

坑道周辺における不飽和領域の生起にともなう 地球化学反応を考慮した水理-物質移行連成解析

—高レベル放射性廃棄物の地層処分における
熱-水-応力-化学連成挙動モデル/解析コードの適用—

Coupled Hydro-Transport Analysis Study of Geochemical Reaction Due to Unsaturated
around the Disposal Tunnel
- Application of the Coupled Thermo-Hydro-Mechanical and Chemical (THMC)
Processes Model / Analysis Code in the Geological Disposal for the High-level
Radioactive Waste-

鈴木 英明 藤崎 淳 藤田 朝雄

Hideaki SUZUKI, Kiyoshi FUJISAKI and Tomoo FUJITA

地層処分研究開発部門
ニアフィールド研究グループ
Near-Field Research Group
Geological Isolation Research and Development Directorate

January 2008

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp/index.shtml>)
より発信されています。このほか財団法人原子力弘済会資料センター*では実費による複写頒布を行っ
ております。

〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920

* 〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4 日本原子力研究開発機構内

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920

© [Japan Atomic Energy Agency](http://www.jaea.go.jp), 2008

坑道周辺における不飽和領域の生起にともなう地球化学反応を考慮した 水理－物質移行連成解析

－高レベル放射性廃棄物の地層処分における熱－水－応力－化学
連成挙動モデル／解析コードの適用－

日本原子力研究開発機構
地層処分研究開発部門 地層処分基盤研究開発ユニット

鈴木 英明^{*}，藤崎 淳^{*}，藤田 朝雄

(2008年1月7日受理)

高レベル放射性廃棄物の地層処分システムにおいて想定される人工バリアを中心とした化学的変遷を考慮した熱－水－応力－化学連成挙動の時間的・空間的な変遷を予測するため、現象理解に基づく数値解析システムの構築を目指し、連成挙動モデル／解析コードの高度化を進めている。

人工バリア定置後のニアフルド挙動のより現実的な理解と予測を行うためには、処分場建設にともなう生じる応力場、水理場、化学場などの変化を解析評価の初期条件として考慮する必要がある。例えば、坑道掘削にともなう処分坑道周辺での不飽和領域の発生は、岩盤内に空気が浸入することによる地下水の酸化還元電位の変化や、地下水へのガスの溶解あるいは脱ガスによる溶液組成の変化など、オーバーパックの腐食や核種移行の環境条件などに影響を及ぼすことが予想される。

本報告書は、幌延等の具体的地質環境における熱－水－応力－化学連成挙動モデル／解析コードの適用事例の提示に向け、これまでに開発した連成挙動モデル／解析コードによって、坑道周辺での不飽和領域の生起にともなう地球化学の変化を表現出来るかどうかを検討した。

その結果、岩盤内に酸素が浸入することによる間隙水の酸化還元電位の変化や、間隙水中に高い濃度で溶解している炭酸が脱ガスすることによる間隙水 pH の変化など、これまでに開発してきた連成挙動モデル／解析コードによって、このような挙動を解析評価できることを確認した。

核燃料サイクル工学研究所（駐在）：〒319-1194 茨城県那珂郡東海村村松 4-33

※技術開発協力員

Coupled Hydro - Transport Analysis Study of Geochemical Reaction Due to Unsaturated around the Disposal Tunnel

– Application of the Coupled Thermo – Hydro – Mechanical and Chemical (THMC) Processes Model / Analysis Code in the Geological Disposal for the High-level Radioactive Waste –

Hideaki SUZUKI[※], Kiyoshi FUJISAKI[※] and Tomoo FUJITA

Geological Isolation Research Unit
Geological Isolation Research and Development Directorate
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received January 7, 2008)

The development of excavation disturbed zone (EDZ) around the disposal tunnel affects such as the corrosive environment of the over-pack, re-saturation period of the buffer material, and environmental condition of the nuclear species migration on the geological disposal for the high-level radioactive waste (HLW).

It is necessary to consider aftermath of EDZ in initial condition of the realistic numerical simulation of the long-term behavior of near-filed HLW repository after emplacement of engineered barrier system.

This report presents the analysis assessment geochemical reaction with the development of the unsaturated zone around the disposal tunnel by developed the coupled Thermo – Hydro – Mechanical and Chemical (THMC) processes model / analysis code.

As a result, the THMC processes analysis model apply a change of the solution composition by degasification of the carbon dioxide gas to the pore water and the change of the oxidation-reduction potential due to unsaturated zone around the disposal tunnel.

Keywords : Coupled THMC, Numerical Simulation, Excavation Disturbed Zone (EDZ), Mass Transport, Oxidation-reduction Potential, CO₂ Degasification

※Collaborating Engineer

目 次

1. はじめに	1
2. 熱-水-応力-化学連成解析モデルの概要	2
3. 1次元モデルによる水理-物質移行連成解析	5
3. 1 目的	5
3. 2 解析条件	5
3. 3 解析結果	12
3. 3. 1 ケース1	12
3. 3. 2 ケース2	16
3. 4 まとめ	20
4. 坑道周辺における水理-物質移行連成解析	21
4. 1 目的	21
4. 2 解析条件	21
4. 3 解析結果	28
4. 3. 1 ケース1	28
4. 3. 2 ケース2	31
4. 3. 3 ケース3	34
4. 3. 4 ケース4	38
4. 4 まとめ	41
5. おわりに	46
参考文献	47

Contents

1. Introduction	1
2. Outline of the THMC model / code	2
3. Analysis on coupled hydro-transport by one-dimensional model	5
3.1 Purpose	5
3.2 Boundary conditions	5
3.3 Results	12
3.3.1 case1	12
3.3.2 case2	16
3.4 Chapter conclusions	20
4. Analysis on coupled hydro-transport around the disposal tunnel	21
4.1 Purpose	21
4.2 Boundary conditions	21
4.3 Results	28
4.3.1 case1	28
4.3.2 case2	31
4.3.3 case3	34
4.3.4 case4	38
4.4 Chapter conclusions	41
5. Conclusions	46
References	47

表 目 次

表 2.1	熱-水-応力-化学連成モデルの支配方程式系	3
表 2.2	熱-水-応力-化学連成モデルの支配方程式中の記号一覧表	4
表 3.1	飽和・不飽和浸透流および物質移行に関わる解析パラメータ	10
表 3.2	設定鉍物の分子量と初期鉍物濃度	10
表 3.3	初期間隙水組成	11
表 4.1	飽和・不飽和浸透流および物質移行に関わる解析パラメータ	26
表 4.2	設定鉍物の分子量と初期鉍物濃度	26
表 4.3	初期間隙水組成	27

目 次

図 2.1	熱-水-応力-化学連成挙動の概念モデル	2
図 2.2	熱-水-応力-化学連成挙動解析コードの概要	3
図 3.1	1次元の水理-物質移行連成解析条件	8
図 3.2	1次元解析で用いた仮想的な多孔質媒体の不飽和透水係数	9
図 3.3	1次元解析で用いた仮想的な多孔質媒体の水分特性曲線	9
図 3.4	ケース 1 の解析結果	13
図 3.5	ケース 2 の解析結果	17
図 4.1	坑道周辺における水理-物質移行連成解析条件	23
図 4.2	仮想的に設定した坑道周辺の固有透過度	24
図 4.3	仮想的に設定した岩盤の不飽和透水係数	25
図 4.4	仮想的に設定した岩盤の水分特性曲線	25
図 4.5	ケース 1 の解析結果	29
図 4.6	ケース 2 の解析結果	32
図 4.7	ケース 3 の解析結果	35
図 4.8	ケース 4 の解析結果	38
図 4.9	坑道周辺の水分飽和度の解析コンター図	42
図 4.10	坑道周辺の溶存酸素の解析コンター図	43
図 4.11	坑道周辺の間隙水 pH の解析コンター図	44
図 4.12	坑道周辺の間隙水 pe の解析コンター図	45

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物の地層処分における人工バリア定置後のニアフィールドの挙動は、廃棄体からの放熱、人工バリアへの地下水の浸潤、緩衝材の膨潤、間隙水組成の変化など熱的、水理的、力学的および化学的プロセスが相互に影響を及ぼし合う連成挙動として扱うことが肝要である。「第2次取りまとめ」¹⁾以降、オーバーパックの腐食や核種移行の環境条件の予測を行うため、地球化学変遷を考慮した人工バリアの長期挙動について、より現実的な理解と予測を目的とする熱-水-応力-化学連成挙動モデル/解析コードの開発を進めている^{2), 3)}。

これまでに、本解析モデル/コードによる工学規模での人工バリア試験の検証解析や⁴⁾、ニアフィールド熱-水-応力-化学連成挙動に関する事例解析において、「第2次取りまとめ」で示された緩衝材中の最高温度、再冠水時間、間隙水のpHについて概ね整合が取れていることを確認している⁵⁾。

しかしながら、これまでの人工バリア定置後のニアフィールドの長期挙動に関する解析評価は、処分場建設前の乱されていない地質環境条件を初期条件としており、処分坑道掘削にともなう生じる応力場、水理場、化学場などの変化を考慮できていない。例えば、坑道掘削により周辺岩盤の間隙水圧が低下した場合には、緩衝材の再冠水時間に影響を与えることが予想され、また、処分坑道周辺における不飽和領域の発生は、岩盤内に空気が浸入することによる地下水の酸化還元電位の変化や、二酸化炭素の溶解あるいは炭酸の脱ガスによる溶液組成の変化、鉱物の溶解沈殿など、オーバーパックの腐食環境や核種移行の環境条件などに影響を及ぼすことも考えられる。

本研究では、幌延等の具体的な地質環境における熱-水-応力-化学連成挙動解析の適用事例の提示に向けて⁶⁾、これまでに開発された熱-水-応力-化学連成挙動モデル/解析コードにより、坑道周辺における不飽和領域の生起にともなう地球化学特性の変化を解析評価した。具体的には、坑道周辺に不飽和領域が発生した場合、岩盤内に酸素が侵入することによる間隙水の酸化還元電位の変化や、地下水中に高い濃度で溶存している炭酸が脱ガスした場合の間隙水pHの変化など、地球化学特性への影響について、地下水の流れと物質移行を連成させた解析を実施した。

2. 熱-水-応力-化学連成解析モデルの概要

本研究で使用する熱-水-応力-化学連成挙動の概念モデルを図 2.1 に示す³⁾。

本連成モデルは、熱移動、水分移動、応力変形、物質移行、地球化学反応について、表 2.1 に示すように、温度 T 、圧力水頭 ψ 、変位 u_i 、親化学種の総溶解濃度 $C_{<in>$ 、親化学種の総濃度 $T_{<in>$ を未知数とした支配方程式系となる。

本連成解析コードは、「第2次取りまとめ」において、人工バリア挙動評価のうち、緩衝材の再冠水時間の推定に使用した熱-水-応力連成解析コードの THAMES⁷⁾、不飽和を扱える地下水移流分散解析コードの Dtransu-3DEL⁸⁾、そして、地球化学解析コードの PHREEQC⁹⁾ を母体とし、これら個別の解析コードを制御するプロセス管理プログラムと、各解析コード間の連成対象変数の受け渡しを行う共有メモリ管理プログラムによって連成解析体系を構築している (図 2.2 参照)。

本モデルの大きな特徴としては、非等温下での温度勾配による水分移動を考慮した飽和・不飽和浸透流解析、また、移流・拡散解析と地球化学解析を連成させ、気相、液相、固相間の地球化学反応と物質移行を考慮した解析が可能となっている。化学反応モデルについては、PHREEQC の機能をほぼ考慮できており、水溶性錯体、ガスの溶解・脱ガス、イオン交換反応、鉱物の溶解・沈殿の平衡反応のほか、速度反応も考慮できる。

本研究では、熱-水-応力-化学連成挙動モデル/解析コードにおける条件設定として、解析全領域の温度を一定とし、また、変位を拘束して応力変形を考慮しないことによって、水-化学連成解析として実施した。

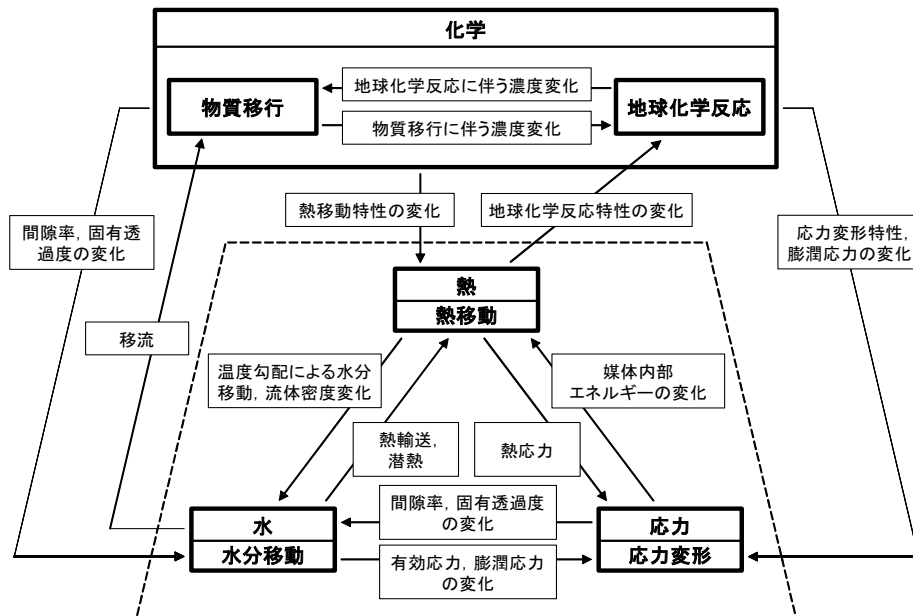


図 2.1 熱-水-応力-化学連成挙動の概念モデル

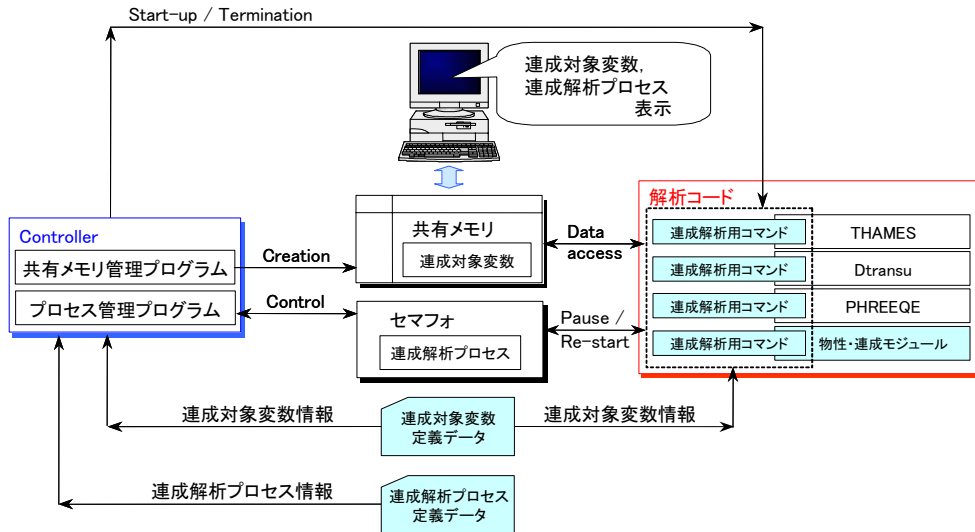


図 2.2 熱-水-応力-化学連成挙動解析コードの概要

表 2.1 熱-水-応力-化学連成モデルの支配方程式系

<p>1) 熱移動の支配方程式</p> $\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_l C_l q_l T) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_m \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m C_m T) = 0$
<p>2) 水分移動の支配方程式</p> $-\frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \xi \rho_l D_o \frac{\partial \theta}{\partial x_i} + (1 - \xi) \frac{\rho_l^2 g K}{\mu_l} \frac{\partial (\psi + z)}{\partial x_i} + \rho_l D_T \frac{\partial T}{\partial x_i} \right\} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_l n S) = 0$
<p>3) 応力変形の支配方程式</p> $\frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{1}{2} C_{ijkl} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) - \pi' \delta_{ij} - \frac{E}{1 - 2\nu} \delta_{ij} \alpha_s (T - T_0) + \chi \delta_{ij} \rho_l g \psi \right\} + \rho_m b_i = 0$
<p>4) 化学現象 (物質移行, 地球化学反応) の支配方程式</p>
<p>4-1) 物質移行の支配方程式 (n 番目親化学種の質量保存の式)</p> $\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_l q_i C_{(n)}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_l n S D_{ij} \frac{\partial C_{(n)}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_l n S T_{(n)}) = 0$
<p>4-2) 地球化学反応の支配方程式 (平衡モデル)</p>
<p>4-2-1) 電気的中性の式</p> $\sum_{a=1}^A (z_a m_a) = 0$
<p>4-2-2) 電子保存の式</p> $\sum_{a=1}^A (v_a m_a) = OPV + \sum_{p=1}^P (u_p MIN_p)$
<p>4-2-3) 質量保存の式 (n 番目親化学種の質量保存の式)</p> $C_{(n)} = \sum_{a=1}^A (c_{a,n} m_a), \quad C_{(n)} = T_{(n)} + \sum_{p=1}^P (b_{p,n} MIN_p)$
<p>4-2-4) 固相の質量作用の式 (p 番目鉱物相の質量作用の式)</p> $\sum_{n=1}^N \{ b_{p,n} \log(a_n) \} = \log(K_p)$
<p>4-2-5) 水溶性化学種の質量作用の式 (親化学種を除く a 番目水溶性化学種の質量作用の式)</p> $\log(a_a) = \log(K_a) + \sum_{n=1}^N \{ c_{a,n} \log(a_n) \}$

表 2.2 熱-水-応力-化学連成モデルの支配方程式中の記号一覧表

ρ_l	液相密度	ν	ポアソン比
C_l	液相比熱	α_s	固相の熱線膨張係数
q_l	液相ダルシー流速	T_0	初期温度
T	温度	χ	有効応力に関するパラメータ
λ_m	媒体熱伝導率	b_i	物体力
ρ_m	媒体密度	$C_{(n)}$	n 番目親化学種の総溶解濃度
C_m	媒体比熱	D_{ij}	分散テンソル
ξ	不飽和パラメータ 飽和領域で $\xi=0$, 不飽和領域で $\xi=1$	$T_{(n)}$	n 番目親化学種の総濃度
D_θ	水分勾配水分拡散係数	A	水溶性化学種の総数
θ	体積含水率	z_a	a 番目水溶性化学種の電荷
g	重力加速度	m_a	a 番目水溶性化学種の重量モル濃度
K	固有透過度	ν_a	a 番目水溶性化学種の実効原子価
μ_l	液相粘性係数	OPV	系の総実効原子価
ψ	圧力水頭(水分ポテンシャル)	P	鉱物相の総数
Z	位置水頭	u_p	p 番目鉱物相の実効原子価
D_T	温度勾配水分拡散係数	MIN_p	p 番目鉱物相の溶解量
n	間隙率	$c_{a,n}$	a 番目水溶性化学種に対する n 番目親化学種の化学量論係数
S	飽和度	$b_{p,n}$	p 番目鉱物相に対する n 番目親化学種の化学量論係数
C_{ijkl}	弾性マトリクス	N	親化学種の総数
u_i	変位	a_n	n 番目親化学種の活量
π'	膨潤応力に寄与する膨潤圧	K_p	p 番目鉱物相の質量作用の式に対する化学反応の平衡定数
δ_{ij}	クロネッカデルタ	a_a	a 番目水溶性化学種の活量
E	ヤング率	K_a	a 番目水溶性化学種の質量作用の式に対する化学反応の平衡定数

3. 1次元モデルによる水理－物質移行連成解析

3. 1 目的

本章では、初期に間隙空間が全て水で満たされた飽和状態にある多孔質媒体が、不飽和状態へ変化した場合に、気相の影響を受けることによる間隙水組成の変化について、これまでに開発した熱－水－応力－化学連成解析モデル／コードにより解析を実施し、その適応性について確認する。

ここでは、現象理解を容易にすることを目的として、1次元の簡易モデルを用いて、水理場の変化にともなう固相－液相－気相間での地球化学反応を考慮した水理－物質移行連成解析を実施した。

なお、次章では、ここでの結果に基づき、ジオメトリの影響を把握することを目的として、解析ジオメトリを坑道形状に拡張したより現実的な解析を実施した。

3. 2 解析条件

飽和状態にある多孔質媒体が不飽和状態へ変化し、不飽和領域に $O_2(g)$ が侵入した場合の間隙水の酸化還元状態の変化と、初期間隙水からの炭酸の脱ガスにともなう間隙水 pH の変化に関する解析を実施する。

解析幾何学形状および解析条件を図 3.1 に示す。解析モデルは、長さが 1m の柱状の均質多孔質媒体とし、節点数 44、要素数 10 でモデル化した。

初期の水理条件として、要素番号 1～9 については、圧力水頭 $0mH_2O$ の水で飽和した状態とした。

水分移動に関する境界条件としては、モデル右端の要素番号 10 の水分飽和度を 50% と設定し、後述する水分特性曲線より圧力水頭を $-335mH_2O$ の規定境界とした。この境界条件により、初期に飽和状態にある要素番号 1～9 は、時間の経過とともに水分量が減少し不飽和状態へと変化する。

物質移行に関する境界条件としては、要素番号 10 の不飽和領域（気相）を大気相当の $O_2(g)$ 濃度および $CO_2(g)$ 濃度に設定する。したがって、要素番号 10 の気相濃度として、 $O_2(g)$ 濃度については、分圧を $10^{-0.7}atm$ として $8.93 \times 10^{-3}mol/l_{air}$ 、 $CO_2(g)$ 濃度については、分圧を $10^{-3.5}atm$ として $1.41 \times 10^{-5}mol/l_{air}$ の規定境界とした。

また、要素番号 10 の間隙水は、上記のガス分圧の下で平衡状態にあるものとし、溶存酸素濃度については、 $2.04 \times 10^{-4}mol/l_{water}$ 、溶存炭酸濃度については、 $1.31 \times 10^{-5}mol/l_{water}$ の規定境界とした。

水理および物質移行に関わる解析パラメータを表 3.1 に示す。水理に関する解析パラメ

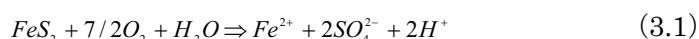
ータは、仮想的に乾燥密度が 1600kg/m^3 の緩衝材（ケイ砂 30wt%混合ベントナイト）の値を設定した¹⁰⁾。

本解析が飽和から不飽和へと変化する移流支配であることから分散の効果は考慮しないこととし、物質移行パラメータの分散長については、無視しえるような小さな値を設定した。また、間隙水中の分子の拡散係数については、「第2次取りまとめ」の安全評価では各元素によって、 $2.0 \times 10^{-10} \sim 6.0 \times 10^{-10} \text{m}^2/\text{s}$ に設定しており、ここでは、 $5.0 \times 10^{-10} \text{m}^2/\text{s}$ と設定した。

次に、固相中の鉱物の設定であるが、ここでは、水-鉱物反応を考慮しない場合をケース1とした。また、固相中に、quartz (SiO_2)、calcite (CaCO_3) および pyrite (FeS_2) を設定し、水-鉱物反応を考慮した場合をケース2として解析を実施した。

固相中の鉱物濃度については、仮想的に表 3.2 に示す値に設定した。

水-鉱物反応のうち、quartz (SiO_2)、calcite (CaCO_3) については平衡反応、pyrite (FeS_2) については、次式の反応により酸素が消費される挙動を溶解速度モデルで考慮することとした。



pyrite (FeS_2) の溶解速度は、文献より次式を使用した¹¹⁾。本文献では、pyrite (FeS_2) の比表面積を $0.047\text{m}^2/\text{g}$ としている。これより、本解析における固相中の pyrite (FeS_2) の鉱物濃度 100mol/m^3 、分子量 120g/mol 、空隙率 0.403 に設定していることから、pyrite (FeS_2) の単位体積あたりの表面積を約 $1.4\text{m}^2/\text{l}$ と設定した。

$$r = 10^{-8.19} \frac{m_{\text{DO}}^{0.5}}{m_{\text{H}^+}^{0.11}} \quad (3.2)$$

$$r : \text{mol/m}^2\text{s}$$

各ケースでの初期間隙水の設定方法は、以下の通りであり、初期間隙水組成を表 3.3 に示す。

(1) ケース1

本ケースは、固相中に鉱物を設定しないケースである。

初期間隙水は、仮想的に大気中の 10 倍の $\text{CO}_2(\text{g})$ (分圧 $10^{-2.5}\text{atm}$) と平衡状態の純水とした ($\text{pH}=5.136$, $\text{pe}=0.808$)。

(2) ケース2

本ケースは、固相中の鉱物として、quartz (SiO_2)、calcite (CaCO_3) および pyrite (FeS_2) を設定した。

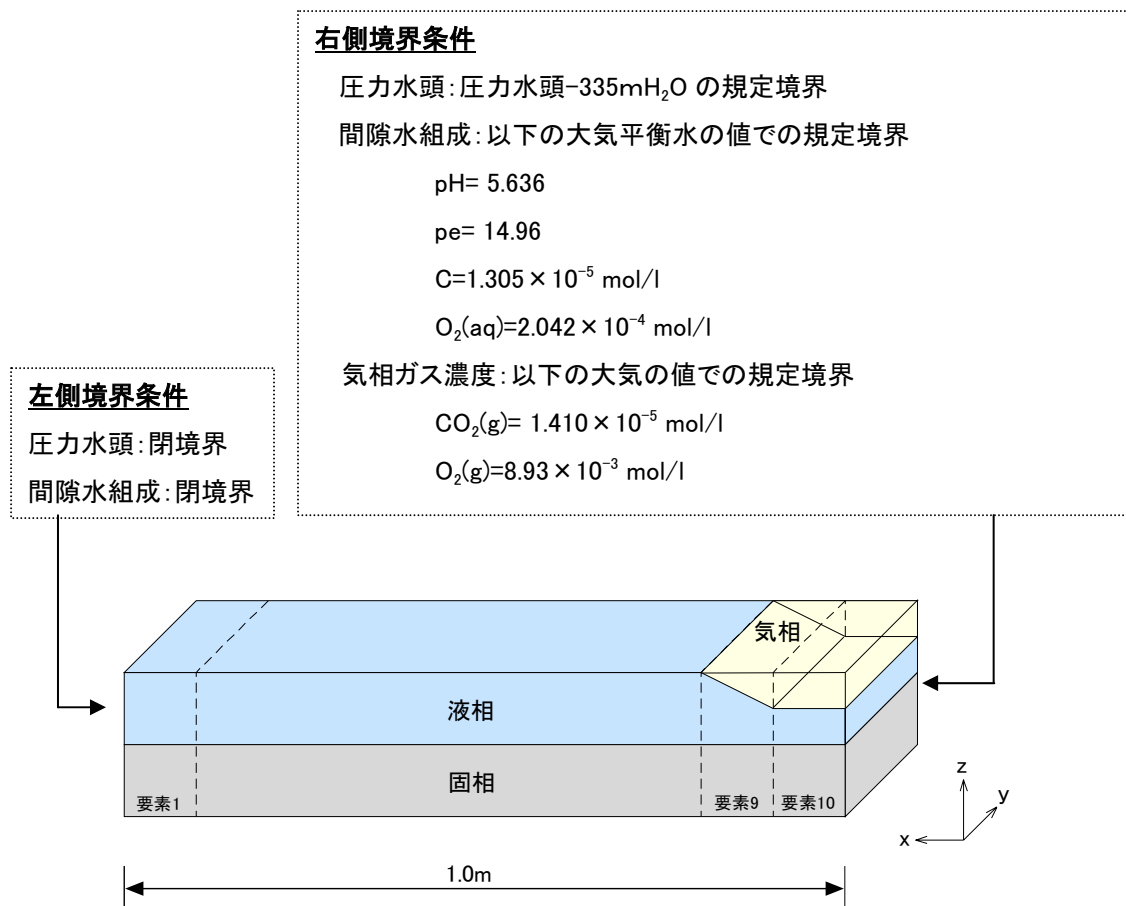
初期間隙水は、仮想的に大気の 10 倍の $\text{CO}_2(\text{g})$ (分圧 $10^{-2.5}\text{atm}$) および大気相当の $\text{O}_2(\text{g})$ (分圧 $10^{-0.7}\text{atm}$) と平衡状態にある純水が、quartz (SiO_2), calcite (CaCO_3) と平衡にあり、且つ pyrite (FeS_2) により溶存酸素が消費された還元条件とした ($\text{pH}=8.95$, $\text{pe}=-4.98$)。

なお、熱力学データは、「第 2 次取りまとめ」の溶解度計算で用いた熱力学データベース 991231c0.tdb¹²⁾ (<http://migrationdb.jaea.go.jp/>) を採用した。

温度は解析全領域で 20°C 一定とした。

解析時間は 1000 日後までとした。

本解析は、地球化学反応を考慮した水理-物質移行の連成解析であるが、図 2.1 の連成挙動の概念モデルにある地球化学反応によって生じる間隙率および固有透過度の変化は考慮せず、水移動から物質移行へ一方向の連成解析として実施した。



初期条件

圧力水頭: 0mH₂O (= 飽和)

間隙水組成: 解析ケースにより異なる (表 3.3 参照)

ケース1 CO₂(g) (10^{-2.5}atm)* と平衡の純水

ケース2 CO₂(g) (10^{-2.5}atm)* O₂(g) (10^{-0.7}atm)** と平衡の純水が設定鉱物と平衡

溶存酸素は pyrite により全消費

* 大気の 10 倍の分圧

**大気分圧

図3.1 1次元の水理-物質移行連成解析条件

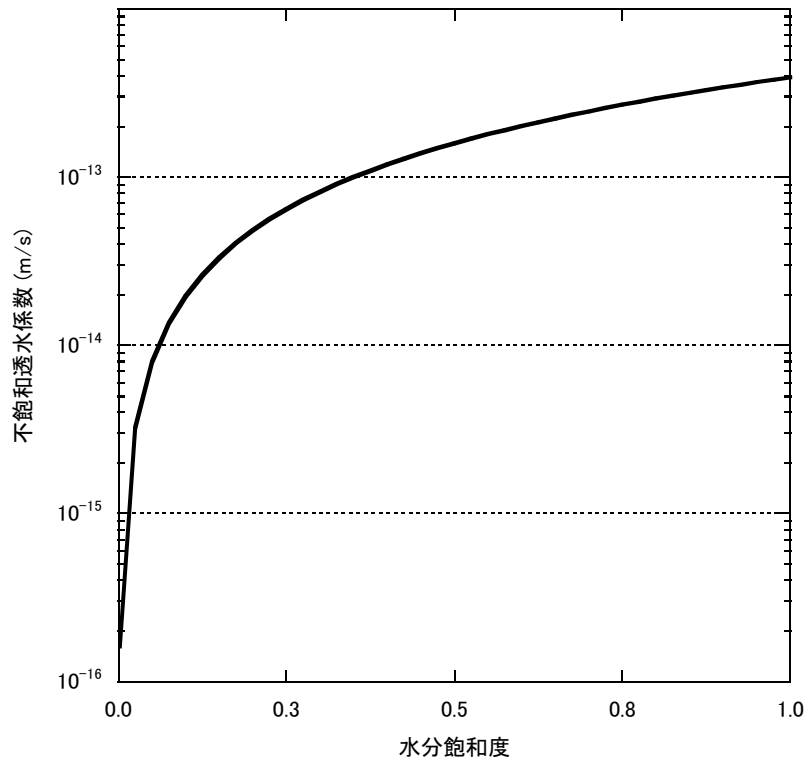


図 3.2 1次元解析で用いた仮想的な多孔質媒体の不飽和透水係数

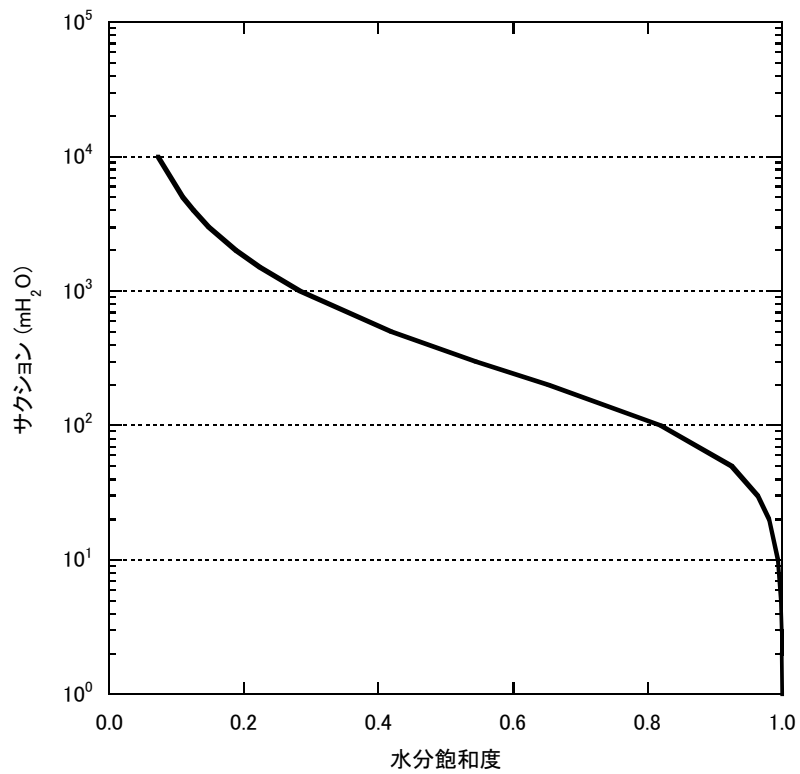


図 3.3 1次元解析で用いた仮想的な多孔質媒体の水分特性曲線

表 3.1 飽和・不飽和浸透流および物質移行に関わる解析パラメータ

固相密度 (kg/m ³)	1600
固相真密度 (kg/m ³)	2680
間隙率 (-)	0.403
固有透過度 (m ²)	4.00 × 10 ⁻²⁰ (20°Cでの透水係数は 3.91 × 10 ⁻¹³ m/s)
不飽和水理パラメータ	<p>①不飽和透水係数 K_r (m/s) (図 3.2)</p> $K_r = S_r^{1.3}$ <p>S_r : 水分飽和度</p> <p>②サクシオン ψ (mH₂O) (図 3.3)</p> $S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = [1 + \alpha\psi ^n]^{-1-\frac{1}{n}}$ <p>ただし, S_e (有効飽和度)</p> <p>$\theta_r = 0$ (最小体積含水率)</p> <p>$\theta_s = 0.403$ (飽和体積含水率)</p> <p>$\alpha = 8.00 \times 10^{-3}$ (1/m)</p> <p>$n = 1.6$</p>
縦分散長 (m)*	2.0 × 10 ⁻²
遅延係数 (-)	1
減衰係数 (1/year)	0
間隙水中の実効拡散係数 (m ² /s)	2.00 × 10 ⁻¹⁰
気相中のガスの拡散係数 (m ² /s) ¹³⁾	O ₂ (g) : 1.80 × 10 ⁻⁵ CO ₂ (g) : 1.35 × 10 ⁻⁵

*分散の効果が無視できるように小さな値を設定

表 3.2 設定鉱物の分子量と初期鉱物濃度

	分子量 (g/mol)	初期鉱物濃度 (mol/m ³)
quartz (SiO ₂)	60.100	10000.0
calcite (CaCO ₃)	100.100	1000.0
pyrite (FeS ₂)	120.028	100.0

表 3.3 初期間隙水組成

	ケース 1	ケース 2
設定鉱物	なし	quartz (SiO ₂) calcite (CaCO ₃) pyrite (FeS ₂)
pH	5.136	8.954
pe	0.808	-4.980
C	1.147×10^{-4} mol/l	4.130×10^{-4} mol/l
Ca	-	2.983×10^{-4} mol/l
Fe	-	5.834×10^{-5} mol/l
S	-	1.167×10^{-4} mol/l
Si	-	1.903×10^{-4} mol/l
温度	20°C	
備考	-	溶存酸素は pyrite (FeS ₂) の還元作用により全消費

3. 3 解析結果

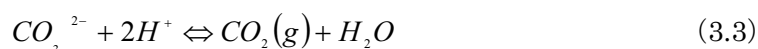
3. 3. 1 ケース 1

水分飽和度の変化を図 3.4(a)に示す。時間の経過とともに右側境界より水分飽和度は低下し、不飽和領域が拡大している。

初期間隙水中の溶存炭酸濃度は、仮想的に大気の 10 倍の $\text{CO}_2(\text{g})$ (分圧 $10^{-2.5}\text{atm}$) と平衡状態にあるものとして設定しているため、不飽和領域の生起にともない大気分圧に設定した境界条件の影響によって、間隙水中から炭酸が脱ガスしている。そして、一時的に気相中の $\text{CO}_2(\text{g})$ 濃度が上昇しているが、最終的には、大気分圧相当の $1.41 \times 10^{-5}\text{mol/l_air}$ となっている (図 3.4 (b))。

また、炭酸の脱ガスによって、間隙水中の全 C 濃度は減少しており、最終的には、大気分圧 $10^{-3.5}\text{atm}$ と平衡状態の $1.31 \times 10^{-5}\text{mol/l_water}$ となっている (図 3.4(c))。

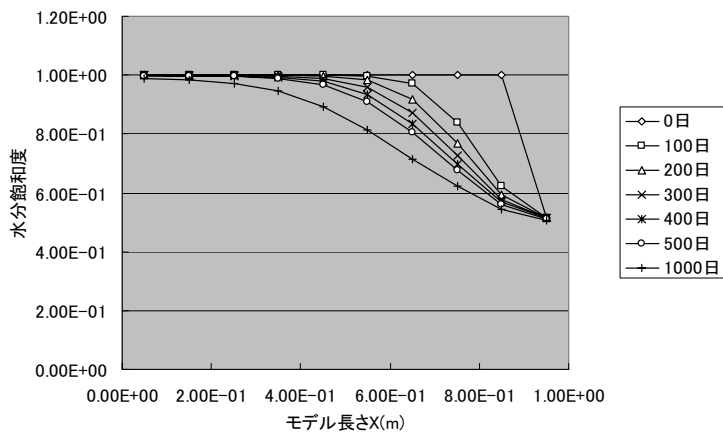
間隙水中より炭酸が脱ガスすることにより、間隙水の pH は、次式に示す反応によって 5.14 から 5.63 へ上昇している (図 3.4(f))。



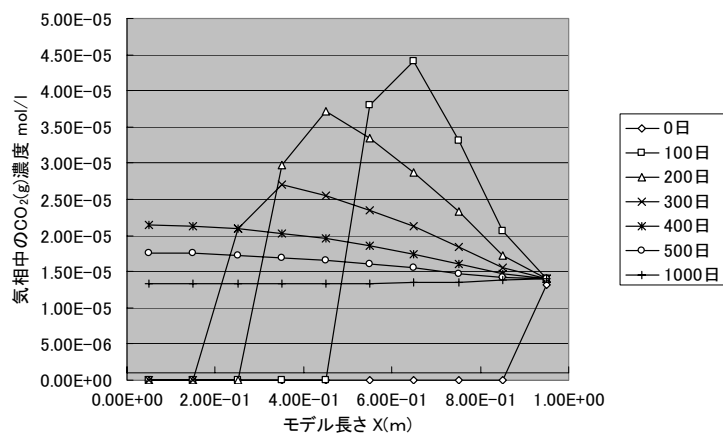
また、不飽和領域の発生にともなって、右側境界より $\text{O}_2(\text{g})$ が浸入して濃度が上昇している (図 3.4(d))。そして、気相中の $\text{O}_2(\text{g})$ 濃度の影響によって、間隙水中の溶存酸素濃度が上昇している (図 3.4(e))。

溶存酸素濃度は、気相中の $\text{O}_2(\text{g})$ 濃度と同じようなプロファイルとなっている。これは、間隙水中の溶存酸素の拡散速度に比べて、気相中の $\text{O}_2(\text{g})$ の拡散速度が速いためである。

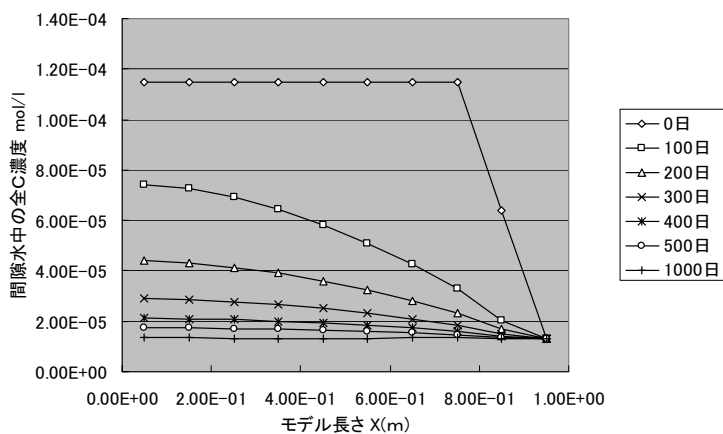
間隙水 pe については、酸素の浸入によって上昇する結果となっている (図 3.4(g))。



(a) 水分飽和度の分布

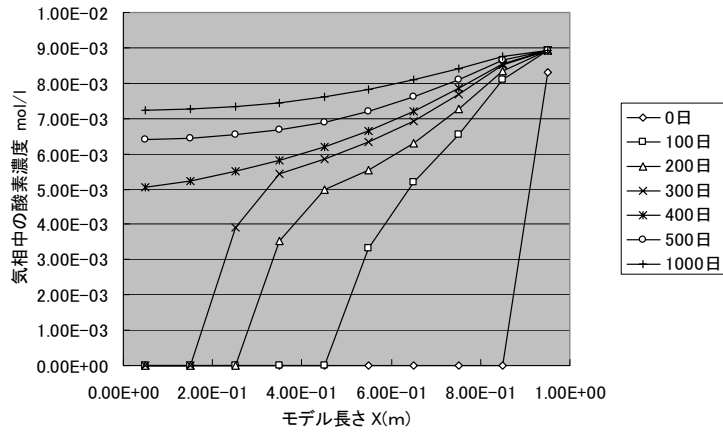


(b) 気相中の CO₂(g)の分布

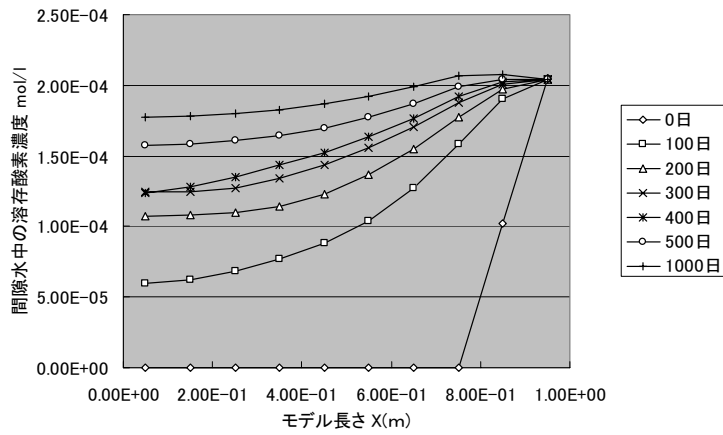


(c) 間隙水中の全 C 濃度の分布

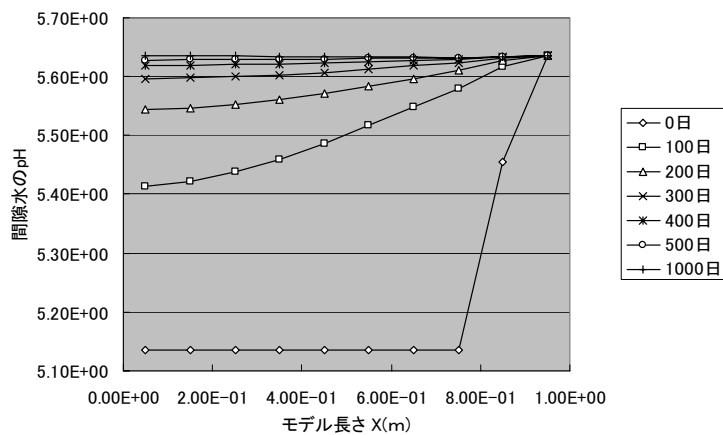
図 3.4 ケース1の解析結果



(d) 気相中の $O_2(g)$ 濃度の分布

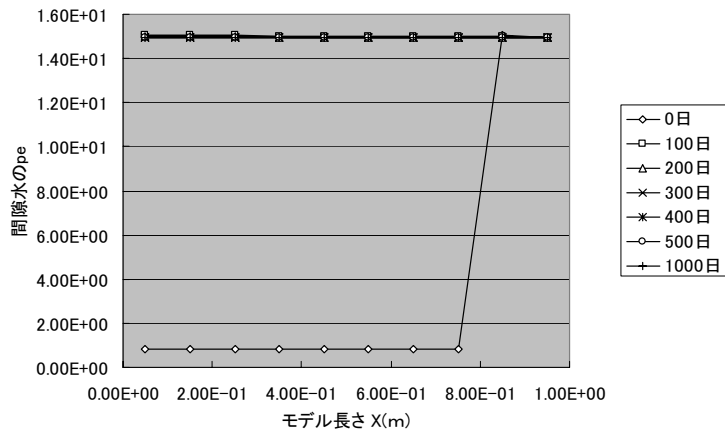


(e) 間隙水中の溶存酸素濃度の分布



(f) 間隙水 pH の分布

図 3.4 ケース1の解析結果(続き)



(g) 空隙水 pe の分布

図 3.4 ケース1の解析結果(続き, その2)

3. 3. 2 ケース 2

本解析ケースは、前述の解析ケース 1 に、水-鉱物平衡反応として quartz (SiO₂) と calcite (CaCO₃)、および pyrite (FeS₂) の酸化反応を加えた解析ケースである。

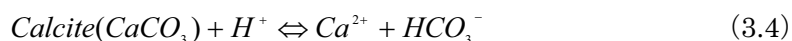
水分飽和度の変化については、ケース 1 の場合と同じであり、時間の経過とともに右側境界より水分飽和度が低下して不飽和領域が拡大している (図 3.5 (a)).

図 3.5 (b), 図 3.5 (c) に示すように、calcite (CaCO₃)、pyrite (FeS₂) とともに、右側境界より鉱物濃度が減少している。quartz (SiO₂) については、鉱物濃度の変化はみられない (図 3.5 (d)).

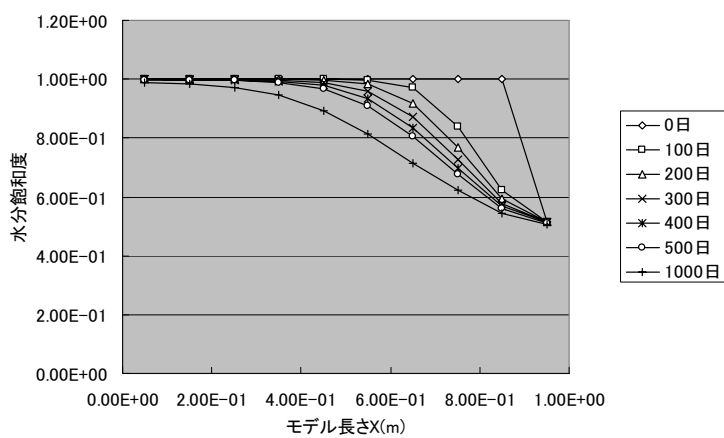
気相中の CO₂(g)濃度および間隙水中の全 C 濃度ともに、ケース 1 に比べて 1 オーダー程度高くなっている (図 3.5 (e), (f)). これは、calcite (CaCO₃) の溶解による影響と考えられる。

気相中の O₂(g)濃度および溶存酸素濃度は、ケース 1 に比べて低くなっている。これは、pyrite (FeS₂) の酸化によって酸素が消費されているためと考えられる (図 3.5 (g), (h)).

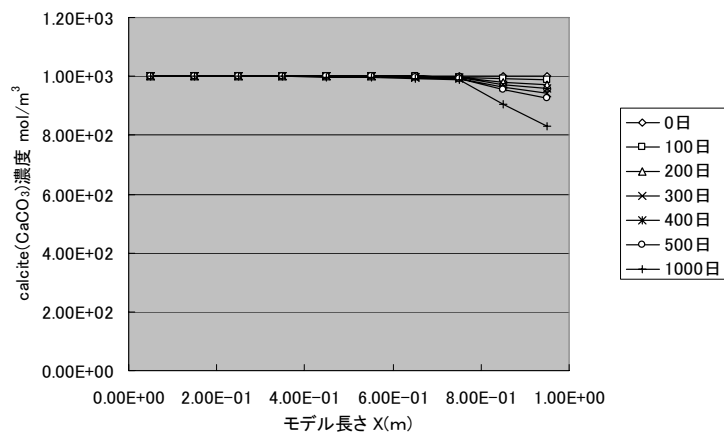
間隙水 pH については、初期の 8.95 から約 6.5 まで低下している (図 3.5 (i)). calcite (CaCO₃) の溶解は、(3.4) 式に示すように pH を上昇させる。このため、本ケースにおける間隙水の pH の低下は、(3.1) 式で示した pyrite (FeS₂) の酸化の影響が大きいと考えられる。



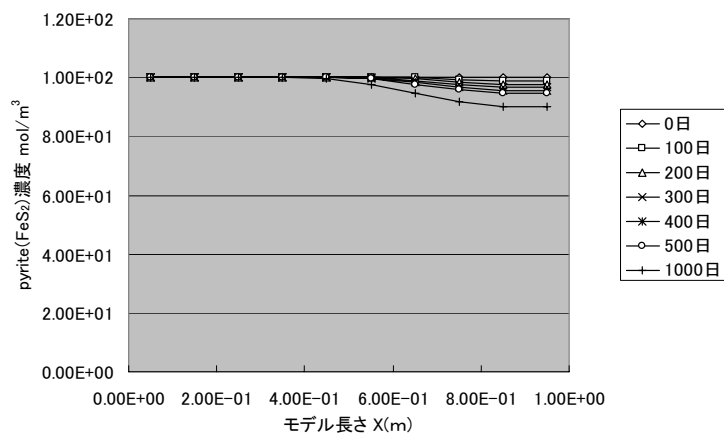
間隙水の pe については、ケース 1 のような上昇は見られない。これは、pyrite (FeS₂) による還元作用によるものと考えられる。このため、内部では初期の還元状態が保たれている結果となっている (図 3.5 (j)).



(a) 水分飽和度の分布

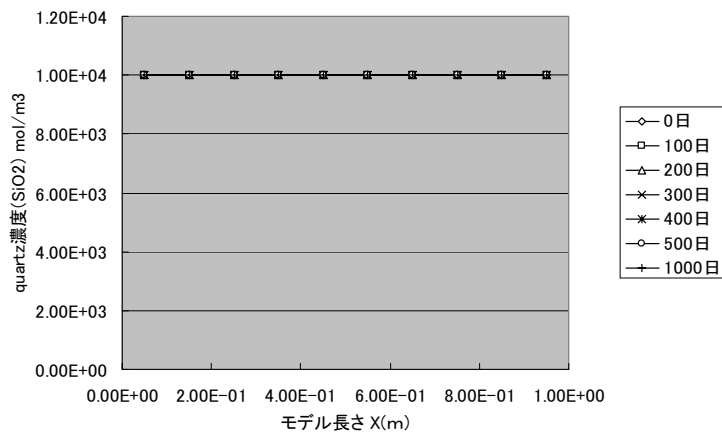


(b) calcite (CaCO₃)濃度の分布

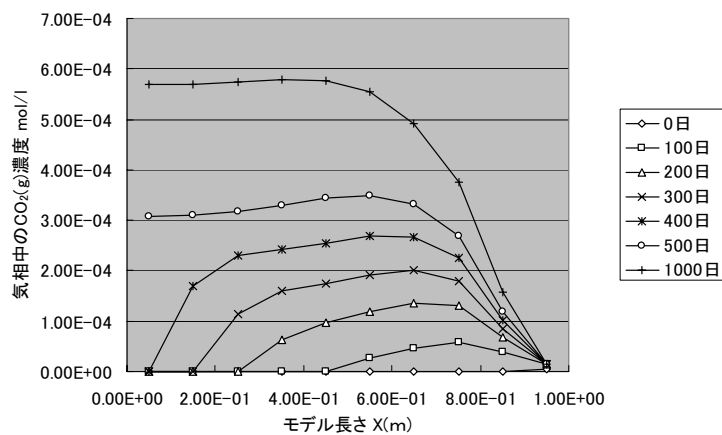


(c) pyrite (FeS₂)濃度の分布

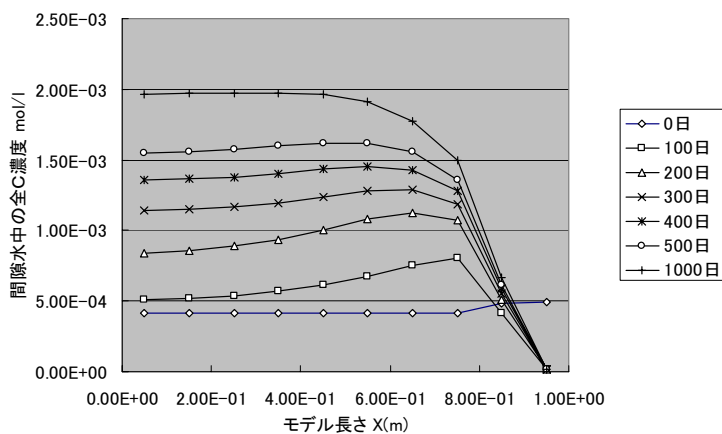
図 3.5 ケース2の解析結果



(d) quartz (SiO_2) 濃度の分布

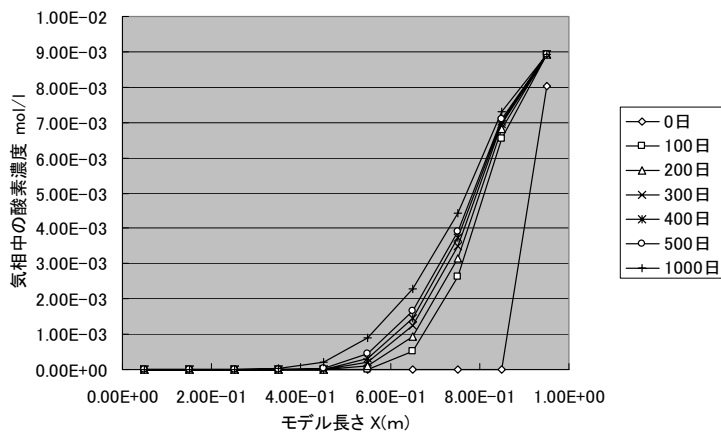


(e) 気相中の $\text{CO}_2(\text{g})$ の分布

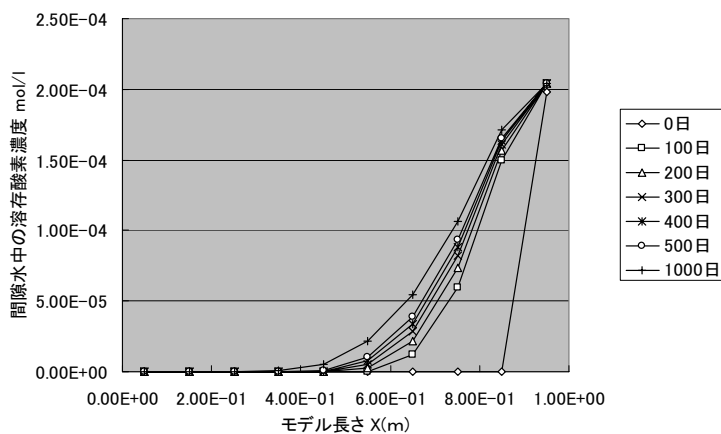


(f) 間隙水中の全 C 濃度の分布

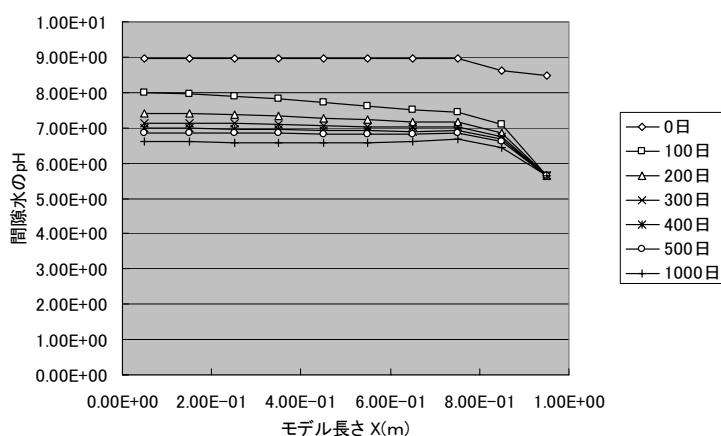
図 3.5 ケース2の解析結果(続き, その1)



(g) 気相中の $O_2(g)$ 濃度の分布

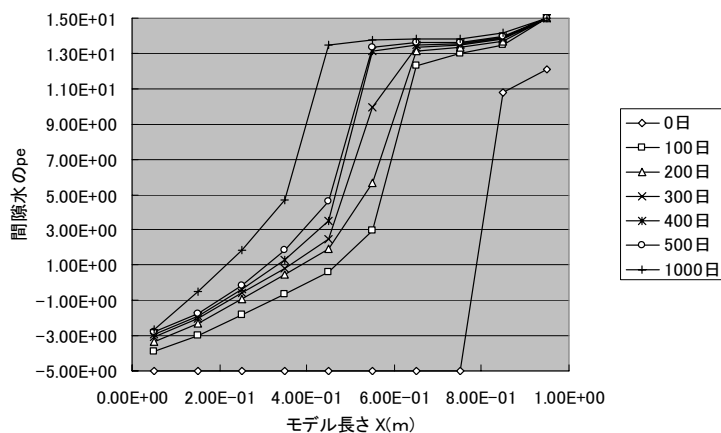


(h) 間隙水中の溶存酸素濃度の分布



(i) 間隙水 pH の分布

図 3.5 ケース2の解析結果(続き, その2)



(j) 間隙水 pe の分布

図 3.5 ケース2の解析結果(続き, その3)

3. 4 まとめ

熱-水-応力-化学連成挙動モデル/解析コードを用いて、多孔質媒体が飽和状態から不飽和状態へ変化していく過程における間隙水の酸化還元状態の変化と、間隙水からの炭酸の脱ガスに伴う間隙水組成の変化に関する水理-物質移行連成解析を実施した。

その結果、不飽和領域の生起によって、

- 1) 酸素の浸入にともなう間隙水 pe の変化
- 2) 炭酸の脱ガスにともなう間隙水 pH の変化
- 3) pyrite(FeS_2)の酸化と還元状態の維持

など、解析結果は十分に理解し得るものであった。

以上のことから、本連成解析モデル/コードにより、不飽和領域の生起にともなう地球化学の変化が表現可能であることを確認した。

4. 坑道周辺における水理－物質移行連成解析

4. 1 目的

地下深部において坑道が掘削され、坑道周辺に不飽和領域が発生した場合、大気が岩盤内に侵入することによって間隙水組成が変化することが予想される。

本章では、仮想的な地下坑道モデルを用いて、坑道周辺が飽和状態から不飽和状態へと変化し、岩盤内に空気が侵入することによる間隙水組成の変化について、地球化学反応を考慮した水理－物質移行連成解析を実施した。

4. 2 解析条件

解析領域のモデル化および解析条件を図 4.1 に示す。

対象とするモデルは、地表面からの深度が 400m にある直径が 4m の水平坑道とし、地表面から深度 800m までを均質多孔質媒体として節点数 4266、要素数 2002 でモデル化した。

岩盤の初期条件は飽和状態とした。

水理学的境界条件としては、図 4.1 に示すモデル上面と右側面を全水頭固定境界、モデル底面およびモデル左側面を不透水境界とした。

坑道掘削にともない坑道周辺の岩盤は、発破損傷や応力再配分などの影響により、透水係数の変化などの水理特性が変化することが知られている。ここでは、東濃鉱山、釜石鉱山における掘削影響試験では、坑道壁面から 1m 程度の範囲でマイクロクラックが発生し、諸物性が低下することが確認されていることから¹⁴⁾、ここでは、図 4.2 に示すように、坑道壁面から 1m の範囲を水理学的なゆるみ域として固有透過度を大きく設定した。

岩盤の不飽和水理特性は、仮想的に図 4.3、図 4.4 のように設定した。このうち、水分特性曲線については、砂岩の値¹⁵⁾を用いた。

本連成解析を実施するのに必要となる飽和・不飽和浸透流および物質移行に関する解析パラメータを表 4.1 に示す。

物質移行パラメータの分散長については、第 3 章と同様に、本解析が飽和から不飽和へと変遷する移流支配であることから、分散の効果は無視するため小さな値を設定した。また、間隙水中の分子の拡散係数についても、第 3 章と同様、「第 2 次取りまとめ」の安全評価で設定した各元素の平均的な値とした。

坑道壁面からの湧水を表現する方法としては、計測された湧水量あるいは坑道壁面からの地下水の蒸発量などから、壁面から流出する流量を与える方法が考えられるが、本解析

では、計算負荷を低減させることを目的として、間隙水圧を規定境界として与える手法を採用した。ここでは、坑道壁面の水分飽和度が 90%と仮定し、図 4.3 に示す水分特性曲線から坑道壁面の間隙水圧の値を $-10.2\text{mH}_2\text{O}$ に設定した。

物質移行に関する境界条件としては、坑道壁面の気相濃度は大気の数とした。すなわち、 $\text{CO}_2(\text{g})$ については、分圧を $10^{-3.5}\text{atm}$ として $1.41\times 10^{-5}\text{mol/l_air}$ 、 $\text{O}_2(\text{g})$ については、分圧を $10^{-0.7}\text{atm}$ として $8.93\times 10^{-3}\text{mol/l_air}$ の規定境界とした。

それ以外の部分の物質移行に関する境界条件は閉境界とした。

解析は、表 4.3 に示すように設定する鉱物によって 4 ケースを実施した。

岩盤中で考慮する鉱物および鉱物の初期濃度は、第 3 章と同様に、仮想的に表 4.2 のように設定した。このうち、quartz(SiO_2)および calcite(CaCO_3)については平衡反応、pyrite(FeS_2)についても、第 3 章と同様に、酸素による溶解速度反応を設定した。また、ケース 4 では、二次鉱物として $\text{Fe}(\text{OH})_3$ アモルファスを設定した。

熱力学データは、第 3 章と同様、「第 2 次取りまとめ」の溶解度計算で用いた熱力学データベース 991231c0.tdb¹²⁾ (<http://migrationdb.jaea.go.jp/>) を採用した。

岩盤の初期間隙水を表 4.3 に示す。

間隙水中の溶存炭酸濃度は、幌延地下研究施設サイトのボーリング調査によって得られた値より設定することとし、ボーリング孔 HDB-4 の深度 400m 程度から汲み上げられた地下水中の炭酸濃度より、 $\text{CO}_2(\text{g})$ の分圧がおおよそ $10^{-0.79}\text{atm}$ と見積もられることから¹⁶⁾、ここでは、間隙水中の炭酸濃度は、この $\text{CO}_2(\text{g})$ の分圧と平衡にあるものとして設定した。また、溶存酸素は含まない設定とした。

温度は全領域で 25°C 一定とした。

解析時間は 1000 日後までとした。

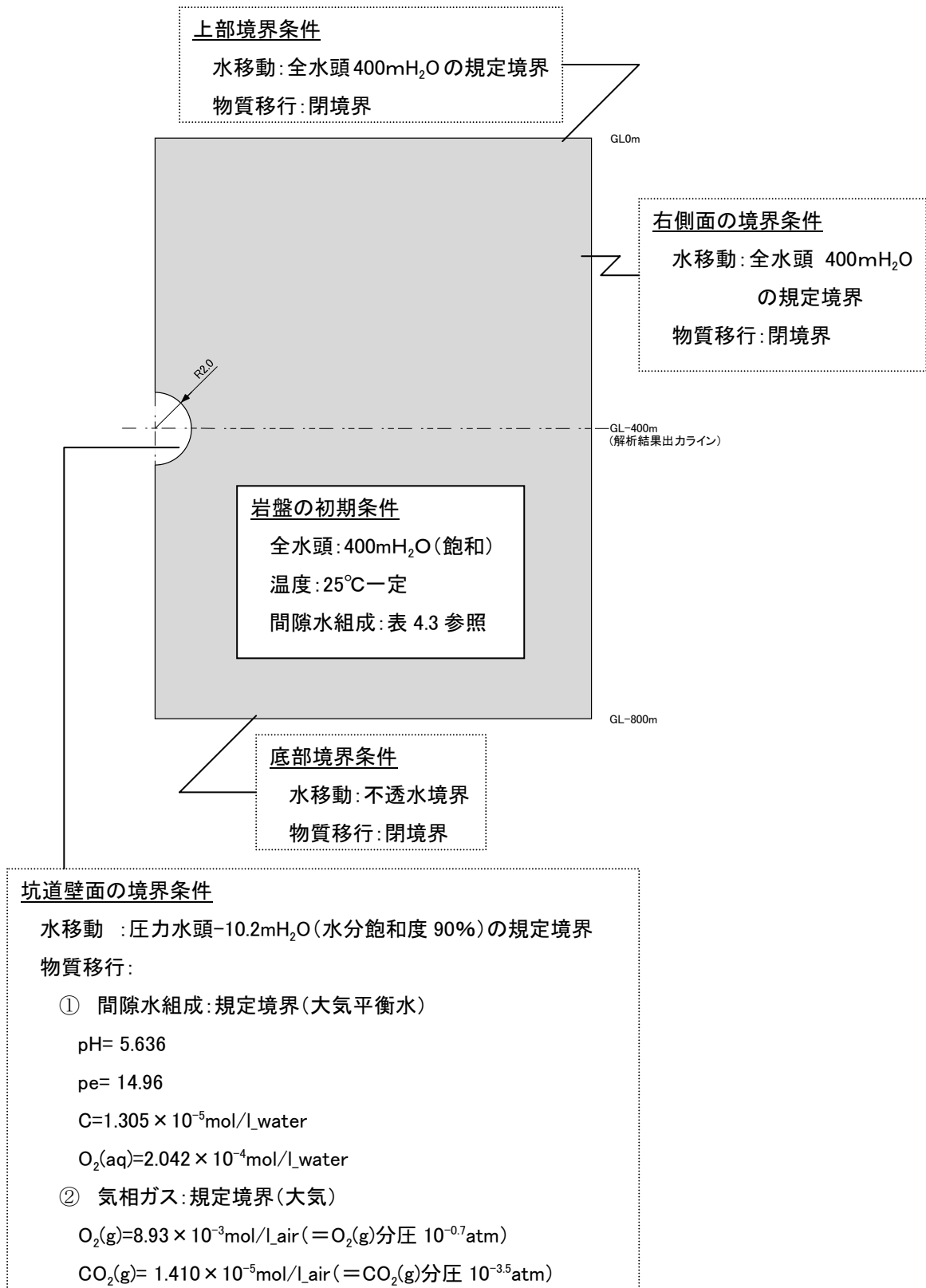
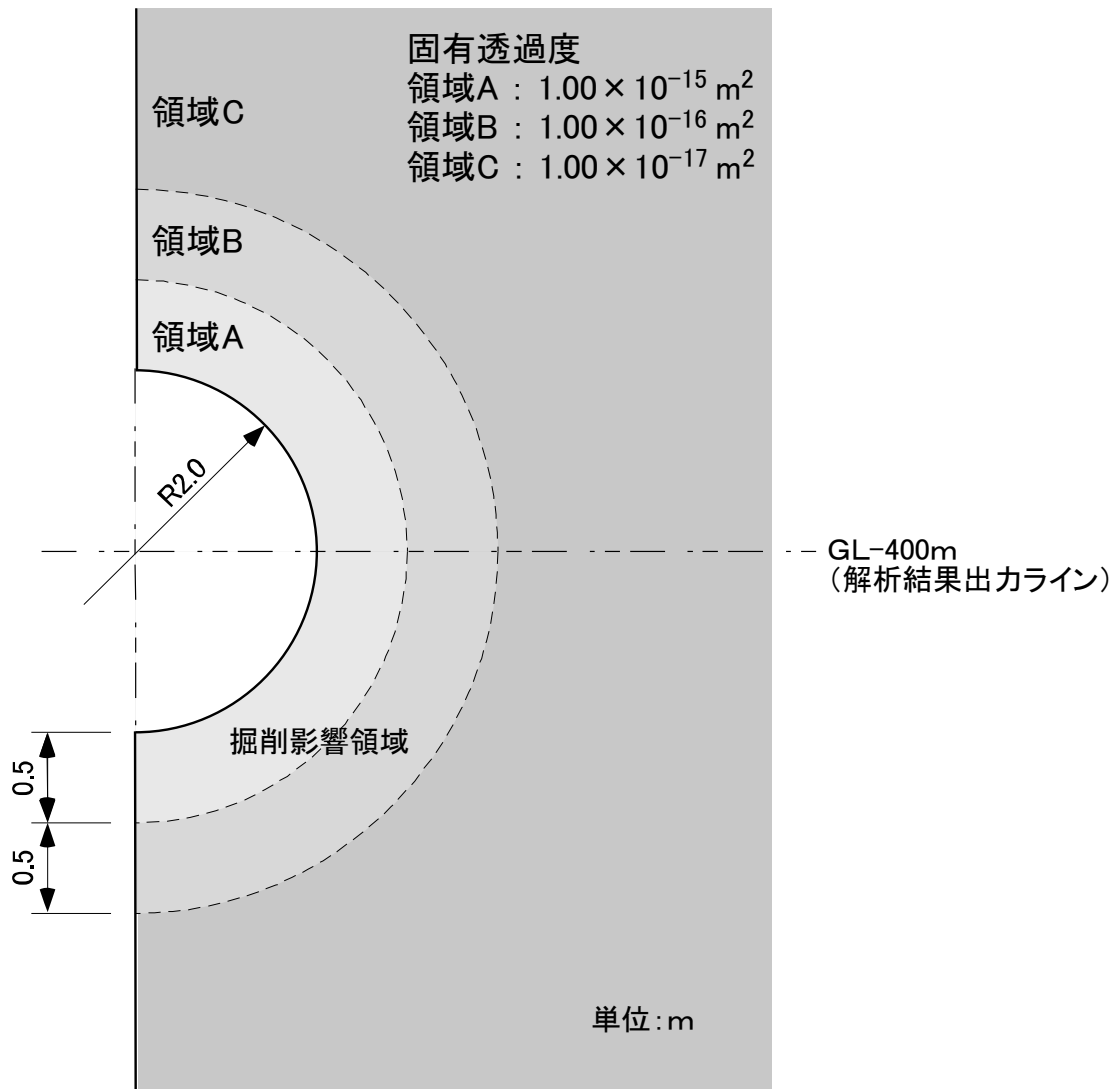


図 4.1 坑道周辺における水理－物質移行連成解析条件



(領域Aと領域Bを掘削影響領域とし、坑道壁面から 1m の範囲を水理学的なゆるみ域として固有透過度を大きく設定した)

図 4.2 仮想的に設定した坑道周辺の固有透過度

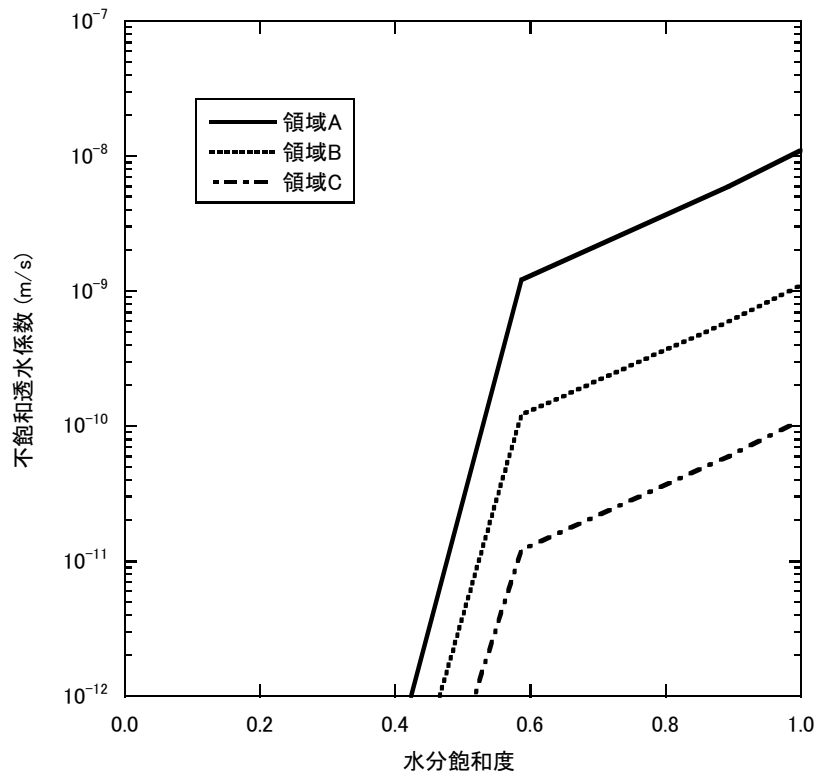


図 4.3 仮想的に設定した岩盤の不飽和透水係数

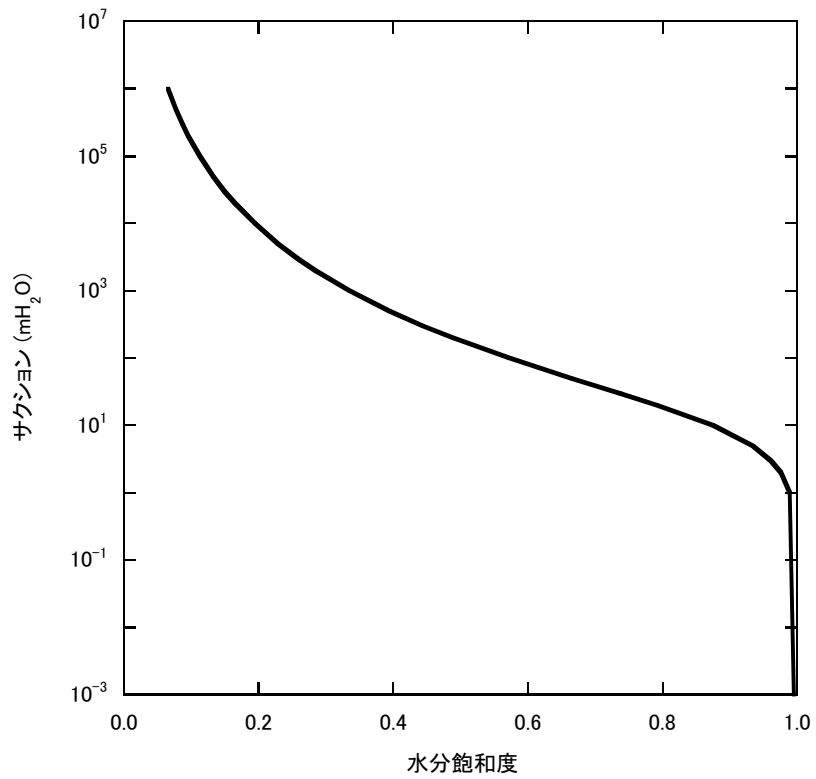


図 4.4 仮想的に設定した岩盤の水分特性曲線

表 4.1 飽和・不飽和浸透流および物質移行に関わる解析パラメータ

固相密度 (kg/m ³)	2220
固相真密度 (kg/m ³)	2610
間隙率 (-)	0.150
固有透過度 (m ²)*	領域 A : 1.00 × 10 ⁻¹⁵ (透水係数 1.10 × 10 ⁻⁸ m/s, 25°C) 領域 B : 1.00 × 10 ⁻¹⁶ (透水係数 1.10 × 10 ⁻⁹ m/s, 25°C) 領域 C : 1.00 × 10 ⁻¹⁷ (透水係数 1.10 × 10 ⁻¹⁰ m/s, 25°C)
不飽和水理パラメータ	①不飽和透水係数 K_r (m/s) (図 4.2 参照) ②サクシオン ψ (mH ₂ O) (図 4.3 参照) $S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = [1 + \alpha\psi ^n]^{-1-\frac{1}{n}}$ ただし, S_e (有効飽和度) $\theta_r = 0.00$ (残留体積含水率) $\theta_s = 0.15$ (飽和体積含水率) $\alpha = 1.006 \times 10^{-1}$ (1/m) $n = 1.237$
縦分散長 (m)	1.0 × 10 ^{-2**}
横分散長 (m)	1.0 × 10 ^{-3***}
遅延係数 (-)	1
減衰係数 (1/year)	0
間隙水中の実効拡散係数 (m ² /s)	7.50 × 10 ⁻¹¹
気相中のガスの拡散係数 (m ² /s) ¹³⁾	O ₂ (g): 1.80 × 10 ⁻⁵ CO ₂ (g): 1.35 × 10 ⁻⁵

* 領域 A および領域 B を掘削影響領域として設定した

** 分散を考慮しないため小さな値を設定した

*** インプットデータ作成上, 縦分散長の 1/10 の値を設定した

表 4.2 設定鉱物の分子量と初期鉱物濃度

	分子量 (g/mol)	初期鉱物濃度 (mol/m ³)
quartz(SiO ₂)	60.100	10000.0
calcite (CaCO ₃)	100.100	1000.0
pyrite(FeS ₂)	120.028	100.0
Fe(OH) ₃ アモルファス(二次鉱物)	106.869	0.0

表 4.3 初期間隙水組成

	ケース1	ケース2	ケース3	ケース4
設定 鉱物	なし	quartz(SiO ₂) calcite(CaCO ₃)	quartz(SiO ₂) calcite(CaCO ₃) pyrite(FeS ₂)	quartz(SiO ₂) calcite(CaCO ₃) pyrite(FeS ₂) Fe(OH) ₃ アモルファス(二次鉱物として設定)
pH	4.300	6.748	6.748	6.748
pe	1.195	-1.350	-3.150	-3.150
C	5.687×10^{-3} mol/l	9.029×10^{-3} mol/l	9.029×10^{-3} mol/l	9.029×10^{-3} mol/l
Ca	-	3.342×10^{-3} mol/l	3.342×10^{-3} mol/l	3.342×10^{-3} mol/l
Fe	-	-	5.126×10^{-8} mol/l	5.126×10^{-8} mol/l
S	-	-	1.025×10^{-7} mol/l	1.025×10^{-7} mol/l
Si	-	1.657×10^{-4} mol/l	1.657×10^{-4} mol/l	1.657×10^{-4} mol/l
温度	25°C			

4. 3 解析結果

4. 3. 1 ケース 1

水分飽和度および間隙水組成に関する解析結果を図 4.5 (a) ~ (g) に示す。グラフの横軸は、坑道壁面からの距離であり、解析結果の出力点は、図 4.4 で示した GL-400m のライン上である。

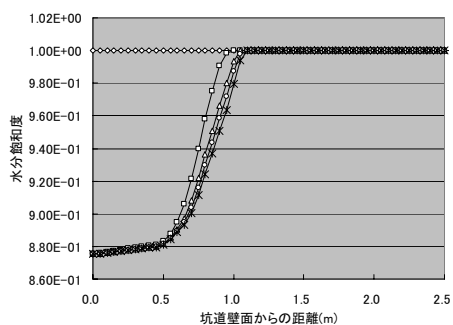
坑道周辺の水分飽和度が低下し、100 日後には坑道壁面より岩盤内部に 1m 程度の範囲で不飽和領域が広がる結果となっている (図 4.5 (a))。

坑道周辺の岩盤中に不飽和領域が生じて、坑道壁面から岩盤の空隙中に大気 ($\text{CO}_2(\text{g})$) および $\text{O}_2(\text{g})$ が浸入する。初期間隙水は、高い濃度の炭酸が溶解している条件としているため (仮想的に $\text{CO}_2(\text{g})$ 分圧 $10^{-0.78}\text{atm}$ と平衡状態を設定している)、間隙水中の炭酸は大気分圧 ($10^{-3.5}\text{atm}$) と平衡する方向で脱ガスする。このため、間隙水中の全 C 濃度は低下し (図 4.5 (e)), 気相中の $\text{CO}_2(\text{g})$ が上昇している (図 4.5 (c))。

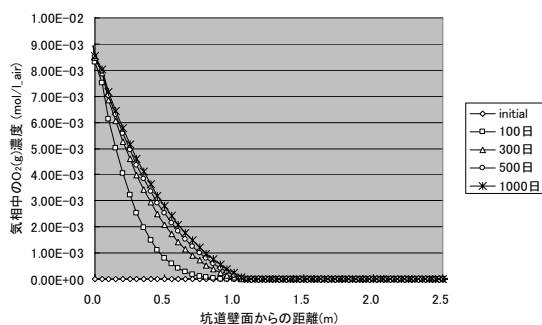
そして、間隙水の pH は、前章の (3.3) 式に示す反応によって、上昇する結果となっている (図 4.5 (f))。

また、不飽和領域が生じることによって、坑道壁面より岩盤空隙中に $\text{O}_2(\text{g})$ が浸入している (図 4.5 (b))。間隙水の溶存酸素濃度は、気相中の $\text{O}_2(\text{g})$ (分圧 $10^{-3.5}\text{atm}$) が溶け込むことによって上昇している (図 4.5 (d))。溶存酸素濃度は、気相中の $\text{O}_2(\text{g})$ 濃度と同じようなプロファイルとなっている。これは、間隙水中の溶存酸素の拡散に比べて、気相中の $\text{O}_2(\text{g})$ の拡散が速いためである。そして、溶存酸素濃度の上昇によって間隙水の pe が上昇している (図 4.5 (g))。

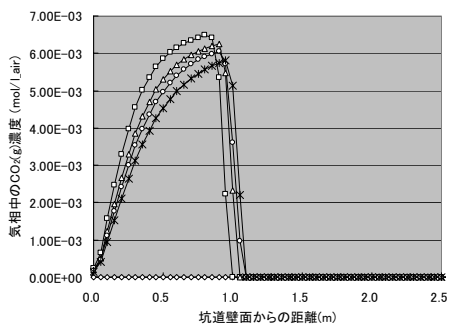
本ケースでは、坑道周辺に不飽和領域が生起し、間隙中に大気が入り込むことによって、間隙水からの炭酸の脱ガスにともなう間隙水 pH の変化、および酸素の浸入による間隙水の pe の変化を確認できた。



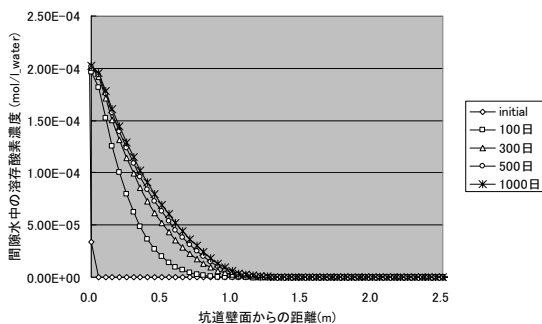
(a) 水分飽和度の分布



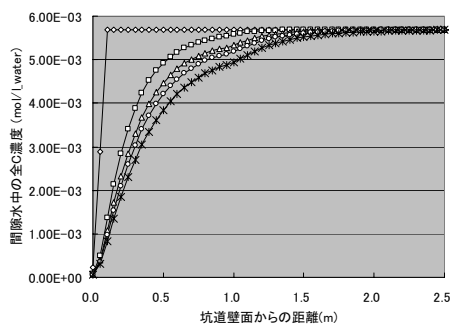
(b) 気相中の O₂(g)濃度分布



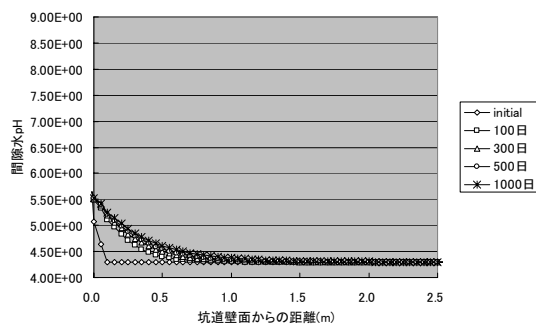
(c) 気相中の CO₂(g)濃度分布



(d) 間隙水中の溶存炭酸濃度分布

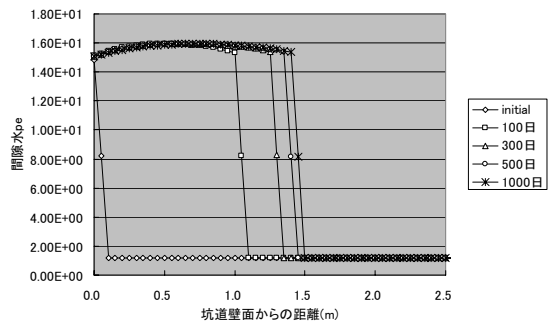


(e) 間隙水中の全 C 濃度分布



(f) 間隙水の pH の分布

図 4.5 ケース1の解析結果



(g) 間隙水の pe の分布

図 4.5 ケース1の解析結果(続き)

4. 3. 2 ケース 2

本ケースは、前述の解析ケース 1 に、calcite (CaCO_3) と quartz(SiO_2)の水-鉱物平衡反応を考慮した解析ケースである。

水分飽和度、間隙水組成、鉱物の溶解沈殿量に関する解析結果を図 4.6(a)～(k) に示す。グラフの横軸は坑道壁面からの距離であり、解析結果の出力点は、前ケースと同様、図 4.4 で示した GL-400m のライン上である。

水分飽和度の変化については、前述の解析ケースと同じであり、坑道壁面より水分飽和度が低下し、100 日後には坑道壁面より岩盤内部に 1m 程度の範囲で不飽和領域が広がる結果となっている (図 4.6 (a))。

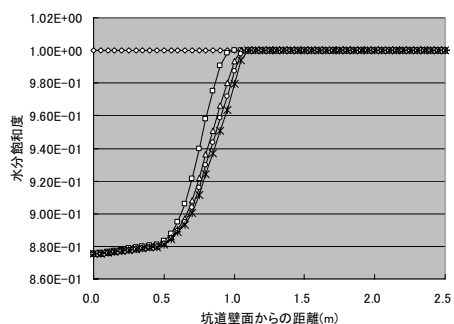
岩盤内に不飽和領域が生じ、岩盤の空隙中に大気が入ることによって、間隙水から炭酸の脱ガスが生じ、間隙水中の全 C 濃度が低下 (図 4.6 (e))、気相中の $\text{CO}_2(\text{g})$ 濃度が上昇している (図 4.6 (c))。また、この脱ガスによって間隙水の pH は道壁面近傍で 8.5 程度まで上昇している (図 4.6 (h))。

坑道壁面近傍では、calcite (CaCO_3) が沈殿している (図 4.6 (j))。これは、坑道壁面近傍の間隙水の pH が 8.5 程度であることから、中和反応によるものと考えられる。calcite (CaCO_3) の沈殿によって、間隙水中の Ca 濃度は減少している (図 4.6 (f))。

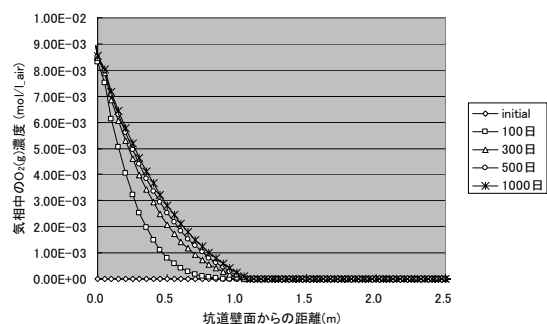
また、坑道壁面より岩盤空隙中に $\text{O}_2(\text{g})$ が浸入し (図 4.6 (b))、これと平衡する形で溶解酸素濃度が上昇し (図 4.6 (d))、間隙水の pe が上昇している (図 4.6 (i))。

quartz (SiO_2)については、溶解・沈殿が見られない (図 4.6 (k))。

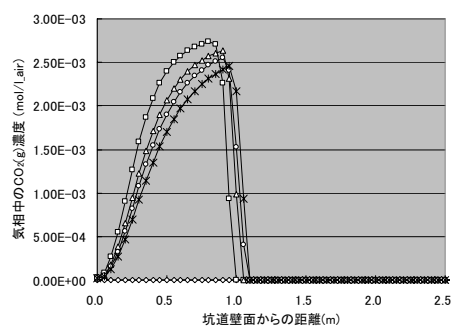
本ケースでは、不飽和領域が生じることによって、間隙水からの炭酸の脱ガスにともなう間隙水 pH の変化、および酸素の浸入による間隙水の pe の変化を確認した。また、坑道壁面近傍で calcite (CaCO_3) の沈殿を確認した。



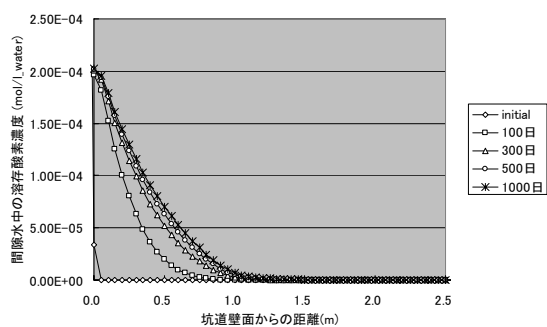
(a) 水分飽和度の分布



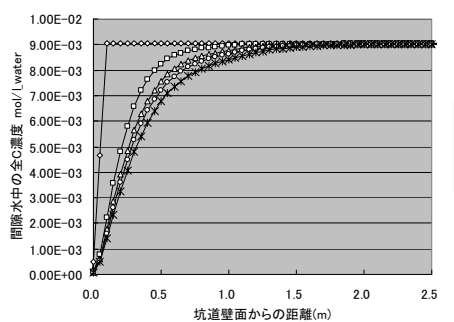
(b) 気相中の $O_2(g)$ 濃度分布



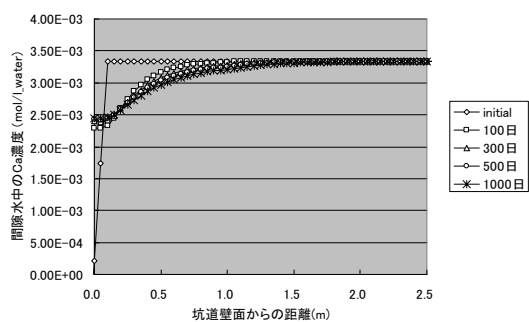
(c) 気相中の $CO_2(g)$ 濃度分布



(d) 間隙水中の溶存酸素濃度分布

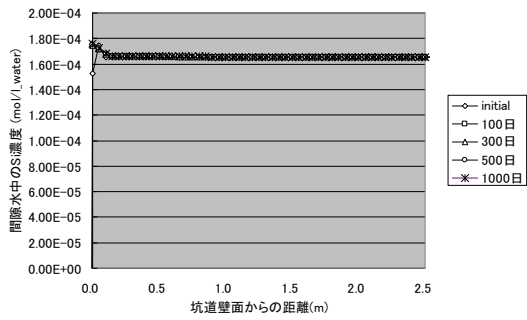


(e) 間隙水中の全 C 濃度分布

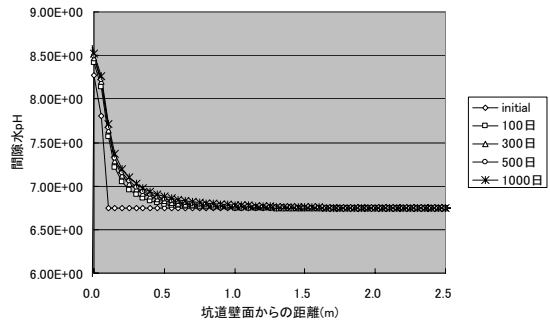


(f) 間隙水中の Ca 濃度分布

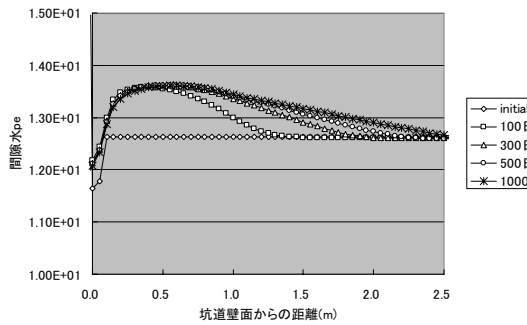
図 4.6 ケース2の解析結果



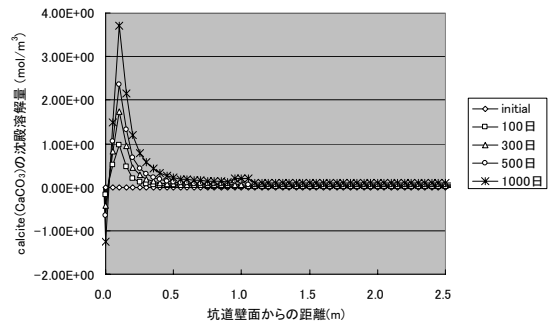
(g) 間隙水中の Si 濃度分布



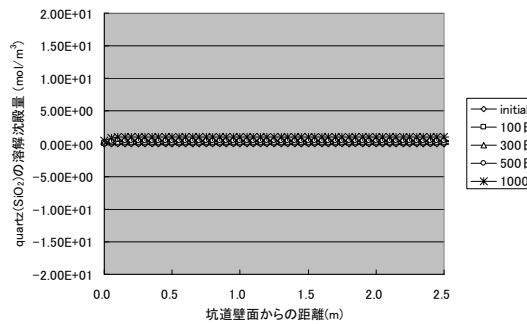
(h) 間隙水の pH の分布



(i) 間隙水の pe の分布



(j) calcite (CaCO₃) の溶解沈殿量
(+は沈殿, -は溶解)



(k) quartz (SiO₂) の溶解沈殿量
(+は沈殿, -は溶解)

図 4.6 ケース2の解析結果(続き)

4. 3. 3 ケース 3

本ケースは、前述のケース 2 に、pyrite (FeS_2) の酸化速度反応を加えた解析ケースである。

水分飽和度、間隙水組成、鉱物の溶解沈殿量の変化に関する解析結果を図 4.7 (a) ~ (n) に示す。グラフの横軸は坑道壁面からの距離であり、解析結果の出力点は、前ケースと同様、図 4.4 で示した GL-400m のライン上である。

水分飽和度の変化については、前述の解析ケースと同じである (図 4.7 (a))。

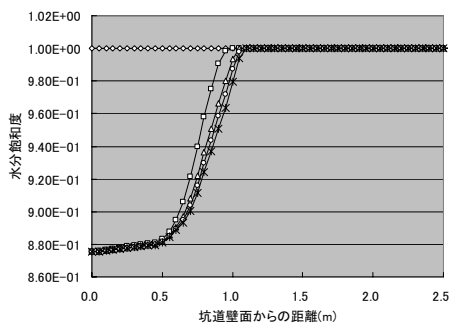
岩盤の空隙中に大気が浸入することによって、間隙水から炭酸の脱ガスが生じ、気相中の $\text{CO}_2(\text{g})$ の上昇 (図 4.7 (c))、間隙水中の全 C 濃度の低下 (図 4.7 (e)) についても前述のケースと同じになる。

一方、酸素については、前述の解析ケース 2 に比べて気相中の $\text{O}_2(\text{g})$ 濃度 (図 4.7 (b)) および溶存酸素濃度 (図 4.7 (d)) とともに低くなっている。これは、岩盤内に侵入した酸素が pyrite (FeS_2) の酸化によって消費されるためである (図 4.7 (n))。このため、間隙水の pe は、前述の pyrite (FeS_2) を設定しない解析ケースに比べて、変化する範囲が小さく初期の還元状態が保たれる結果となっている (図 4.7 (k))。そして、pyrite (FeS_2) の酸化により、間隙水中の S 濃度、Fe 濃度は高くなっている (図 4.7 (h), (i))。

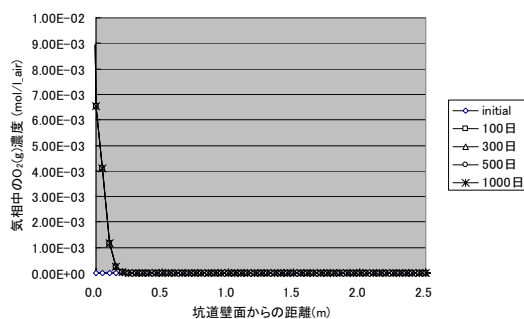
calcite (CaCO_3) は、坑道壁面で溶解している。前述のケース 2 の場合、calcite (CaCO_3) は坑道壁面で沈殿傾向にあった。これは、前述の通り、間隙水の pH が 8.5 程度であることから、中和反応と考えられる。本ケースでは、pyrite (FeS_2) の酸化反応を加えたことによって、坑道壁面の pH が 7.5 程度となっていることから、calcite (CaCO_3) が溶解傾向にあるものと考えられる (図 4.7 (l))。calcite (CaCO_3) の溶解反応によって、間隙水中の Ca 濃度は上昇している (図 4.7 (f))。

quartz (SiO_2) については、濃度変化がほとんど見られない (図 4.7 (m))。

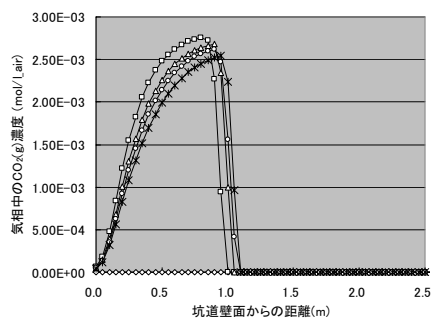
本ケースでは、pyrite (FeS_2) の酸化反応を考慮することによって、間隙水 pe が変化する範囲が、pyrite (FeS_2) を設定しないケースに比べて小さくなることを確認した。



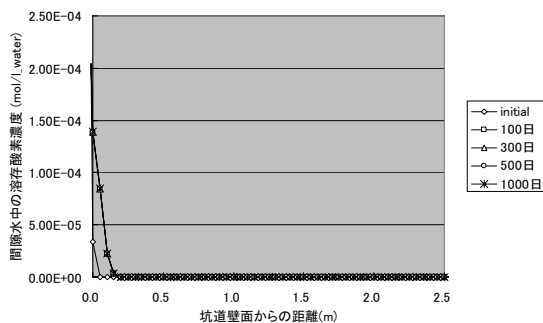
(a) 水分飽和度の分布



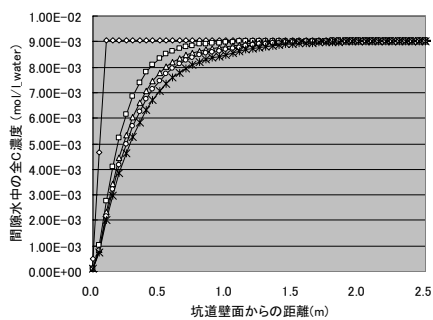
(b) 気相中の O₂(g)濃度分布



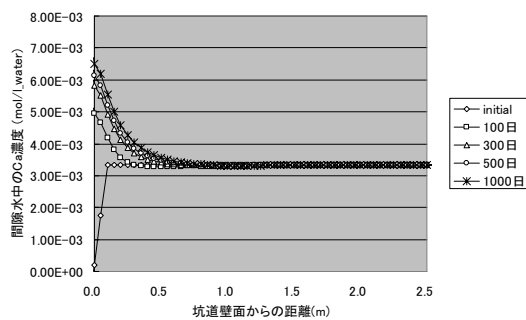
(c) 気相中の CO₂(g)濃度分布



(d) 間隙水中の溶存酸素濃度分布

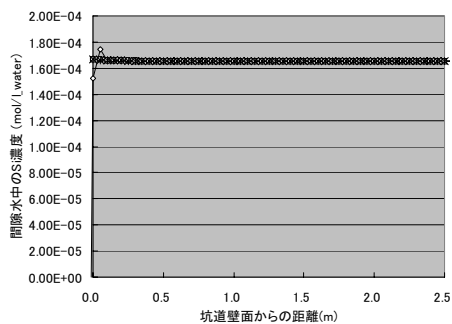


(e) 間隙水中の全 C 濃度分布

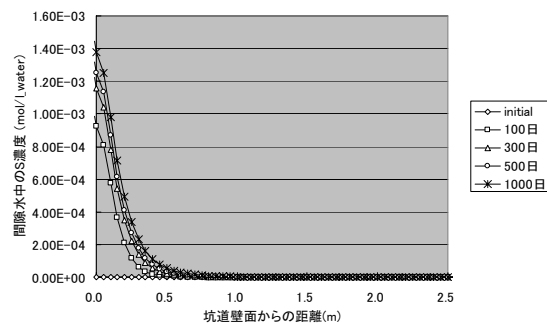


(f) 間隙水中の Ca 濃度分布

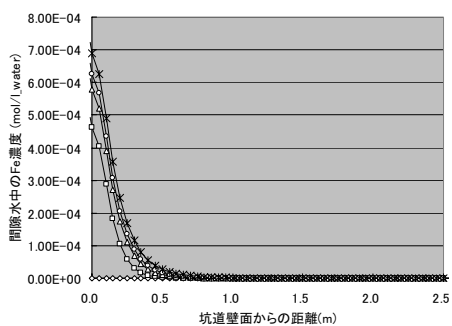
図 4.7 ケース3の解析結果



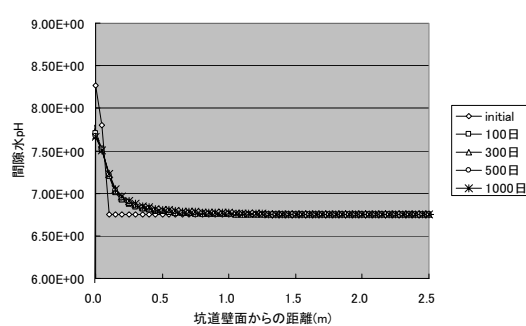
(g) 間隙水中の Si 濃度分布



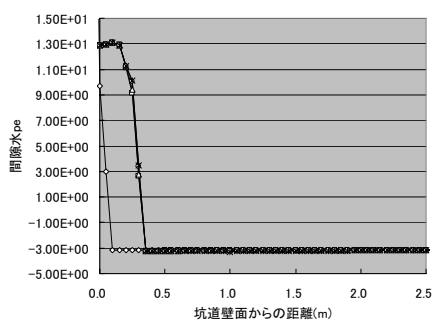
(h) 間隙水中の S 濃度分布



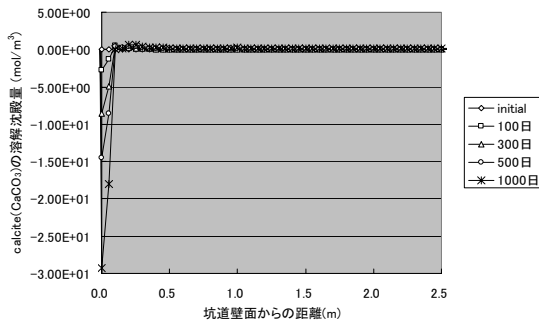
(i) 間隙水中の Fe 濃度分布



(j) 間隙水の pH の分布

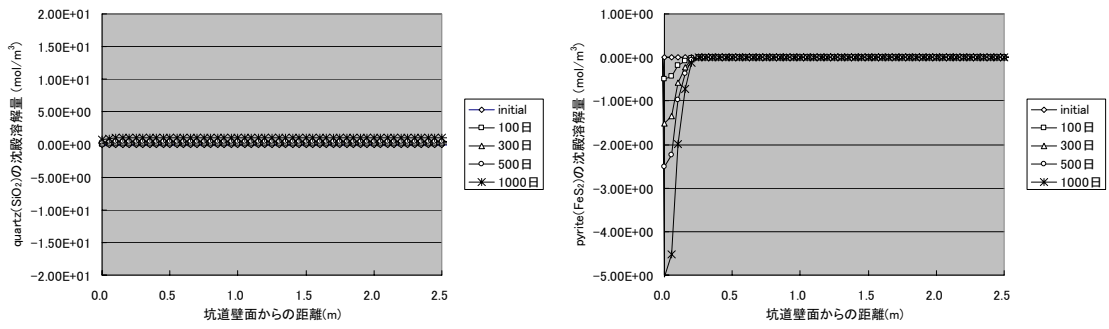


(k) 間隙水の pe の分布



(l) calcite (CaCO₃) の溶解沈殿量
(+は沈殿, -は溶解)

図 4.7 ケース3の解析結果(続き, その1)



(m) quartz(SiO₂)の沈殿溶解量
(+は沈殿, -は溶解)

(n) pyrite(FeS₂)の沈殿溶解量
(+は沈殿, -は溶解)

図 4.7 ケース3の解析結果(続き, その2)

4. 3. 4 ケース4

本ケースは、前述のケース3に、二次鉱物として $\text{Fe}(\text{OH})_3$ アモルファスを設定した解析ケースである。

水分飽和度、間隙水組成、鉱物の溶解沈殿量の変化に関する解析結果を図4.8 (a) ~ (d) に示す。グラフの横軸は坑道壁面からの距離であり、解析結果の出力点は、前ケースと同様、図4.4で示したGL-400mのライン上である。

水分飽和度の変化については、これまでの解析ケースと同じとなる。

間隙水から炭酸の脱ガスが生じ、気相中の $\text{CO}_2(\text{g})$ 濃度の上昇、間隙水中の全C濃度の低下、また、 $\text{O}_2(\text{g})$ の浸入による溶存酸素濃度の上昇、pyrite (FeS_2) の酸化、それに伴う間隙水 p_e の変化についても前述の解析ケース3と同様である。

本ケースでは、二次鉱物として設定した $\text{Fe}(\text{OH})_3$ アモルファスが、坑道壁面で沈殿している (図4.8 (d))。この $\text{Fe}(\text{OH})_3$ アモルファスの沈殿により、間隙水中のFe濃度は低い値となっている (図4.8 (i))。

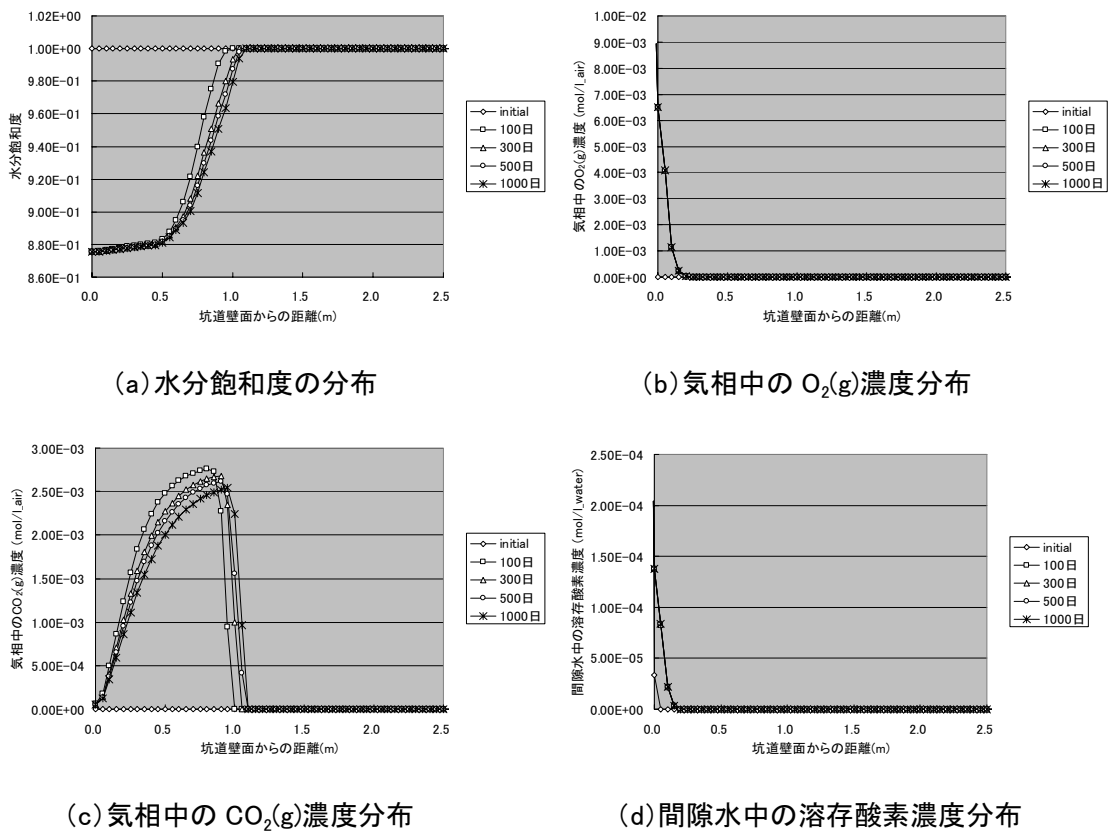
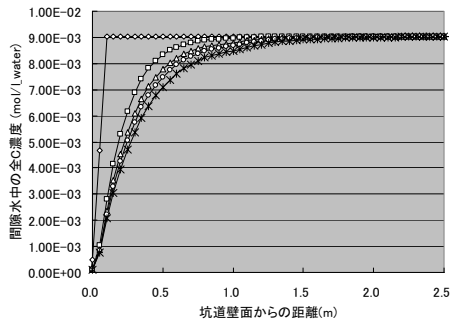
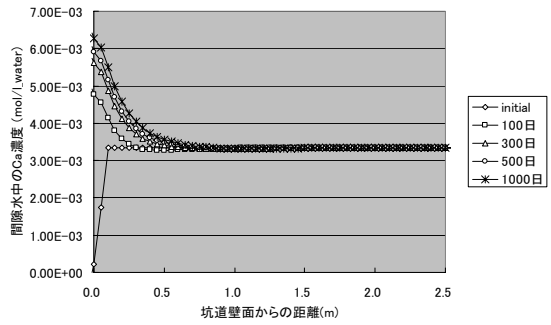


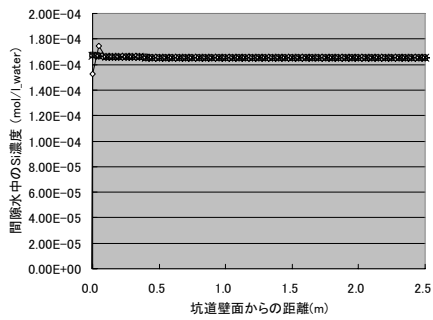
図 4.8 ケース4の解析結果



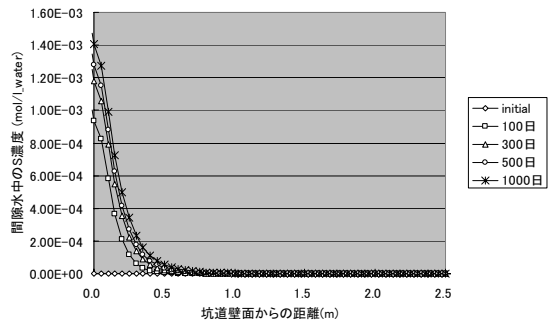
(e) 間隙水中の全 C 濃度分布



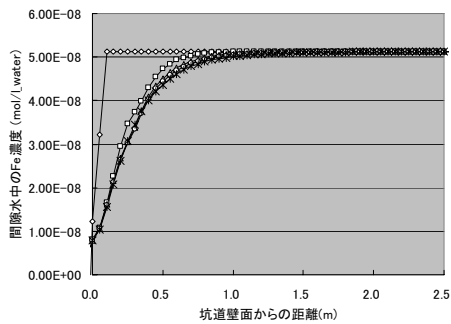
(f) 間隙水中の Ca 濃度分布



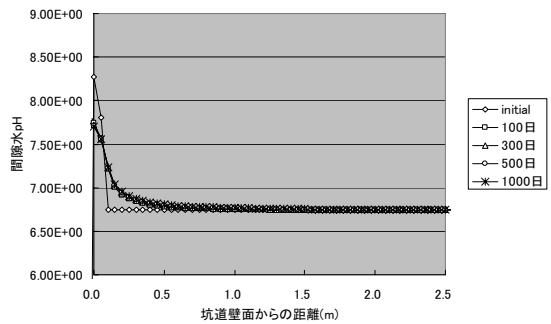
(g) 間隙水中の Si 濃度分布



(h) 間隙水中の S 濃度分布

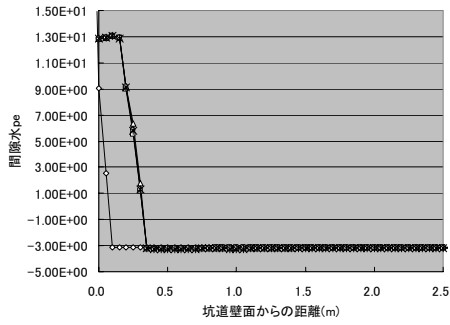


(i) 間隙水中の Fe 濃度分布

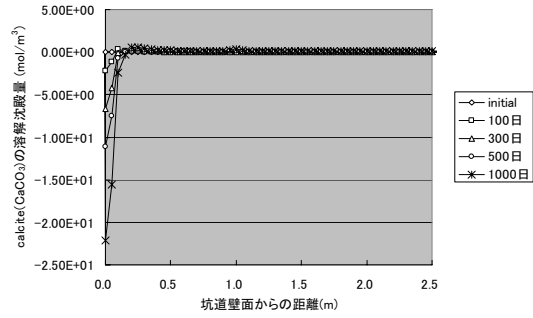


(j) 間隙水の pH の分布

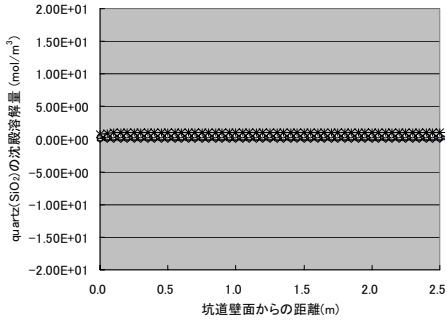
図 4.8 ケース4の解析結果(続き, その1)



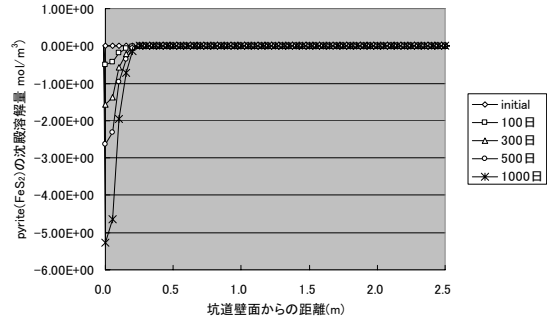
(k) 間隙水の pe の分布



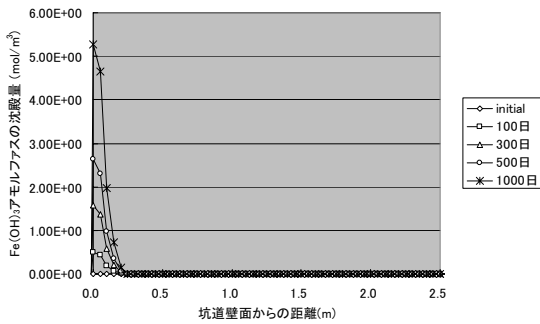
(l) calcite (CaCO₃) の溶解沈殿量
(+は沈殿, -は溶解)



(m) quartz(SiO₂) の沈殿溶解量
(+は沈殿, -は溶解)



(n) pyrite (FeS₂) の沈殿溶解量
(+は沈殿, -は溶解)



(o) Fe(OH)₃ アモルファスの沈殿量

図 4.8 ケース4の解析結果(続き, その2)

4. 4 まとめ

地下深部の水平坑道を対象として、坑道周辺での不飽和領域の生起に伴う地球化学特性の変化に主眼を置いた解析を実施した。

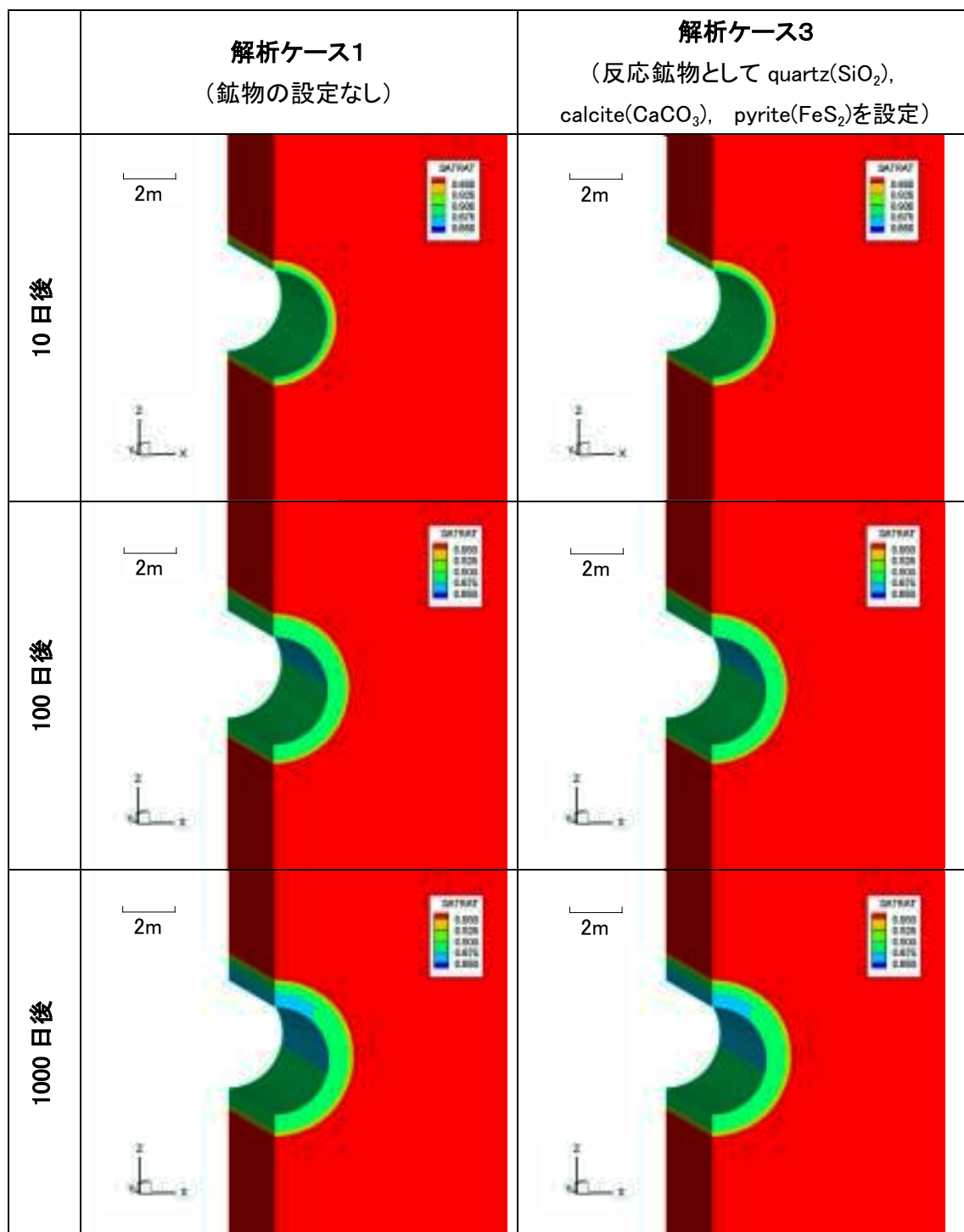
その結果、

- 1) 間隙水の酸化還元状態の変化
- 2) 間隙水からの炭酸の脱ガスにともなう pH の変化
- 3) pyrite(FeS_2)の酸化反応による還元状態の維持

などの地球化学特性の変化を把握した。

今回の解析条件において、このような地球化学特性が変化する範囲は、1000 日後で坑道壁面より内部に最大で 2m 程度であった。

一例として、ケース 1 (鉱物の設定なし) とケース 3 (quartz(SiO_2), calcite(CaCO_3), pyrite(FeS_2)を設定) について、10 日後、100 日後、1000 日後の水分飽和度、間隙水中の溶存酸素濃度、pH、pe の解析コンター図を比較して図 4.9~4.12 に示す。



注) 地球化学反応から水理特性への影響を考慮していないため、両ケースの結果は同じになる。

例えば、“鉱物の溶解沈殿→間隙率変化→透水係数変化”のような連成を考慮すれば坑道周辺での水分飽和度の分布は異なる結果となる。

図 4.9 坑道周辺の水分飽和度の解析コンター図

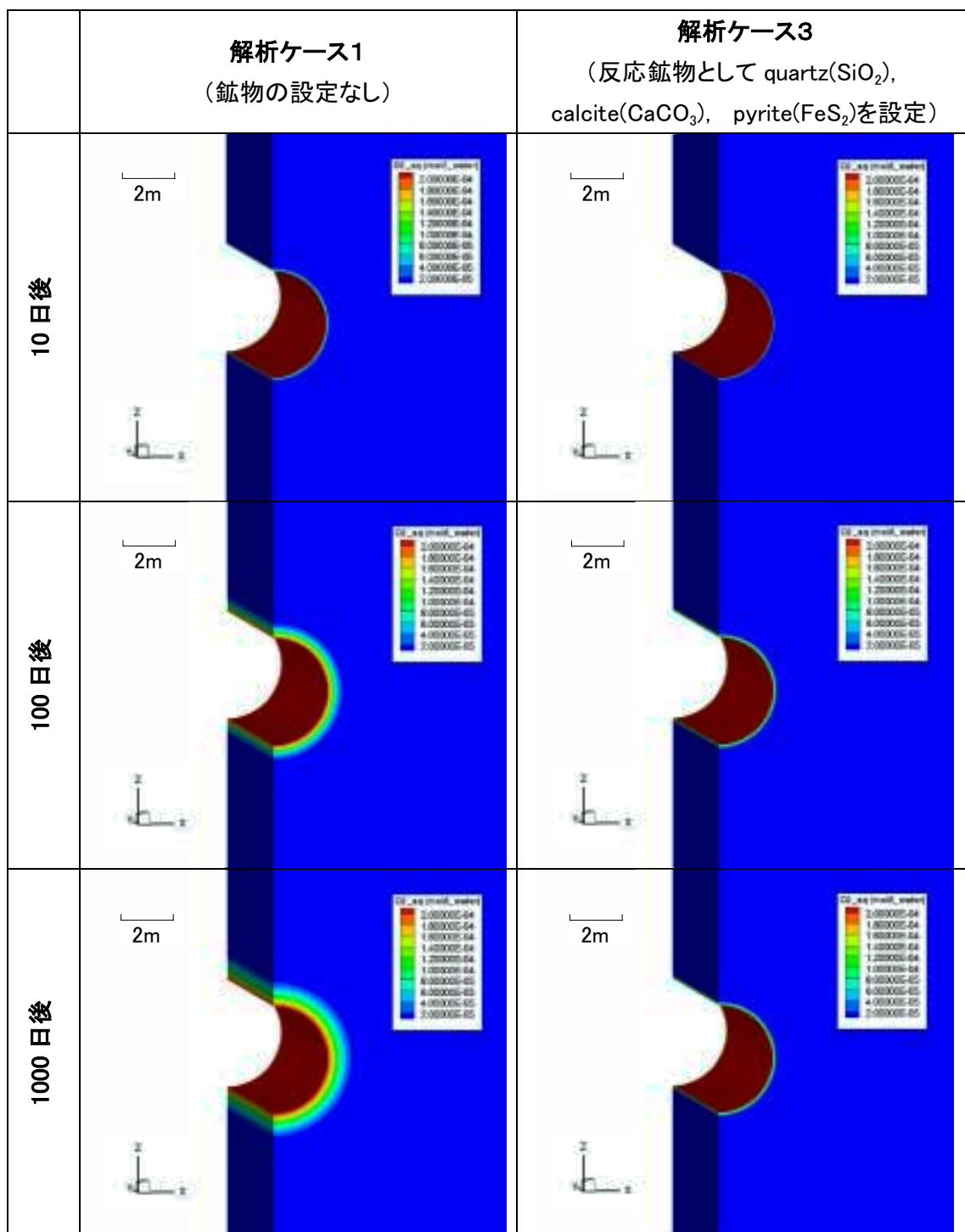


図 4.10 坑道周辺の溶存酸素の解析コンター図

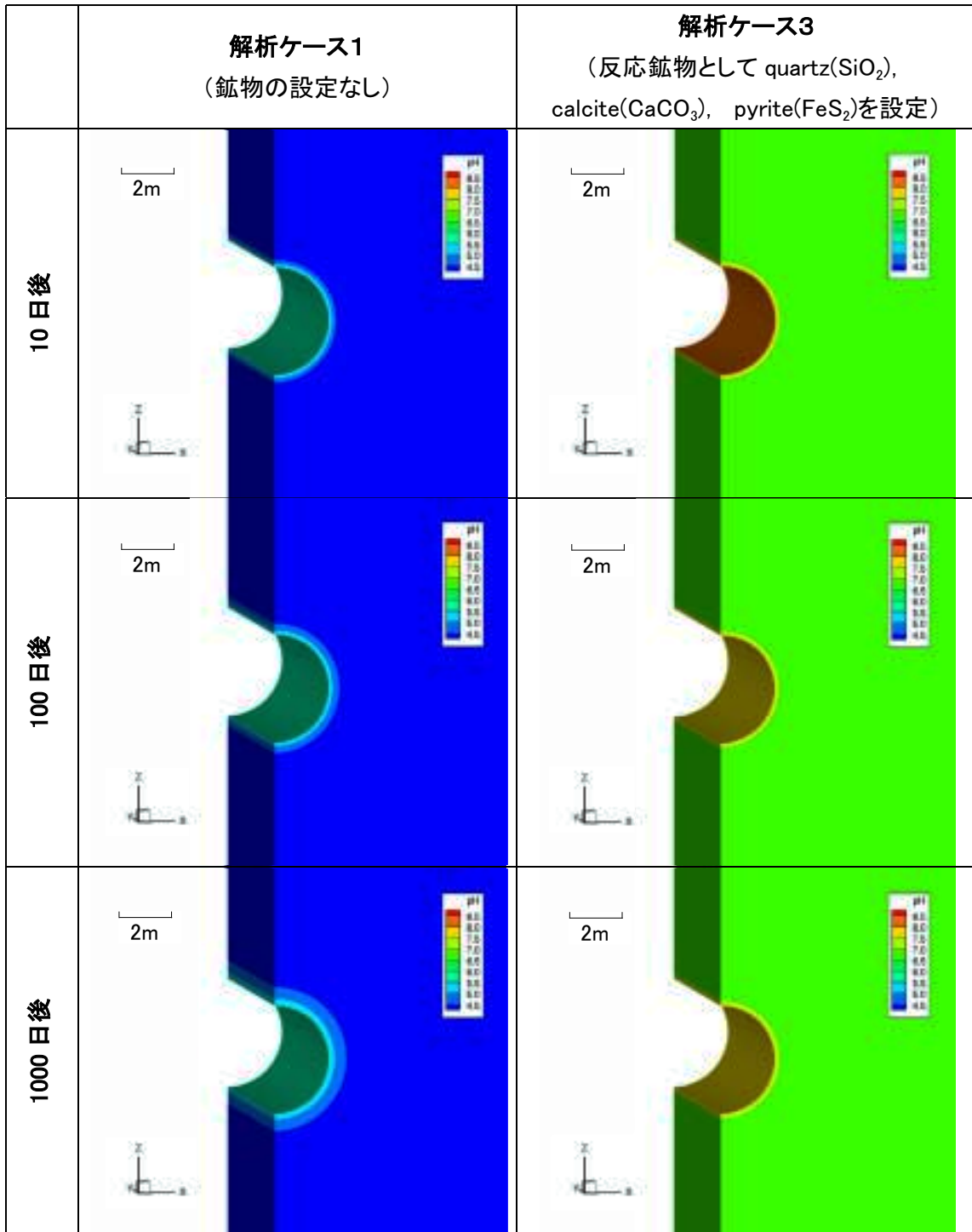


図 4.11 坑道周辺の間隙水 pH の解析コンター図

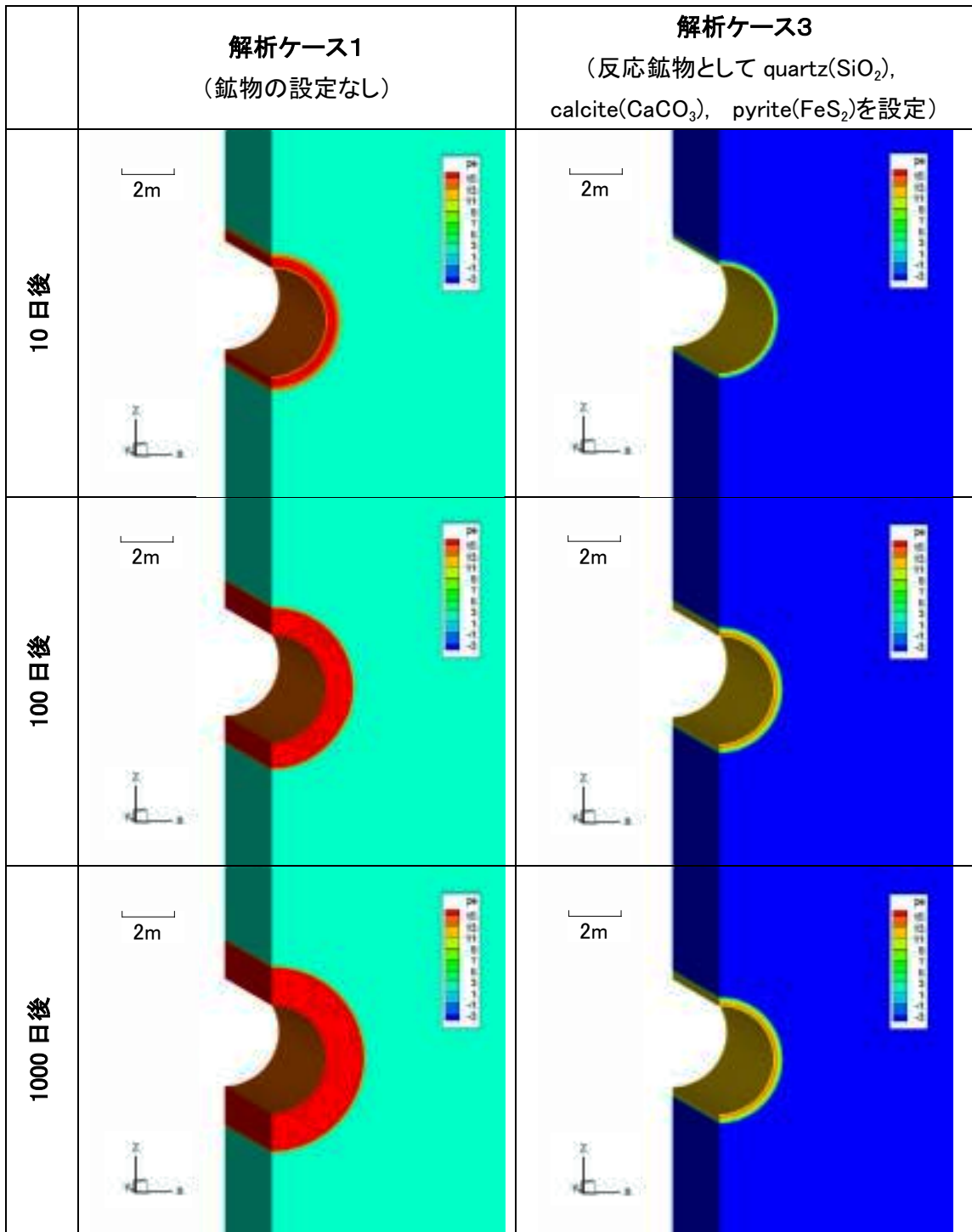


図 4.12 坑道周辺の間隙水 p_e の解析コンター図

5. おわりに

高レベル放射性廃棄物の地層処分における人工バリア定置後のニアフルドの長期挙動のより現実的な予測のためには、処分坑道掘削にともなう生じる応力場、水理場、化学場などの変化を解析に反映する必要がある。

本報告書は、幌延等の具体的な地質環境における熱 - 水 - 応力 - 化学連成挙動解析の適用事例の提示に向けた予備的解析として、これまでに開発した熱 - 水 - 応力 - 化学連成挙動モデル／解析コードにより、坑道周辺での不飽和領域の生起にともなう化学場の変化を表現できるかどうかを検討した。

その結果、岩盤内に大気が入り込むことによる間隙水の酸化還元電位の変化や、間隙水より炭酸が脱ガスすることによる pH の変化など、本連成挙動モデル／解析コードが、気相 - 液相 - 固相間での地球化学特性の変化を表現できることを確認した。

今後は、本連成挙動モデル／解析コードにより、幌延等の具体的地質環境下での坑道掘削による地球化学への影響に関する解析評価を通じて、その妥当性を確認していくとともに、適用事例の提示を行う予定である。

参考文献

- 1) 核燃料サイクル開発機構 (1999) : “わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性－地層処分研究開発第2次取りまとめ－, 総論レポート”, サイクル機構技術資料, JNC TN1400 99-020.
- 2) 伊藤彰, 川上進, 油井三和 (2003) : “熱-水-応力-化学連成挙動に関する数値解析コードの開発”, 核燃料サイクル開発機構, JNC TN8400 2002-022.
- 3) 伊藤彰, 川上進, 油井三和 (2004) : “高レベル放射性廃棄物地層処分におけるニアフィールドの熱-水-応力-化学連成モデル／解析コードの開発”, 核燃料サイクル開発機構, JNC TN8400 2003-032.
- 4) 鈴木英明, 藤崎淳, 藤田朝雄, 油井三和 (2006) : “高レベル放射性廃棄物地層処分におけるニアフィールド熱－水－応力－化学連成解析モデルを用いた連成試験 (COUPLE) の解析評価”, 土木学会第61回年次学術講演会, CS05-031, pp.267-268.
- 5) 伊藤彰, 杉田裕, 川上進, 油井三和, 石原義尚, 千々松正和, 根山敦史, 菱谷智幸 (2003) : “高レベル放射性廃棄物地層処分におけるニアフィールドの熱-水-応力-化学連成挙動に関する数値解析の取り組み”, 土木学会第58回年次学術講演会, CS7-041, pp.359-360.
- 6) 資源エネルギー庁・(独) 日本原子力研究開発機構 (2006) : “高レベル放射性廃棄物の地層処分基盤研究開発に関する全体計画.
- 7) Masakazu Chijimatsu, Tomoo Fujita, Akira Kobayashi and Yuzo Ohnishi (1999) : “Coupled Thermo – Hydro – Mechanical Experiment at Kamaishi Mine, Technical Note 16-99-03, Analyses of Task 2C, DECOVALEX II”, JNC Technical Report, JNC TN8400 99-031.
- 8) Makoto Nishigaki, Tomoyuki Hishiya and Naro Hashimoto (2001): “Density Dependent Groundwater Flow with Mass Transport in Saturated – Unsaturated Porous Media”, Proceedings of the First Asisn-Pacific Congress on Computational Mechanics, pp.1375-1380.
- 9) David L. Parkhurst (1995) : User’s Guide to PHREEQC-A Computer Program for Speciation, Reaction-Path, Advective-Transport, and Inverse Geochemical Calculations, U.S. geological Survey, Water-Resources Investigations Report 95-4227.
- 10) 核燃料サイクル開発機構 (1999) : “わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性－地層処分研究開発第2次取りまとめ－, 分冊 2, 地層処分の工学技術, サイクル機構技術資料, JNC TN1400 99-022, p.IV-336.
- 11) Mark A. Williamson J. Donald Rimstidt (1994) : “ The kinetics and electrochemical rate-determining step of aqueous pyrite oxidation ”, Geochimica et Cosmochimica Acta, Vol.58, No.24, pp. 5443-5454.

- 12) 吉田泰, 油井三和 (2003) : “地球化学計算コードで利用可能な JNC 熱力学データベース”, JNC Technical Report, JNC TN8400 2003-005.
- 13) 中野政詩 (1991) : “土の物質移動学”, 東京大学出版会, p.88.
- 14) 核燃料サイクル開発機構 (1999) : “わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性－地層処分研究開発第2次取りまとめ－, 分冊1, わが国の地質環境”, サイクル機構技術資料, JNC TN1400 99-020.
- 15) 動力炉・核燃料開発事業団 (1997) : “不飽和領域の原位置計測手法および解析モデルの研究”, 委託研究成果報告書, PNC TJ1449 97-002 (I)
- 16) Katsuhiko Hama, Takanori Kunimaru, Richard Metcalfe and Andrew J. Martin (2006) : “The hydro geochemistry of argillaceous rock formations at the Horonobe URL site, Japan”, Physics and Chemistry of the Earth.vol.32, pp.170-180.

国際単位系 (SI)

表1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質の量	モル	mol
光の度	カンデラ	cd

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立方メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	メートル ⁻¹	m ⁻¹
密度 (質量密度)	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
質量体積 (比体積)	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ (物質の濃度)	アンペア毎メートル	A/m
輝度	モル毎立方メートル	mol/m ³
屈折率	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
	(数の) 1	1

表5. SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 ²⁴	ヨタ	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	c
10 ¹⁸	エタ	E	10 ⁻³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	y

表3. 固有の名称とその独自の記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(a)	rad		m ² ・m ⁻¹ =1 ^(b)
立体角	ステラジアン ^(a)	sr ^(c)		m ² ・m ⁻² =1 ^(b)
周波数	ヘルツ	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ ・kg ⁻¹ ・s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N・m	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻²
工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s ¹ ・A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻³ ・A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻³ ・A ⁻²
コンダクタンス	ジーメン	S	A/V	m ² ・kg ⁻¹ ・s ³ ・A ²
磁束密度	ウェーバ	Wb	V・s	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻² ・A ⁻¹
磁束	テスラ	T	Wb/m ²	kg ⁻¹ ・s ⁻² ・A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻² ・A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(d)	°C		K
光照射度	ルクス	lx	cd・sr ^(c)	m ² ・m ⁻² ・cd=cd
(放射性核種の)放射能吸収線量, 質量エネルギー当量	グレイ	Gy	J/kg	m ² ・m ⁻⁴ ・cd=m ⁻² ・cd
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量, 組織線量当量	シーベルト	Sv	J/kg	s ⁻¹

- (a) ラジアン及びステラジアンの使用は、同じ次元であっても異なった性質をもった量を区別するときの組立単位の表し方として利点がある。組立単位を形作るときにいくつかの用例は表4に示されている。
 (b) 実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号“1”は明示されない。
 (c) 測光学では、ステラジアンの名称と記号srを単位の表し方の中にそのまま維持している。
 (d) この単位は、例としてミリセルシウス度m°CのようにSI接頭語を伴って用いても良い。

表4. 単位の中に固有の名称とその独自の記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘力のモーメント	パスカル秒	Pa・s	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻¹
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m ² ・m ⁻¹ ・s ⁻¹ =s ⁻¹
角速度	ラジアン毎平方秒	rad/s ²	m ² ・m ⁻¹ ・s ⁻² =s ⁻²
熱流密度, 放射照度	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg ⁻¹ ・s ⁻³
熱容量, エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻² ・K ⁻¹
質量熱容量 (比熱容量), 質量エントロピー (比エネルギー)	ジュール毎キログラム	J/(kg・K)	m ² ・s ⁻² ・K ⁻¹
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m・K)	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻³ ・K ⁻¹
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ ・kg ⁻¹ ・s ⁻²
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻³ ・A ⁻¹
体積電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ ・s ¹ ・A
電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² ・s ¹ ・A
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	m ³ ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻² ・A ⁻²
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻² ・mol ⁻¹
モルエントロピー	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol・K)	m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻² ・K ⁻¹ ・mol ⁻¹
モル熱容量	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ ・s ¹ ・A
照射線量 (X線及びγ線)	グレイ	Gy	m ² ・s ⁻²
吸収線量	グレイ	Gy	m ² ・s ⁻²
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ² ・m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ⁻³ ・m ² ・kg ⁻¹ ・s ⁻²
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² ・sr)	m ² ・m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ⁻³ ・kg ⁻¹ ・s ⁻²

表6. 国際単位系と併用されるが国際単位系に属さない単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h=60 min=3600 s
日	d	1d=24 h=86400 s
角度	°	1°=(π/180) rad
分	'	1'=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648000) rad
リットル	l, L	1l=1 dm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1t=10 ³ kg
ネーパ	Np	1Np=1
ベル	B	1B=(1/2) ln10 (Np)

表7. 国際単位系と併用されこれに属さない単位でSI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
電子ボルト	eV	1eV=1.60217733(49)×10 ⁻¹⁹ J
統一原子質量単位	u	1u=1.6605402(10)×10 ⁻²⁷ kg
天文単位	ua	1ua=1.49597870691(30)×10 ¹¹ m

表8. 国際単位系に属さないが国際単位系と併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
海里	海里	1海里=1852m
ノット	ノット	1ノット=1海里毎時=(1852/3600)m/s
アール	a	1a=1 dam ² =10 ² m ²
ヘクタール	ha	1ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
バール	bar	1bar=0.1MPa=100kPa=1000hPa=10 ⁵ Pa
オングストローム	Å	1Å=0.1nm=10 ⁻¹⁰ m
バール	b	1b=100fm=10 ⁻²⁸ m ²

表9. 固有の名称を含むCGS組立単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn・s/cm ² =0.1Pa・s
ストークス	St	1 St=1cm ² /s=10 ⁻⁴ m ² /s
ガウス	G	1 G ≐ 10 ⁻⁴ T
エルステッド	Oe	1 Oe ≐ (1000/4π) A/m
マクスウェル	Mx	1 Mx ≐ 10 ⁻⁸ Wb
スチルブ	sb	1 sb = 1cd/cm ² =10 ⁴ cd/m ²
ホト	ph	1 ph=10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal = 1cm/s ² =10 ⁻² m/s ²

表10. 国際単位に属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R = 2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
X線単位	X unit	1X unit=1.002×10 ⁻⁴ nm
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
ジャンスキー	Jy	1 Jy=10 ⁻²⁶ W・m ⁻² ・Hz ⁻¹
フェルミ	fm	1 fermi=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット	carat	1 metric carat = 200 mg = 2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カリ	cal	
マイクロン	μ	1 μ = 1μm=10 ⁻⁶ m

