

JAERI - M
93-207

確率論的システム評価コードによる
不確かさ・感度解析(I)

— 廃棄物処分システムの安全評価に関する
国際比較問題レベル0への適用 —

1993年10月

本間 俊充・笹原 孝*

JAERI-Mレポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の間合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division, Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1993

編集兼発行 日本原子力研究所
印刷 財団法人原子力資料サービス

確率論的システム評価コードによる不確かさ・感度解析 (I)
— 廃棄物処分システムの安全評価に関する国際比較問題レベル0への適用 —

日本原子力研究所東海研究所環境安全研究部

本間 俊充・笹原 孝*

(1993年9月22日受理)

本報告書は、OECD/NEA主催のPSAC利用者グループの比較問題レベル0に、開発中の確率論的システム評価コードを適用した結果を示すものである。この比較問題は、廃棄物の地層処分施設の性能評価に用いる確率論的システム評価コードの比較検証を目的として提案されたものの一つである。計算には、入力パラメータ値のサンプリングのためのプリ・プロセッサコードPREPと不確かさ/感度解析のためのポスト・プロセッサコードUSAMOを用い、廃棄物処分システムを構成する各サブシステムモデルは、レベル0の問題設定にしたがってコード化したものを用いた。比較問題の設問への回答の他に、不確かさ及び感度解析を行い、その結果も記載した。

Uncertainty and Sensitivity Analysis using Probabilistic
System Assessment Code (I)
- Application to PSACOIN Level 0 Intercomparison -

Toshimitsu HOMMA and Takashi SASAHARA*

Department of Environmental Safety Research
Tokai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received September 22, 1993)

This report presents the results obtained when applying the probabilistic system assessment code under development to the PSACOIN Level 0 intercomparison exercise organised by the Probabilistic System Assessment Code User Group in the Nuclear Energy Agency (NEA) of OECD. This exercise is one of a series designed to compare and verify probabilistic codes in the performance assessment of geological radioactive waste disposal facilities. The computations were performed using the Monte Carlo sampling code PREP and post-processor code USAMO. The submodels in the waste disposal system were described and coded with the specification of the exercise. Besides the results required for the exercise, further additional uncertainty and sensitivity analyses were performed and the details of these are also included.

Keywords: Uncertainty Analysis, Sensitivity Analysis, Probabilistic Safety Assessment, Computer Code, Monte Carlo Sampling, Geologic Disposal, Radioactive Waste, Performance Assessment, Regression Model

* Tohoku Electric Power Co. Inc.

目 次

1. はじめに	1
2. 問題設定	2
2.1 廃棄物固化体モデル	2
2.2 緩衝材モデル	3
2.3 地層モデル	3
2.4 生物圏モデル	4
3. 計算方法と解析結果	5
3.1 ベースケース	5
3.2 不確かさ解析	6
3.3 感度解析	7
4. まとめ	9
参考文献	10
付録A レベル0問題の仕様	20
付録B レベル0問題の質問表	33

Contents

1. Introduction	1
2. Description of Models	2
2.1 Waste Form Model	2
2.2 Buffer Model	3
2.3 Geosphere Model	3
2.4 Biosphere Model	4
3. Methods and Results	5
3.1 Base Case	5
3.2 Uncertainty Analysis	6
3.3 Sensitivity Analysis	7
4. Summary	9
References	10
Appendix A Problem Specification	20
Appendix B Results Questionnaire	33

1. はじめに

経済協力開発機構（OECD）の原子力機関（NEA）に、1985年「確率論的システム評価コード（Probabilistic System Assessment Code：PSAC）利用者グループ」が設立された。このグループの主たる目的は、OECD各国における放射性廃棄物処分システムの確率論的安全（性能）評価のための計算コードの開発を支援することにある。グループの活動は主にコード使用経験の情報交換、共同のコード開発、技術的課題についての検討、計算コードの比較である。このうち、計算コードの比較作業は特に重要な活動で、安全評価のために開発されたコードの機能を検証する一つの方法となる。現在では、このグループは単に確率論的システム評価グループ（PSAG）と呼ばれている。

廃棄物処分の安全評価においては、処分システムの挙動を記述するために様々な詳細さの数学モデルが用いられるが、そのようなモデルには一般にいろいろな不確かさが付随している。不確かさには、システムを特徴づけるパラメータに起因するもの、システム各部分のモデルに起因するもの、システムの将来の進展に関連するもの等がある。確率論的システム評価（PSA）とはシステム全体に適用する手法で、この不確かさを系統的に扱い、不確かさの影響がモデルの結果にどの様に伝播するかを見い出すための手法である。確率論的システム評価コード（PSAC）は、解析すべき処分システムを構成するいくつかのサブシステムを数学的に記述するモデルと、それらを制御し、各モデルで用いられるパラメータの値を選択して、多数組の入力データを作成する起動モジュール（一般に“executive” modules,あるいは“driver” routinesと呼ばれる）から構成される。PSAコードとしては、カナダのSYVAC（System Variability Analysis Code）コード（Wuschke et. al., 1981）が代表的である。SYVACでは影響解析モデルで用いるパラメータの値を、各々定義された確率分布関数（pdf:probability distribution function）からサンプリングを行い、システムが示す不確かさ、あるいはシステムの変動を結果の頻度分布として定量化し（不確かさ解析）、またその結果を感度解析に役立てている。

このグループで行われるコード検証作業は、安全評価に有用な情報を提供するPSAコードの信頼性を明らかにする上で、重要なステップとみることができる。

原研は1986年よりPSACグループに参加し、高レベル放射性廃棄物の深地層処分の安全評価に役立てるため、確率論的システム評価コードの開発を行っている。この報告書では、PSACグループにおける最初のコード比較問題レベル0（NEA PSAC User Group, 1987）を対象に、原研で開発中のPSAコードを適用した結果をまとめる。レベル0の主たる目的は、PSAコードの起動モジュールを比較し、コードの設計仕様を満たしているか確認することにあった。起動モジュールは、処分システムを構成するサブシステム（人工バリア、天然バリアおよび生物圏）内において、放射性核種の移行を解析する各モデルで用いられるモデルの入力パラメータの値を、各々の確率分布からサンプリングし、そのパラメータの値を各システムモデルに転送する基本的な機能を備えていなければならない。レベル0では、さらにPSAコードの出力結果の統計解析を行うポストプロセッサコード及びそこで用いられる感度解析の手法の比較も含まれている。

以下2章では、レベル0問題の詳細を説明し、3章で不確かさ及び感度解析の方法と解析結果を、最後にまとめを記す。

2. 問題設定

この章では、Goodwin と Saltelliによるレベル0問題のノート（付録A）（NEA PSAC User Group, 1987）に従って問題を概括する。

問題は Cs-137, I-129, Pd-107, Se-79, Sm-151, Sn-126, Zr-93の7核種によって、決定グループ内で最大に被曝する個人に対する年実効線量当量を計算することである。処分場から核種が漏洩しバフファ材および地層中を移行して、汚染された井戸あるいは河川から人間が飲料水を摂取することによって被曝がもたらされるとする。核種の各媒体中における移行を推定するためのパラメータの内いくつかは不確かであるとし、その各々に確率分布が与えられている。全部で22のこの様な変動パラメータがあり、その確率分布の形状および分布形状を規定するパラメータの値は付録Aに与えられている。このうち8つは核種に依存しないパラメータで2つのパラメータは核種依存である。

レベル0問題によるコード比較作業参加者には回答に対する質問表（付録B）が配付され、

- 1) 指定された各時間における実効線量当量の確率分布（ヒストグラム）
- 2) 指定された各時間に至るまでの最大実効線量当量の確率分布（ヒストグラム）
- 3) 以上の2種類の確率分布の平均値と標準偏差
- 4) 各時間において平均線量に対して重要である核種とパラメータの順位付け（感度解析）が求められた。

以下にはレベル0問題で与えられた廃棄物固化体、緩衝材、地層、生物圏の各媒体中における核種移行のモデルを記す。

2.1 廃棄物固化体モデル

廃棄物固化体はある期間一定の率で溶解すると仮定する。浸出率 $R_{wr}(t)$ [kg/m²a]は、

$$\begin{aligned} R_{wr}(t) &= R^0 & t < \tau^D \\ &= 0 & t \geq \tau^D \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで、

$$\tau^D = \frac{Q}{(R^0 \cdot S)} \quad (2.2)$$

R^0 : 初期の浸出率 [kg/m²a]

Q : 固化体の質量 [kg]

S : 固化体の全表面積 [m²]

以下2章では、レベル0問題の詳細を説明し、3章で不確かさ及び感度解析の方法と解析結果を、最後にまとめを記す。

2. 問題設定

この章では、Goodwin と Saltelliによるレベル0問題のノート（付録A）（NEA PSAC User Group, 1987）に従って問題を概括する。

問題は Cs-137, I-129, Pd-107, Se-79, Sm-151, Sn-126, Zr-93の7核種によって、決定グループ内で最大に被曝する個人に対する年実効線量当量を計算することである。処分場から核種が漏洩しバフファ材および地層中を移行して、汚染された井戸あるいは河川から人間が飲料水を摂取することによって被曝がもたらされるとする。核種の各媒体中における移行を推定するためのパラメータの内いくつかは不確かであるとし、その各々に確率分布が与えられている。全部で22のこの様な変動パラメータがあり、その確率分布の形状および分布形状を規定するパラメータの値は付録Aに与えられている。このうち8つは核種に依存しないパラメータで2つのパラメータは核種依存である。

レベル0問題によるコード比較作業参加者には回答に対する質問表（付録B）が配付され、

- 1) 指定された各時間における実効線量当量の確率分布（ヒストグラム）
- 2) 指定された各時間に至るまでの最大実効線量当量の確率分布（ヒストグラム）
- 3) 以上の2種類の確率分布の平均値と標準偏差
- 4) 各時間において平均線量に対して重要である核種とパラメータの順位付け（感度解析）が求められた。

以下にはレベル0問題で与えられた廃棄物固化体、緩衝材、地層、生物圏の各媒体中における核種移行のモデルを記す。

2.1 廃棄物固化体モデル

廃棄物固化体はある期間一定の率で溶解すると仮定する。浸出率 $R_{wr}(t)$ [kg/m²a]は、

$$\begin{aligned} R_{wr}(t) &= R^0 & t < \tau^D \\ &= 0 & t \geq \tau^D \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで、

$$\tau^D = \frac{Q}{(R^0 \cdot S)} \quad (2.2)$$

R^0 : 初期の浸出率 [kg/m²a]

Q : 固化体の質量 [kg]

S : 固化体の全表面積 [m²]

である。

廃棄物固化体からの核種 i のフラックスは次式で与えられる。

$$F_{wi}(t) = R_{wi}(t) \cdot I^0_i \cdot \exp(-\lambda_i \cdot t) \cdot S \quad [\text{mol/a}] \quad (2.3)$$

ここで、

I^0_i : 核種 i の初期量 [mol/kg]

λ_i : 核種 i の崩壊常数 [1/a]

である。

このモデルでは R^0 が不確かなパラメータで対数一様分布を持つとする。

2.2 緩衝材モデル

緩衝材の厚み X_B が核種の移行の遅延の役割を果たし、遅延の時間 τ^{B_i} は核種に依存し次式で与えられる。

$$\tau^{B_i} = \frac{X_B^2 \cdot R^{B_i}}{4 D_B} \quad [a] \quad (2.4)$$

ここで、

$$R^{B_i} = 1 + \frac{\rho_B}{\varepsilon_B} \cdot K_{D^{B_i}} \cdot (1 - \varepsilon_B) \quad [-] \quad (2.5)$$

ρ_B : 緩衝材密度 [kg/m³]

ε_B : 緩衝材の空隙率 [-]

$K_{D^{B_i}}$: 核種 i に対する緩衝材の吸着係数 [m³/kg]

D_B : 緩衝材の拡散係数 [m²/a]

である。

このモデルでは X_B および $K_{D^{B_i}}$ が不確かなパラメータでそれぞれ一様、対数一様分布を持つとする。

2.3 地層モデル

地層中の移行経路の長さ X_G が核種の移行を遅らせ、時間的に広がらせる役割を果たす。時間 τ^{L_i} と τ^{H_i} の間に核種は広がり、この時間は次式の根で与えられる。

$$X_G = 2 \left(\frac{D_G \cdot \tau^{G_i}}{R^{G_i}} \right)^{1/2} + \frac{V_G \cdot \tau^{G_i}}{R^{G_i}} \quad [m] \quad (2.6)$$

ここで、

$$R^{G_i} = 1 + \frac{\rho_G}{\varepsilon_G} \cdot K_{D^{G_i}} \cdot (1 - \varepsilon_G) \quad [-] \quad (2.7)$$

- ρ_g : 地層の密度 [kg/m³]
 ε_g : 地層の空隙率 [-]
 K_{D_i} : 核種 i に対する地層の吸着係数 [m³/kg]
 $D_g = D^0_g + \alpha_g \cdot V_g$ [m²/a]
 D^0_g : 地層の拡散係数 [m²/a]
 V_g : 地下水速度 [m/a]
 α_g : 分散長 [m]

である。

したがって、地層からの核種 i のフラックス $F^g_i(t)$ [mol/a] は次式で与えられる。

$$F^g_i(t) = 0 \quad \begin{array}{l} t < \tau^B_i + \tau^L_i \\ \text{あるいは} \\ t > \tau^B_i + \tau^H_i + \tau^D \end{array} \quad (2.8)$$

$$= \frac{\tau^D}{\tau^H_i + \tau^D - \tau^L_i} \cdot F^B_i(t') \cdot \exp[-\lambda_i \cdot (t - t')] \quad \text{それ以外} \quad (2.9)$$

ここで、

$$t' = \frac{t - \tau^L_i - \tau^B_i}{\tau^H_i + \tau^D - \tau^L_i} \cdot \tau^D + \tau^B_i \quad (2.10)$$

このモデルでは X_g , K_{D_i} , D^0_g , V_g , α_g がすべて不確かなパラメータで X_g は一様分布, K_{D_i} は対数正規分布, D^0_g は正規分布, V_g と α_g は対数一様分布を持つとする。

2.4 生物圏モデル

生物圏モデルでは、核種が地層から井戸のような地表水に浸透して、人間が飲料水を摂取することにより被曝するとする。年実効線量当量は、

$$H_i(t) = \frac{F^g_i \cdot A_i}{W} \cdot W_m \cdot D_i \quad [\text{Sv}] \quad (2.11)$$

で与えられる。

ここで、

- A_i : 核種 i のモル当りの放射能 [Bq/mol]
 W : 取水量 [m³/a]
 W_m : 飲料水摂取量 [m³]
 D_i : 核種 i の線量換算係数 [Sv/Bq]

である。

このモデルでは W_m と W が不確かなパラメータで一様分布を持つとする。

3. 計算方法と解析結果

前章で与えられた処分システムモデルのコード化の機能を確認するため、最初にすべての入力パラメータを固定した決定論的(deterministic)な計算を行った。付録Aで与えられた22の変動パラメータについては各々の分布の中央値に値を固定し、計算された線量を時間の関数として示したものが Figure 1である。この図に見られるように、与えられたモデルでは、時間に関してそれぞれの核種に対応したいくつかの線量ピークが出現する。このケースでは、吸着しにくい I-129のピークが、まず 4.84×10^5 年から 6.31×10^5 年に現れ、その後、Se-79, Pd-107, Sn-126のピークが続く。Cs-135とZr-93は、 10^7 年以降にピークが現れるため、この図には示されていない。また、Sm-151は生物圏に到達する時間に比べ、半減期(93年)が十分短いため線量に寄与していない。

確率論的(Stochastic)な計算では、22の変動パラメータについて各々の確率分布からLHS(Latin Hypercube Sampling)法(Mckay, Beckman and Conover, 1979)によって入力パラメータ値を1000ケースサンプリングし、その各々の入力パラメータ値の組に対してモデルシミュレーションを行い、設問への回答とした。また、以下の不確かさ/感度解析のために、ランダムサンプリング法によって2500ケースの入力パラメータ値を選択し、そのモデルシミュレーションも併せて行った。計算には、入力パラメータ値のサンプリングのためのプリ・プロセッサコードとしてPREP(Homma and Saltelli, 1992)を、不確かさ/感度解析のためのポスト・プロセッサコードとして、現在開発中のUSAMOを用いた。処分システムを構成する各サブシステムモデルは、この解析のために問題設定にしたがってコード化した。

3.1 ベースケース

Table 1には、LHS法によって選択された1000ケースの入力パラメータ値の組み合わせから生じた年線量に対する基本的な統計量(平均値, 標準偏差, 線量がゼロでないシミュレーションの割合)を示してある。ここで線量は各々の核種からの線量の総和(全線量)を対象としている。Figure 1で見たように、個々のシミュレーション結果では、各々の核種による線量ピークが時間に対して離散的に出現するため、指定された時間における全線量がゼロでない割合は非常に小さく、また標準偏差も大きい。Figure 2.aからFigure 2.fは、指定された各時間における全線量のヒストグラムである。ここで、Figure 2.a及びFigure 2.bに見られる早い時間のピークは、主にI-129に対応する。Figure 2.dの 10^6 年においては、はっきりした3つのピークが見られる。小さい方の線量ピークはSe-79によるもので、中間の線量ピークはPd-107とSn-126に、最も大きな線量ピークはI-129に対応する。Table 1に見られるように、線量がゼロでないシミュレーションの割合は 10^6 年が最も大きい、それでも僅かに23%に過ぎない。Figure 2.fの 10^7 年では、I-129のピークが僅かに残るものの、大半はZr-93とCs-135の寄与によるものである。

Table 2には、指定された時間の線量ではなく、その時間までに出現した各シミュレーション

の最大線量を対象とした同様の統計量が示されている。1000シミュレーションのうちの96.7%で、 10^7 年までにその最大線量が出現している。残りの33のシミュレーションではこれ以降に最大線量が出現することになる。このことからわかるように、実際には1000シミュレーションのほとんどが 10^7 年までに一定の線量を与えているが、Figure 1のようにその出現が時間に関して離散的なため、Table 1に示したように評価時間を固定すると線量がゼロであるケースが圧倒的に大きくなる。Figure 3は、最大線量とその出現時間を核種別にプロットした散布図である。いかなる時間においても、I-129の線量が支配的であることがわかる。

3.2 不確かさ解析

モデルの入力パラメータが確率分布をもつランダム変数であると考え、前節で示されたように、その変動が伝播し、モデル出力もある確率分布をもつランダム変数となる。この節の不確かさ解析では、モデル入力の不確かさに起因するモデル出力の不確かさを解析する。次節で述べる感度解析はこの節の不確かさ解析に密接に関係しており、ここではモデル出力の不確かさに影響を及ぼす個々の入力パラメータの重要度の解析を行う。

不確かさ解析の課題は、モデル出力の確率分布を特徴づけることである。ここで行ったようなモンテ・カルロ計算では、モデル出力を直接計算するので累積分布関数 (complementary distribution function) が直接得られる。また、分布を特徴づける統計量として、平均値 (期待値) あるいは分散も得られる。しかし不確かさ解析で重要なことは、推定された平均値の信頼区間を決めることである。前節で見たように、廃棄物処分の評価に現れる線量分布あるいはリスク分布は、しばしば極端な歪み (skewness) を持つ場合がある。したがって、大きな標本の平均値は正規分布をする、というような通常の仮定ができない可能性がある。

もし、モデル出力が正規分布をしているなら、母集団平均の信頼区間を計算するために、tテストのようなパラメトリック (parametric) 手法を用いることができる。しかしながら、母集団の分布関数がわからない場合には、いわゆるチェビシェフの定理 (Tchebycheff's Theorem) が利用できる。分布形がわからないある確率変数 x が与えられたとき、チェビシェフの定理によると、ある指定された数 α に対して

$$P(|x - \mu| \leq \alpha \sigma) > 1 - \frac{1}{\alpha^2} \quad (3.1)$$

が満足される (Hold 1952)。ここで、 μ 及び σ はそれぞれ母集団の平均値と標準偏差である。確率変数 x として標本平均 \bar{x} をとると、標本平均の標準偏差 $\sigma_{\bar{x}}$ は $\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{\sigma^2}{N}$ なので、次の不等式が得られる。

$$P(|\bar{x} - \mu| \leq \alpha \frac{\sigma}{\sqrt{N}}) > 1 - \frac{1}{\alpha^2} \quad (3.2)$$

この式から、 μ に対する95%の信頼区間は $P=0.95$ として、

$$\bar{x} \pm 4.472 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad (3.3)$$

として得られる。もちろん、母集団の標準偏差は前もってわかっていないので、 σ の代わりに標本集団の標準偏差 s を用いると μ に対する95%の信頼区間は、

$$\bar{x} \pm 4.472 \frac{s}{\sqrt{N}} \quad (3.4)$$

となる。ここで解析しているモデルのように、標本数が少ない場合、平均値に寄与する大きな線量値を数え落としているかもしれないので、平均値だけでなく標準偏差も過小評価している危険がある。したがって、この関係式は注意して用いる必要がある。

ランダムサンプリングにより選択された2500ケースの入力パラメータセットの各々についてモデルシミュレーションを行い、全線量についての平均値と(3.4)式による95%信頼区間を示したものがFigure 4である。比較的大きなサンプル数にも係わらず、曲線は滑らかになっておらず、統計的な収束には至っていないと考えられる。付録Aに与えられているように、パラメータの変動範囲が大きいことが一つの原因と考えられる。

全線量の平均値の統計的収束性を見るため、ランダムサンプリングによる2500ケースを以下の様々なサンプル数をもつサブサンプルに分割して、 $t=100,000$ 年における各々のサブサンプルの平均値を算出しFigure 5にプロットした；

- サンプル数 50からなる50のサブサンプル
- サンプル数 100からなる25のサブサンプル
- サンプル数 125からなる20のサブサンプル
- サンプル数 250からなる10のサブサンプル
- サンプル数 500からなる 5のサブサンプル
- サンプル数1250からなる 2のサブサンプル

Figure 5には、各サンプル数における全サンプルの平均値及び各サブサンプルの標準偏差の平均値を(3.4)式に用いて、各サンプル数における平均値の95%信頼区間を合わせて示してある。個々のサブサンプルの平均値は95%信頼区間内に入るが、解の収束には相当数(数千ケース)のサンプル数が必要なことがこの図から明らかである。

3.3 感度解析

感度解析の目的は一言でいえば、考察しているモデル出力に対する入力パラメータの影響の度合いを明らかにすることである。その影響の程度に基づいて、入力パラメータの重要度のランク付けを行うために、様々な統計手法が考えられる。しかし、そのランク付けは一通りではない。

この解析に用いた計算コードUSAMOでは、不確かさ解析に用いた k 個の入力パラメータ ($x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,k}$) とそれに対応したモデル出力 (y_i) の ($i=1, 2, \dots, N$) のサンプルから得られるいくつかの推定量(統計手法)を備えている。大別すると、それらは、

- (1) 1つの2変量サンプルに基づく推定量
- (2) 1つの多変量サンプルに基づく推定量
- (3) 2つの単変量サンプルに基づく推定量
- (4) その他

に分けられる。(1)は個々の変動パラメータとモデル出力($x_{i,1}, y_i$)間の相関係数 (Pearson Correlation Coefficient)及びそれらの順位数による相関係数 (Spearman Rank Correlation Coefficient)に代表される。(2)は全変動パラメータとモデル出力のサンプル ($x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,k}, y_i$)を用いる偏相関係数 (PCC: Partial Correlation Coefficient)あるいは標準回帰係数 (SRC: Standardized Regression Coefficient)及び同様に順位数を用いたPRCC (Partial Rank Correlation Coefficient), SRRC (Standardized Rank Regression Coefficient)に代表される。また、tテスト統計や、スミルノフテスト統計 (Conover, 1980)に代表される2サンプルテストは(3)に属す。これらの推定量の中で、ここでは従来からよく用いられ、統計的に堅固 (robust) とされるSRC及びSRRCによる感度解析を行い、この例題の特徴を明らかにした。

SRC (Y, X_j)はモデル出力Yに対する回帰モデルの入力変数 X_j の項の係数である。これを用いてYは以下のように近似できる。

$$Y^* = \sum_{j=1}^k \text{SRC}(Y, X_j) X_j^*$$

ここで、 X_j^* は以下のように規格化された変数であり、

$$X_j^* = \frac{(X_j - \bar{X}_j)}{S(X_j)}$$

\bar{X}_j 及び $S(X_j)$ は各々、標本平均及び標準偏差である。SRCを用いる場合、いわゆるモデル決定係数 R_y^2 を考慮することが大切である。 R_y^2 はSRCに基づく線形回帰モデルが、実際のモデル出力であるYをどの程度よく近似しているかを計る尺度となる。 R_y^2 は

$$R_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}$$

と表される。ここで、 \bar{y} は出力値 y_i の平均値、 \hat{y}_i は回帰モデルによる予測値である。したがって、 R_y^2 は回帰モデルで説明できる出力値の分散の割合を示している。 R_y^2 が1に近いほど回帰モデルの予測がよいことになる。

この回帰モデルの係数SRC (Y, X_j)は、入力変数の相対的な重要度を計るよい尺度となり得る。もちろん、感度解析の指標としてSRCを用いるには、回帰モデルが出力値を十分予測していなければならない。Y及び X_j の実際の値を用いて計算したモデル決定係数 R_y^2 の値が小さいとき、したがってモデルの非線形性が強い場合には、各々の順位数を用いる方法がある。順位

数に基づく R^2 の値が1に近ければ、モデルは非線形であるが単調な関数であり、SRRCが感度解析の指標として有効となる。

Figure 6には、この例題に対して次の3つの量が時間の関数として示されている。

- (1) SRCに基づくモデル決定係数,
- (2) SRRCに基づくモデル決定係数,
- (3) 全線量がゼロでない割合。

これらは不確かさ解析に用いた2500ケースのシミュレーションの結果から計算した。ベースケースの計算(1000シミュレーション)でも見たように、全線量がゼロでない割合は極めて低く、最大でも30%以下である。この特徴は、サンプル数がこのように増えても変わらない。また、入力パラメータとモデル出力の実際の値に基づく標準回帰モデルのモデル決定係数は極めて低く、順位数(ランク)を用いた標準ランク回帰モデルのモデル決定係数も最大で0.3程度である。これは全線量が入力パラメータの線形あるいは単調関数では十分に記述できないことを示している。また、多くの入力パラメータの値の組に対して全線量が0という同じ値を与える(censored data)ことも問題を複雑にしている理由である。

Figure 7には、参考として上記のSRC及びSRRCを主要な4つの入力パラメータについて、時間の関数として示した。もちろん、Figure 6にあるようにSRC及びSRRCのモデル決定係数共、非常に小さく回帰性が悪い。したがって、ここに示された係数で入力パラメータの重要度を決定することはできない。ここで解析したモデルにおいては、モデルの線形性あるいは単調性に左右されないような、非線形の感度解析手法の適用が必要である。

4. ま と め

開発中の確率論的システム評価コードをOECD/NEAのPSAC利用者グループの比較問題レベル0に適用し、不確かさ・感度解析を行った。計算には、入力パラメータ値のサンプリングのためのプリ・プロセッサコードPREPと不確かさ/感度解析のためのポスト・プロセッサコードUSAMOを用い、廃棄物処分システムを構成する各サブシステムモデルは、レベル0の問題設定にしたがってコード化したものを用いた。決定論的な解析及び確率論的な解析により上記のPREP及びUSAMOが正常に機能していることを確認した。

レベル0の問題設定は処分システムをかなり簡略化したモデルであるが、処分場から生物圏への放射性核種の移行の基本的特徴は記述されている。不確かさ解析の結果によると、入力パラメータの変動範囲が大きく、出現する線量の範囲も大きい。また、ごく少数のサンプルからもたらされる線量が全線量の平均値に寄与するため、全線量の平均値が収束するには相当数(数千ケース)のサンプル数が必要なことが明らかになった。

回帰モデルを用いた感度解析によると、標準回帰モデルのモデル決定係数は極めて低く、順位数(ランク)を用いた標準ランク回帰モデルのモデル決定係数も最大で0.3程度である。したがって、モデル出力が入力パラメータの線形関数あるいは単調関数では十分に記述できない。ま

数に基づく R^2 の値が1に近ければ、モデルは非線形であるが単調な関数であり、SRRCが感度解析の指標として有効となる。

Figure 6には、この例題に対して次の3つの量が時間の関数として示されている。

- (1) SRCに基づくモデル決定係数,
- (2) SRRCに基づくモデル決定係数,
- (3) 全線量がゼロでない割合。

これらは不確かさ解析に用いた2500ケースのシミュレーションの結果から計算した。ベースケースの計算(1000シミュレーション)でも見たように、全線量がゼロでない割合は極めて低く、最大でも30%以下である。この特徴は、サンプル数がこのように増えても変わらない。また、入力パラメータとモデル出力の実際の値に基づく標準回帰モデルのモデル決定係数は極めて低く、順位数(ランク)を用いた標準ランク回帰モデルのモデル決定係数も最大で0.3程度である。これは全線量が入力パラメータの線形あるいは単調関数では十分に記述できないことを示している。また、多くの入力パラメータの値の組に対して全線量が0という同じ値を与える(censored data)ことも問題を複雑にしている理由である。

Figure 7には、参考として上記のSRC及びSRRCを主要な4つの入力パラメータについて、時間の関数として示した。もちろん、Figure 6にあるようにSRC及びSRRCのモデル決定係数共、非常に小さく回帰性が悪い。したがって、ここに示された係数で入力パラメータの重要度を決定することはできない。ここで解析したモデルにおいては、モデルの線形性あるいは単調性に左右されないような、非線形の感度解析手法の適用が必要である。

4. ま と め

開発中の確率論的システム評価コードをOECD/NEAのPSAC利用者グループの比較問題レベル0に適用し、不確かさ・感度解析を行った。計算には、入力パラメータ値のサンプリングのためのプリ・プロセッサコードPREPと不確かさ/感度解析のためのポスト・プロセッサコードUSAMOを用い、廃棄物処分システムを構成する各サブシステムモデルは、レベル0の問題設定にしたがってコード化したものを用いた。決定論的な解析及び確率論的な解析により上記のPREP及びUSAMOが正常に機能していることを確認した。

レベル0の問題設定は処分システムをかなり簡略化したモデルであるが、処分場から生物圏への放射性核種の移行の基本的特徴は記述されている。不確かさ解析の結果によると、入力パラメータの変動範囲が大きく、出現する線量の範囲も大きい。また、ごく少数のサンプルからもたらされる線量が全線量の平均値に寄与するため、全線量の平均値が収束するには相当数(数千ケース)のサンプル数が必要なことが明らかになった。

回帰モデルを用いた感度解析によると、標準回帰モデルのモデル決定係数は極めて低く、順位数(ランク)を用いた標準ランク回帰モデルのモデル決定係数も最大で0.3程度である。したがって、モデル出力が入力パラメータの線形関数あるいは単調関数では十分に記述できない。ま

た, censored data のため, 通常の回帰モデルによる感度解析には限界があることが明らかになった。

参 考 文 献

- Conover, W.J. (1980), "Practical Nonparametric Statistics", 2 ed. John Wiley & Sons, New York.
- Hold, A. (1952), "Statistical Theory with Engineering Applications", John Wiley & Sons, New York.
- Homma, T. and A. Saltell (1992), "LISA package user guide. Part I PREP (Statistical PRE Processor). Preparation of input sample for Monte Carlo simulations; Program description and user guide", CEC Physical Sciences Report EUR 13922 EN.
- Mckay, M.D., R.J. Beckman and W.J. Conover (1979), "A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code", Technometrics, 21(2), 239-245.
- NEA PSAC User Group (1987), "PSACOIN Level 0 Intercomparison. An international code intercomparison exercise on a hypothetical safety assessment case study for radioactive waste disposal systems", Nuclear Energy Agency, OECD, Paris.
- Wuschke, D.M., K.K. Metha, K.W. Dormuth, T. Andres, G.R. Sherman, E.L.J. Rosinger, B.W. Goodwin, J.A.K. Reid and R.B. Lyon (1981), "Environmental and safety assessment studies for nuclear fuel waste management. Volume 3: Post closure assessment", AECL Report TR-127-3.

た, censored data のため, 通常の回帰モデルによる感度解析には限界があることが明らかになった。

参 考 文 献

- Conover, W. J. (1980), "Practical Nonparametric Statistics", 2 ed. John Wiley & Sons, New York.
- Hold, A. (1952), "Statistical Theory with Engineering Applications", John Wiley & Sons, New York.
- Homma, T. and A. Saltell (1992), "LISA package user guide. Part I PREP (Statistical PRE Processor). Preparation of input sample for Monte Carlo simulations; Program description and user guide", CEC Physical Sciences Report EUR 13922 EN.
- Mckay, M. D., R. J. Beckman and W. J. Conover (1979), "A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code", Technometrics, 21(2), 239-245.
- NEA PSAC User Group (1987), "PSACOIN Level 0 Intercomparison. An international code intercomparison exercise on a hypothetical safety assessment case study for radioactive waste disposal systems", Nuclear Energy Agency, OECD, Paris.
- Wuschke, D. M., K. K. Metha, K. W. Dormuth, T. Andres, G. R. Sherman, E. L. J. Rosinger, B. W. Goodwin, J. A. K. Reid and R. B. Lyon (1981), "Environmental and safety assessment studies for nuclear fuel waste management. Volume 3: Post closure assessment", AECL Report TR-127-3.

Table 1 Statistical results of total dose at specified time from 1000 simulations based on LHS sampling scheme

Time (years)	Mean dose (Sv)	Standard deviation	Fraction of non-zero (%)
$10^{4.5}$	3.47×10^{-6}	3.26×10^{-5}	2.0
10^5	4.86×10^{-6}	2.54×10^{-5}	10.8
$10^{5.5}$	2.15×10^{-6}	1.35×10^{-5}	18.1
10^6	5.68×10^{-7}	2.52×10^{-6}	23.0
$10^{6.5}$	1.57×10^{-7}	6.68×10^{-7}	15.8
10^7	7.04×10^{-9}	6.80×10^{-8}	13.7

Table 2 Statistical results of total maximum dose up to specified time from 1000 simulations based on LHS sampling scheme

Time (years)	Mean dose (Sv)	Standard deviation	Fraction of non-zero (%)
$10^{4.5}$	5.31×10^{-6}	4.50×10^{-5}	2.2
10^5	2.11×10^{-5}	8.11×10^{-5}	14.9
$10^{5.5}$	3.48×10^{-5}	9.03×10^{-5}	38.7
10^6	3.85×10^{-5}	8.95×10^{-5}	62.5
$10^{6.5}$	3.97×10^{-5}	8.91×10^{-5}	86.2
10^7	3.98×10^{-5}	8.91×10^{-5}	96.7

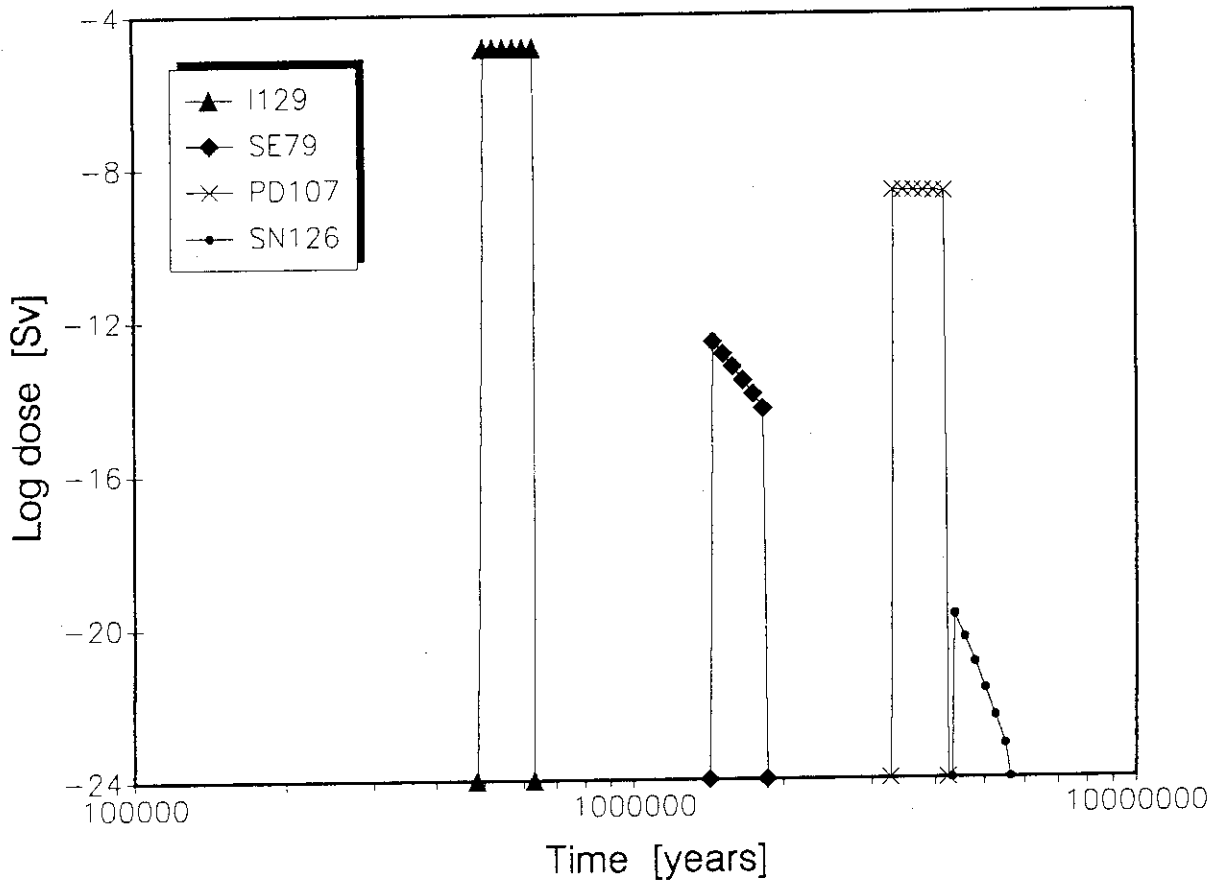


Fig. 1 Annual dose as a function of time for all parameters fixed at their median values

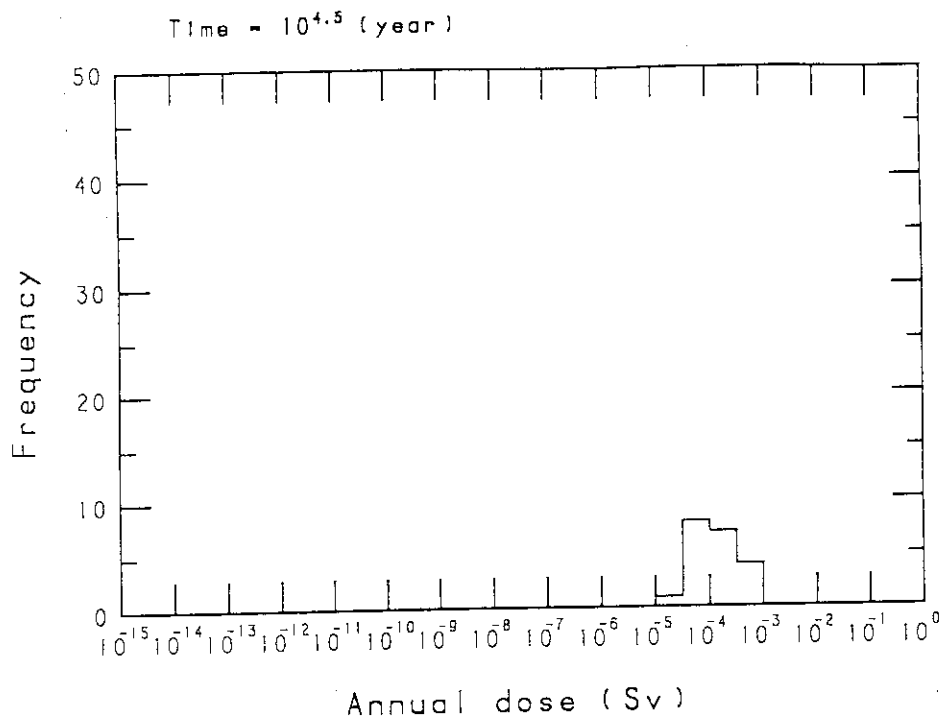


Fig. 2.a Histogram of the probability versus annual effective dose equivalent at a specified time

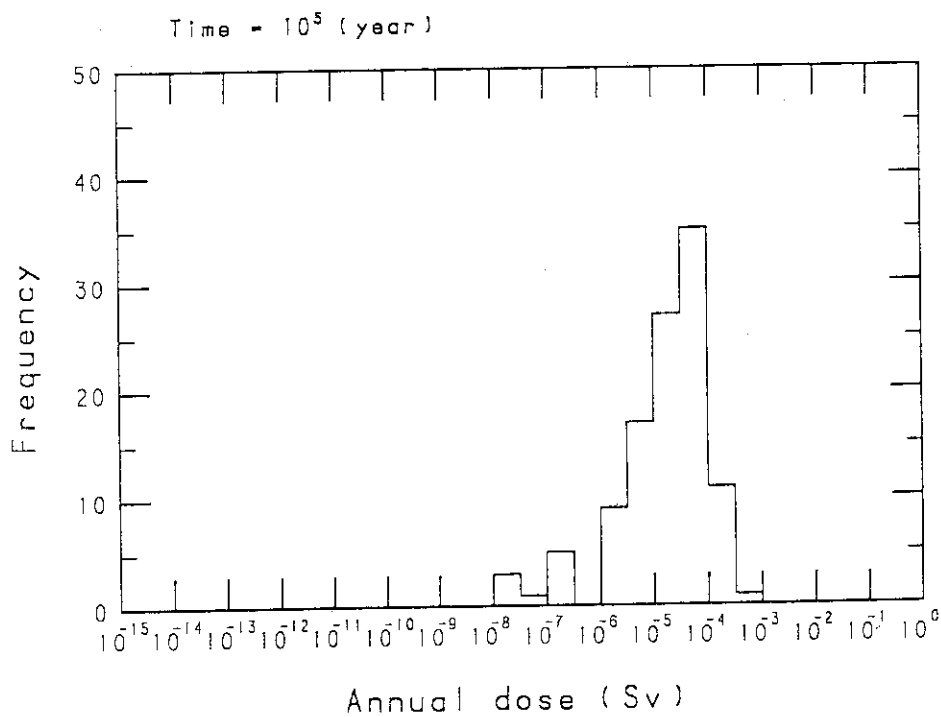


Fig. 2.b Histogram of the probability versus annual effective dose equivalent at a specified time

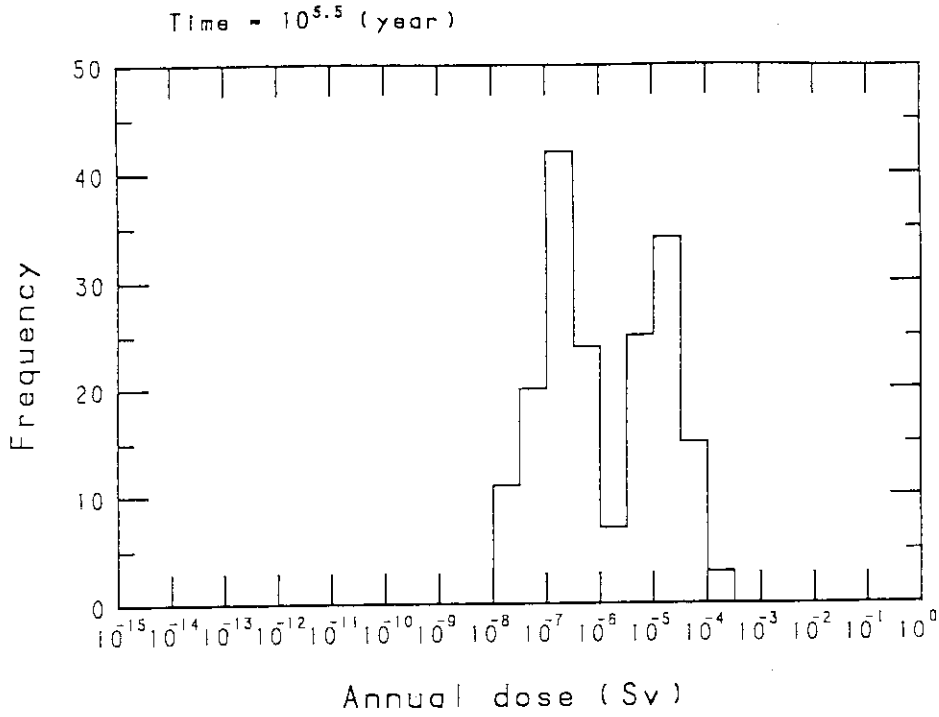


Fig. 2.c Histogram of the probability versus annual effective dose equivalent at a specified time

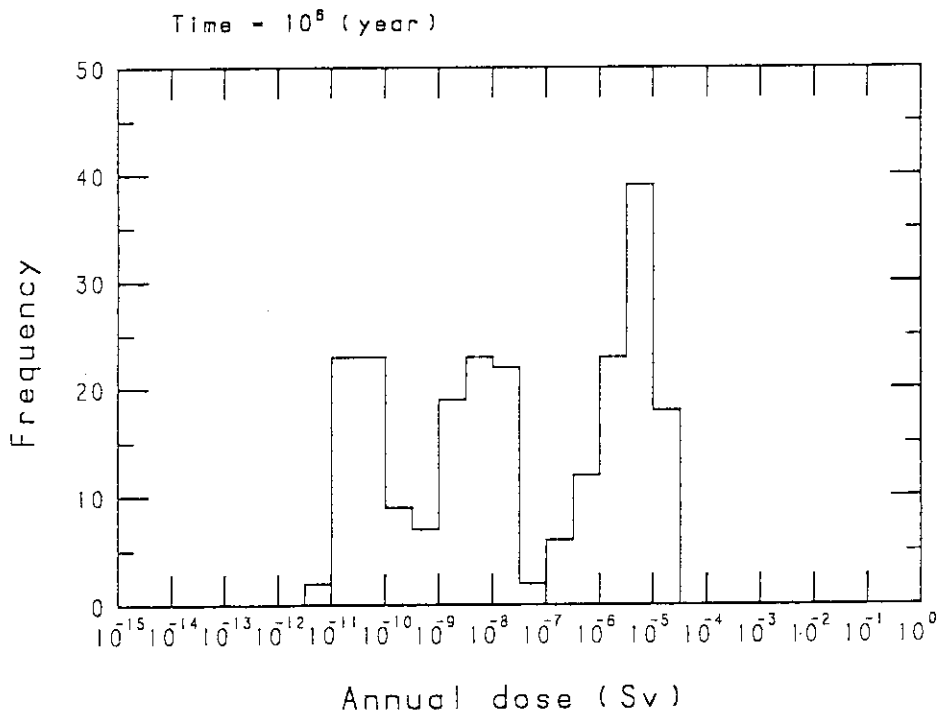


Fig. 2d Histogram of the probability versus annual effective dose equivalent at a specified time

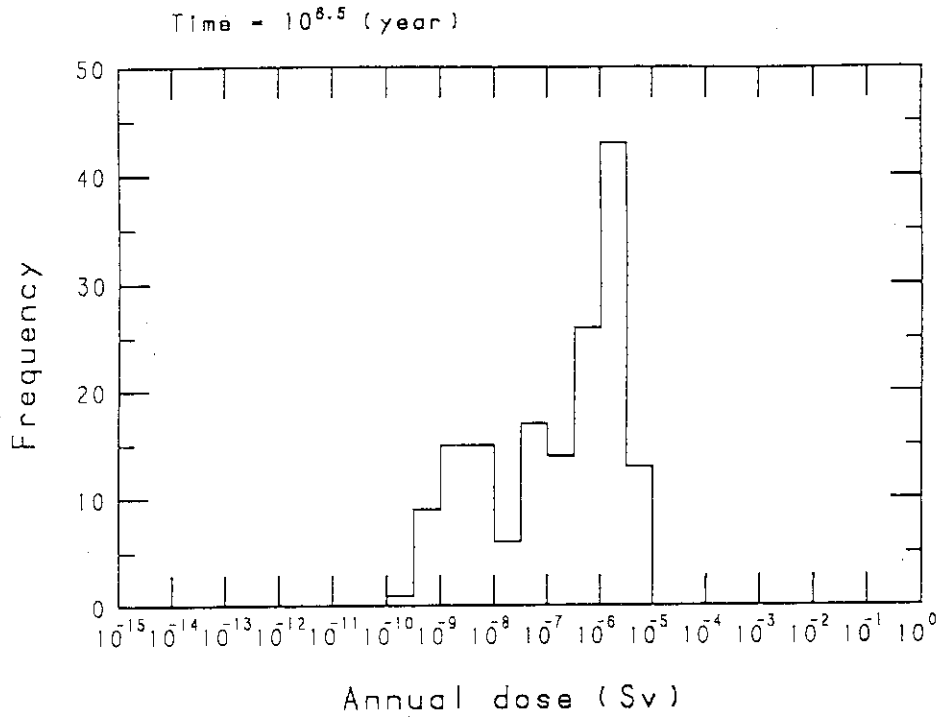


Fig. 2e Histogram of the probability versus annual effective dose equivalent at a specified time

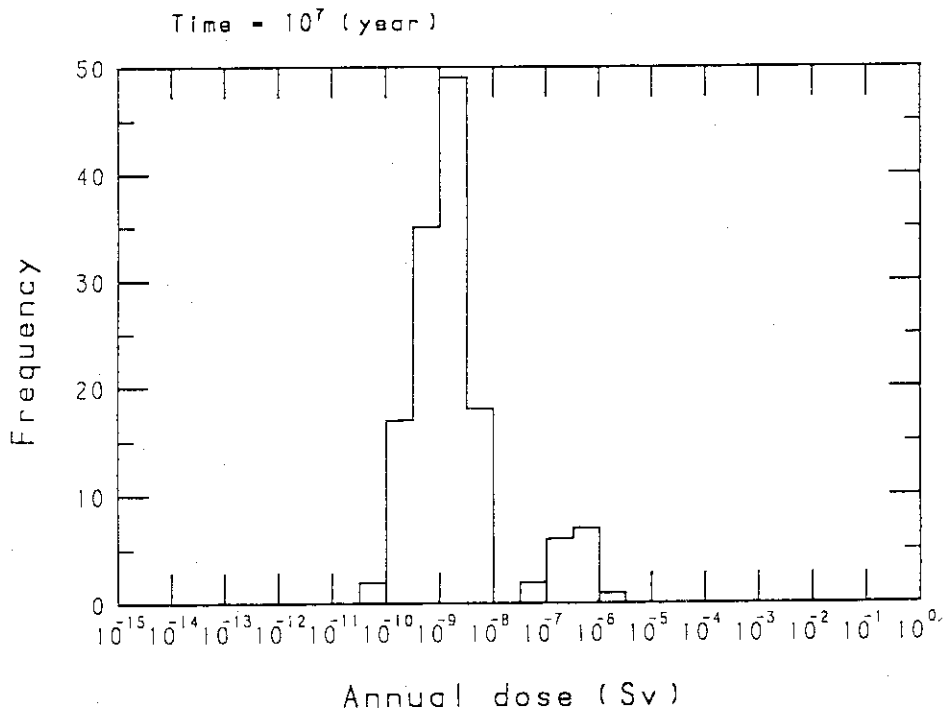


Fig. 2f Histogram of the probability versus annual effective dose equivalent at a specified time

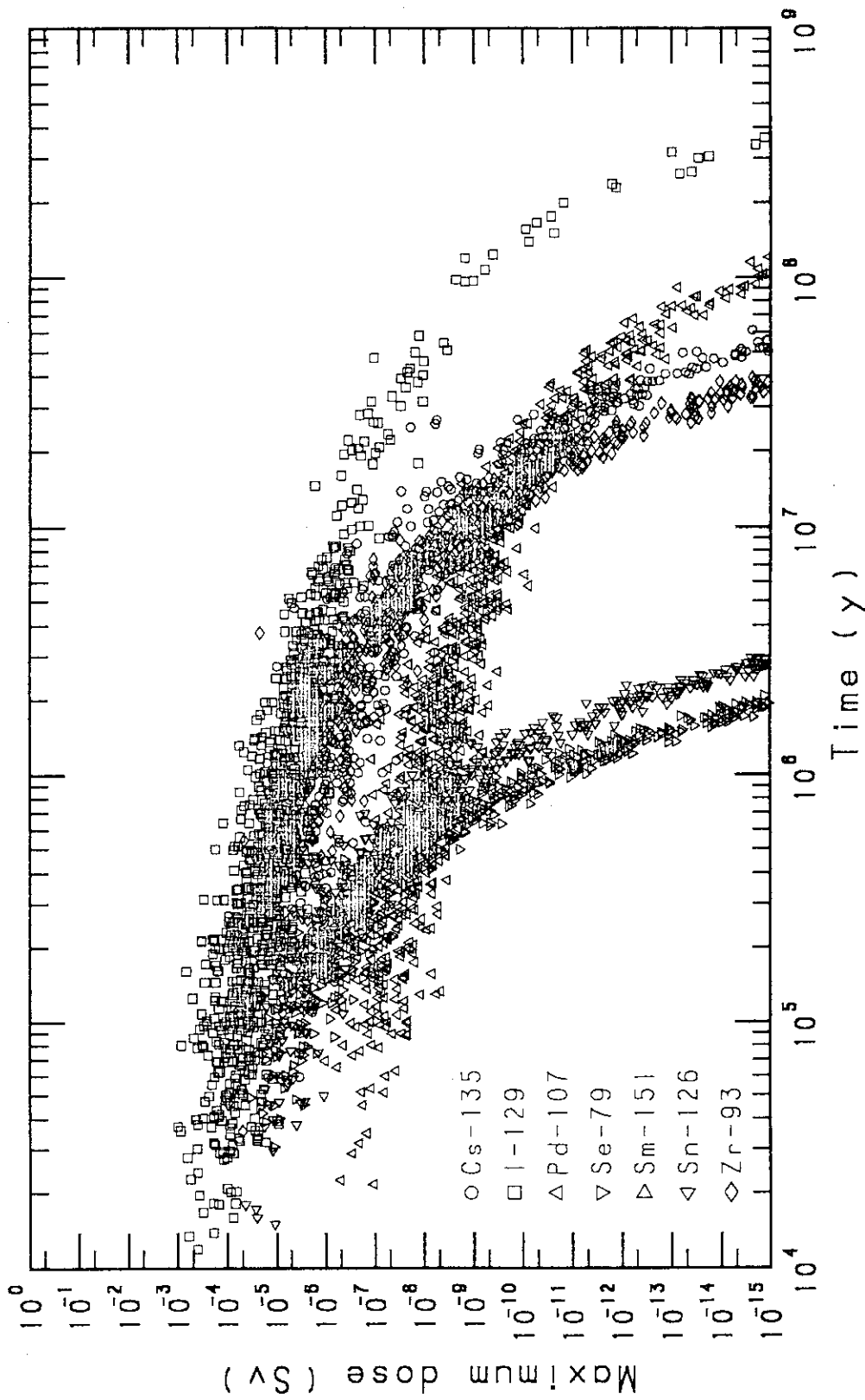


Fig. 3 Scatterplot of the maximum annual effective dose versus the time at which the maximum dose occurred

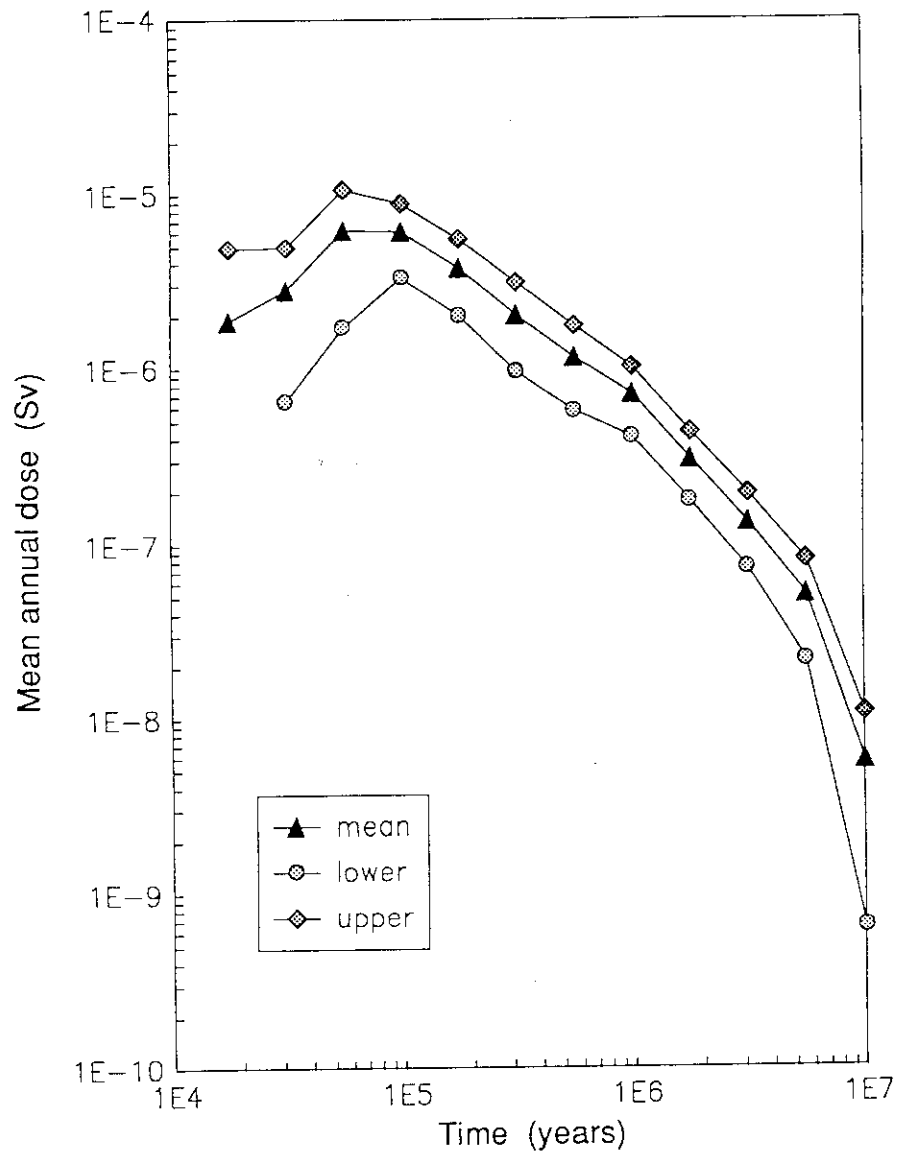


Fig. 4 Mean and 95% confidence bounds for total dose from seven nuclides

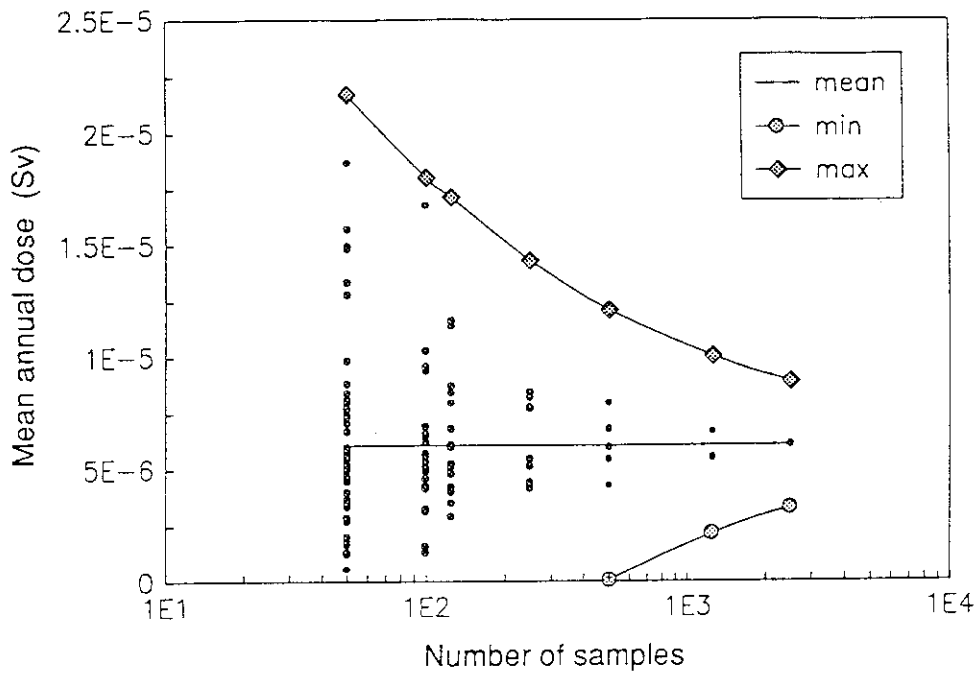


Fig. 5 Chebyshev confidence intervals for the mean total dose at 1×10^5 (a) as a function of sample size

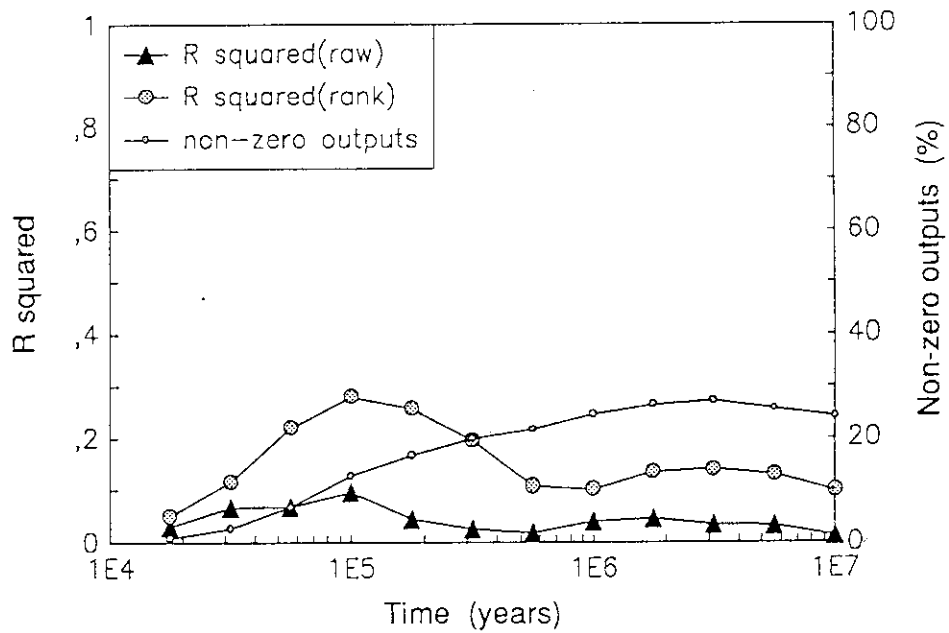


Fig. 6 Model coefficients of determination R^2 for regression models based on raw values and ranks, and rate of non-zero outputs

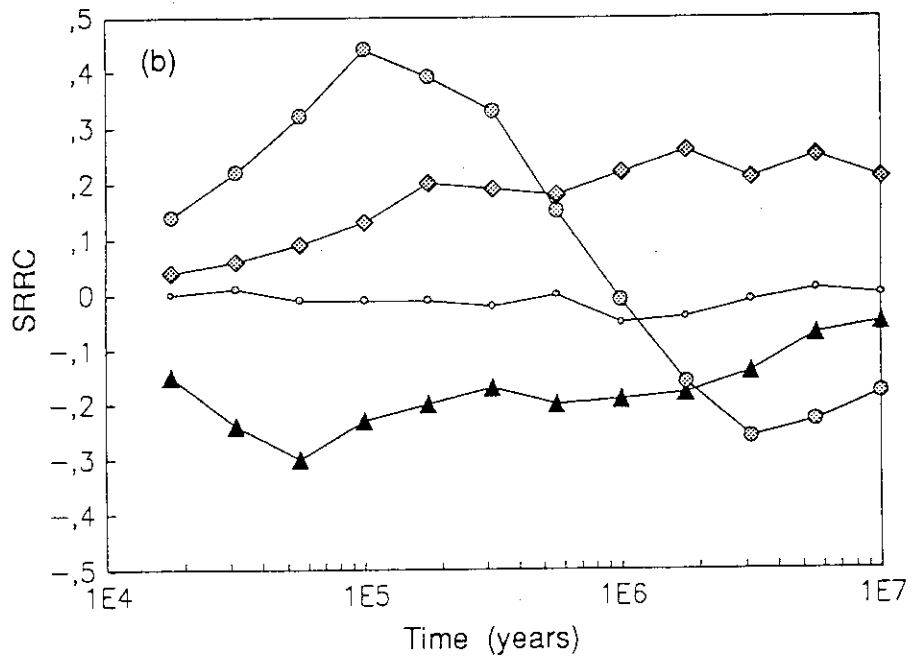
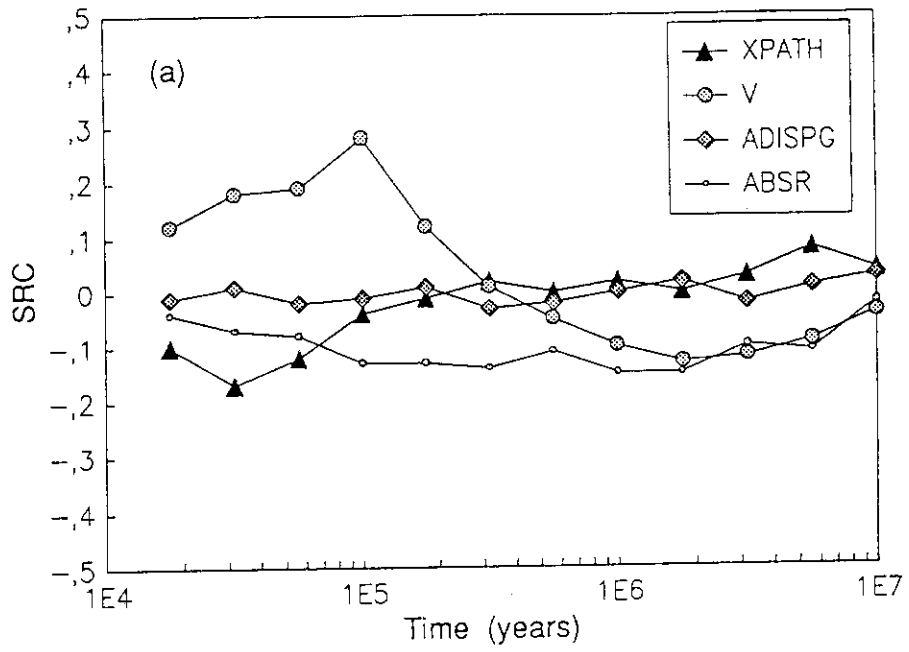


Fig. 7 Standardised regression coefficients and standardised rank regression coefficients of the most influential variables

Revised April, 1986

PROBABILISTIC SYSTEMS ASSESSMENT CODESLEVEL 0 INTERCOMPARISON

(B.W. Goodwin/WNRE, Pinawa and A. Saltelli/JRC, Ispra)

1. INTRODUCTION

The level 0 intercomparison was designed primarily to test the executive modules of probabilistic systems assessment codes. Consequently a set of very simple submodels and associated data is defined here. Only seven fission products (and no decay chains) are involved. Although the submodels and data appear to be representative of deep burial of high level waste, they are sufficiently simple to be of use by other types of probabilistic systems assessment codes.

Sections 2 to 5 describe simple analytical equations used to represent a hypothetical disposal system. There are a total of 22 parameters that are represented by probability distributions, including 14 radionuclide-specific parameters. The appendix provides a definition of the probability distributions used, and a glossary of parameter names and values.

Section 6 contains recommended methods for presentation of the computed results. The emphasis is on the direct output of the assessment codes, although further analysis (such as sensitivity analysis) would also be of value.

2. WASTE FORM MODEL

Dissolution of the waste form is assumed to occur at a time-invariant leach rate for a finite length of time. Radionuclides are released congruently as the waste form dissolves.

The waste form leach rate, $R_{wf}(t)$, is given by

$$R_{wf}(t) = R^0 [1-h(t-\tau^D)] \quad [\text{kg/m}^2\text{a}]$$

where h is the Heaviside step function:

$$\begin{aligned} h(y) &= 0 \text{ if } y < 0 \\ &= 1 \text{ if } y \geq 0. \end{aligned} \quad [--]$$

The time-invariant leach rate is R^0 and the length of time, τ^D , required for the dissolution of the waste form is given by:

$$\tau^D = \frac{Q}{R^0 S} \quad [a]$$

where Q is the total mass of the waste form and S is the total surface area (also assumed to be time-invariant) of the waste form.

The release of radionuclide i is given by the rate of dissolution of the waste form and the inventory of the radionuclide. The flow of radionuclide, $F_i^w(t)$, from the waste form is:

$$F_i^w(t) = R_{wf}(t) I_i(t) S \quad [\text{mol/a}]$$

where $I_i(t)$ is the inventory of radionuclide i at time t , given by

$$I_i(t) = I_i^0 \exp(-\lambda_i t) \quad [\text{mol/kg(waste)}]$$

where I_i^0 is the initial inventory of radionuclide i and λ_i is its decay constant.

3. BUFFER MODEL

A buffer of thickness X_B acts to delay the flow of radionuclides from the waste form to the geosphere. The flow of radionuclides from the buffer is given by

$$F_i^B(t) = \begin{cases} 0 & \text{if } t < \tau_i^B \\ F_i^w(t - \tau_i^B) \exp(-\lambda_i \tau_i^B) & \text{if } t \geq \tau_i^B \end{cases} \quad [\text{mol/a}]$$

where τ_i^B is given by the following approximate relationship for a purely diffusive barrier:

$$\tau_i^B = \frac{X_B^2 R_i^B}{4D_B} \quad [\text{a}]$$

$$\text{where } R_i^B = \frac{1 + \rho_B K_{Di}^B (1 - \epsilon_B)}{\epsilon_B} \quad [--]$$

$$\rho_B = \text{buffer density} \quad [\text{kg/m}^3]$$

$$\epsilon_B = \text{buffer porosity} \quad [--]$$

$$K_{Di}^B = \text{buffer sorption constant for radionuclide } i \quad [\text{m}^3/\text{kg}]$$

$$\text{and } D_B = \text{diffusion coefficient of the buffer, assumed to be identical for all radionuclides.} \quad [\text{m}^2/\text{a}]$$

4. GEOSPHERE MODEL

A geosphere path of length X_G acts to delay and spread the flow of radionuclides from the buffer to the biosphere. The flow of radionuclides from the geosphere is given by:

$$F_i^G(t) = \begin{cases} 0 & \text{if } t < \tau_i^B + \tau_i^L \text{ or } t > \tau_i^B + \tau_i^H + \tau^D \\ \frac{\tau^D}{\tau_i^H + \tau^D - \tau_i^L} F_i^B(t') \exp[-\lambda_i(t-t')] & \text{otherwise} \end{cases} \quad [\text{mol/a}]$$

where

$$t' = \left(\frac{t - \tau_i^L - \tau_i^B}{\tau_i^H + \tau^D - \tau_i^L} \right) \tau^D + \tau_i^B \quad [a]$$

and where τ_i^L and τ_i^H are the low and high roots, respectively, for τ_i^G in the following quadratic equation:

$$X_G = 2 \left(\frac{D_G \tau_i^G}{R_i^G} \right)^{1/2} + \frac{V_G \tau_i^G}{R_i^G} \quad [m]$$

where

$$R_i^G = 1 + \frac{\rho_G}{\epsilon_G} (1 - \epsilon_G) K_{D_i}^G \quad [--]$$

$$\rho_G = \text{geosphere density} \quad [\text{kg/m}^3]$$

$$\epsilon_G = \text{geosphere porosity} \quad [--]$$

$$K_{D_i}^G = \text{geosphere sorption constant for radionuclide } i \quad [\text{m}^3/\text{kg}]$$

$$\text{and } D_G = D_G^0 + \alpha_G V_G \quad [\text{m}^2/\text{a}]$$

$$\text{where } D_G^0 = \text{diffusion coefficient of radionuclides in the geosphere} \quad [\text{m}^2/\text{a}]$$

$$\alpha_G = \text{dispersivity in the geosphere} \quad [m]$$

$$V_G = \text{groundwater velocity in the geosphere} \quad [\text{m/a}]$$

Figure 1 illustrates the relationships between the various delay times and spreading of the flows for the waste form, the buffer and the geosphere.

5. BIOSPHERE MODEL

The flow F_i^G is assumed to enter a water extraction point, such as a well. The water is used as drinking water. The concentration of the nuclide i in the water, C_i , is given by

$$C_i = \frac{F_i^G A_i}{W} \quad [\text{Bq/m}^3]$$

where A_i is the molar specific activity of radionuclide i and W is the water extraction rate.

Only the water ingestion pathway is considered. Doses to man are computed using

$$H_i(t) = C_i \cdot W_m \cdot D_i \quad [\text{Sv/a}]$$

where

$H_i(t)$ = annual effective dose equivalent to the maximum exposed individual of the critical group due to radionuclide i

W_m = consumption rate of water by man

D_i = dose concentration factor for radionuclide i , by the ingestion pathway

The total annual effective dose equivalent, $H(t)$, is given by the sum of $H_i(t)$ over all radionuclides under consideration:

$$H(t) = \sum_i H^i(t) \quad [\text{Sv/a}]$$

The total annual effective dose equivalent is also referred to simply as dose and/or as dose rate.

6. PRESENTATION OF THE RESULTS

The probabilistic systems assessment codes will produce predicted values of dose as a function of time. Several hundred simulations or more will likely be required to produce reasonably converged mean doses.

For purposes of comparison, standard outputs should be prepared. These include a table of the mean and standard deviation of the predicted doses, which should be prepared at times of 10^5 , $10^{5.5}$, 10^6 , ... years, up to some specified cutoff time. A cutoff time of 10^7 years is recommended here. Another useful "summary" output would be to calculate the mean and standard deviation in the maximum dose predicted for each simulation. In addition, it would be instructive to carry out a sensitivity analysis, and to produce a summary of the results (such as a table of parameter rankings).

Two types of standard plots should be produced. The first type (demonstrated in Figure 2) is histograms of probability vs dose at the previously specified points in time, using a logarithmic dose axis with a bin size of one-half a log unit (i.e. bin limits in Sv/a are 10^{-1} to $10^{-1.5}$, $10^{-1.5}$ to 10^{-2} , etc. Bin sizes of one log unit may be used if the number of simulations is lower than about 200). A lower cutoff value of 10^{-15} Sv/a should be assumed. A total of 5 plots should be prepared at the 5 specified times.

The second type of standard plot (demonstrated in Figure 3) is a scatterplot of maximum dose (log scale) versus time of occurrence (log scale) for each nuclide. If possible, the time of occurrence should be

accurate to within two significant figures (or more). For clarity, it may be useful to use two or more plots.

To simplify the intercomparison, the plotted results of the probability vs dose histograms be provided in tabular form. Also the following scales should be used if possible:

- (a) For the probability-dose histograms, normalize the maximum probability to 10 cm., and use a scale of 1 cm. per decade (log unit) for the dose rate. The resultant plot will be 10 cm. high by 16 cm. wide (assuming that the dose varies from 10^{-15} to 10^1 Sv/a); see Figure 2.
- (b) For the scatterplot of dose vs time, use a scale of 1 cm. per decade (log unit) for the (vertical) dose axis, and a scale of 5 cm. per decade (log unit) for the time axis. The resulting plots will be about 16 cm. high by 15 cm. wide (using a time scale from 10^4 to 10^7 a); see figure 3.

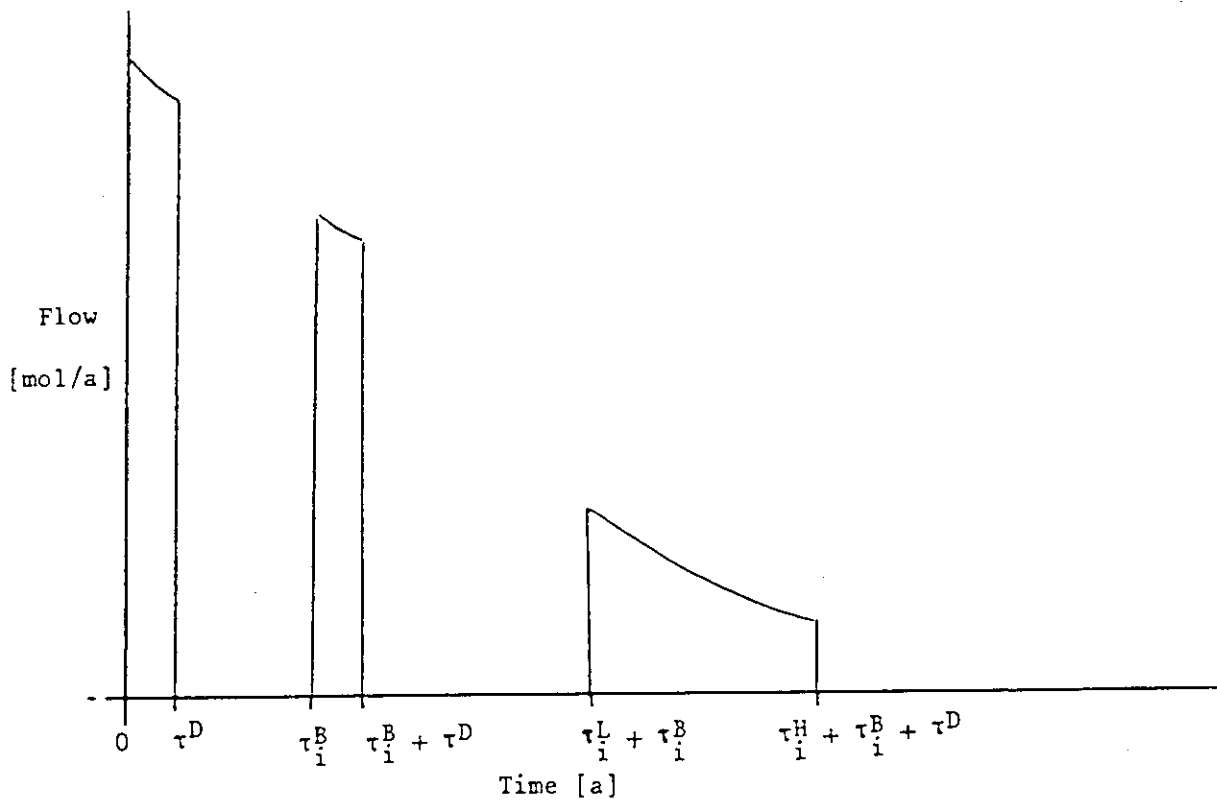


Figure 1. Illustration of the flows from the waste form, buffer and geosphere, showing the relationships between the various delay times. If decay were ignored, the area under the three curves would be identical.

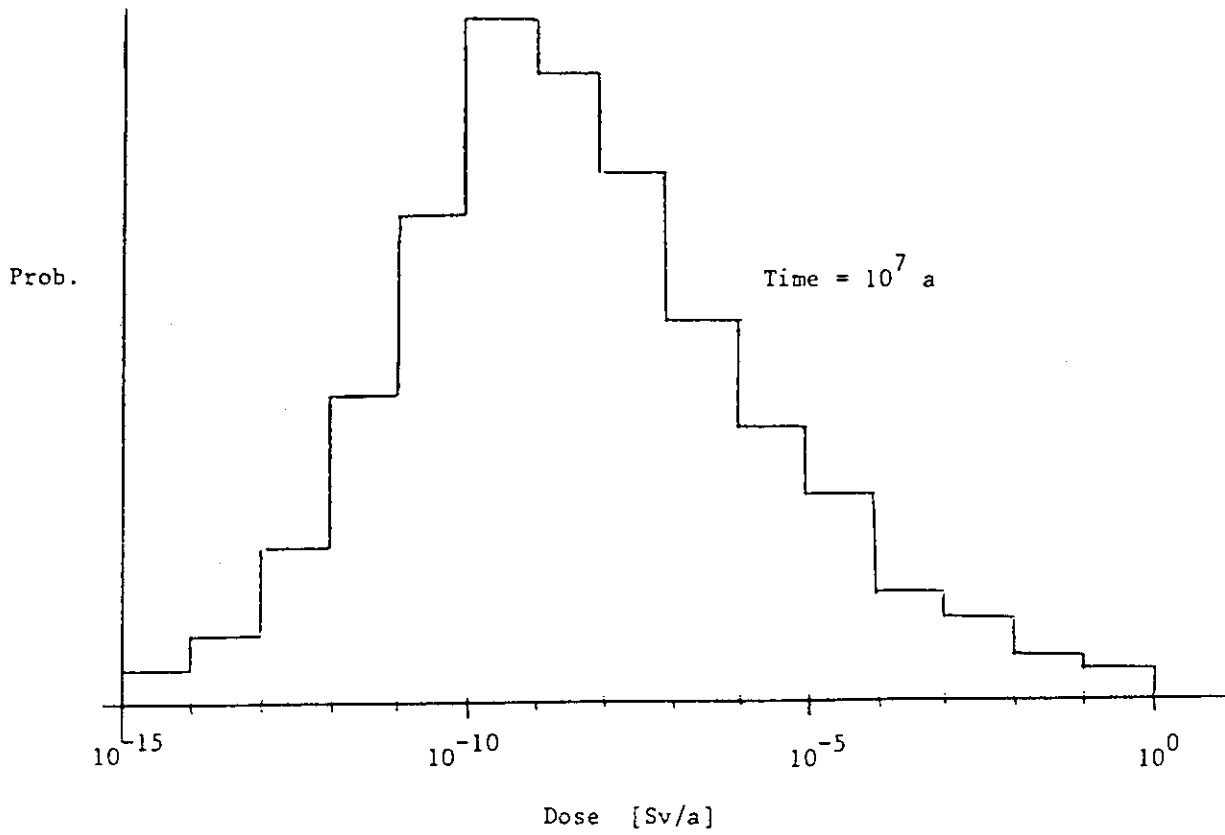


Figure 2. Sample histogram of the probability versus annual effective dose equivalent at a specified time. The vertical axis has been scaled so that the maximum probability is 10 cm. high, and the horizontal axis uses a scale of 1 cm. per log unit. A bin size of one log unit has been used here.

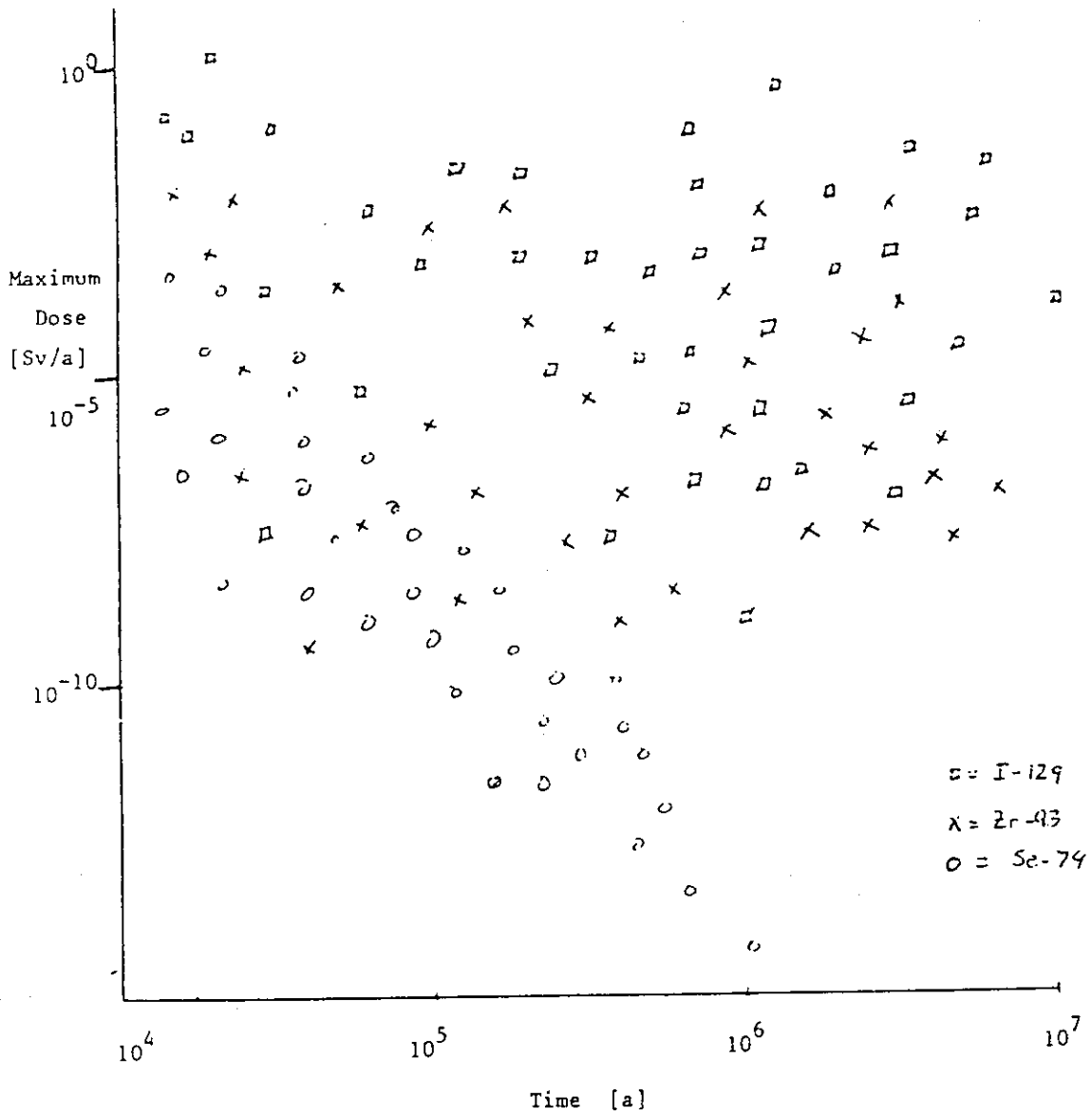


Figure 3. Sample scatterplot of the maximum annual effective dose equivalent for several nuclides, versus the time at which the maximum dose occurred. The vertical scale is 1 cm. per log unit, and the horizontal scale is 5 cm. per log unit.

APPENDIX A: DEFINITIONS FOR PROBABILITY DISTRIBUTIONS

- (a) UNIFORM: If x is uniform in the interval $[a,b]$ then the probability, $\frac{dP(x)}{dx}$, of x falling between x and $x+dx$ is given by

$$dP(x) = \begin{cases} 0 & x \text{ outside } [a,b] \\ \frac{dx}{b-a} & x \text{ within } [a,b] \end{cases}$$

The distribution is defined by providing values for a and b .

- (b) LOG-UNIFORM: If x is log uniform in $[a,b]$, then $\log_{10}(x)$ is uniform in $[\log_{10}(a), \log_{10}(b)]$. The distribution is defined by providing values for $\log_{10}(a)$ and $\log_{10}(b)$.
- (c) NORMAL: If x is normally distributed, then the probability of x falling between x and $x + dx$ is

$$dP(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[- (x-\mu)^2 / 2\sigma^2 \right] dx \quad -\infty < x < \infty$$

where the defining parameters are the mean, μ , and the standard deviation, σ .

- (d) LOGNORMAL: If x is lognormally distributed, then $\log_{10}(x)$ is normally distributed with parameters μ and σ . The defining parameters provided always refer to a normal distribution. Thus if parameter x is lognormally distributed, then $y = \log_{10}(x)$ is normally distributed, and the required defining parameters μ and σ refer to the transformed parameter y . For those codes that input the geometric mean (GM) and the geometric standard deviation (GSD) for lognormal distributions, the conversions are: $GM = 10^\mu$ and $GSD = 10^\sigma$ where μ and σ are the \log_{10} (not \log_e) values.
- (e) The level 0 intercomparison includes only the four distribution types defined above. Other probability distributions that may be required for other simulations include: TRIANGULAR, BETA, GAMMA, WEIBULL, EXPONENTIAL and PIECEWISE UNIFORM. Note that truncated NORMAL and truncated LOGNORMAL distributions may also be required due to physical limitations on the feasible values of a parameter.

APPENDIX B: GLOSSARY OF TERMS AND PARAMETER VALUES

Variable Name	Description	Probability Distribution	Units	Value
A_i	molar specific activity of radionuclide i	constant	Bq/mol	see Table 1
C_i	concentration of radionuclide i in drinking water	---	Bq/m ³	calculated
D_B	buffer diffusion coefficient (for all radionuclides)	constant	m ² /a	0.03
D_i	dose concentration factor for radionuclide i , by the ingestion pathway	constant	Sv/Bq	see Table 1
D_G°	geosphere diffusion coefficient (for all radionuclides)	normal	m ² /a	$\mu=0.04$ $\sigma=0.001$
D_G	hydrodynamic dispersion coefficient	---	m ² /a	calculated
$F_i^W(t)$	flow of radionuclide i from waste form	---	mol/a	calculated
$F_i^B(t)$	flow of radionuclide i from buffer	---	mol/a	calculated
$F_i^G(t)$	flow of radionuclide i from geosphere	---	mol/a	calculated
$H_i(t)$	annual effective dose equivalent from radionuclide i	---	Sv/a	calculated
$H(t)$	total annual effective dose equivalent	---	Sv/a	calculated
H_{min}	cut off dose rate	constant	Sv/a	1.0×10^{-15}
H_b	background dose	constant	Sv/a	1.8×10^{-3}
$I_i(t)$	inventory of nuclide i at time t	---	mol/kg (waste)	calculated

Variable Name	Description	Probability Distribution	Units	Value
I_i^0	initial inventory of radionuclide i	constant	mol/kg (waste)	see Table 1
K_{Di}^B	sorption constant in the buffer for radionuclide i	lognormal	m^3/kg	see Table 2
K_{Di}^G	sorption constant in the geosphere for radionuclide i	lognormal	m^3/kg	see Table 2
Q	total amount of waste form	constant	kg	2.0×10^8
$R_{wf}(t)$	waste form leach rate at time t	---	$kg/(m^2 \cdot a)$	calculated
R^0	time-invariant waste form leach rate	log-uniform	$kg/(m^2 \cdot a)$	-2.57 to 1.11 (i.e. range is $10^{-2.57}$ to $10^{1.11}$)
R_i^B	retention factor in the buffer of radionuclide i	---	---	calculated
R_i^G	retention factor in geosphere of radionuclide i	---	---	calculated
S	total surface area of the waste form	constant	m^2	1.2×10^6
t	time	(independent variable)	a	$[0, t_{max}]$
t_{max}	simulation cut-off time	constant	a	1.0×10^7
V_G	groundwater velocity in the geosphere	log-uniform	m/a	-3 to -1 (i.e. range is 10^{-3} to 10^{-1})
W	water extraction rate	uniform	m^3/a	5×10^5 to 5×10^6
W_m	water ingestion rate (man)	uniform	m^3/a	0.7-0.9

Variable Name	Description	Probability Distribution	Units	Value
X_B	buffer thickness	uniform	m	0.5 to 5.0
X_G	geosphere pathlength	uniform	m	10^3 to 10^4
α_G	dispersivity in the geosphere	log-uniform	m	0.3 to 2.3 (i.e. range is $10^{0.3}$ to $10^{2.3}$)
ϵ_B	buffer porosity	constant	---	0.099
ϵ_G	geosphere porosity	constant	---	0.3
λ_i	decay constant nuclide i	constant	a^{-1}	see Table 1
ρ_B	buffer density	constant	kg/m^3	1.85×10^3
ρ_G	geosphere density	constant	kg/m^3	2.0×10^3
τ_i^B	transit time in the buffer of radio-nuclide i.	---	a	calculated
τ^D	time for the dissolution of the waste form	---	a	calculated
$\tau_i^L, \tau_i^H,$ τ_i^G	transit times in the geosphere of radio-nuclide i. τ_i^L and τ_i^H are the low and high roots of τ_i^G in the geosphere model.	---	a	calculated

TABLE 1

DECAY CONSTANTS WASTE INVENTORIES, SPECIFIC MOLAR ACTIVITIES,
AND DOSE-CONCENTRATION FACTORS

Radionuclide	Decay Constant λ^{-1}	Initial Inventory mol/kg (waste)	Specific Molar Activity Bq/mol	Ingestion Dose Factors Sv/Bq
Cs-135	3.01E-07	3.465E-4	5.75E+9	1.9E-9
I-129	4.36E-08	5.6E-4	8.32E+08	7.8E-8
Pd-107	1.07E-07	6.75E-4	2.04E+9	4.1E-11
Se-79	1.07E-05	2.035E-5	2.04E+11	2.3E-9
Sm-151	7.45E-03	2.13E-5	1.42E+14	1.1E-10
Sn-126	6.93E-06	4.95E-5	1.32E+11	9.1E-10
Zr-95	4.62E-07	2.34E-3	8.82E+9	4.5E-10

TABLE 2

MEAN μ AND STANDARD DEVIATION σ
FOR THE LOGNORMAL DISTRIBUTIONS OF SORPTION CONSTANTS

Element	Buffer Sorption Constant K_{Di}^B		Geosphere Sorption Constant K_{Di}^G	
	σ	μ	σ	μ
Cs	0.86	-0.46	1.6	-1.46
I	1.34	-5.07	2.6	-6.07
Pd	0.669	-1.91	1.4	-2.91
Se	0.143	-2.38	0.3	-3.38
Sm	0.605	-2.13	1.2	-3.13
Sn	0.729	-1.77	1.4	-2.77
Zr	0.5	-0.71	1.0	-1.71

付録B レベル0問題の質問表

RADIOACTIVE WASTE MANAGEMENT COMMITTEE

PSAC Intercomparison: Level 0 Results Questionnaire

QUESTIONNAIRE

The following questionnaire is to elicit data from all participants in the PSAC Level 0 exercise. You may not have data for all the tables/questions attached, but should provide as much as is available. If possible, you may also wish to do additional computations to fill any gaps. The comparisons will be based on those tables/questions for which there are at least three respondents. It is expected that all participants will provide data for Table 1. Completed questionnaires should be returned to the NEA by 16th January at the very latest.

-
- Notes:
1. Zero dose is interpreted as being 10^{-5} Sv/a or less.
 2. Please supply 3 significant figures where relevant.
 3. Units for dose should be Sieverts/year [Sv/a]. Units for time should be years [a].
 4. Please use separate copies of this questionnaire if you wish to provide results from more than one run.

1. What are the specifics of your code? (Code name, number of runs, sampling methods, etc.)

2. Table 1: Mean dose vs time

	104.5	105	Time 105.5	106	106.5	107
Mean dose at specified time						
Standard deviation						
Relative fraction of doses that are non zero						

3. Table 2: Mean of maximum dose vs time

	104.5	105	Time 105.5	106	106.5	107
Mean of maximum dose up to specified time						
Standard deviation						
Relative fraction of maximum dose that are non zero						

4. Table 3: Frequency vs dose bins (for histogram plots)

Dose Bins	Time					
	$10^{4.5}$	10^5	$10^{5.5}$	10^6	$10^{6.5}$	10^7
<10 ⁻¹⁵						
10 ⁻¹⁵ to 10 ^{-14.5}						
10 ^{-14.5} to 10 ⁻¹⁴						
10 ⁻¹⁴ to 10 ^{-13.5}						
10 ^{-13.5} to 10 ⁻¹³						
10 ⁻¹³ to 10 ^{-12.5}						
10 ^{-12.5} to 10 ⁻¹²						
10 ⁻¹² to 10 ^{-11.5}						
10 ^{-11.5} to 10 ⁻¹¹						
10 ⁻¹¹ to 10 ^{-10.5}						
10 ^{-10.5} to 10 ⁻¹⁰						
10 ⁻¹⁰ to 10 ^{-9.5}						
10 ^{-9.5} to 10 ⁻⁹						
10 ⁻⁹ to 10 ^{-8.5}						
10 ^{-8.5} to 10 ⁻⁸						
10 ⁻⁸ to 10 ^{-7.5}						
10 ^{-7.5} to 10 ⁻⁷						
10 ⁻⁷ to 10 ^{-6.5}						
10 ^{-6.5} to 10 ⁻⁶						
10 ⁻⁶ to 10 ^{-5.5}						
10 ^{-5.5} to 10 ⁻⁵						
10 ⁻⁵ to 10 ^{-4.5}						
10 ^{-4.5} to 10 ⁻⁴						
10 ⁻⁴ to 10 ^{-3.5}						
10 ^{-3.5} to 10 ⁻³						
10 ⁻³						

- Note
1. If you do not have a high density of points, use bins ranging over one order of magnitude, and indicate the bin range
 2. Please indicate whether your dose data consists of doses at the indicated times, or dose maxima up to the indicated times. Most participants are expected to provide the former data, and some might provide both.

5. Identify and rank contributors to mean dose at the times 105, 106 and 107a.

Time	Ranked contributors [radionuclide]
105	
106	
107	

Eg. At 105a, the contributors might be $I > Cs > Pd \dots \gg Sm$

6. Identify your technique(s) used for sensitivity analyses ranking (eg Spearman, correlation coefficient, etc.)

7. Identify and rank the significant parameters affecting mean dose at 105, 106 and 107a.

Time	Significant parameters
105	
106	
107	

Eg. At 105a, the most significant parameters might be:

$$V_G > K_D^G (I) > W \dots \gg K_D^G (Pd)$$