

処分場の設計評価等に関する統合化システムの開発

－ 成 果 報 告 書 －

(核燃料サイクル開発機構 研究委託内容報告書)

平成 12 年 2 月

三菱重工業株式会社

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村村松4番地49

核燃料サイクル開発機構

技術展開部 技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:

Technical Cooperation Section.

Technology Management Division.

Japan Nuclear Cycle Development Institute

4-49 Muramatsu, Tokai mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1184, Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)
2000

2000年2月

処分場の設計評価等に関する統合化システムの開発

房枝茂樹^{*1}、柳澤一郎^{*2}、今村尚子^{*1}、武石雅之^{*1}、
大崎徹^{*2}、松岡不識^{*2}、森村弘一^{*3}、桂井清道^{*4}、
根山敦史^{*5}、森 康二^{*5}

要旨

本研究では、数値地層処分システム開発の第一フェーズシステムとして、2002年度末の運用開始を目指したシステムの開発の方向性を定め、かつシステム実現の見通しを得ることを目的として、統合解析プラットホームの基本設計、処分技術を対象とした解析コード、データベースに関する検討を実施し、開発計画をまとめた。

主要な結論は下記の通りである。

- (1) 統合解析プラットホームの基本設計を実施し、数値地層処分システムで必要となる接続計算や連成解析等を実現可能とするべく、柔軟性のある解析ネットワーク表現および解析ネットワークを構成するオブジェクトの仕様ならびに実行制御方式を定めた。
- (2) 統合プラットホーム上での接続計算の柔軟性の確認と、基本設計へのフィードバックを目的とし、処分場における空洞安定性と熱的安定性に関する最適化問題を対象に、プロトタイプシステムを構築した。この結果、基本設計で示した設計方針により、柔軟性のある解析が可能であるとの見通しを得た。
- (3) 想定されるユーザである、規制側、実施主体、研究開発機関での運用形態の議論も踏まえ、数値地層処分システムの開発計画を検討し、第一フェーズに対する開発計画並びに長期開発計画をまとめた。

本報告書は、三菱重工業株式会社が核燃料サイクル開発機構の委託により実施した研究成果に関するものである。

契約番号：110D 0230

機構担当部課室：2000年レポートチーム 研究調整グループ

* 1 三菱重工業株式会社 原子力プラント技術部 開発技術課

* 2 三菱重工業株式会社 原子力プラント技術部 バックエンド技術課

* 3 三菱重工業株式会社 技術本部 エレクトロニクス技術部 システム技術開発センター

* 4 三菱重工業株式会社 新型炉燃料サイクル技術部 燃料サイクル技術課

* 5 コンピュータソフト開発(株) 環境工学グループ

Development of an Integrated Software System (Digital Geological Disposal System) for Design and Evaluation of HLW Disposal System

Shigeki Fusaeda^{*1}, Ichiro Yanagisawai^{*2}, Naoko Imamura^{*1},
Masayuki Takeishi^{*1}, Tooru Oosaki^{*2}, Fushiki Matsuoka^{*2},
Kiyomichi Katurai^{*3}, Kouichi Morimura^{*4}, Atsushi Neyama^{*5},
Kouji Mori^{*5}

ABSTRACT

In this study, a design study on "Digital Geological Disposal System" has been carried out in order to define the developmental goal for the first phase (- FY2002) system and to demonstrate the feasibility of the system development. The key conclusions are summarized as follows:

- (1) As the result of the basic design of the Integrated Analysis Platform (IAP), the representation method for the procedure of analysis that is called analysis network, the configuration of the object that makes up the analysis network, and the execution control mechanism of the analysis network are newly proposed in order to enhance the flexibility of IAP.
- (2) A prototyping study concerning an optimization problem that includes cavity stability analysis and thermal analysis, showed that the design of IAP is practical one and also has enough flexibility to solve complex problems expected in the repository design processes.
- (3) The development plan for the "Digital Geological Disposal System" has been investigated based on the discussions about the system usage by the potential users such as the regulators, the implementation body and the research institutes, as well as the technical discussions. As a result, short-term (for the first phase) and long-term development plans have been proposed.

This work was performed by Mitsubishi Heavy Industries, LTD.(MHI) under contract with Japan Nuclear Cycle Development Institute.

Contract No. : 110D 0230

JNC Liaison : Geological Isolation Research Project

*1 MHI, Products Development Section, Nuclear Plant Engineering Department

*2 MHI, Back-end Engineering Section, Nuclear Plant Engineering Department

*3 MHI, System Technology Center, Electronics Research & Development Department

*4 MHI, Fuel Cycle Engineering Section, Advanced Reactor & Nuclear Fuel Cycle Engineering Department

*5 Computer Software Development, Environmental Engineering Application Promotion Group

目次

1. はじめに	1
2. 全体計画の策定	2
2.1 運用形態の検討	2
2.1.1 地層処分計画への活用	3
2.1.2 数値地層処分システムの要求機能	23
2.2 数値地層処分システムの概念構成	27
2.2.1 ソフトウエア構成	27
2.2.2 ハードウエア構成	31
2.3 開発計画の策定	35
2.3.1 第1フェーズシステムの開発計画	35
2.3.2 長期開発計画	39
3. 統合解析プラットホームに関する検討	43
3.1 統合解析プラットホームの基本設計	43
3.1.1 機能仕様	44
3.1.2 解析コード導入のための標準化手法	68
3.1.3 並列化処理ライブラリの適用性の検討	72
3.2 プロトタイプシステムの開発・検証	87
3.2.1 プロトタイプシステムの開発	87
3.2.2 プロトタイプシステムの検証	94
3.3 解析手法の導入	96
3.3.1 解析手法の検証	96
3.3.2 連成解析に関する検討	108
4. 解析手法に関する検討	133
4.1 処分場設計解析コード／モデルに関する検討	133
4.2 設計最適化に関する検討	139
4.2.1 処分場設計における最適化問題への活用例	140
4.2.2 フレームワークの検討	143
4.2.3 設計解析コードに関する検討	148
4.2.4 プレポストプロセッサーに関する検討	151
4.2.5 最適化手法の検討	161
4.2.6 性能評価ツールの統合化	168
4.2.7 まとめ	169
4.3 経験的手法の適用性検討	171
4.3.1 エキスパートシステムの概要	172

4.3.2 地層処分施設設計への適用検討	174
4.4 GeoFEM/Tiger に関する検討	182
4.4.1 Tiger コードの全体構成	182
4.4.2 数値地層処分システムでの利用可能性	186
5. 統合データベースに関する検討	204
5.1 データモデルの概念検討	204
5.2 要求機能の検討	209
6. おわりに	214

参考文献

付録 1 エキスパートシステムの基礎知識

付録 2 処分場設計解析コード/モデルに関する検討－ 設計解析コードの現状調査 －

付録 3 制約条件付き最適化問題の一解法（逐次二次計画法）

表リスト

表 2.1-1 地質環境評価における数値地層処分システムへの要求	18
表 2.1-2 処分場設計における数値地層処分システムへの要求	19
表 2.1-3 性能評価における数値地層処分システムへの要求	20
表 2.1-4 社会的合意形成における数値地層処分システムへの要求	21
表 2.1-5 数値地層処分システムの地層処分事業への運用案 (西暦 2003 年度の運用開始)	22
表 2.3.1-1 第 1 フェーズシステムの開発計画	36
表 2.3.1-2 解析コードの導入計画	38
表 2.3.2-1 数値地層処分システムの開発フェーズ	41
表 2.3.2-2 数値地層処分システムの開発計画	42
表 3.1.2-1 解析コードに対する要求事項	69
表 3.1.3-1 PVM の機能	75
表 3.1.3-2 MPI の機能	76
表 3.1.3-3 PVM と MPI の比較	77
表 3.2.1-1 プロトタイプシステムの動作環境	89
表 3.3.1-1 岩盤物性値（空洞解析）	101
表 3.3.1-2 热物性値（热解析；非定常热伝導解析）	101
表 3.3.1-3 本試解析で対象とする最適化問題の構成	103
表 3.3.2-1 材料物性値	123
表 3.3.2-2 質点変位時間変化に関する解析結果	131
表 4.1-1 「地層処分の工学技術」において使用されている解析コード	135
表 4.1-2 設計解析コードの現状	136
表 4.2.1-1 数値地層処分システムの最適化問題への活用例	142
表 4.2.4-1 メッシュ生成手法の比較	160
表 4.4.2-1 モジュールライブラリ構成サブルーチン一覧表	189
表 4.4.2-2 GeoFEM から利用している MPI の機能	190
表 4.4.2-3 解析モデル(1) 解析概要	200
表 4.4.2-4 解析モデル(2) 解析概要	200
表 5.2-1 热解析入力データ項目（ABAQUS）	211
表 5.2-2 空洞解析入力データ項目（ABAQUS）	212

図リスト

図 2.1-1 数値地層処分システムで取扱う情報とその活用イメージ.....	10
図 2.1-2 数値地層処分システム・解析での活用イメージ.....	11
図 2.1.1-1 YMP における情報管理システムの概念	12
図 2.1.1-2 WIPP における情報管理システムの概念	12
図 2.1.1-3 WIPP における性能評価用パラメータセットの品質保証 · From Number 464.....	13
図 2.1.1-4 NNWTSI(Nevada Nuclear Waste Storage Investigations) 研究区域における 15 ヶ所の候補地	14
図 2.1.1-5 NNWSI(Nevada Nuclear Waste Storage Investigations) 研究区域における 15 ヶ所の候補地スクリーニング結果	15
図 2.1.1-6 地層処分・性能評価解析支援システム (CAPASA) の概念	16
図 2.1.1-7 地層処分研究総合評価システム	17
図 2.1.2-1 研究開発分野間のリンク	26
図 2.2.1-1 ソフトウェアの概念構成	28
図 2.2.2-1 ハードウェアの概念構成	34
図 3.1.1-1 解析ネットワークのアイテム	47
図 3.1.1-2 解析ネットワークの例	48
図 3.1.1-3 解析ネットワークに基づいた解析手順	49
図 3.1.1-4 統合解析プラットホームの概略構成	50
図 3.1.1-5 解析コード単体または接続解析を 目的とした場合の解析コード組み込み方法	53
図 3.1.1-6 連成解析を目的とした場合の解析コード組み込み方法	53
図 3.1.1-7 連成解析を目的とした場合の解析コードの実行制御方法	54
図 3.1.1-8 入力データ設定／データ表示ソフトウェア	55
図 3.1.1-9 分岐オブジェクト	56
図 3.1.1-10 ループオブジェクト	56
図 3.1.1-11 感度解析オブジェクト	57
図 3.1.1-12 不確実性解析オブジェクト	58
図 3.1.1-13 データベースコンテナー	59
図 3.1.1-14 グローバルコンテナー	61
図 3.1.1-15 オブジェクト間データフロー	62
図 3.1.1-16 データベースコンテナー・オブジェクト間データフロー	63
図 3.1.1-17 解析ネットワーク実行フロー	66
図 3.1.1-18 オブジェクト実行フロー	67

図 3.1.3-1 計算機クラスタ Avalon の外観	72
図 3.1.3-2 並列化処理ライブラリ	73
図 3.1.3-3 並列化処理ライブラリによる移植性の向上	74
図 3.1.3-4 処理の流れ	79
図 3.1.3-5 マスターの記述	80
図 3.1.3-6 スレーブの記述	81
図 3.2.1-1 コントローラプロトタイプの構成	92
図 3.2.1-2 操作環境プロトタイプ	93
図 3.3.1-1 空洞解析、熱解析オブジェクト出力表示例 (FEMAP)	99
図 3.3.1-2 ORIGEN2 オブジェクト出力表示例 (発熱履歴; EXCEL)	99
図 3.3.1-3 最適化オブジェクト出力表示例 (設計変数の収束履歴; EXCEL)	100
図 3.3.1-4 核種移行解析オブジェクト出力表示例 (核種放出率; EXCEL)	100
図 3.3.1-5 空洞解析モデル (単位; m)	102
図 3.3.1-6 熱解析モデル (単位; m)	102
図 3.3.1-7 設計変数の変化	104
図 3.3.1-8 2000 年レポートとの概算比較 (参考図; 本試解析と 2000 年レポートで解析条件は異なる)	104
図 3.3.1-9 最適化オブジェクト出力リスト	105
図 3.3.2-1 連成系の安定性指標に関する検討の流れ	109
図 3.3.2-2 非定常熱伝導-浸透流の連成概念	109
図 3.3.2-3 3 系の連成解析に対する非定常解析スキーム	113
図 3.3.2-4(a) 連成パターン I : 連成情報のやり取りが片方向 A⇒B の場合	114
図 3.3.2-4(b) 連成パターン II : 連成情報のやり取りが双方向 A↔B の場合	114
図 3.3.2-4(c) 連成パターン III-① : 3 連成の場合	115
図 3.3.2-4(d) パターン III-② : 3 連成の場合	115
図 3.3.2-4(e) パターン III-③ : 3 連成の場合	116
図 3.3.2-5(a) FEM 解析モデルの形状・寸法・境界条件	122
図 3.3.2-5(b) FEM 解析モデルの要素分割図 (Z 方向均等 9 分割)	123
図 3.3.2-6 热移流ありの場合の热伝導解析結果・非定常温度分布	126
図 3.3.2-7 热伝導解析結果の定常温度分布の比較	126
図 3.3.2-8 極端な移流支配の系の場合 (Pe=45.0) に対する定常温度分布	127
図 3.3.2-9 2 質点からなる連成系の解析モデル図	128
図 4.2.1 空洞の力学的安定性および人工バリアシステムの 热的安定性から定まる廃棄体 1 体当たりの处分必要面積	140
図 4.2.2-1 設計最適化プロトタイプシステムの構成概念	145
図 4.2.2-2 解析ネットワークの内部構成 (実行時)	146

図 4.2.2-3 処分場基本設計システムを用いた解析作業の流れ	147
図 4.2.3-1 ABAQUS の入力形式	149
図 4.2.3-2 ABAQUS の出力形式 (fil ファイル)	150
図 4.2.4-1 解析領域と形状最適化に関する設計変数の例	153
図 4.2.4-2 メッシュ生成の基本方針 (その 1)	156
図 4.2.4-3 メッシュ生成の基本方針 (その 2)	158
図 4.2.4-4 形状最適化に用いる形状修正ベクトルの作成 (弾性解析例)	159
図 4.2.5-1 目的関数、制約関数における近似勾配の算出概念	166
図 4.2.5-2 応答曲面の例	167
図 4.2.5-3 近似モデルを用いた最適化計算の概念	168
図 4.3-1 支援システムの処理フロー	178
図 4.3-2 レイアウト入力機能—イメージ図	179
図 4.4.1-1 GeoFEM/Tiger のサブシステムおよび統合化環境	183
図 4.4.1-2 GeoFEM での領域分割法による解析手順	184
図 4.4.1-3 データ記述言語 GDL による処理手順	186
図 4.4.2-1 GeoFEM の Fortran90 の module により階層化された構成一覧	188
図 4.4.2-2 反復ステップ s+1 での改良近似	193
図 4.4.2-3 局所的不完全 LU 分解法 (ILU(0)法) の適用例	197
図 4.4.2.4 PE 間の袖領域 (Overlapped Region)	198
図 4.4.2-5 解析モデル(1) イメージ	199
図 4.4.2-6 断層モデル解析結果 (I-DEAS による可視化)	199
図 4.4.2-7 ソルバーとデータを共有化した数値処分システムの概念的構成	202
図 5.1-1 処分場の構成に関するデータモデル	207
図 5.1-2 現象に関するデータモデル (イメージ)	208
図 5.2-1 热解析／空洞安定性解析のデータモデル	213

1. はじめに

数値地層処分システムは、高レベル放射性廃棄物の地層処分システムにおける設計手法や性能評価等に係わるモデル、コードおよび各種データを計算機上に有機的に統合化して、極めて長い時間枠や天然の地層に起因する不確実性を考慮して、現実的な時間の範囲にて解析シミュレーションを行うことにより地層処分システムの総合的な評価を行うツールである。また、評価結果の信頼性を向上するため、追跡性、再現性等の確保や検証・確認作業の支援、ならびに評価作業の効率化を図るものである。

本年度は、この数値地層処分システムの初期の開発フェーズ（以下、第1フェーズシステム）として、西暦2002年度末の運用開始を念頭においていたシステムの開発の方向性を定め、かつシステム実現に関する見通しを得ることを目的とし、中核のソフトウェア要素となる統合解析プラットホームの基本設計、処分技術を対象とした解析手法ならびデータベースに関する検討を実施し、開発計画を策定した。また、基本設計や検討作業においては具体的な課題や対応策を明確にするためプロトタイピングを含めた検討を実施した。

2. 全体計画の策定

西暦 2004～5 年頃は、我が国の高レベル放射性廃棄物地層処分計画において処分候補地選定活動から処分予定選定活動に移り変わる時期と考えられ、処分候補地での地質環境調査が主要な活動として実施され、取得される地質情報を基に予備的に処分施設の概念設計や安全評価等の活動が開始されることが想定される。数値地層処分システムの開発にあたっては、これらの時期において、システムの適用を可能とすることを考慮して、2003 年頃までに、第 1 フェーズとして、プロトタイプを完成させることを考える。

本節では、地層処分事業の展開を踏まえて、第 1 フェーズにおけるシステムを中心として、数値地層処分システムの運用形態を検討するとともに、システムの概念構成ならびに開発計画について検討する。

2.1 運用形態の検討

地層処分研究開発第 2 次取りまとめ・総論レポート(JNC TN1400 99-020)によれば、数値地層処分システムの開発について、

「地層処分システムにおいて想定されるさまざまな現象の解析評価を容易かつ柔軟に行うことができるよう、研究開発において得られた知識の体系化を進める。具体的には、解析モデルおよびデータベースを計算機上で統合した“数値地層処分システム”を開発する。このシステムによる解析結果を可視的化することによって、地層処分システムにおける複雑な現象の時間的、空間的変遷について定量的に理解でき、個々の現象と処分システムの全体性能との関係を容易に把握することができる。このシステムを用いることによって特定の地質環境が与えられれば、その条件に対応した処分場の設計、構築された処分システムに対する長期的な挙動の評価、その結果の設計へのフィードバックといった一連の繰り返し作業を効率的かつ容易に進めることができとなり、地層処分システムの最適化に資する。また、当該システムを活用して、地層処分システムの長期にわたる変化をわかりやすく提示することができ、地層処分に対する国民各層への理解促進に資することができる。」

としている。

システムの運用形態の検討にあたっては、システムに求められる個々の機能を過不足なく摘出することが肝要である。上記のシステム構想を前提として、米国 DOE における解析コードやデータの統合化事例も配慮し、運用形態を分析することとした。図 2.1-1 は、平成 10 年度の検討でまとめたシステムの活用方法（案）とサイクル機構の既存施設を考慮に入れ、前記システム構想を模式的に示したものである。本図右側のブロックは、数値地層処分システムが受け持つ解析コード、データ、知識情報を示している（①～⑧）。こ

これらの個別情報や統合して解析した結果が、種々の経路（パーソナルコンピュータ、仮想体験シミュレータ、サイクル機構広報・新設窓口、サイクル機構展示館、E N T R Y内展示コーナー）によりユーザーが利用できることを示している。また、数値地層処分システムの解析部分に係わる活用イメージを図 2.1-2 に示す。本図に示すように、数値地層処分システムの解析では、解析ツール、データベースを利用することとなるため、本節では、種々の運用形態に対して、候補となるツールやデータベースに格納するデータについて議論する。また、解析コード、データ、知識情報の統合化に加え、品質保証活動の一端を担う活用についても考慮するものとする。

本節では、第 1 フェーズシステム（西暦 2003 年度からの試運用）を対象として、地層処分事業に関わる種々の活動内容、サイクル機構や実施主体等の役割分担や技術開発体制ならびに地層処分事業の計画を踏まえて、数値地層処分システムの狙いおよび要求機能を明確にする。

平成 10 年度の成果は、表 2.1-1～表 2.1-4 に示すように数値地層処分システムの幅広い運用を想定し、地質環境、処分場設計、性能評価、社会的合意形成に係わるテーマ、概要、数値地層処分システムへの要求や開発課題についてまとめた。本表では、西暦 2003 年度までの実現目標についても付記しており、本節の検討では、これらの成果も考慮した上で、数値地層処分システムの地層処分事業への活用についてさらに詳しく分析する。

また、本システムの運用方法としては、

- ・サイクル機構内における本システムの利用（実施主体から作業を請け負って実施）
- ・本システムを、実施主体へパッケージとして提供
- ・サイクル機構および実施主体の双方の利用（インターネット等を介した利用）

等が考えられるため、今後の地層処分事業の展開や最新の計算機科学技術動向等を踏まえて、運用方法を検討する。

地層処分事業への活用について検討した結果を表 2.1-5 に示す。本表の詳細については「2.1.1 地層処分事業への活用」に記載する。

2.1.1 地層処分計画への活用

わが国の地層処分の事業は、申請者（実施主体／電気事業者）による活動や規制者（国）による活動、ならびに両者の活動を支援するための研究開発活動が含まれる。現時点では、実施主体／電気事業者、国、研究開発団体の地層処分事業に係わる具体的な役割分担は、決まっていない。したがって、本項では、総合エネルギー調査会原子力部会(中間報告；高レベル放射性廃棄物処分事業の制度化のあり方、平成 11 年)で示されている地層処分の実施体制の考え方、ならびに公開されているサイクル機構（研究開発団体）の今後の研究計画案に基づき、数値地層処分の活用について分析する。

(1) 規制者（国）による活用

国の役割は、処分事業の長期安定性および長期安全性を確保するため、事業の推移に従って、基本計画の策定／資金確保制度の制定／技術的能力、経理的基礎等、実施主体の要件を法的に担保／実施主体の事業計画の承認／安全規制等に関する技術開発／安全審査・設置許可／安全管理監督／地下利用制限等その他規制／事業終了後の安全責任の継承／不測の事態における制度的対応／記録の保持、などが役割とされている。

数値地層処分システムがこれらの項目に対し技術的に貢献する内容としては、研究開発にて得られた知識、解析コード、データ等に基づく地層処分施設基本仕様の検討評価、安全規制等に係わる技術開発、安全審査、記録の保持が挙げられる。さらに、西暦 2003 年以降実施されると考えられる事項としては、安全規制等にかかる技術開発のうち立地指針（処分予定地選定基準の策定）、候補地選定に対する確認などが挙げられる。また、ここでは、規制者の効率的な管理の実現ならびに規制者の重要な役割と考えられる品質保証に関する事項についても挙げられている。

(a) 立地指針（処分予定地選定基準の策定）

処分予定地選定期階では、文献データに加え現地で取得された地質環境の長期安定性、地質環境データに基づく施設の概念設計、予備的安全評価、さらには社会学的要件、処分事業コストなど様々な要因の摘出を行うことである。また、これらの要因から適切なサイトを抽出するための方法論を確立するための検討を行う可能性がある。これらの検討において、公開文献データ、サイト取得データ、解析コード、入出力データ、に基づく総合評価（後述の Decision Analysis など）を短期間に効率的かつ確実に行うためには、情報管理を含めた解析支援システムが必要となる。

(b) 候補地選定に対する確認

本活動では、実施主体が行った評価結果の適切性について、品質保証の観点から判断するものと考えられる。再現性の観点からは、実施主体で行った評価条件に基づき、同一手法または異なる手法にてクロスチェック評価を行う必要がある。本活動で取扱う情報は、実施主体が採用する手法に依存するため、現時点にて明確なことは言えないが、後述の Decision Analysis などは評価手法の候補として考えられる。この種のクロスチェック評価の事例としては、原子力発電プラントを対象として、通商産業省の指導のもと、第三者による安全解析や強度解析が実施されている。追跡可能性、透明性、回収可能性の観点からは、実施主体の活動に関する品質保証ドキュメント、ならびに本ドキュメントに基づく取得・収集データ、データ変換ツールの信頼性、正確性、入出力データの正確性を示すための記録を監査することが必要と考えられる。効率的な確認（審査）のためには、これらの情報を計算機などにより管理するためのフレームワークが必要となる。

また、次ステップの活動として考えられる、予定地選定に係わる事業計画を承認する上でも、過去のデータ収集状況を効率的に把握するために、計算機による情報管理が必要となる。

<計算機による情報管理；品質保証システムの活用>

解析コード（データ変換ツールなども含む）や解析コードに付随する入出力データの計算機による管理は、米国のユッカマウンテンプロジェクトや WIPP などでも実施している。図 2.1.1-1, 2 は、それぞれユッカマウンテンプロジェクト、WIPP で採用された情報管理システムの概念を示す。図 2.1.1-1 の TDB (Technical Data Base) は、地質幾何学情報、熱力学データ、設計データなどが含まれている。また、RIB は Reference Information Base を示し、各データに付属する情報（平均値、標準偏差、単位、媒体など）が含まれている。図 2.1.1-2 の WIPP の情報管理システムでは、ドキュメント、解析コード、入出力データの管理が行われている。さらに、ドキュメントと入力データの関連性については、図 2.1.1-3 に示すような管理規定 (Form Number 464) を用いることにより、追跡可能性、再現性、回収可能性が確保されている。しかしながら、ここで示した管理方法については、データ取得⇒加工⇒パラメータ⇒データ作成⇒評価解析⇒後処理の一連の作業に対する計算機システムによる一貫した管理が実現できていない。地質環境、処分場設計、安全評価に係わる解析は、通常ワークステーション (EWS) を用いて実施し、その結果をパーソナルコンピュータ (PC) 上で図化処理される。この様な作業形態は、EWS、PC 間で情報の追跡が途切れる可能性が高いため、この点を配慮した品質保証システムを構築する必要がある。

(2)事業者（実施主体／電気事業者）による活用

実施主体（西暦 2000 年秋に設立予定）は、国が法的に進める制度の下で、あらかじめ手当てされた事業資金を計画的かつ合理的に支弁し、事業を確実かつ安全に遂行する責務を有する。また、本事業を進める法人として設立される実施主体は、事業の推進にあたり社会的信頼性を確保することが極めて重要であるため、所要の制度の下で設立以後、事業推進全体を通じて、情報公開、透明性確保等に十分配慮し、国民および地元からの信頼獲得することが求められる。西暦 2000 年に予定されている実施主体の設立以降、処分候補地の選定／処分候補地での調査／処分施設の概念設計／環境調査、予備的安全評価／処分予定地選定基準に対する適合性評価／土地取得などが考えられる。

(a)立地（候補地選定／予定地選定）

複数のサイトから候補地を選定する場合は、種々の要件（地質環境データに基づく長期的安定性、地下水特性、資源分布、社会学的要件など）を考慮した決定解析(Decision Analysis)が実施されるものと考えられる。米国 HLW 処分場の候補地選定活動においても決定解析が採用されている（例えば、S.Sinnock and J.A.Fernandez, Sandia National

Laboratories, Summary and Conclusions of the NNWSI Area-to-Location Screening Activity, SAND 82-0650, August 1982)。この文献では、処分候補地としてネバダサイト 15 ケ所の中から、ニッカマウンテンを選定した際の選定についてまとめたものであり、31 個の属性（断層密度、岩盤強度、水理条件、熱伝導率、資源分布、鉱物安定性など）に基づき系統的な評価を実施している。参考のため、15 ケ所のサイトを図 2.1.1-4 に、スクリーニング結果を図 2.1.1-5 に示す。わが国においても、国が規定する立地指針においてこのような手法が導入される場合は、数値地層処分システムに下記のツール、基幹データに加え品質保証の観点(Traceability, Transparency, Reproducibility, Review, Retrievability)から付属情報（単位／基幹データの分類方法／承認記録）の格納が必要となる。

- ・決定解析(Decision Analysis)ツール
- ・属性解析で対象とするデータ項目
- ・基幹データ／単位／基幹データの分類方法／承認記録
- ・決定解析(Decision Analysis)結果

米国における H L W 予定地選定（9 サイトから 5 サイトの絞り込み）では、候補地選定と同様の方法 (Decision Analysis) が採用されている (A Multiattribute Utility Analysis of Sites Nominated for Characterization for the First Radioactive-Waste Repository - A Decision-Aiding Methodology, DOE/RW-0074, May 1986)。本 Decision Analysis では、前記の解析ツールやデータに加え、シナリオ関連データ、環境評価解析ツール、入出力データ、社会学的属性や輸送に係わる属性（安全性）情報により、予定地として適切なサイトが選ばれる。

また、現地におけるデータ取得計画段階では、コスト低減を目的とした検討（例えば、Data Worth Analysis ; R.Allan Freeze, Hydrogeological Decision Analysis, Ground Water, Vol.28, No.5, 1990）が実施されるものと考える。本検討では、地質モデル、パラメータの不確実性モデル、コストデータなどが含まれる。

実施主体による今後の作業は、外部研究機関、エンジニアリングメーカーにおける実務作業を含め、データ取得・収集、解析コード、入出力データを対象とした一貫性のとれた品質保証プログラムを策定し、共通のフレーム内での作業を行い許認可において、成果の品質特性（例えば、SNL が主張している T 2 R 3 ; Traceability, Transparency, Reviews, Reproducibility, Retrievability）が確保されていないことによる出戻り作業が発生しないようにしておく必要がある（コストアップ要因の排除）。例えば、安全評価解析作業の品質特性（追跡可能性、再現性、データの回収可能性）を確保するための方法としては、サイクル機構が 2000 年レポート用の安全評価において、図 2.1.1-6 に示すような支援システム（性能評価解析支援システム CAPASA）を構築したことにより成功している。実施主体においても、このような計算機を用いたシステム導入を図ることにより、極めて

膨大な情報のハンドリングを可能とすることが考えられるため、事業化において寄与される。

処分施設の設計では、通常の工学システムの設計で採用されている手法（短期的な事象；～数十年）が採用されている。ここで言う手法とは、短期的な荷重（地震、強風、熱・機械的な衝撃）や長期的な荷重（数十年間にわたる自重、膨張）に対して、構造物に発生する応力・ひずみを重ね合わせたり、非線形性特性を考慮した個別現象モデルによる評価が主流となっている。また、複雑な体系（幾何形状、複合現象）に対しては、実規模試験体による確認や、そこで得られた情報に基づく経験式などにより、短期的な健全性評価が実施されている。数値地層処分システムでは、これら多岐にわたる作業の効率化や長期的な環境条件を配慮した設計を支援することが望まれる。これまでのサイクル機構からの聞き取り調査も踏まえ、処分場設計支援ツールとしては、以下のようなニーズがあるものと考える。

- ・設計者側が決めた人工バリア仕様が安全評価に耐えうるか否か（安全評価との統合）。
- ・低コストのセメント系材料を採用した際の影響度（性能評価モデルの統合、連成）。
- ・最適な人工バリア仕様の効率的な決定。
- ・地質環境データベースとの連携。
- ・安全解析の観点からの人工バリア仕様への要求事項の明確化。
- ・大規模3次元モデル化解析の効率的実施。
- ・地下施設の設計手法の確立。
- ・設計した地下施設に対する専門家の意見、批判への対応。
- ・人工バリア構成要素に関するデータベース構築など。

また、安全評価側からは、将来的な支援ツールとして以下のニーズがあるものと考える。

- ・シナリオ解析情報と性能評価モデル／コードの統合
- ・核種移行特性データベースとの連携。
- ・地質環境データベースとの連携。
- ・処分場設計データベースとの連携。
- ・安全裕度の定量化。

(b)情報公開／透明性促進活動

本活動において、現在サイクル機構が試みている取組みとして、地層処分研究総合評価システム及びGeofuture21が挙げられる。地層処分研究総合評価システム（図2.1.1-7参照）は今後とも、情報公開／透明性促進活動に役立つと考える。地層処分の長期的な変化については、現在サイクル機構が東海アトムワールド（1F）に設置している地層処分体験システムGeofuture 21を対象として、種々のシナリオに応じた数値地層処分システムの生成データを提供することにより実現できると考える。

(3)研究開発団体（サイクル機構）による活用

現段階において、処分事業の開始に際しサイクル機構の役割分担は明確となっていないが、規制者側の研究開発組織または申請者側の研究開発・主契約者として処分事業を実施する可能性がある。その場合には、前記「(1)規制者による活用」、「(2)申請者による活用」に記載された運用形態が適用されることとなる。ここでは、今後の研究の柱として掲げられている深地層研究施設計画やサイクル機構の知識情報の体系化、実施主体への技術移管を念頭に置いた数値地層処分システムの活用案について示す。

(a)深地層研究施設

深地層研究は、実際の深地層での体系的な調査研究を通じて、地層処分技術の実用化に資する研究開発を実施するものである。ここでは、サイクル機構が平成11年6月に公開した深地層の研究施設における研究計画（案）を参考に、数値地層処分システムの運用案について検討した。

1)施設設計

西暦2003年頃は、施設設計が実施されるものと考えられ、取得された調査データと地下施設設計ツールとの連携を取りつつ最適な施設設計（例えば、支保厚さ、坑道径の効率的な設定）を行うための支援システムが必要となる。また、この支援システムには、熱・水・応力などの連成モデル、ガス移行、セメント系材料の影響度試験などが、計画されていることから、複数現象（熱、水、応力、化学）の連成が柔軟に対応できるように配慮しておく必要がある。柔軟な連成機能を数値地層処分システムに持たせることにより、試験計画の立案（試験期間、測定のタイミング・要求精度）に利用することができ、データ取得後は、モデルの適用性検討ならびに確認解析を実施すると考えられる。

2)安全評価

深地層研究施設では、主に物質移行試験が予定されている。数値地層処分システムの運用案としては、地下施設で取得されたデータとモデル解析情報（入出力情報）の一元管理が考えられる。また、3次元的な地下水流动状況、物質移行状況の可視化を実測データやモデル解析データに基づき示すことなどが考えられる。さらに、水理・物質移行モデルだけでは、実測データが解釈できない場合も考えられるため、熱、ガス移行、化学現象などとの連成が柔軟に対応できるように配慮しておく必要がある。また、これらの連成が実現するまでは、科学的な定性的な考察を可視化することも肝要である。

(b)知識の体系化

サイクル機構の技術を実施主体に移管することを目的として、現在所有している技術資源（データ、解析ツール、文書情報）を統合化するものである。本統合化のイメージを、図 2.1-1 に示す。本統合化は、処分事業におけるサイクル機構の役割を広く国民や地元住民に理解していただくため、開示方法については、電子媒体だけでなく、種々のオプションを配慮しておく必要がある。

(c) 実施主体への技術移管

サイクル機構が所有している技術情報の実施主体への技術移管は、今後、手順／方法について検討されることが考えられる。技術移管のうち、解析コードやデータについては汎用性の高いシステムを開発することにより、処分事業のコスト低減に寄与することが考えられる。例えば、数値地層処分システムを広く普及されている PC などで利用可能となれば、実施主体からのシステムの利用が可能となり、計算機・ソフトウェアの購入などが不要になるとともに、時間の経過に伴い最新の情報を迅速に移管することができる。

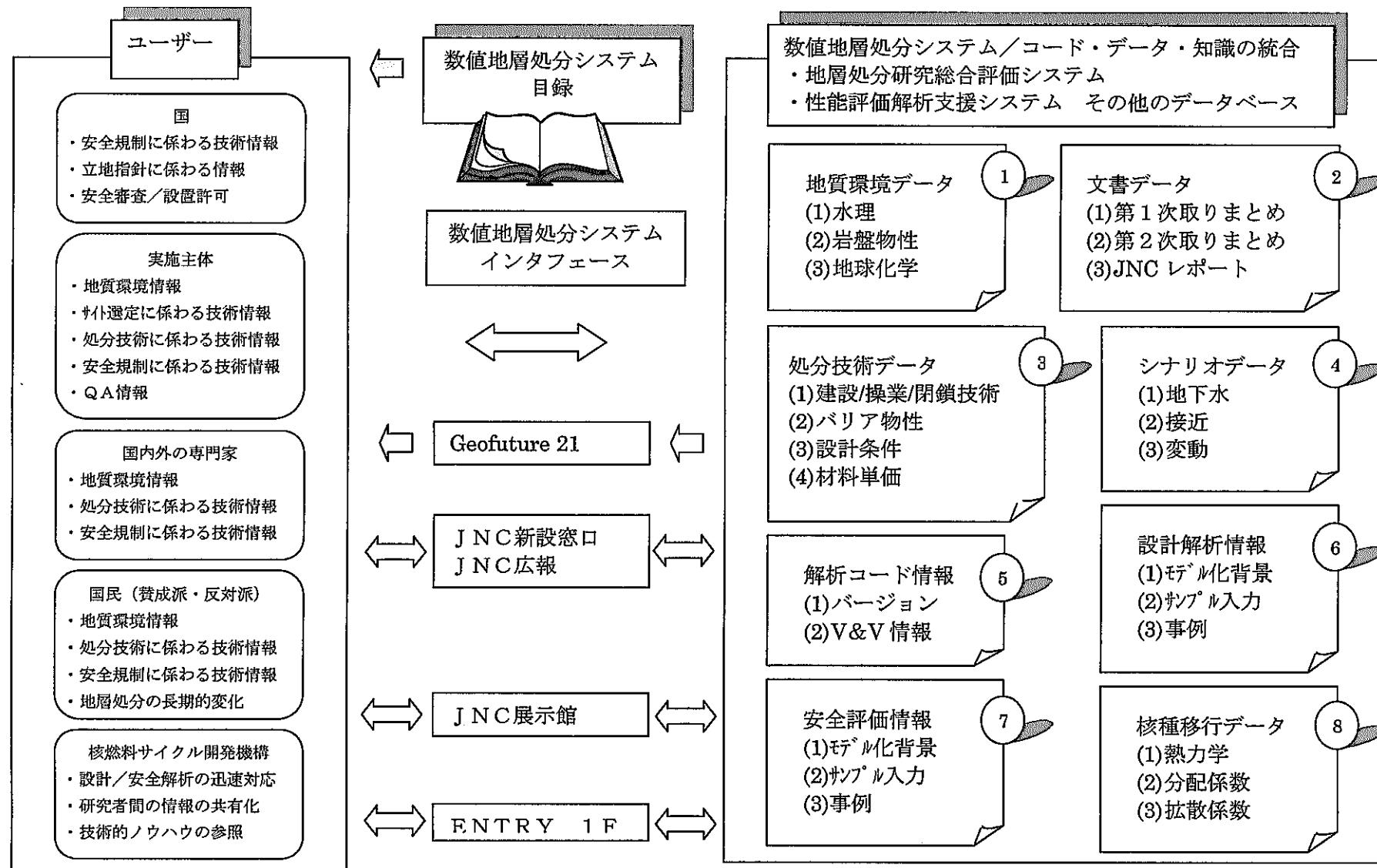


図 2.1-1 数値地層処分システムで取扱う情報とその活用イメージ

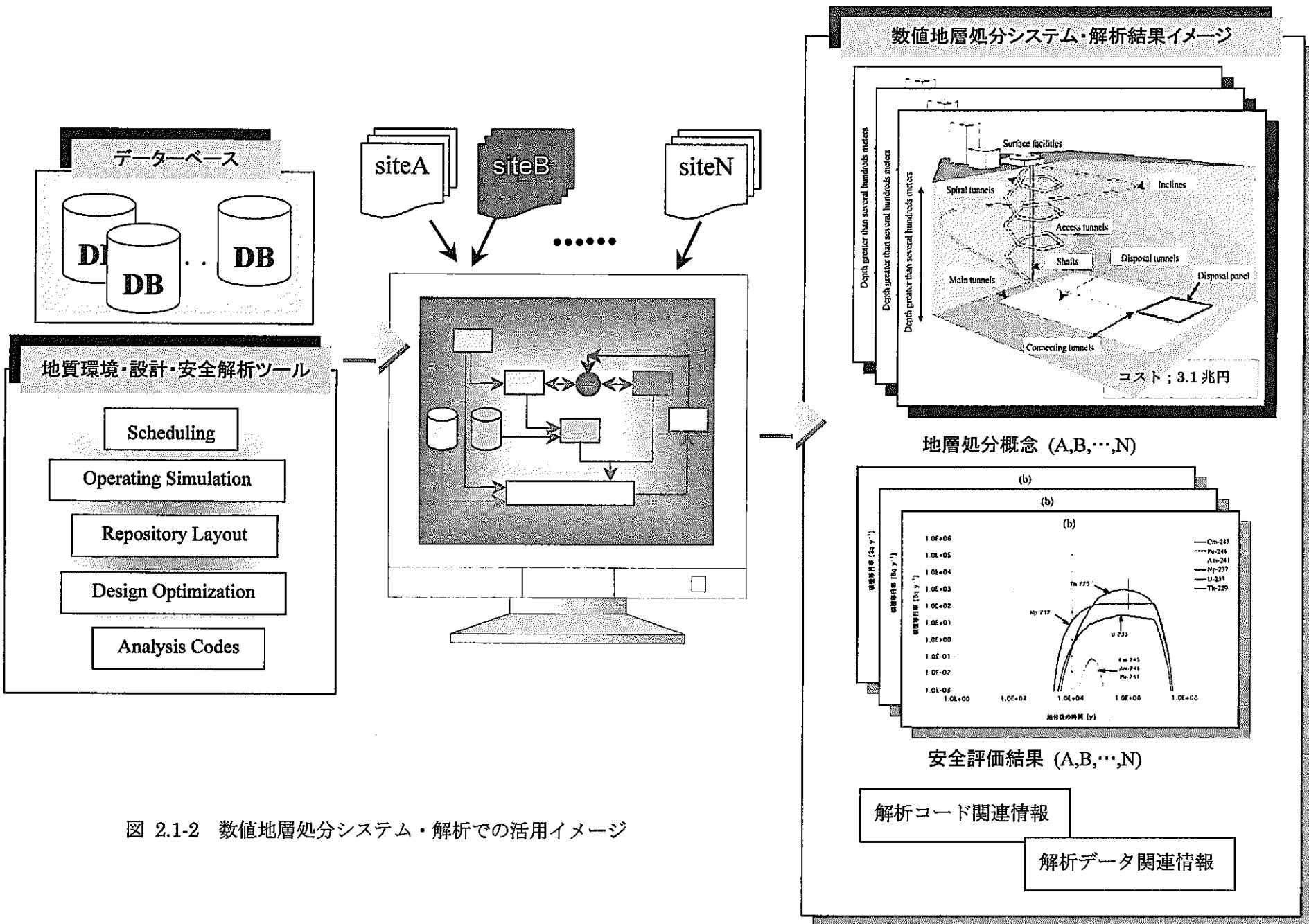


図 2.1-2 数値地層処分システム・解析での活用イメージ

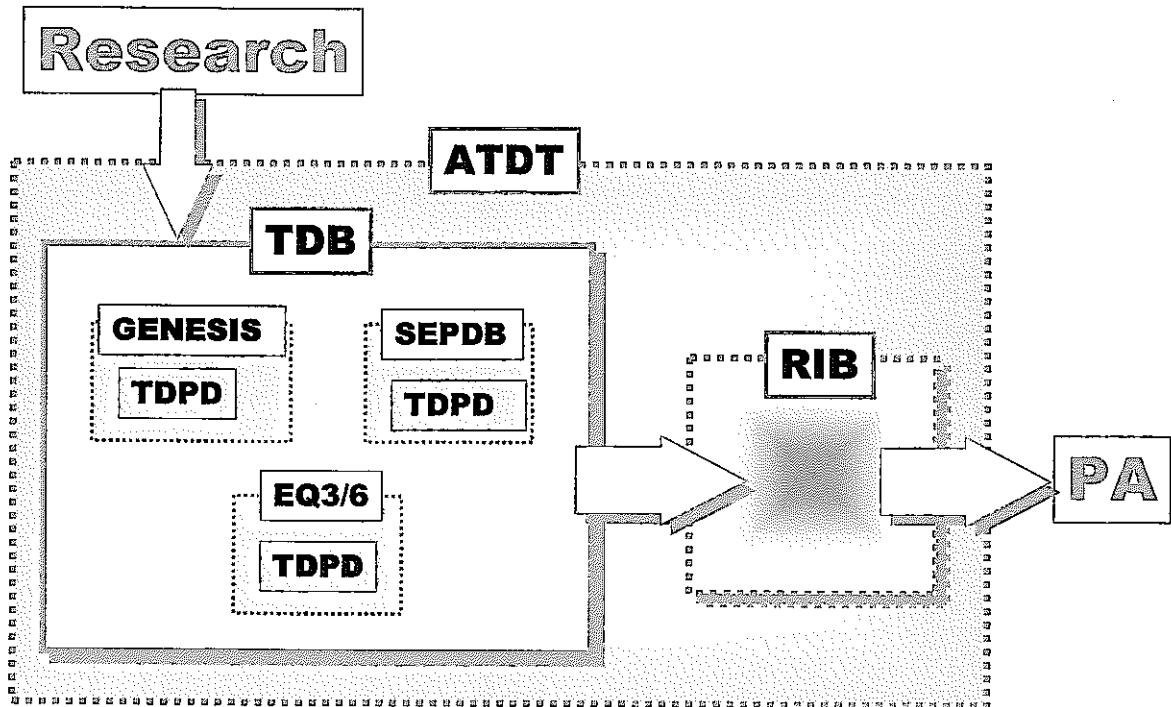


図 2.1.1-1 YMPにおける情報管理システムの概念
平成 9 年度サイクル機構向け「地層処分システム性能評価の品質保証に関する研究（II）」最終報告会 OHP 原稿抜粋

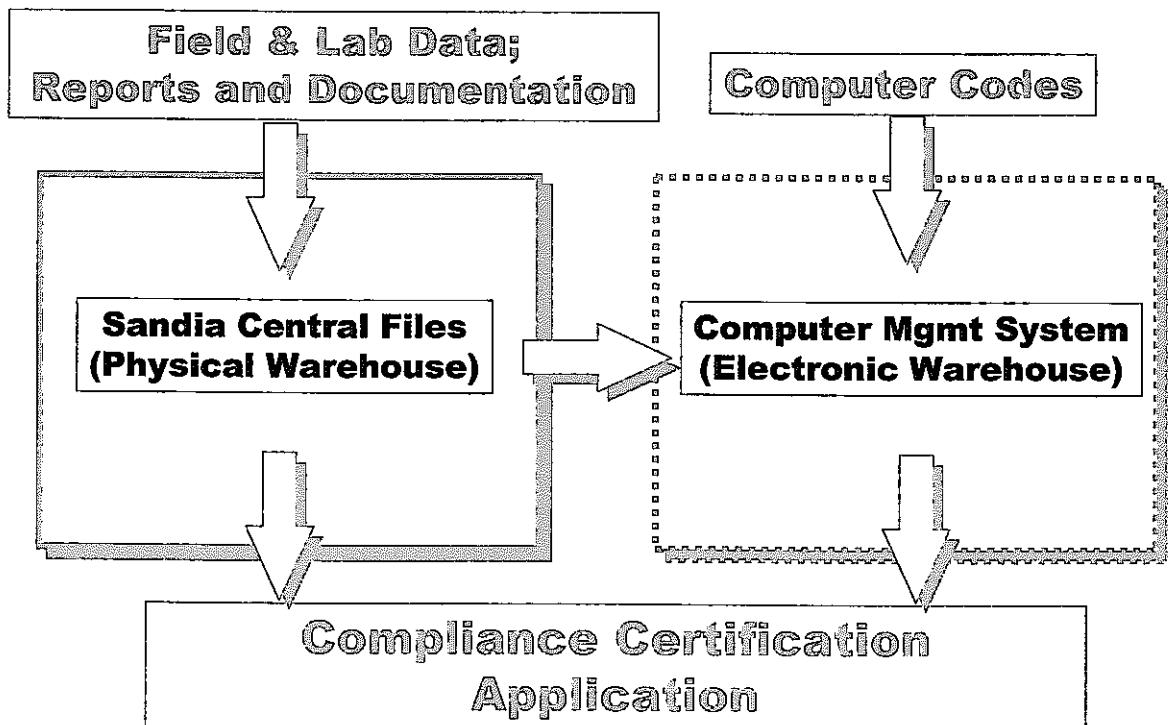


図 2.1.1-2 WIPPにおける情報管理システムの概念
平成 9 年度サイクル機構向け「地層処分システム性能評価の品質保証に関する研究（II）」最終報告会 OHP 原稿抜粋

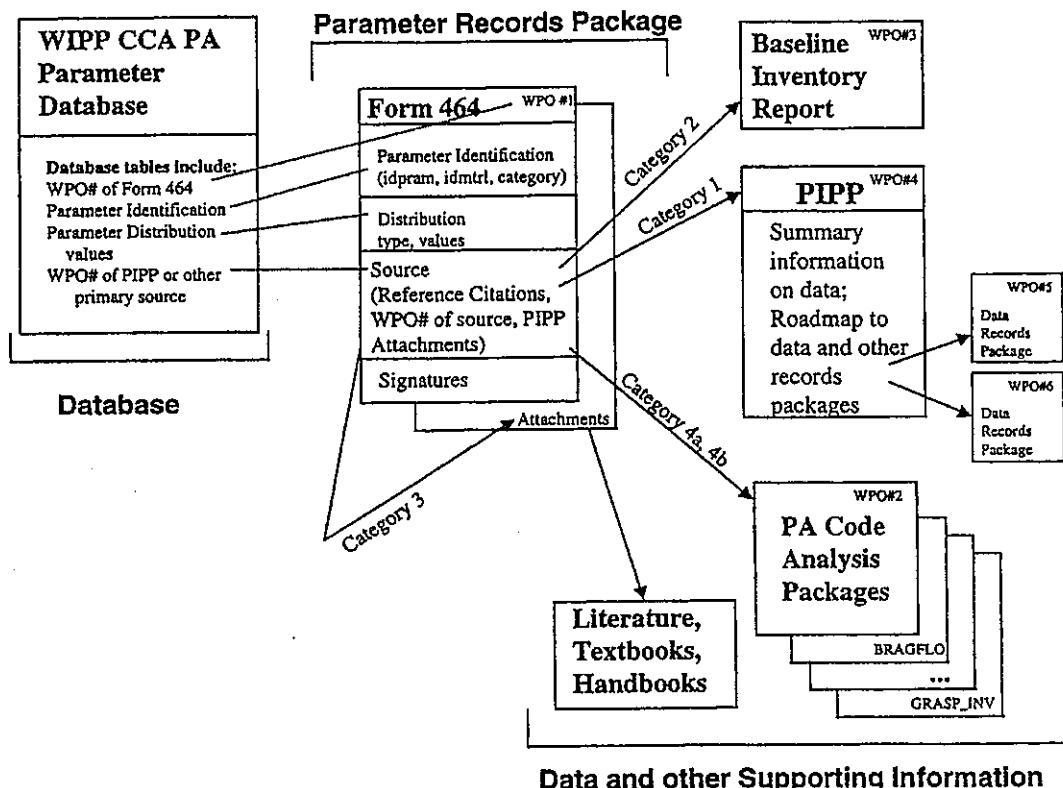
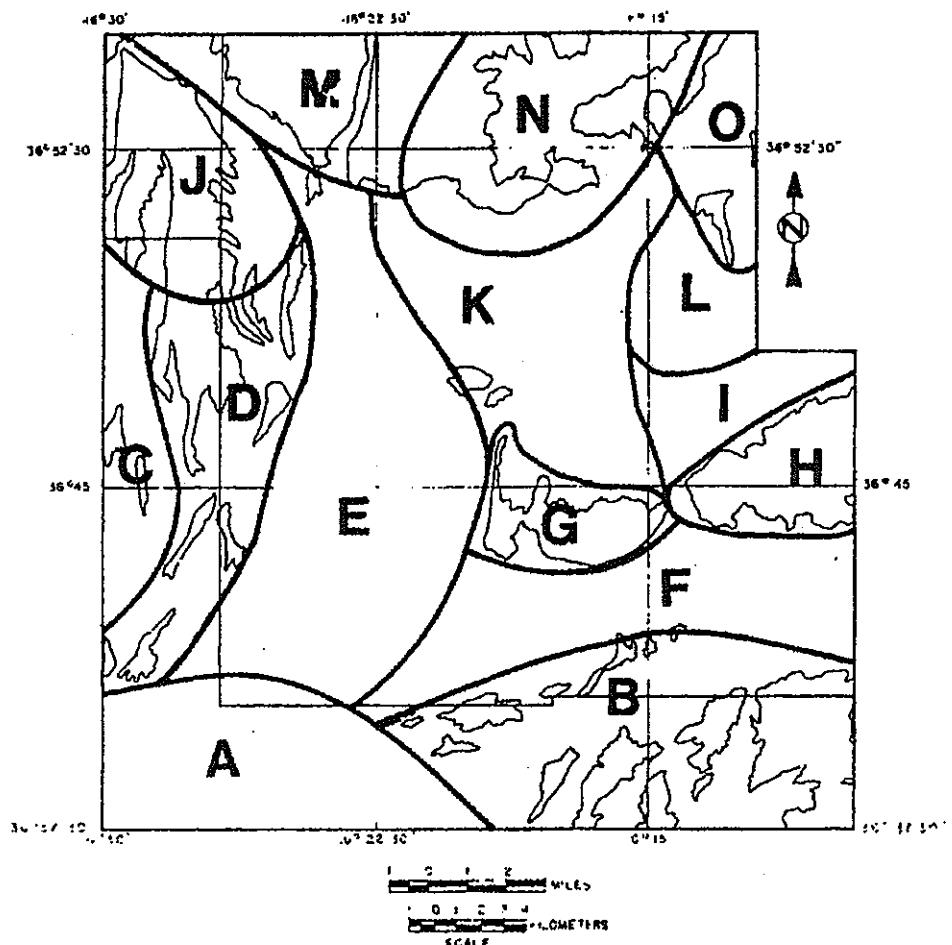


Figure 2. Parameter Records Package tracking system.

図 2.1.1-3 WIPPにおける性能評価用パラメータセットの品質保証・Form Number 464

Susan M.Howarth, WIPP Compliance Certification Calculations Parameters -Parameter Documentation-, The 8th Annual International High Level Radioactive Waste Management Conference and Exposition, 平成 10 年 5 月



ALTERNATIVE LOCATIONS

- | | |
|--------------------------------------|-----------------------------------|
| A AMARGOSA DESERT | H SKULL MOUNTAIN |
| B STRIPED HILLS-SPECTER RANGE | I EASTERN JACKASS FLATS |
| C EASTERN CRATER FLAT | J NORTHERN YUCCA MOUNTAIN |
| D CENTRAL-SOUTHERN YUCCA
MOUNTAIN | K CENTRAL JACKASS FLATS |
| E WESTERN JACKASS FLATS | L NORTHEASTERN JACKASS FLATS |
| F ROCK VALLEY | M YUCCA WASH-FORTYMILE CANYON |
| G LITTLE SKULL MOUNTAIN | N CALICO HILLS-UPPER TOPOPAH WASH |
| | O KIWI MESA-MID VALLEY PASS |

Figure 38. Approximate Boundaries of 15 Alternative Locations for Repositories in SW NTS and adjacent areas.

図 2.1.1-4 NNWSI(Nevada Nuclear Waste Storage Investigations)研究区域における 15ヶ所の候補地

S.Sinnock and J.A.Fernandez, Sandia National Laboratories, Summary and Conclusions of the NNWSI Area-to-Location Screening Activity, SAND 82-0650, August 1982

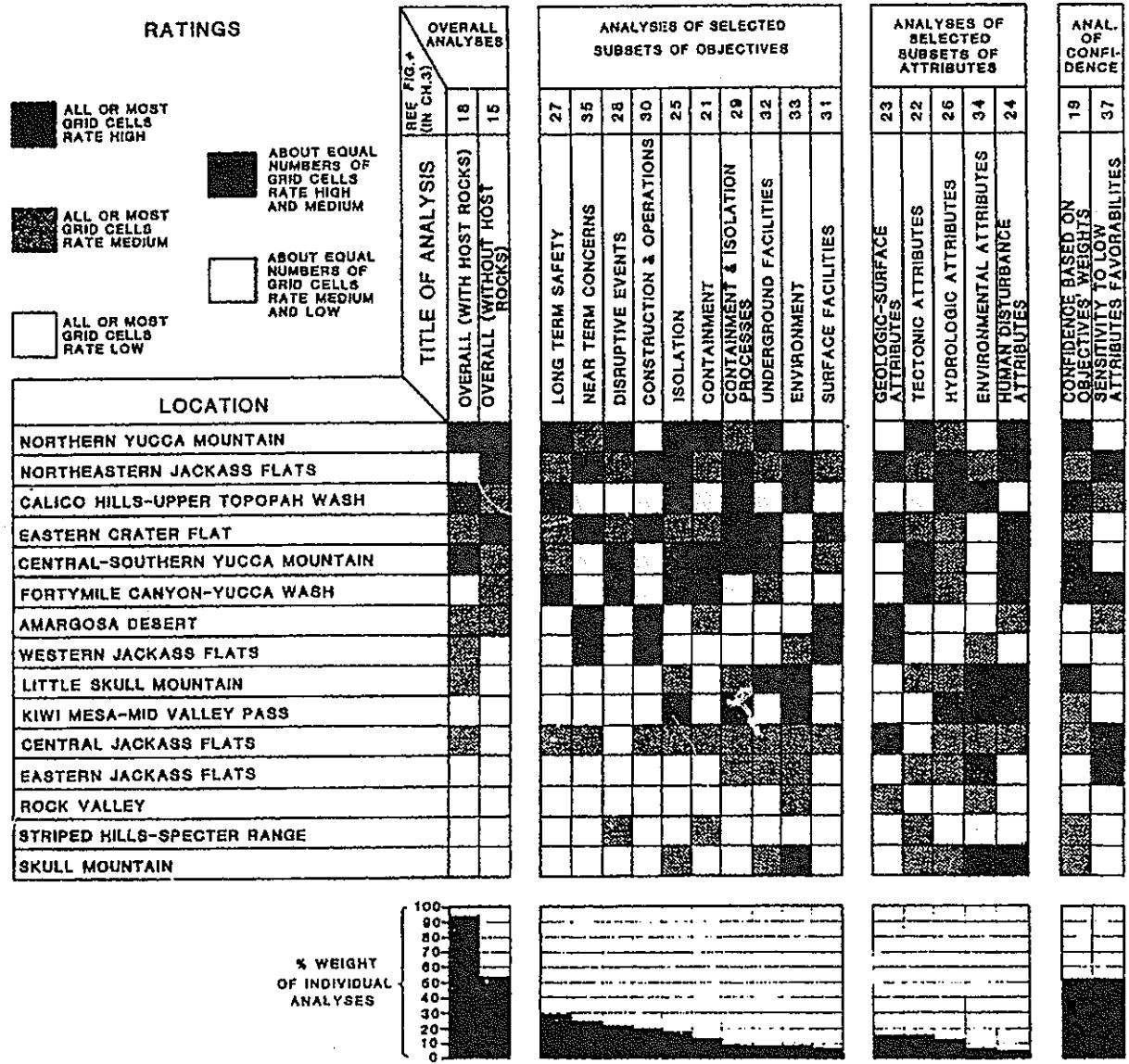


Table 9
Summary of Location Ratings

図 2.1.1-5 NNWSI(Nevada Nuclear Waste Storage Investigations)研究区域における 15ヶ所の候補地スクリーニング結果

S.Sinnock and J.A.Fernandez, Sandia National Laboratories, Summary and Conclusions of the NNWSI Area-to-Location Screening Activity, SAND 82-0650, August 1982.

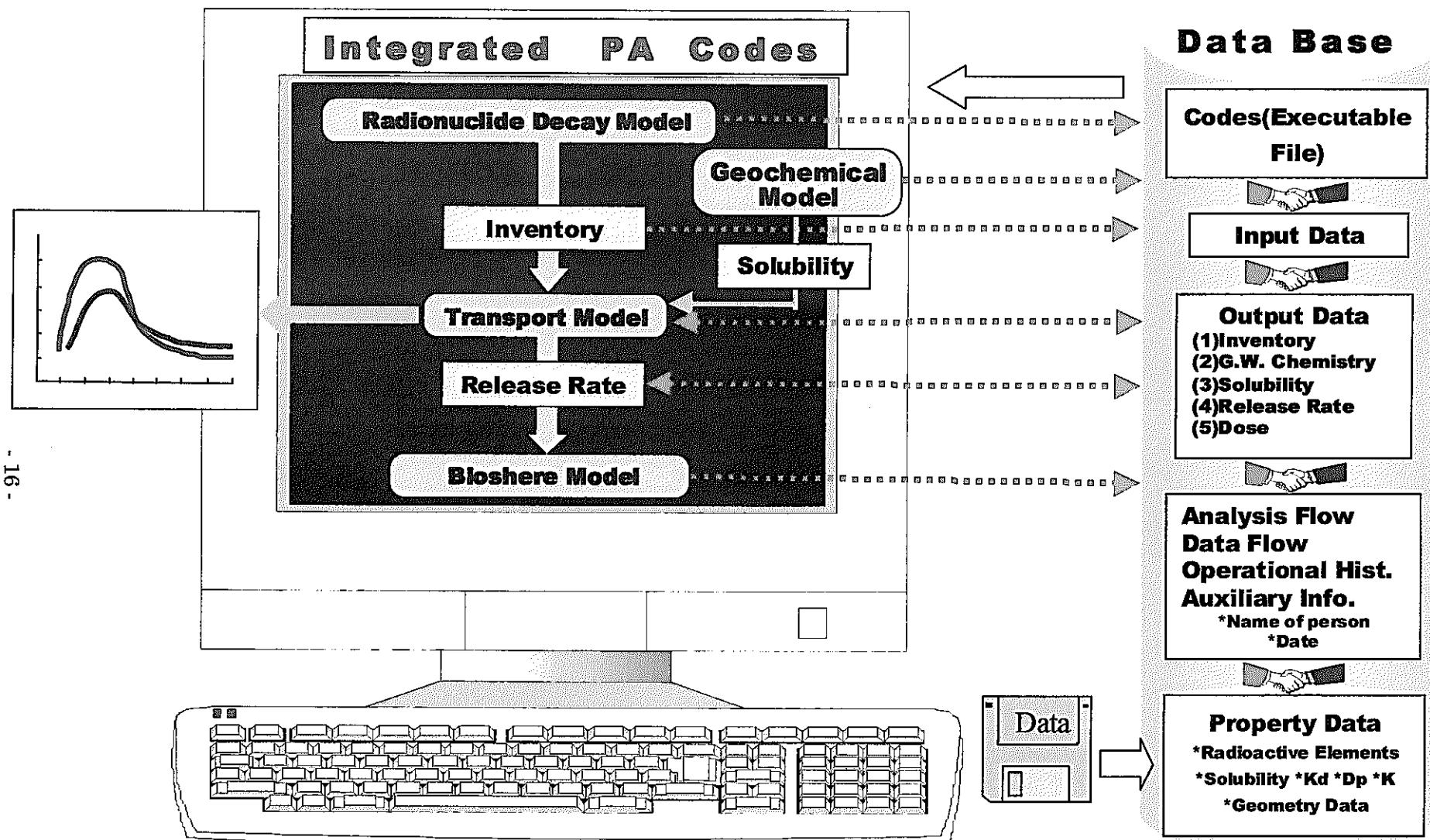


図 2.1.1-6 地層処分・性能評価解析支援システム (CAPASA) の概念

Atsushi Neyama, Yoshinao Ishihara, Hitoshi Makino, Shigeki Fusaeda, Hiroyuki Umeki, Katsuhiko Ishiguro, Takao Ohi, Kouji Mori, Shinichi Kataoka, Ichiro Yanagisawa, David H Lester, Michael B Gross, Sidney B Ailes, Quality Assurance Program with Computer-Oriented Management System for Performance Assessment, The 8th Annual International High Level Radioactive Waste Management Conference and Exposition, 平成10年5月14日

- ◆ 第2次取りまとめの技術的・科学的根拠となる基盤情報や参考文献を要約した技術メモ約1200件（平成11年6月現在），用いたパラメータなどの数値データ約20種類を階層的にデータベースとして統合
- ◆ 各情報毎に，文献名，著者，バージョンなどの品質情報も管理

→ ☆成果の追跡性，信頼性を向上

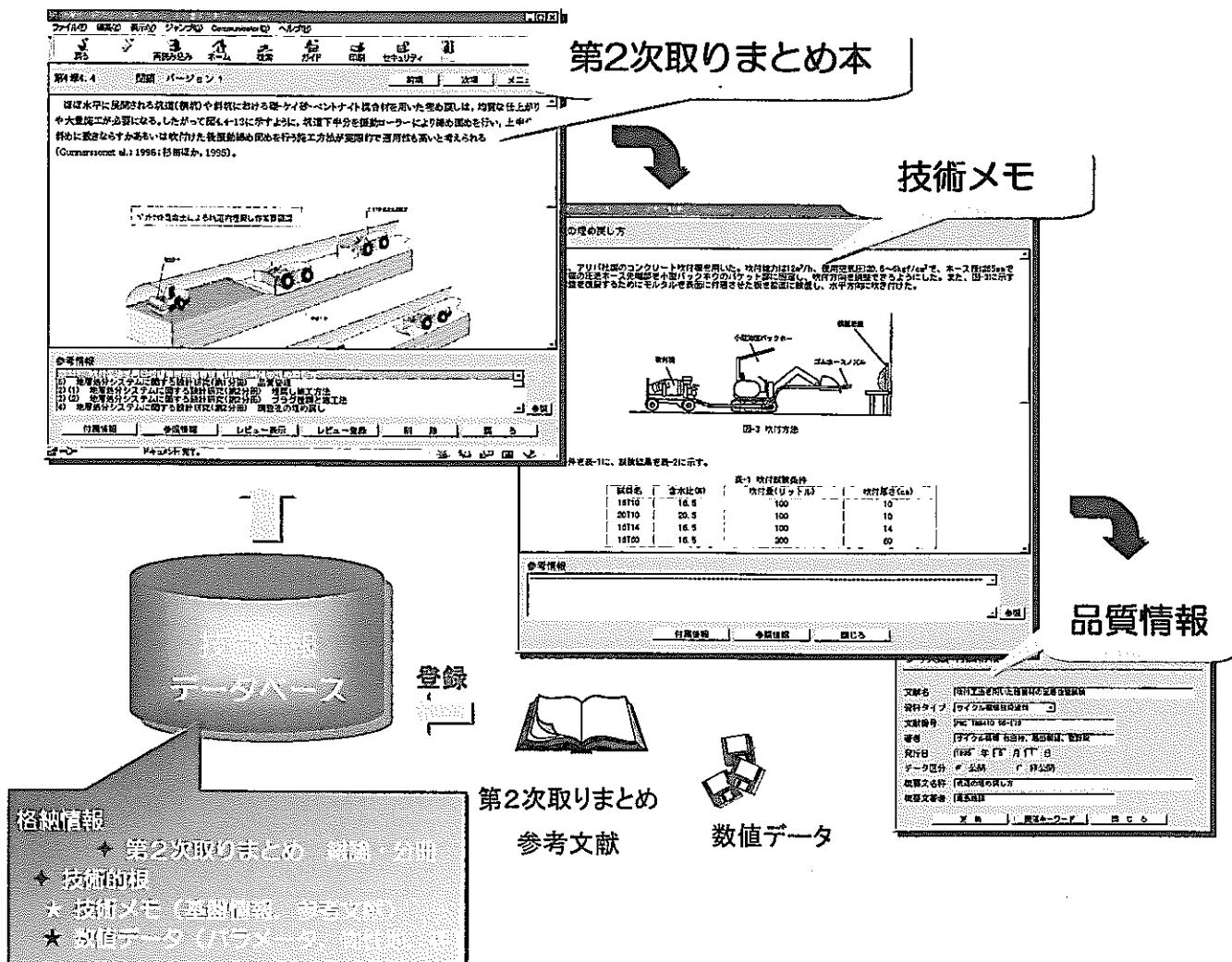


表 2.1-1 地質環境評価における数値地層処分システムへの要求

分類	テーマ	概要	数値地層処分システムへの要求	開発課題
統合化	処分予定地スクリーニング支援	処分候補地を対象としたスクリーニング支援（効率的かつ合意形成の確保）のためのシステムとして下記項目の評価機能を持つ支援ツールを開発する。これらの支援ツールを数値地層処分システム上に実現させることにより、スクリーニング手法や基準策定の確立に資する。 ・地質環境の視点に基づく評価（中期） ・処分技術の視点に基づく評価（長期） ・安全評価の視点に基づく評価（短期） ・社会的評価の視点に基づく評価（長期） ・総合評価（長期）	・処分場設計評価ならびに安全評価は、「処分場設計」で示した、処分場感度解析ツール、経済性評価ツールなどの枠組みを活用し、与えられた地質環境条件のもとで、安全性を満足したある程度最適な処分場設計の経済性を評価できるようにすること。 ・地質環境評価では、地質環境条件に関する情報から、スクリーニングのための指標を評価できること。 ・第3者からの情報入手、分析できる機能をもつこと。	・処分場設計や性能評価で課題としている感度解析ツールの開発と同様の事項 ・処分場設計で構築する予定の経済性評価ツールと同様の開発課題 ・地質環境の視点に基づくスクリーニングに手法 ・社会科学的評価に関する要素のデータ分析 ・開発した支援システムの適用性検討（検証）
統合化	サイト特性調査計画支援	サイト特性調査をコストミニマムで最大限の成果を上げるための下記項目を支援し計画立案を支援する。 ・サイト特性調査項目の絞り込み（中期） ・分析精度ならびに最適観測点の評価（中期） ・最適なサイト特性調査機器の選定支援（中期？） ・取得データの品質管理（短期） ・活動記録の保存（短期）	・調査計画で取得したデータは地質環境データベースに取り込むこと。 ・地質環境データベースには、取得データの品質管理に係わる情報を保持できること。 ・分析精度への要求を、安全評価ならびに処分場設計における感度解析からもとめられるようにすること。	・地質環境データベースの開発 ・安全評価及び処分技術における感度解析ツールの開発。 ・サイト特性調査機器選定支援システムの開発（知識ベースシステム） ・開発した支援システムの適用性検討（地下施設からのデータに基づく検証）
個別コード/ツール	測定精度の評価	サイト特性調査計画支援機能の一部（野外試験への適用が可能であり、サイクル機構のR&Dへ早期適用することも目的としている）（中期）	・分析精度への要求を、安全評価ならびに処分場設計における感度解析からもとめられるようにすること	・感度解析から要求精度評価ロジックの開発 ・評価ロジックの適用性確認
個別コード/ツール	最適観測点の評価	サイト特性調査計画支援機能の一部（野外試験への適用が可能であり、サイクル機構のR&Dへ早期適用することも目的としている）（中期）	・逆解析手法、統計学的処理、不確実性解析により最適なボーリング位置、必要ボーリング数を設定できること。	・最適化ロジックの開発 ・最適観測点評価手法の開発 ・最適化ロジックの適用性確認
データベース	地質環境に関するデータベースの開発	処分場設計、安全評価へのつなぎとなる地質環境データに関するデータベースを開発する。（短期）	・地理的条件、地質構造要素、岩盤物性、地下水特性、核種移行特性などの情報を、安全評価や処分場設計で活用するデータへ変換可能な次元、粒度で表現した、デジタル地質環境モデルを生成し、保持すること。 ・デジタル地質環境モデルから地質環境評価ならびに安全評価、処分場設計で使用するデジタルデータへの変換機能を有すること。 ・サイトで得られた測定データによるデータの拡張、更新が容易にできること。 ・サイト取得データからのデータの変遷を追跡できること。また、品質管理に関する情報を併せ保持できること。	・デジタル地質環境モデルの開発 ・データモデルの開発 ・データベース実装手法 ・データ変換アルゴリズム
個別コード	地質環境解析コードの開発	地下の物理的・化学的な時間・空間情報の把握や理解を目的とし、広域スケールを対象として、 ・地質環境支援：上記支援システムで扱う解析支援 ・安全評価支援：（シナリオ【隆起・沈降、火成活動、地震、資源生成】、妥当性事例の提供） ・過去や未来における地質環境の予測（P A） ・処分場設計支援：処分場スケールでの計算における初期応力場や地下水場の提供 ・処分場設計支援：処分場レイアウト設計のための地下水流动情報提供 ・モニタリング妥当性評価 などの解析が実現できるコードを開発する。（長期）	・地質環境データベースに登録された地質環境情報から自動的にデータ生成が可能であること。 ・ズーミングのアプローチにより広域から詳細解析への展開ができること。 ・既存の個別現象コード、簡易式の結果や文献情報により、アニメーションが作成できる様にすること。 ・3次元広域解析は、別途実施されている大型シミュレータからの結果を境界条件として受け取れること。もしくは連成解析が可能となるようにすること。 ・3次元広域解析の結果は、理解しやすい可視化手法により表現されること。 ・解析結果は性能評価あるいは処分技術での解析への接続が可能であること。 ・現実的な解析時間で広域スケールをカバーする解析が行えること。 ・地層ウォータースルーザーのためのコンテンツが生成できること。	・天然現象モデル選定・開発 ・気圧、地圧大規模シミュレータとのインターフェイス開発 ・メッシュジェネレータ ・解析の高速化 ・可視化手法 ・開発した解析コードの適用性検討（地下施設からのデータに基づく検証）

図中で【短期】は2003年頃まで、【中期】は2005年頃まで、【長期】は2008年頃までの実現目標であることを示す。

表 2.1-2 処分場設計における数値地層処分システムへの要求

分類	テーマ	概要	数値地層処分システムへ要求	開発課題
統合化	処分場設計方法論の開発 (処分場設計ツールとデータの統合)	処分場設計に必要な解析ツールならびにデータを研究の進展にあわせ取り込み、合理的設計に向けた設計要件、設計ロジック、解析手法をそのまま地層処分数値地層処分システム上に実現する。処分場設計手法の進展に応じてシステムのコード、データを改良させることにより、効率的な開発、実装、検証ならびに成果の公開を可能とする。 【短・中・長期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 設計要件、設計ロジックならびに各種設計コード、解析データ、解析手順の管理がシステム上で可能であること。 ・ 解析コードの新規作成、変更ならびに解析手順の変更が容易に可能であること。 ・ 解析コード、データの履歴管理が可能なこと。 ・ 設計情報（処分場の仕様）、設計に用いるデータ、設計基準を区別して管理できること。また、それらのデータの研究の進展に従った変遷を管理できること。 ・ 設計条件（地質環境データ等）から始まる一連の設計作業をシステム上で実行し、設計データを作成、保存、再現できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 解析コード、解析手順、データの一元管理のためのプラットフォーム ・ 処分場設計のための設計ロジックとそれに対応した設計コード群 ・ 処分場設計データベース（特に、設計情報だけでなく、設計解析に用いるデータ、設計基準などを体系的に格納できること）
個別コード／ツール 統合化	処分場設計最適化	開発の初期の段階では部分的な設計最適化を目指し、最終的には経済性ツール、性能評価解析などと組合せ安全性と経済性の観点からシステム全体としての最適化を目指す。 【短・中・長期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 最適化ツールにより得られた処分場設計を、処分場設計データベースに一括登録できること。 ・ 経済性評価ツールとの連携が取れること。 ・ 安全評価感度解析ツールとの連携が取れること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 最適化ロジック（坑道間距離と廃棄体ピッチのロジック等） ・ 数理的あるいは知識工学的手法によるシステム開発
個別コード／ツール	処分場自動レイアウト	地質環境条件（地質構造要素、力学的条件、水理）を用い、処分場設計にて定められた設計条件から処分場パネル、坑道の自動レイアウト設計を行う。 【短・中・長期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 3次元デジタル地質環境モデルとの連携を図る。 ・ 自動レイアウトの結果をそのまま3次元レイアウト情報に変換し、処分場設計データベースに登録できること。 ・ 自動レイアウトに必要な制約条件は処分場設計データベースから自動生成できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 自動レイアウトのためのロジック開発 ・ 知識工学的手法によるシステム構築
個別コード／ツール	スケジューリング	処分場の調査・建設、操業、閉鎖などの各段階における計画作成支援の為のツールを開発する。 【短・中・長期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 調査・建設、操業、閉鎖における作業計画を、現実的な時間で求め、その結果を処分場設計の判断支援や経済性評価のための入力として活用できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 計画（スケジューリング）ロジック（問題の定式化） ・ 知識工学的手法によるシステム構築
個別コード／ツール 可視化	操業シミュレーション	処分場の操業時の作業性を確認するために、ヴァーチャリティを用いた地下施設における操業手順のシミュレーションシステムを開発する。 【中・長期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 処分場における操業プロセスを現実感あふれる画面で模擬できること。 ・ 処分場設計データベースからデータの自動生成できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 操業プロセス模擬のための表現方法、入力方法、評価方法
個別コード／ツール	処分場スケールでの解析	処分場の仕様を設定することを目的として、処分場スケールでの設計解析（熱・力学・水理）を実施できること。 【中期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ データ作成を処分場データベースに登録された処分場レイアウトなどから自動生成できること。 ・ 現実的な計算時間で結果が得られること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 自動データ生成 ・ 解析コードの高速化
個別コード／ツール 統合化	処分場設計感度解析	処分場設計における主要パラメータの安全評価、経済性評価への影響を自動的に評価するツールを開発する。 【短・中・長期】 処分場設計者が簡易に性能評価を可能とすること。 【短期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ リファレンスからの設計変更の影響を評価できること。 ・ さらに、自動設計と組合せ、一部の設計変更やデータ変更などのシステム全体への影響（安全、経済性）を評価可能であること。 ・ 性能評価における感度解析ツールの整備が必要である。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 処分場自動設計ツール（基本計画程度） ・ データ自動作成 ・ 複数の解析の自動実行、自動評価
統合化	経済性評価ツール	処分場設計データベースに格納された設計結果から処分場コストを評価するツールを開発する。 【短・中期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 処分場設計データベースの情報を用いて評価できること。 ・ 設計レベル（概念、基本、詳細）に応じた評価が可能であること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 経済性評価手法
個別コード／ツール 高速化 可視化	健全性評価コードの高度化、高速化	下記の現象解析について関して、モデルの精緻化、三次元化と効率化を目的として高速化を図る。 【中期】 <ul style="list-style-type: none"> ・ 再冠水時的人工バリア挙動解析 ・ 耐震安定性解析 ・ 長期構造健全性解析 ・ ガス移行評価解析 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 現実的な計算時間で結果が得られること。 ・ ブラックボックス化を防ぐため、計算の途中結果の確認機能、計算結果のインターラクティブな可視化などの機能を取り入れること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 現象解析モデルの高度化仕様 ・ FEM、FDMコードの高速化 ・ コード開発（3次元化） ・ インタラクティブな可視化機能 ・ 可視化手法
データベース	処分場設計に関するデータベース	処分場設計の結果、設計に用いるデータ、基準などの情報を体系的に格納できるデータベースを開発する。 【短・中期・長期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 将来の処分場建設までの長期にわたり使用可能な設計であること。（研究開発から処分場閉鎖、それ以降も） ・ 段階的な開発を前提とすること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ データモデル ・ データベース実装手法
データベース	3次元地質環境モデル (地質環境データベースの一部)	処分場設計向けの地質環境条件を格納したデータベースを開発する。 【中期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 処分場設計との連携（自動的なデータ受け渡し）が取れること。 ・ サイトで得られた情報によるデータの拡張が可能であること。 ・ 生データから設計データまでのデータの変遷が追跡できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ データモデル開発（広域の3次元情報の扱い） ・ データベース実装手法
高速化	並列処理向け汎用有限要素法コードの開発	処分場設計で特に計算量の大きな解析は、主に有限要素法を用いた非線形、非定常解析である。これらの解析時間短縮を図るべく並列処理汎用有限要素法コードを開発する。 【中期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 現状のモデルで計算時間は500時間程度かかっていることを考慮すると、実質的な計算速度を3桁以上向上させる必要がある。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 処分場で対象とする現象に合わせた有限要素法開発仕様の策定 ・ それに基づくコード開発
可視化	設計情報の可視化	処分場が地下施設であり、かつ空間的拡がりが大きいことから、処分場の設計において、可視化による表現が必要である。（PAの観点からも） 【中期】	<ul style="list-style-type: none"> ・ 処分場設計データベースの内容から、自動的に処分場ウォークスルーのコンテンツを生成できること。（設計のレベルに応じて） ・ 地層処分擬似体験シミュレータへのデータ提供ができること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 可視化シナリオ ・ 自動データ作成のアルゴリズム

図中で【短期】は2003年頃まで、【中期】は2005年頃まで、【長期】は2008年頃までの実現目標であることを示す。

表 2.1-3 性能評価における数値地層処分システムへの要求

分類	テーマ	概要	数値地層処分システムへの要求	開発課題
統合化 個別コード／ツール 高速化	安全評価手法の確立に向けた解析支援	性能評価に関する様々なシナリオ、モデル、データを用いた解析・評価を容易に行うことができる解析プラットフォームを開発する。「サイクル機構／短期」	<ul style="list-style-type: none"> ・解析コード、データをはじめとした各種ツールをシステムに容易に取り込むことができ、研究開発の進展に応じた解析手法の進化に柔軟かつタイムリーに対応できること→独自のモデルチェインを作成したり、複数の解析コードを用いた連成解析を容易に行うことができる。 ・安全評価手法（方法論）の開発と関係する全ての情報をシステム内に管理できること。 ・シナリオに関する情報と連携がとれること。 ・現実的な計算時間で結果が得られること。 	<ul style="list-style-type: none"> ○ 安全評価手法（方法論）の開発 ● 安全評価手法の確立に係わる情報を管理するためのロジック開発 ● 統合化プラットフォームの開発 ● データベース開発 ● 解析の高速化
統合化 個別コード／ツール 可視化	数値実験シミュレータ	高温・高圧などの過酷環境下や長期間にわたる現象など、室内試験等により実現困難な試験系の数値シミュレーションを支援する解析プラットフォームを開発する。「サイクル機構／長期」	<ul style="list-style-type: none"> ・各種試験系のシミュレーションモデルをシステムに容易に取り込める。 ・シミュレーション結果を分かり易く示すこと。 	<ul style="list-style-type: none"> ○ 各種試験系シミュレーションモデルの開発 ● シミュレーションに関する情報を管理するためのロジック開発 ● 可視化手法の開発
統合化	地質環境／処分場設計との統合	地質環境や処分場設計に係わる情報ソースと連携した統合支援環境を構築する。三次元的情報をもつ地質環境データや設計データより、性能評価モデル等を半自動的に作成する。「サイクル機構／短期」	<ul style="list-style-type: none"> ・解析/評価に用いた諸情報と地質環境データおよび設計データとの連携がとれること。 ・処分施設の3次元的情報から任意の水理/核種移行解析モデルを作成できること。 ・各種ツール（例えば、最適化ツール）との連携がとれること。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 統合化プラットフォームの開発 ・次元の異なるジオメトリ間のインターフェイス機能の開発 ● データベース開発
統合化	不確実性解析・感度解析	統合化された地質環境データと処分場設計データに基づき、性能評価パラメータの不確実性を考慮した感度解析を効率的に行うドライバ機能を開発する。「サイクル機構／短期」	<ul style="list-style-type: none"> ・地質環境データ、処分場設計データと連携し、性能評価に関する感度解析ができる。 ・不確実性解析に利用可能なサンプリングツールをシステム内に有すること。 ・現実的な計算時間で結果が得られること。 ・解析の経過を適時確認できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ・サンプリングツールの開発、整備 ● 統合化プラットフォームの開発 ● 解析の高速化 ● 解析経過のインターラクティブな表示機能の開発 ● データベース開発
統合化 個別コード／ツール	コード開発業務のインテリジェント化	研究開発の効率的促進と資源の有効活用を目的とし、解析コードの設計・開発や品質保証を行うためのインテリジェントな支援環境を構築する。「サイクル機構／長期」	<ul style="list-style-type: none"> ・新規解析モデル／コードが効率的に開発できること。 ・例えば、以下に示す解析コードのライフサイクルを考慮したインテリジェントな品質保証システムとしての役割をもつこと。 <ul style="list-style-type: none"> 一設計、製作・実装 一検証・確証 一運用、構成管理 ・全ての解析コード／モデルが体系的に管理できること。 ・シナリオとの連携が容易にとれること。 	<ul style="list-style-type: none"> ● インテリジェント化ロジックの開発 ● 品質保証ロジックの開発 ● 知識ベースの開発 ● データベースの開発 ● 統合化プラットフォームの開発
統合化	安全評価指針に係わる情報管理	国により策定された安全評価指針の内容や引用の出典、改訂履歴などを管理できる環境を構築する。「国／中期」	<ul style="list-style-type: none"> ・安全評価指針の策定に係わる全ての情報を体系的に一括管理できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ○ 安全評価指針のロジック開発 ● データベースの開発
統合化	安全評価解析の支援	事業申請に係わる安全評価解析を効率的に行うためのプラットフォームを開発する。国の規制動向やサイクル機構の研究成果等を対応付けることができる解析支援環境としても機能する。「実施主体／短期」	<ul style="list-style-type: none"> ・シナリオとの連携が容易にとれること。 ・安全評価指針との連携が容易にとれること。 ・品質保証の観点から、安全評価解析に係わる全ての情報を体系的に管理できること。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 統合化プラットフォームの開発 ● データベースの開発 ● 品質保証ロジックの開発
統合化 個別コード／ツール 高速化 可視化	シミュレーションツール	多方面の研究成果を統合し、地層処分システムを忠実に構築することができる共通の枠組みを開発する。多数の解析コードやデータを統合し、様々な天然事象を含めたリアルスティックなシナリオのシミュレーションツールとして活用する。「その他／長期」	<ul style="list-style-type: none"> ・各種シミュレーションモデルをシステムに容易に取り込める。 ・地質環境データと処分場設計データに基づき、数値地層処分システムの構成（場）を容易に定義できること。 ・様々な研究分野の情報を体系的に管理し、それらを共有化できること。 ・複数の解析コードを用いた連成解析が行えること。 ・シミュレーション結果を分かり易く示すこと。 ・現実的な計算時間で結果が得られること。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 統合化プラットフォームの開発 ○ 各種シミュレーションモデルの開発 ● プレポスト処理システムの開発 ● 可視化手法の開発 ● 解析の高速化 ● データベースの開発

概要に併記した「短期」は 2003 年頃まで、「中期」は 2005 年頃まで、「長期」は 2008 年頃までの実現目標であることを示す。また、開発課題に併記した「●」は数値地層処分システムとしての課題、「○」は地層処分研究としての課題、「・」は時間をかけなければできる程度の課題を示す。

表 2.1-4 社会的合意形成における数値地層処分システムへの要求

分類	テーマ	概要	数値地層処分システムへ要求	開発課題
個別コード/ツール	地質環境解析コードの開発	P A全般：地質環境の長期的な安定性について理解してもらうため、過去から未来の地下環境変遷を、解析ならばに既存情報により可視化する。 <ul style="list-style-type: none">既存の個別現象コードや簡易式の結果に文献情報を加えたアニメーションを表示する。(短期)複合現象モデルの開発、コード開発を行い、大規模な数値解析を行う。(長期)	<ul style="list-style-type: none">既存の個別現象コード、簡易式の結果や文献情報により、アニメーションが作成できる様にすること。3次元広域解析は、別途実施されている大型解析コードからの結果を境界条件として受け取ることができること。もしくは連成解析が可能となるようにすること。固体、流体、気体について夫々元素の属性を割り当て、異なる色、形状、音の特性が与えられる様にすること。	<ul style="list-style-type: none">天然現象モデル選定既存の個別現象コード、簡易式の結果や文献情報の統合化気圈、地圏大規模解析コードとのインターフェイス開発天然現象モデル選定・開発可視化
個別コード/ツール	処分技術解析コードの開発	P A全般：処分施設の安全性や人工バリア構成要素（ガラス固化体、オーバーパック、緩衝材）の長期的な安定性を理解してもらうため、地下環境下での状況を可視化する。 <ul style="list-style-type: none">処分場設計データのアニメーションを表示する。(長期)既存の個別現象コードや簡易式の結果に文献情報を加えたアニメーションを表示する。(短期)複合現象モデルの開発、コード開発を行い、大規模な数値解析を行う。(長期)建設、操業時の作業状況や事故が起こった場合の安全性を視覚的に示す。(長期)	<ul style="list-style-type: none">既存の個別現象コード、簡易式の結果や文献情報により、アニメーションが作成できる様にすること。個別現象コードの連成が出来る様にすること。処分場設計データベース（建設、操業）の中から、自動的に処分場ウォークスルーのためのコンテンツを生成できること。ただし、短期的に実現させるためには、平成9年度の数値地層処分システムの成果が取り込める様にすること。固体、流体、気体について夫々元素の属性を割り当て、異なる色、形状、音の特性が与えられる様にすること。	<ul style="list-style-type: none">ガラス固化体については、固化体生成時からの変遷（溶融状態、中間貯蔵冷却状態、輸送、定置、処分）プロセスについて表示するため、モデル解析や文献情報の統合化が必要柔軟なモデル統合化環境の開発可視化（損傷については幾何形状の変位、腐食については幾何形状の膨張変位や腐食生成物の色、変質については色と空隙構造の変化について示す。）
個別コード/ツール	数値地層処分システム安全評価解析	P A全般：長期的安全性を理解してもらうため、地質環境解析コード（天然事象、地質環境データ）、処分技術解析コードからの情報に基づき、超期間の核種移行解析を可視化する。また、天然原子炉による状況を可視化する。 <ul style="list-style-type: none">地質環境アニメーションに既存の核種移行解析結果を統合する。(短期)地質環境解析コード、地下施設解析コード、に核種移行モデル機能を統合する。(長期)天然原子炉に関する公開情報に基づき、地層の変遷や核種移行挙動のアニメーションを表示する。(短期)	<ul style="list-style-type: none">地質環境のアニメーション結果に容易に核種移行解析結果が取り込める様にすること。個別現象コードの連成が出来る様にすること。固体、流体、気体について夫々元素の属性を割り当て、異なる色、形状、音の特性が与えられる様にすること。	<ul style="list-style-type: none">3次元核種移行解析コードの開発柔軟なモデル統合化環境の開発可視化
個別コード/ツール	複合現象解析コードの開発	P A専門家：現象メカニズムの理解度や安全評価基準・技術基準で設定した係数根拠を示すため、モデル開発を行い試験の再現結果や試験結果を示す。 <ul style="list-style-type: none">試験条件の表示、個別現象モデルによる解析結果、測定結果について表示する。(短期)複合現象モデル、精緻なモデルの開発を行う。(長期)	<ul style="list-style-type: none">固体、流体、気体について夫々元素の属性を割り当て、異なる色、形状、音の特性が与えられる様にすること。個別現象コードの連成が出来る様にすること。	<ul style="list-style-type: none">柔軟なモデル統合化環境の開発
個別コード/ツール	経済性評価ツールの開発	P A一般：処分事業推進に関する情報公開を目的として、処分費用に関する項目や費用について表示する。 <ul style="list-style-type: none">実現性成果の表示方法（短期・長期的）	<ul style="list-style-type: none">設計情報（幾何形状を表示する座標）と費用の関連性を持たせること。	<ul style="list-style-type: none">可視化
データベース	地層処分研究総合評価に関するデータベースの高度化	P A一般：第一次取りまとめレポート、第二次取りまとめレポート、関連技術資料、内部資料など多量の文書・数値データの中から、必要な情報を効率的に抽出するため、以下に示す種々の機能に対応すべく既存システムの高度化を行う。 <ul style="list-style-type: none">公開に相当するテキスト・数値データの抽出方法データの信頼性に関するテキスト情報の抽出方法	<ul style="list-style-type: none">テキストマイニングの機能を持つこと。	<ul style="list-style-type: none">可視化

概要に併記した「短期」は 2003 年頃まで、「中期」は 2005 年頃まで、「長期」は 2008 年頃までの実現目標であることを示す。また、開発課題に併記した「●」は数値地層処分システムとしての課題、「○」は地層処分研究としての課題、「・」は時間をかけなければならない程度の課題を示す。

表 2.1-5 数値地層処分システムの地層処分事業への運用案（西暦 2003 年度の運用開始）

利用者	活用項目	必要性	運用形態	数値地層処分の運用メリット
規制者(国)	立地指針の策定	処分予定地を選定するための方法論を確立するためには、地質環境データ、設計・安全評価解析コード、種々のデータを統合した上で、短期的に選定評価を行うためのシステムが必要。	①インターネット(立地支援システム)	①立地指針策定の効率化 ②立地指針の信頼性向上
	処分候補地選定に対する確認	実施主体の選定した候補地が適切であるのか否かを適切に確認するためには、実施主体と同等のツールを整備しておくことが必要。	①インターネット(立地支援システム)	①確認作業の効率化 ②確認作業の信頼性向上
申請者 (実施主体)	立地	複数候補地から、予定地を選定するためには、地質環境データ、操業・処分後の安全性、経済性に関する膨大な情報を統合化した上で、短期間に意志決定を支援するためのシステムが必要。	①インターネット(立地支援システム、品質管理システム)	①立地作業の効率化 ②立地作業の信頼性向上
	情報公開／透明性促進活動	事業内容、事業経過を広く国民各層に普及させるためには、情報管理システムや事業内容を分かりやすく示すためのシステムが必要。	①インターネット(地層処分研究総合評価システム；JNC 殿提供) ②ミュレータ(地層処分体験システム；JNC 殿提供)	①情報普及の促進 ②社会的合意形成の促進
研究開発団体 JNC 殿	深地層研究施設	他セクションで取得・所有しているデータの受取、複数コードを用いた解析作業を効率的に行うためには、評価解析を支援するためのシステムが必要。	①インターネット(統合化解析支援システム、品質管理システム)	②効率的試験計画の策定 ③設計作業の効率化 ④設計手法の確立 ⑤安全評価モデル信頼性向上
	知識の体系化	JNC 殿が所有している情報(試験、解析関連データ)を、広く普及させるためには、加工されたデータのみならず、生データからのプロセスに係わる情報を管理するためのシステムが必要。	①地層処分研究総合評価システム ②地層処分体験システム ③情報基盤センター(インターネット、インターネット JNC 殿広報・窓口・電話)	①情報普及の促進 ②技術情報の共有化 ③実施主体へ効率的技術移管 ④社会的合意形成

2.1.2 数値地層処分システムの要求機能

数値地層処分システムは、高レベル放射性廃棄物地層処分において生起すると想定される多種多様な現象を、性能評価や設計手法等に係わるモデル、コードおよび各種データに基づき、極めて長い時間枠や天然の地層という不確実かつ広域な場を考慮して、現実的な時間でシミュレーションを行うことにより地層処分システムの総合的な評価を行うツールである。また、評価結果の信頼性を向上するため、評価の追跡性、再現性等の確保や検証・確認作業の支援、ならびに評価作業の効率化を図るものである。そして、この数値地層処分システムを用いることにより、サイクル機構における研究開発等の効率的な推進や前項で述べたように、国、実施主体／電気事業者等における各種活動を支援することが可能となる。例えば、候補地選定や予定地選定において地質環境条件が特定されれば、その条件に対応した処分場の設計や地層処分システムの長期的挙動の評価、その結果の設計へのフィードバックといった一連の作業を、品質を保証しつつ、効率的に行うことが可能となる。

このような数値地層処分システムを実現するためには、表 2.1-1～4 に示すような多種多様な機能を備えることが必要となる。しかしながら、地層処分事業の今後の展開（実施主体・研究機関等の役割、候補地選定の要件、予定地選定における予備的安全評価等）が詳細に決定していないことから、表 2.1-1～4 に示した機能の一部に関しては、現時点において具体化することは困難である。

よって、西暦 2003 年から運用を開始する第 1 フェーズシステムでは、2004～5 年以降に本格化することが予想される処分事業の技術的な活動、これに対応する安全基準の策定等において反映されることが期待される機能に焦点を絞った効率的な開発を行い、これらへの適用を通じて改良をおこなっていくことを考慮し、柔軟性や拡張性に優れたシステムを目指すことが大切である。

第 1 フェースシステムにおいては、これまでのサイクル機構における活動や今後、想定される数年間の活動予定を考慮すると、最も重要な機能としては、設計及び性能評価等の解析作業を行うことである。具体的には、第 2 次取りまとめで採用された解析モデルやデータ、ならびに今後、新規に開発されるモデルや取得されるデータを、計算機上に統合することにより、品質を保証しつつ効率的に解析を行うためのシステムを開発することである。以下に、第 1 フェーズシステムが備えるべき主要な機能について述べる。

(1) 第 2 次取りまとめにおける成果のデジタル化

第 2 次取りまとめは、印刷物に加えて、サイクル機構のホームページや地層処分研究総合評価システムにおいてデジタル化されている。しかしながら、第 2 次取りまとめの技術的根拠となった膨大な実験データや解析結果等は、必ずしも、デジタル化されていない。（ここでいうデジタル化とは、単に、情報をテキストデータやイメージデータで扱うのではなく、情報の検索や表示等、様々な活用が可能なように構造化してデジタル化することを意味する。）

数値地層処分システムでは、上記を踏まえ、

- | | |
|-------------|-----------------------------------|
| ① 実験／試験データ | 室内実験や原位置試験により取得されるデータ |
| ② 既存データ | 既存の文献やデータベース等から取得されるデータ |
| ③ 解析に係わるデータ | 解析の入出力データや解析コード、解析内容や評価結果を記載した文書等 |

を、データベースを用いて、それぞれのデータ間の関連とともに管理することが要求機能として挙げられる。これにより、実施主体や国からの情報の提供要求に、迅速に対応可能になるとともに、デジタル情報を持つことにより、様々な形態（3次元コンピュータグラフィックス等）に加工して分かりやすく提供することも可能になる。さらに、解析コードや解析に用いられるデータを、統合的に管理することにより、今後、予想される新たな条件（例えば、処分候補地における地質環境条件）に基づいた解析作業を、迅速に行うことも可能となる。

(2) 研究開発分野のリンク

これまでサイクル機構においては、地質環境、工学技術および安全評価の3つの分野に関し、研究開発を進めるとともに、各分野の成果を、双方向にやり取りし、フィードバックをかけることにより、総合的に地層処分の技術的信頼性を示している。今後は、さらに、個々の研究開発分野を進めると共に、これまで以上に、各分野間の連携を密にして、研究開発を効率的に推進することが重要である。

このためには、数値地層処分システムでは、計算機上に、各分野の研究開発成果を取りまとめるだけでなく、これら成果を有機的に結び付けることにより、例えば、処分場の基本仕様の検討やレイアウト設計を行いながら、これらが処分場の性能評価に与える影響を把握できるような環境を構築することが必要となる。なお、この際には、工学技術の専門家にとって、必要となる性能評価と性能評価を専門とする研究者が行う評価では、目的や詳細度が異なることから、それぞれの専門領域や目的に沿った機能の提供が重要である。図2.1.2-1に示すように、研究者の専門領域に応じて、ビュー（視点）を切り換えることにより、同一な情報やデータ処理であっても、詳細度や手順を変更することにより、容易にシステムを利用できる環境を提供することが考えられる。

(3) 情報提供

地層処分では、様々な現象や多量のデータを扱う必要があるため、従来のようなグラフや表形式に加えて、3次元コンピュータグラフィックス(CG) やバーチャルリアリティ(VR) を駆使して、分かり易く表現することが、様々な受け手に対して理解を高める情報提供方法として適切である。また、表現方法も、情報を受け取る側の専門領域や目的（専門家による評価、一般への情報公開）等に応じて、適切にメニューを用意するこ

とが求められる。

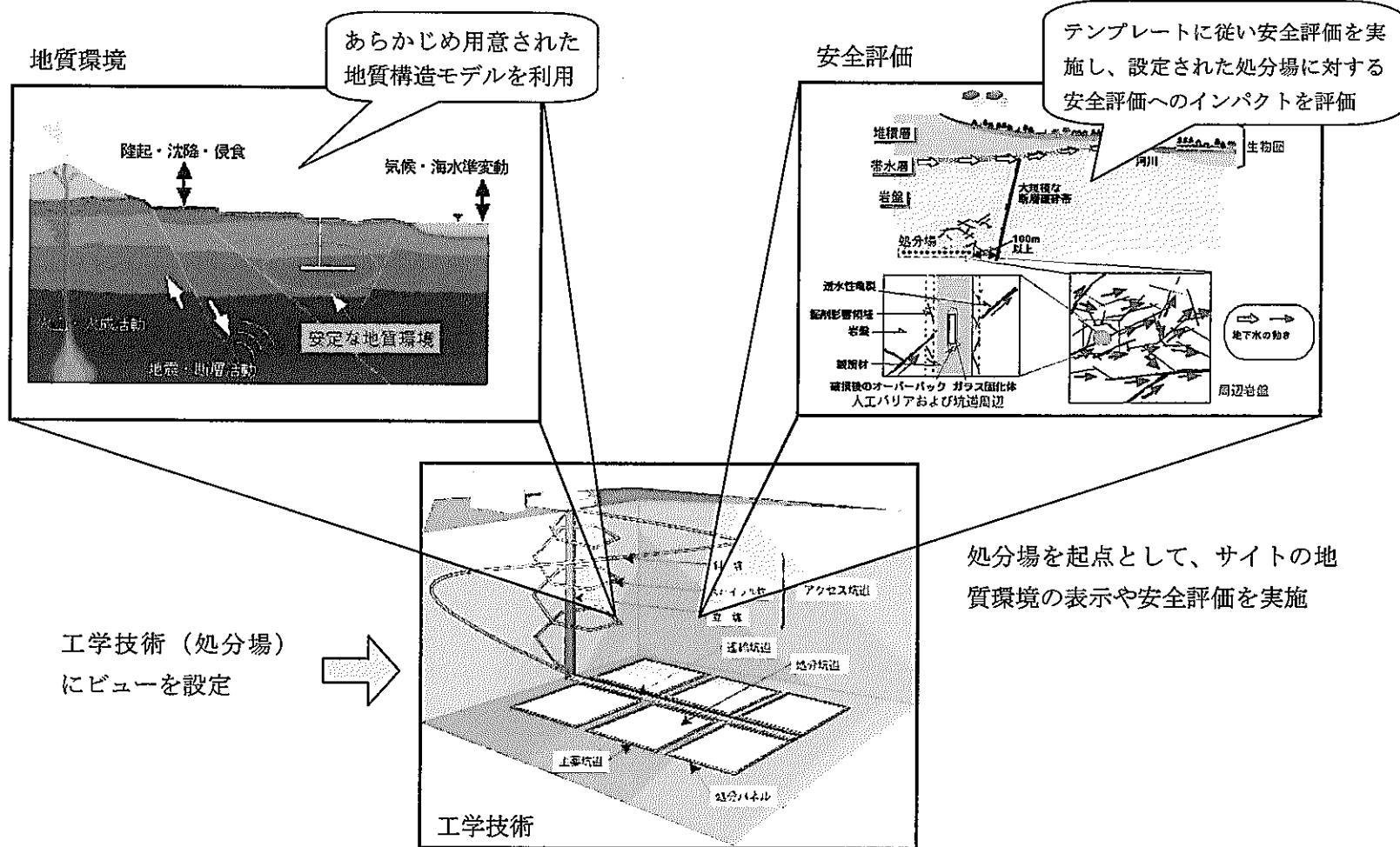
このためには、数値地層処分システムでは、解析結果や実験等から取得されたデータを、目的に応じてデータ処理を行うとともに、CG 技術を用いて、これらデータを表示する機能が必要となる。また、広く一般に情報を公開する場合には、前項でも述べたように、急速に普及しつつあるインターネットの利用が不可欠である。

(4) 解析コードの開発／データ取得支援

サイクル機構では、2000 年以降も、第 2 次取りまとめまでに整備された技術基盤をもとに、地質環境、工学技術、安全評価の分野において、引き続き研究開発を推進していくことが考えられる。この 2000 年以降の研究開発では、処分事業の進展に伴って特定化される地質環境や安全基準に合わせて、解析コードの開発や新規データの取得、様々な解析作業が実施されるものと想定される。

このため、数値地層処分システムでは、第 2 次取りまとめにて使用された解析コードに加えて、新たに開発もしくは改良された解析コードを、統合していくとともに、解析コードの検証や確認作業を支援する環境を提供することが必要である。さらに、数値地層処分システムを、解析コードの開発環境として利用することも考慮すべきである。

また、新規データ取得に関しては、数値地層処分システムを、単にデータベースシステムとして活用するだけでなく、システム上で統計処理等を行い、データの確認作業を支援することや、3 次元 CG 等を駆使してデータを分かりやすく表現する機能を備える必要がある。



出典：JNC JNC TN1400 99-020

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

図 2.1.2-1 研究開発分野間のリンク

2.2 数値地層処分システムの概念構成

本節では、「2.1 運用形態の検討」および3節以降に述べる統合解析プラットホームや統合データベースの検討に基づき、検討したソフトウェア構成及びハードウェア構成について述べる。なお、本検討では、サイクル機構殿所有の既存の計算機資源およびソフトウェア資源を、効率的に利用することを念頭において実施した。

2.2.1 ソフトウェア構成

数値地層処分システムは、

- ① 地層処分システムにおいて想定される様々な現象の解析評価
- ② 設計解析や性能評価解析等の解析作業の効率化
- ③ 品質保証を念頭においた情報管理
- ④ 理解性（understandability）向上のための解析結果等の可視化
- ⑤ 成果の透明性確保のための情報公開 等

が必要となる。このためには、数値解析および情報管理を中心としたシステムを構築するとともに、情報の可視化や公開のための補完的な機能を備えたシステムを構築することが必要となる。また、2002年以降の処分事業の展開に併せたシステムの拡張を考慮すると、処分場のレイアウト設計や建設・操業のためのスケジューリング、コスト評価等のための様々なツールを開発することが必要となる。

一方、システム製作の観点から考えると、数値地層処分システムは、上記に述べたような様々な機能を備えた大規模システムになることが想定されるため、それぞれのソフトウェア要素（サブシステム）を、適切にモジュール化することが、ソフトウェアの開発効率や品質保証、拡張性等の観点から重要である。

以上を踏まえると、数値地層処分システムは、解析および情報管理を行う中核となるソフトウェアならびに様々な機能を持ったソフトウェア群（ツール）から構成することが適当である。そして、ツールは、研究開発や地層処分事業の進展に併せて、適宜、数値地層処分システムに追加していくことが、適切な開発ステップとして考えられる。図2.2.1-1に、2002年度末からの運用を念頭においた第1フェーズの数値地層処分システムのソフトウェア構成を示す。第1フェーズでは、第2次取りまとめで採用されている解析を、品質保証された環境で、効率的に実行するとともに、さらに、前項で述べたような予備的安全評価や設計最適化等の観点から、様々な解析を行うことが重要となる。このような解析は、数値地層処分システムの中核となるソフトウェアである統合解析プラットホームにて制御される。この統合解析プラットホームは、第2次取りまとめにおける性能評価解析の効率化や品質保証を目的として、複数の解析コードを用いた接続計算や情報管理を行う解析管理システム「CAPASA」の概念を部分的に採用しつつ、さらに、設計解析や連成解析への拡張を行ったシステムである。また、統合データベースは、設計解析や性能評価解析等で必要となるデータセットの管理を行うものである。

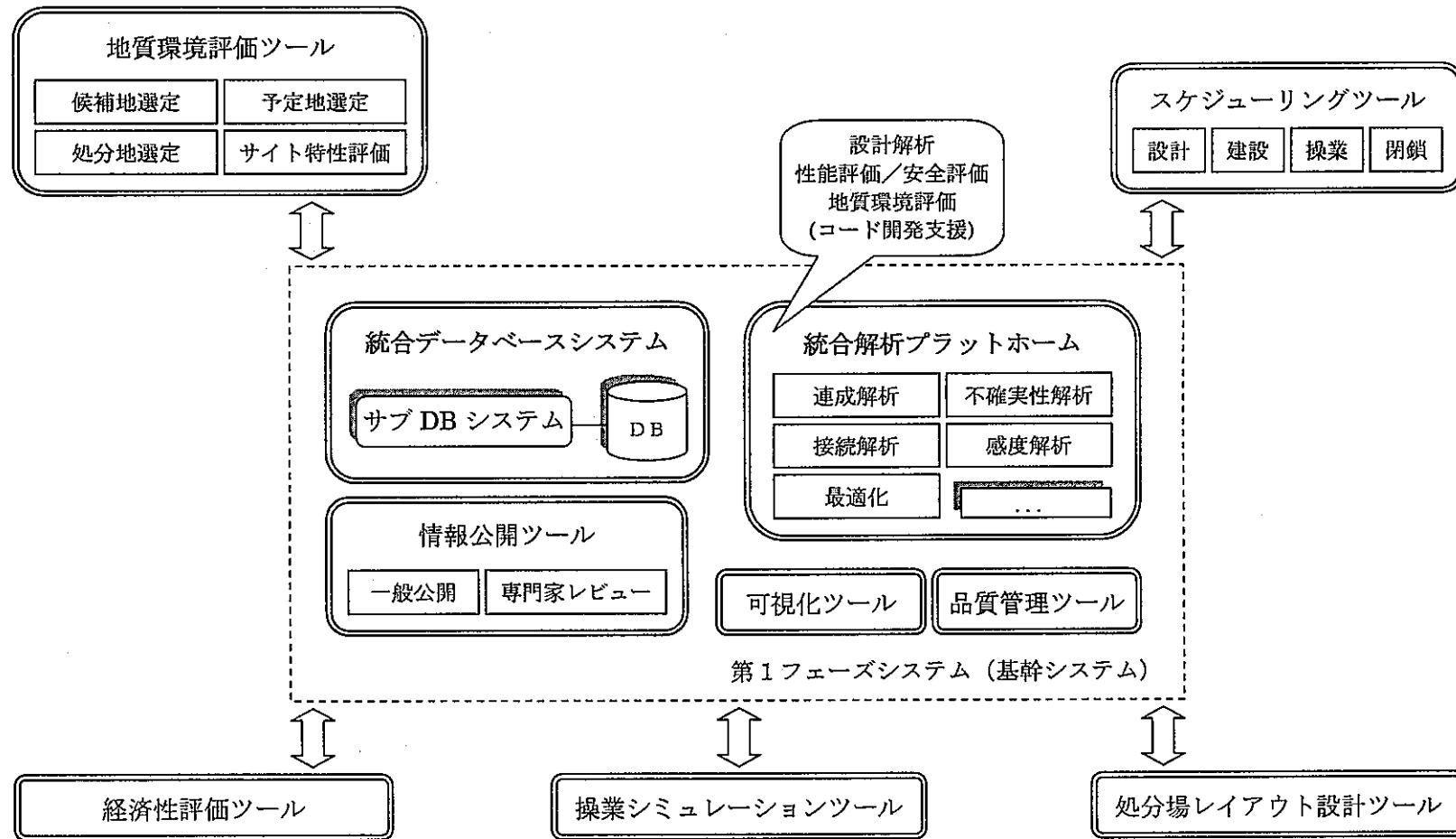


図 2.2.1-1 ソフトウエアの概念構成

以下に、各ソフトウェアの概要を示す。

(1) 統合解析プラットホーム

統合解析プラットホームは、地層処分システムで生起すると想定される様々な現象の解析評価を柔軟に行うこと、ならびに解析の効率化と品質保証を目的として、既存もしくは新規に開発された設計解析コードや性能評価解析コード等を有機的に統合化し、様々な解析を行う。

本プラットホームは、数値地層処分システムの中核となるソフトウェアであり、各解析コード間の連成解析やデータの管理等を行う汎用的な機能を備える。本プラットホームに、解析コードを取り入れることにより、入力データの作成、解析（単体解析、接続解析、連成解析等）の実行、結果の評価といった一連の解析に係わる作業が、一貫した方法で行うことが可能となる。また、品質保証を目的として、解析に係わるすべての情報は、システムにより自動的に管理される。（統合解析プラットホームの詳細は、3章を参照）

(2) 統合データベース

統合データベースは、地層処分システムを構成する人工バリア等の要素および解析に用いられる物性値等、設計や性能評価等を行う際に必要となるすべての情報を管理する。本データベースは、既存のデータベースシステムの有効利用を考慮するとともに、様々なデータを格納した大規模データベースシステムになることを想定して、図 2.2.1-1 に示すように、複数のサブデータベースシステムを統合したシステムとして構築される。（統合データベースの詳細は、5章を参照）

(3) 可視化ツール

可視化ツールは、解析結果、設計情報（処分場レイアウト）、地質環境等の3次元の空間的広がりや時間変化を伴う情報を、最新のコンピュータグラフィックス(CG)技術やバーチャルリアリティ(VR)技術を用いて、対象者（専門家、一般公衆等）や目的（解析結果等の評価、一般への情報公開等）に応じて可視化する。また、情報公開ツールや将来的には地層処分体験システム「GeoFuture 21」を対象とした可視化コンテンツの提供等についても考えられる。

(4) 情報公開ツール

情報公開ツールは、一般国民を対象として、処分事業に対する社会的合意を形成するため、インターネットや専用のコンピュータ等を用いてシミュレーション結果や設計情報等を提供する。また、評価結果等の信頼性を向上するため、専門家によるレビュープロセスを支援する。

本ツールの一部は、現在、第2次取りまとめの品質管理およびインターネットを用いた情報公開、レビュー等を行う地層処分研究総合評価システムを、改良、利用することにより効率的に開発することが考えられる。

(5) 品質管理ツール

研究開発等の成果の品質保証を行うため、サンディア国立研究所にて提唱されているように、追跡性(Traceability)、透明性(Transparency)、再現性(Reproducibility)、レビュー(Reviews)および取得性(Retrievability)を確保することが重要である。このためには、データベース等を用いて、情報の追跡性を確保するとともに、チェックシート等の所定のフォーム（例：WIPP Form #464 表 2.1.1-1 参照）を用いて、第3者による成果のレビューや承認手続きを行う必要がある。

品質管理ツールは、上記を踏まえて、評価結果やデータベース内の情報等からのフォームの自動作成や電子承認機能およびフォームの印刷機能等を備える。

(6) 地質環境評価ツール

地質環境評価ツールは、処分候補地等の地質環境条件に基づき、処分地スクリーニングを支援する。以下の機能等を備えることが考えられる。

- 地質学的な記録に基づいた隆起・沈降・侵食等の将来の推定や活動の規則性に基づいた将来の断層や火山・火成活動等の予測を行う。
- 処分場設計ための候補地における地質環境の提供を目的として、処分場スケールでの初期応力場や地下水場等の解析を行う。
- サイト特性調査支援として、観測点の最適化等を行う。

また、本ツールは、深地層研究施設での、原位置試験等における解析作業やモデルの確認試験等に適用する。なお、本ツールの解析コードを用いて予測解析を行う部分は、統合解析プラットホームに水理コード等、関連する解析コードを取り込むことにより実現される。

(7) 経済性評価ツール

処分場の設計結果から、統合データベースに格納された各設計要素のコスト情報に基づき、処分場に係わるコストを評価する。また、スケジューリングツールと併せて、建設から閉鎖までを対象とした処分場運用のための全コストを評価する。

(8) スケジューリングツール

処分場の運用は、作業の安全性や効率性のため、建設、操業、閉鎖の作業を、処分パネル毎に並行して実施することが考えられている。このため、地質環境条件や処分スケジュールに加えて、上記観点から、処分パネルのレイアウト等、総合的に勘案して最適なスケジューリングを行うことが必要である。

このため、スケジューリングツールでは、処分場の設計結果やガラス固化体の搬入計画等に基づき、建設、操業、閉鎖までのスケジュールの最適化を行う。

(9) 処分場レイアウト設計ツール

処分場設計にて定められた設計条件や地質環境条件（地質構造、水理・力学的条件等）

に基づいて処分場のレイアウトを設計する。具体的には、

- 処分パネルやアクセス坑道・連絡坑道のレイアウト
- 処分坑道や廃棄体のレイアウト（処分坑道離間距離や廃棄体の埋設ピッチ等）
- 処分パネルの形状 など

を、断層や割れ目の位置や地下水流动等の地質環境条件や別途、経済性評価ツールやスケジューリングツールにより導き出される経済性や処分スケジュールに基づき行う。また、本ツールは、深地層研究施設における施設設計等への利用も考えられる。

(10) 操業シミュレーションツール

処分場の操業時の作業性を確認することを目的として、バーチャルリアリティ技術等を採用した可視化ツールと連携して、ガラス固化体の搬入から定置に至る操業シミュレーションを行う。例えば、本ツールでは、処分坑道のレイアウト設計結果に基づき、ガラス固化体やペントナイトブロック等の定置用機器の取り回し（処分坑道等との干渉）等を、確認することが考えられる。

2.2.2 ハードウェア構成

数値地層処分システムは、前項のソフトウェア構成で述べたように、様々な解析やデータ管理を行う統合解析プラットホームと統合データベースを中心として、その他、現象の可視化や設計支援等を行うツール群から構成される。それぞれのサブシステムは、目的や機能が異なることから必然的に、ハードウェアへの要求も異なる。また、2.1節で述べたように、数値地層処分システムは、サイクル機構内での研究開発等に利用されるだけでなく、実施主体、電気事業者、国、サイクル機構以外の研究開発団体等における利用も考慮する必要がある。

以下に、上記を踏まえて検討したハードウェアへの要求仕様を示す。

(1) 統合解析プラットホーム用ハードウェア

統合解析プラットホームは、解析の実行や連成解析時のプロセス（解析コード）の実行制御等を行う。解析コードの実行に際しては、3次元有限要素法を用いた非定常解析等、多くの時間を要する解析が見込まれることから、高速な計算機が必要となる。また、連成解析時には、複数の解析コード（プロセス）を同時に実行することを考慮すると、並列分散処理環境やプロセスの実行管理を行う計算機が必要となる。

また、統合解析プラットホームの使用環境を考えると、数値地層処分システムは、技術移転の可能性も考慮に入れて、特殊な計算機や多大なコストを必要とせずに、利用できることが望ましい。

以上を踏まえると、統合解析プラットホーム用のハードウェアは、

- 計算サーバ 解析コードを実行する複数台の高速な計算機

- コントロールサーバ プロセスの実行制御を行う計算機
- クライアント 使用環境を提供する。
コストパフォーマンスに優れた計算機を利用。

から構成することが適切であると考えられる。また、コントロールサーバと計算サーバ間では、高速にデータ通信を行う必要があるため、これら計算機は、高速ネットワークで接続する必要がある。(連成解析等に伴うデータ通信の詳細は、3.1.1 項参照。)

(2) 統合データベース用ハードウェア

統合データベースは、数値地層処分システムに係わるすべての情報の管理を行う大規模データベースシステムのため、高速にトランザクション処理(データ検索、登録処理)を行う計算機が必要となる。また、大量データの管理を、信頼性をもって行うことを考えると、大容量ハードディスクやハードディスクの二重化(ミラーリング)およびデータバックアップ装置やシステム全体の信頼性を向上させるための無停電電源装置も必要となる。

(3) 可視化ツール用ハードウェア

可視化ツールでは、最新のCG技術やVR技術を必要とするため、可視化専用のハードウェアが必要となる。例えば、昨年度の研究において抽出した3次元CGを高速に描画可能なシリコングラフィックス社製ワークステーションやHMD(Head Mount Display)等のVR用ハードウェアを利用する考えられる。

(4) 情報公開ツール用ハードウェア

情報公開や第3者によるレビュープロセスを、効率的に行うためには、インターネットを利用したWWW(World Wide Web)技術を利用するが有効である。このためには、情報を格納する計算機に加えて、情報をインターネット上に提供するためのWWWサーバと呼ばれる計算機が必要となる。このWWWサーバ用計算機は、アクセス頻度やデータ量に依存するが、情報公開の機能に限定する範囲においては、現状のワークステーション性能を考慮すると、ロウエンド(低価格帯)のワークステーションにて、十分に対応可能である。また、既存のサイクル機構の計算機資源を有効に利用することを考慮すると、現在の地層処分研究総合評価システム用のハードウェアを利用する考えられる。

(5) 品質管理ツール用ハードウェア

品質管理ツールは、データの検索・閲覧・承認、品質管理用フォームの作成、印刷等が主要な機能となる。また、本ツールは、研究者とは別組織となる品質管理担当者が利用することも考慮すると、通常の管理業務で使い慣れているパーソナルコンピュータの利用が適切である。

(6) 地質環境評価ツール用ハードウェア

地質環境評価ツールでは、3次元の広がりをもった地質構造等を表示することから、CG性能に優れた計算機（高性能PC、EWS）を利用するすることが適切である。一方、本ツールの解析機能部分は、統合解析プラットホームに、具体的な解析コードを取り込むことにより実現されることから、本プラットホームと同じ計算機環境で利用されることになる。

(7) 経済性評価ツール用ハードウエア

経済性評価ツールでは、統合データベースに格納されたコスト、設計結果等に係わる情報に基づき、コスト評価を行う。この処理の大部分は、統合データベース用ハードウェアで行われるデータ検索処理となるため、本ツール用ハードウエアは、検索条件設定や評価結果閲覧用グラフィカルユーザインターフェースの提供が、主要機能となるため、パーソナルコンピュータの利用が適切である。

(8) スケジューリングツール用ハードウエア

スケジューリングツールでは、処分場の設計結果や処分スケジュール等、複数の要因を考慮して、建設、操業、閉鎖までのスケジュールを策定するため、高速なデータ処理を行う計算機が必要となる。

(9) 処分場レイアウト設計ツール用ハードウエア

処分場レイアウト設計ツールでは、3次元空間において、パネルレイアウト等を行うため、優れたCG処理能力を備えた計算機が必要となる。例えば、可視化ツールと同様に、シリコングラフィックス社製ワークステーションの利用が考えられる。

(10) 操業シミュレーションツール用ハードウエア

操業シミュレーションツールでは、3次元空間において、ガラス固化体の定置アニメーション等を行うため、可視化ツールと同様に、シリコングラフィックス社製ワークステーションの利用が考えられる。

上記に示した要求機能を踏まえ、かつ2002年度末からの第1フェーズシステムの運用を念頭においたハードウエア構成を、図2.2.2-1に示す。

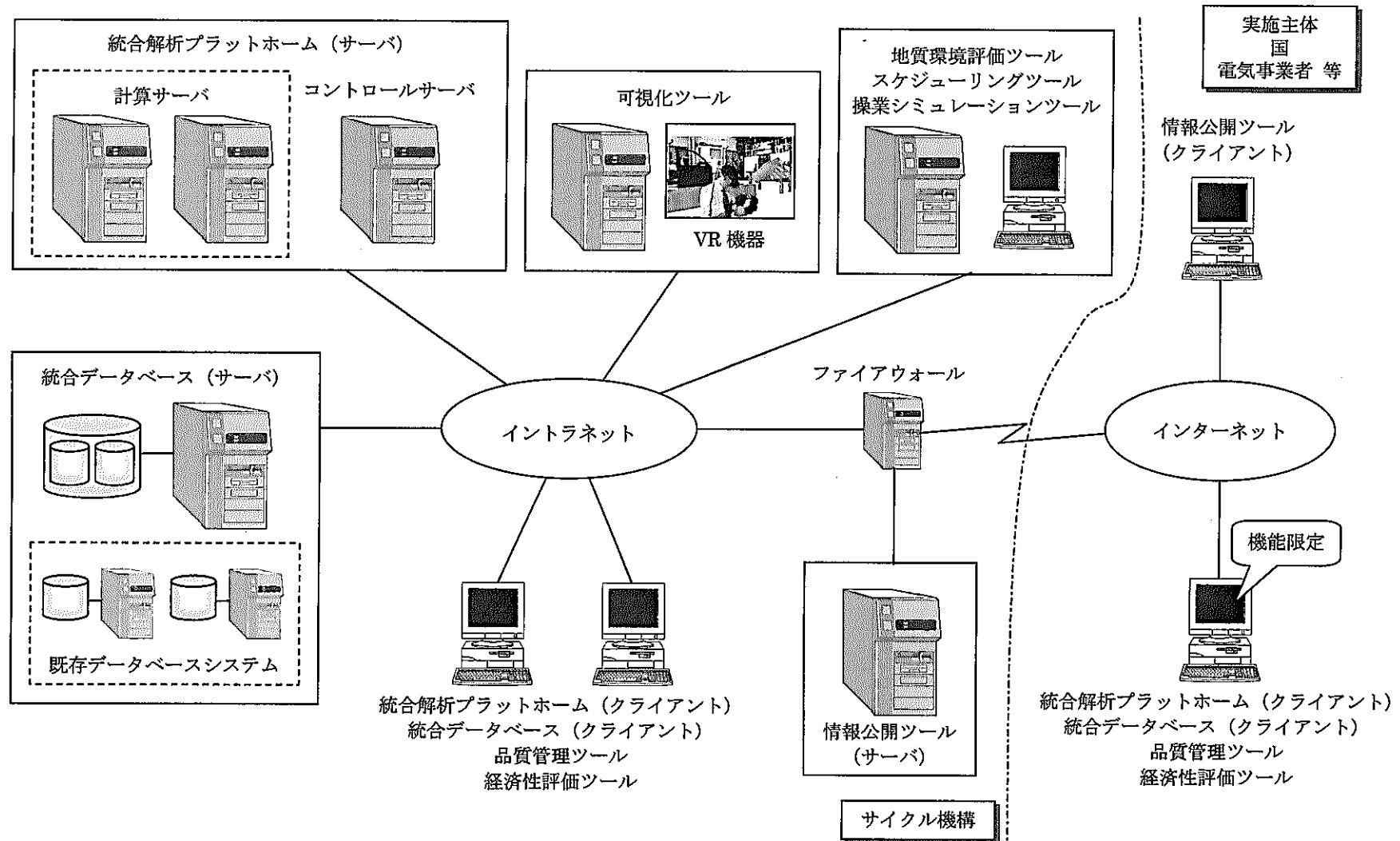


図 2.2.2-1 ハードウェアの概念構成

2.3 開発計画の策定

3 節以降で述べる統合解析プラットホーム、解析手法および統合データベースに関する検討結果を踏まえて、西暦 2003 年度からの運用開始を目指した第 1 フェーズシステムの開発計画を検討するとともに、地層処分事業の長期計画を念頭において、西暦 2003 年度以降のシステムの拡張計画を策定した。

2.3.1 第 1 フェーズシステムの開発計画

(1) 第 1 フェーズシステムの全体開発計画

数値地層処分システムは、地層処分研究開発第 2 次取りまとめで述べているように、

- ① 地層処分システムにおける様々な現象の時間的、空間的変遷の評価
- ② 個々の現象の予測解析等に基づいた処分システムの全体性能の評価

を目的としている。これにより、処分事業の進展に伴い、候補地、予定地等が決定されるに従い、サイトスペシフィックな地質環境に基づいた、地層処分システムの長期的挙動の評価や処分場の設計の最適化等を効率的に行うことが可能となる。また、昨年度検討したように、数値地層処分システムに、処分場や現象の 3 次元可視化等の機能を盛り込むことにより、地層処分システムへの理解促進のためのツールとして活用することも考えられる。

しかしながら、現時点では、2.1.1 項で述べたように、サイクル機構や国、実施主体等の具体的な役割、ならびに候補地選定における詳細な活動計画や選定要件および予定地選定における予備的安全評価等の詳細は決定されていない。このため、第 1 フェーズシステムは、処分事業の展開に伴い、隨時、成長していくシステム、すなわち、拡張性や柔軟性に富んだシステムとして捉えることが大切である。

昨年度の設計研究の検討で述べたように、数値地層処分システムは、連成／接続解析や解析の品質管理や効率化等を行う汎用的なソフトウェアである統合解析プラットホームを中心核に、これに解析コードを導入することにより、設計解析や性能評価等を行うことが適切と考える。すなわち、最初に統合解析プラットホームを構築し、これに、処分事業の進展に応じて、解析コードを導入することにより、数値地層処分システムを構築するものとした。

よって、第 1 フェーズシステムの開発計画では、この統合解析プラットホームの開発を主体に、順次、処分事業の進展を踏まえながら、解析コードを整備、導入していくことが適切である。また、数値地層処分システムにおいて利用されるデータの管理を行うデータベースに関しては、解析コードの整備と同様に、研究開発や処分事業の進展を踏まえながら整備していくことが考えられる。また、2.1.1 項で述べたように、処分事業の計画的な展開においては、広く地層処分の理解を得ていくため、情報公開や透明性確保を配慮することが重要となることから、数値地層処分システムの早期開発段階から、積極的に、社会的合意を得るためにツールとして利用することを念頭におく。

表 2.3.1-1 に、上記を踏まえて策定した第 1 フェーズシステムの開発計画を示す。

表 2.3.1-1 第1フェーズシステムの開発計画

西暦(年度)	99	0	1	2
平成(年度)	11	12	13	14
開発フェーズ	概念検討フェーズ	基本システムの開発		
1.統合解析プラットホーム				
(1) 概念検討				
(2) 基本設計				
(3) 詳細設計				
(4) プロトタイプ				
(5) 製作				
(6) 検証				
2.統合データベース				
(1) 概念検討				
(2) 基本設計				
(3) 既存DBの調査				
(4) 詳細設計				
(5) 製作				
(6) 検証				
3.可視化				
(1) 汎用ツール				
a) 基本設計				
b) 詳細設計				
c) 製作				
検証				
(2) 可視化内容				
設計				
製作				

(2) 解析コードの導入計画

第1フェーズにおける解析コードの導入については、個々の活用に対するニーズはもちろん、システム全体の開発フェーズを踏まえたプランニングが重要であり、各開発フェーズで狙いとする成果に直結するよう配慮しなければならない。

表 2.3.2-2 に示した数値地層処分システムの開発計画では、西暦 2000 年～2002 年までを基本システムの開発期間とし、統合解析プラットホーム、統合データベースのプロトタイプシステムをはじめ、個別コード／ツールならびに汎用並列有限要素解析コードの開発を行うフェーズと位置付けている。この第1フェーズの終期には、統合解析プラットホーム、データベース、個別コード／ツール等の様々なソフトウェア要素の統合化技術の実証（統合化実証）が設けられている。したがって、第1フェーズにおける解析コードの導入に際しては、当面の処分事業ないし研究開発の進捗において重要と考えられる解析コード群が少なくとも統合解析プラットホーム上に取込まれていることを考えなければならない。

具体的な解析コードの導入計画について、例えば、第2次取りまとめで使用された主要な設計解析コード（表 4.1-1 参照）を取り上げ、以下の考えに基づき検討した。

- ・信頼性が高く、かつ処分場設計ツールとして幅広く適用可能な汎用有限要素解析コードを優先的に導入する。
- ・次いで、処分場設計に特化した現象を取り扱う個別事象解析コードを導入する。

表 2.3.1-2 にこれらの解析コードの導入計画を示す。同一の解析コードであっても、解析種別が異なり入出力データが異なる場合（例えば、静的応力解析と非定常熱伝導解析）は、それぞれ個別の解析コードとして扱った。概念検討フェーズにあたる本年度は、処分場設計に必要な最低限の評価機能を実現するミニマムセットとなる解析コード群の搭載を統合解析プラットホームのプロトタイプを対象に行った。ここでは、本格的なシステムの開発に向けた具体的な技術課題の摘出に論点を絞っている。概念設計フェーズでは、個別の解析コードを順次搭載しながら、統合解析プラットホーム、統合データベースとの連携を図るプラグイン方式¹の確立を狙う。併せて、複数の個別解析コードを用いた連成解析手法の確立ならびに GeoFem/Tiger の活用を狙い、地下研究施設での具体的活用を見据えた統合化技術の実証を狙う。

¹ プラグイン方式：「plug in」とは、「プラグに接続する」という意味。解析コード等をプラットホームに組み込むことで、ソフトウェア全体としての適用範囲を拡張できる。

表 2.3.1-2 解析コードの導入計画

西暦(年度)	解析コード名	99	0	1	2	
平成(年度)		11	12	13	14	
開発フェーズ		概念検討フェーズ				
統合解析プラットフォーム		概念検討		基本システムの開発		
統合データベース		開発概念		設計・製作		
燃焼計算	ORIGEN2	概念検討		基本システムの開発		
放射線輸送	MCNP4a	開発概念		設計・製作		
放射線輸送	ANISN					
O.P腐食膨張解析	ABAQUS					
空洞解析	ABAQUS					
熱解析	ABAQUS					
緩衝材流出	ABAQUS					
熱解析	FINAS					
地中地震波	SHAKE					
O.P沈下解析	DACSAR					
EBS地震応答解析	—					
EBS固有値解析	NASTRAN					
岩盤初期応力	NASTRAN					
緩衝材初期応力	NASTRAN					
熱水応力連成解析	THAMES					
ガス移行解析	TOUGH2					

- (1) 概念検討フェーズでは、処分場設計に必要な最低限の評価機能を実現するミニマムセットとなる解析コードの搭載。本格的なシステムの開発に向けた具体的な技術課題の摘出に論点を絞る。
- (2) 基本システムの開発フェーズでは、個別の解析コードを順次搭載しながら、統合解析プラットホーム、統合データベースとの連携を図ったプラグイン手法の確立を狙う。併せて、複数の個別解析コードを用いた連成解析手法の確立ならびに GeoFem/Tiger の活用を狙い、個別解析コードの導入を進めながら、地下研究施設での具体的活用を見据えた統合化技術の実証を狙う。

2.3.2 長期開発計画

ここでは、第1フェーズに引き続く数値地層処分システムの長期開発計画の概要について述べる。

表 2.3.2-1 に数値地層処分システムの開発フェーズの考え方をまとめた。開発フェーズを定めるための大きなマイルストーンは、地層処分事業の進展との関連と、システム実証の段階的な目標である。

(1) 第1フェーズ 基本システムの開発フェーズ (-2002)

下記ステップにより、基本システムを開発し、2002年度末に運用を開始する。

①プロタイピングを含む概念設計

システム概念を提示し、開発計画、体制を定める段階である。この段階で、システムの活用方法、メリット、実現性について議論を行い、開発に関するコンセンサスを得る。

また、概念設計により、システム開発における実現方法も含め検討し、各開発要素の優先度を定め、開発フェーズにおける開発仕様を定める段階である。

この段階でシステム概念を例証するためのプロトタイプシステムを作成し、システム概念の有効性を確認する。

②システム製作

並行して実施される技術開発の進展は、統合解析プラットホームに関する技術開発が先行し、高速化に関する技術開発は時期的に遅れると予想されるため、この段階では「統合化」の有効性を実証することを目標とし、統合解析プロットホームと個別コード／ツールの開発を実施する。

(2) 第2フェーズ 拡張フェーズ(I) (2003-2005)

高速化技術開発の成果を反映し、「高速化」に関する実証を目標としたシステム拡張を実施する。

また、個別コード／ツールの開発と組み込みに関しては、2005年以降より行われることが想定される深地層の研究施設を用いたモデル、データ等の検証や、処分候補地を対象とした評価解析への活用が可能であることを目標とする。

(3) 第3フェーズ 拡張フェーズ(II) (2006-2008)

このフェーズの目標は、「大規模」データの取り込みにより、システムの有効性を実証することである。仮想データならびに特定のサイトから取得される地質環境データをシステムに取り込み、システムの総合実証を行う。

(4) 第4フェーズ フル運用フェーズ (2009-)

開発したシステムをサイクル機構における地層処分研究、実施主体における処分予定地等の選定作業、処分施設の設計等に活用する段階である。

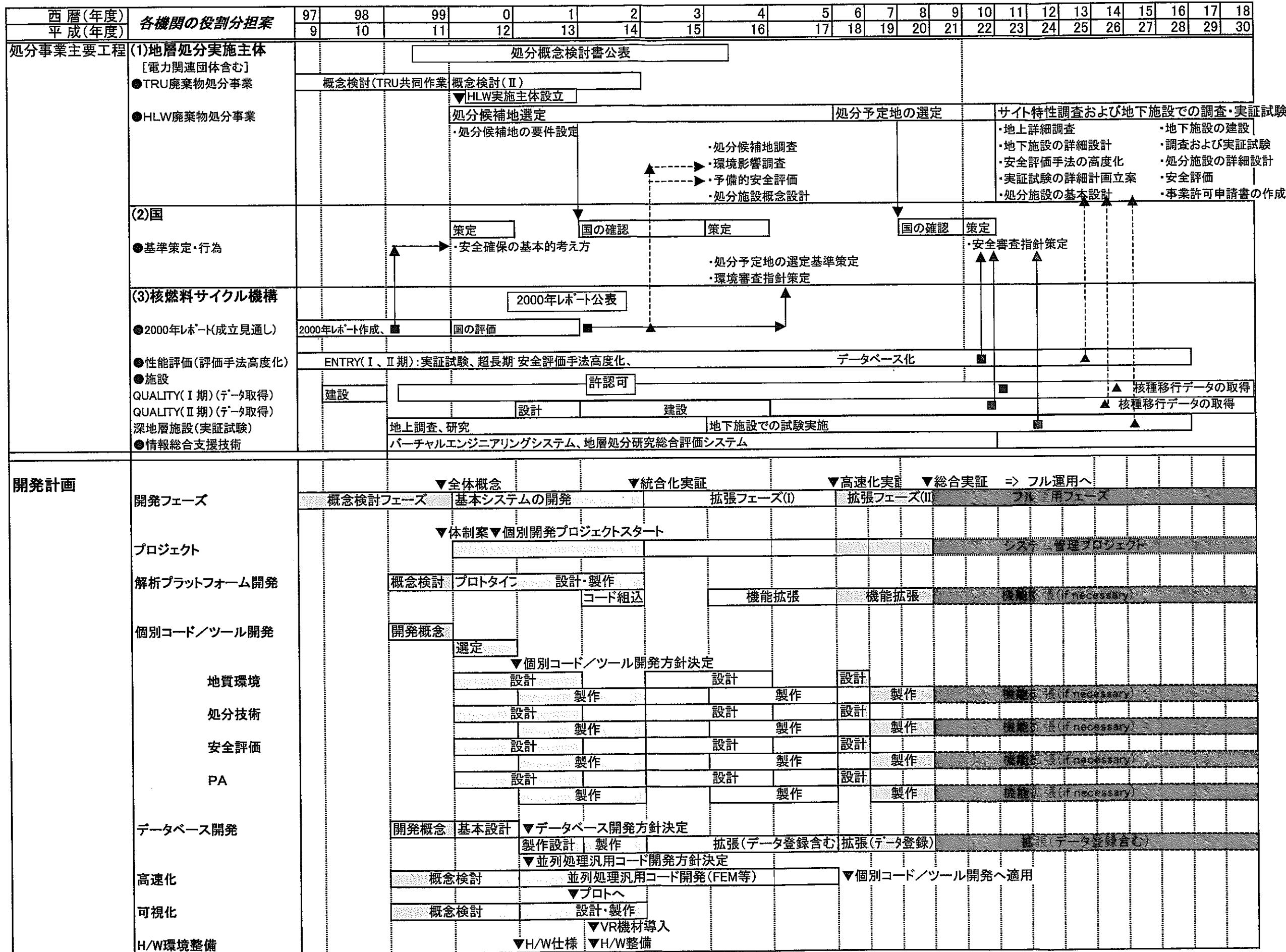
この段階においても、システムは新たなデータや解析コード／ツールを蓄積し成長し続けることが考えられる。

表 2.3.2-2 に上記の開発フェーズをベースとした数値地層処分システムの開発スケジュール案を示す。

表 2.3.2-1 数値地層処分システムの開発フェーズ

開発フェーズ	期間（西暦）	概要	目標
第1フェーズ 基本システムの開発 (設計)	-2000	<ul style="list-style-type: none"> ・概念検討により、システムの活用方法、メリットを明確にし、開発すべきシステムの全体像を定める。 ・フル運用までの長期開発計画を定め、概念設計フェーズ以降のプロジェクト推進に必要な体制などを定める。 ・概念検討で定められたシステム概念を実現する方策を検討し、実現性、優先度にしたがい、開発フェーズにおける開発範囲を明確にする。 ・上記検討を受け開発プロジェクトスタート（2000年度より） ・プロトタイプシステムによりシステムの基本的概念（特に解析統合プラットフォーム）の有効性を実証する。 	<ul style="list-style-type: none"> ・システムの活用方法、メリットの明確化 ・システム概念の提示 ・開発範囲、開発工程、資源、体制の明確化 ・プロトタイプシステムによる実証。（2000年度末） ・開発フェーズにおける下記仕様の決定。 解析統合プラットフォーム仕様 個別コード／ツール仕様 データベース仕様 高速化、可視化開発仕様 ・H/W仕様の決定
第1フェーズ 基本システムの開発 (製作)	2001-2002	<ul style="list-style-type: none"> ・概念設計フェーズで定めた仕様に従い、数値地層処分システムのシステム要素を開発する。 ・この段階で導入する個別コードは、第2次とりまとめに利用されたコードが中心となる。 ・開発したシステムを用いシステムの有効性を実証する。（この段階では、特に「統合化」の有効性を実証） ・拡張フェーズ以降の開発計画の見直しを行う。 	<ul style="list-style-type: none"> ・H/W導入 ・「統合化」の有効性実証 ・拡張フェーズ移行の開発仕様決定
拡張フェーズ(I)	2003-2005	<ul style="list-style-type: none"> ・個別コード開発の成果を順次、システムに取り込む。 ・データベースを順次拡張する。 ・開発成果の中で高速化、統合化の有効性を検証する。 	<ul style="list-style-type: none"> ・「高速化」の有効性実証 ・サイクル機構における地層処分開発研究で活用開始。 ・次フェーズの開発仕様を決定
拡張フェーズ(II)	2006-2008	<ul style="list-style-type: none"> ・個別コード開発の成果を順次、システムに取り込む。 ・データベースを順次拡張する。 ・仮想データならびに特定サイトのデータを用いて総合的な実証を行う。 ・当初の計画に従い、目標とするシステム開発を完了 	<ul style="list-style-type: none"> ・処分予定地の選定活動（処分場概念設計、予備的安全評）への活用開始（2006年頃） ・総合性能の実証 ・フル運用のための環境整備
フル運用フェーズ	2009-	<ul style="list-style-type: none"> ・サイクル機構及び関連機関でのフル運用開始。 処分予定地におけるサイト特性調査計画、施設設計等（実施主体）、処分予定地選定結果の確認（国）等へ活用 	<ul style="list-style-type: none"> ・その後の処分場基本設計以降の段階でも継続的に活用可能であることを実証。

表2.3.2-2 数値地層処分システムの開発計画



3. 統合解析プラットホームに関する検討

数値地層処分システムでは、様々な現象の複合的な扱いや天然の地層という広域で不確実な空間的領域を扱うため、通常の工学システムにおける数値解析と比べて、連成解析や3次元大規模スケールの解析等の複雑な解析が必要となる。また、地層処分システムの総合的な評価を行う際には、処分技術、地質環境および性能評価に関する多種多様なコードやデータを、適切に組み合わせて解析を行うとともに、専門家の経験や知見に基づき、解析結果の評価を適確に行う必要がある。さらに、評価の信頼性を向上するためには、対象問題に適したコードやデータの利用およびコード間のデータ授受等をミスなく効率的に行うこと、ならびに解析の品質管理（追跡性や再現性の確保）が重要となる。

このためには、従来のように個別にコードを開発、利用し、コード間のデータ授受や品質保証等は、解析者の手作業により行うのではなく、連成解析や品質保証等を念頭において標準的な操作／実行環境や開発手法を前提として、コードを総合的に開発、利用することが必要である。すなわち、多種多様なコードを、一様に連成／接続解析、大規模解析および品質保証等を踏まえて取り扱う汎用的な環境である「統合解析プラットホーム」を開発し、これに、本プラットホームでの利用を前提として開発・改良された様々なコードを取り込むことが、数値地層処分システム構築の有効なアプローチと考えられる。

本研究では、この統合解析プラットホームの基本設計を行うとともに、プロトタイプシステムの開発を通して、机上の検討のみでは困難な開発手法に関する技術的課題の摘出および操作性等の検討を実施した。

3.1 統合解析プラットホームの基本設計

第2次取りまとめにおける性能評価においては、プラットホームとして位置付けられる解析管理システム「CAPASA」を用いて、接続解析ならびに解析の品質管理や作業の効率化を行っている。この CAPASA の持つ品質管理の方法や解析コードの組合せによる接続解析の概念は、数値地層処分システムの統合解析プラットホームにおいても、十分に利用できるものである。しかしながら、CAPASA では、比較的シンプルな1次元の性能評価モデルを対象としていたことから、計算の高速化やプレポスト処理（メッシュ生成や可視化等）ならびに連成解析への対応等、数値地層処分システムにおいて必須とされる機能は実現されてない。さらに、CAPASA は、性能評価を対象としていたことから、サイクル機構の特定部門（システム性能評価チーム）における計算機環境でのみ利用可能であり、対応計算機の柔軟性がないものとなっている。

よって、統合解析プラットホームでは、CAPASA が備える接続計算や品質管理に関する機能を踏襲するとともに、数値地層処分システムで必須となる連成解析や大規模3次元解析等を目的とした機能を備えることが必要となる。また、数値地層処分システムは、2章で述べたように、サイクル機構や実施主体において利用されることを想定して、様々な計

算機環境に対応する必要がある。

本項では、統合解析プラットホームの基本設計として、CAPASA の開発や運用を通して得られた知見および数値地層処分システムの運用形態や解析手法の検討結果に基づき検討されたプラットホームの機能について述べる。

3.1.1 機能仕様

本項では、統合解析プラットホームの機能仕様として、解析手順をグラフィカルに表現した解析ネットワークの仕様および解析ネットワークに基づいた解析の実行制御方法について述べる。

(1) 統合解析プラットホームの概要

(a) 解析ネットワーク表現

処分候補地選定段階以降における安全評価解析や処分場の概念設計では、サイトを特定化し、実際の地質環境を対象とした様々な解析を行う必要がある。また、地層処分を取り巻く環境は、実施主体の設立に伴い、研究開発主体から事業へと移行する時期であり、これまで以上に、設計解析や安全評価解析等への迅速な対応が必要となる。さらに、研究開発では、設計最適化や安全裕度の最適化といった観点から、よりリアルな解析、例えば、複数の現象を連成させることにより、実際の現象を、より忠実にシミュレーションすることが想定される。

このためには、複数の解析コードを用いた一連の解析や地質環境の不確実性を考慮した解析等を、品質を保証しつつ効率的に行うことが必須となる。

統合解析プラットホームは、上記を踏まえ、複数の解析コードを用いた一連の解析を、解析ネットワークと呼ばれるグラフィカル表現により解析手順を定義する。これにより、解析の手順を、直感的に理解でき、ヒューマンエラーの削減や作業の効率化を図ることが可能となる。

この解析ネットワークは、図 3.1.1-1 に挙げる階層的に用意されたアイテム（部品）を、解析者が、統合解析プラットホームが提供するグラフィカルユーザインターフェースを用いて、自由に組み合わせることにより作成される。（解析者が、利用できる部品は、最下位階層の部品のみ）そして、一連の解析は、この解析ネットワークに従い、すべて、システムにより自動的に行われる。

以下に、解析ネットワークを構成する各部品の概要について述べる。

① アイテム

解析ネットワークのアイテムを表わす。

② オブジェクト

円形で表現され、解析コード等の実行プロセスを表わす。

③ 解析オブジェクト

数値解析に係わるオブジェクトを表わす。解析オブジェクトは、解析コードおよびデータベースとのデータ授受を行うプレポスト処理ソフトウェア等により構成される。解析オブジェクトの下位階層には、空洞安定性解析等の具体的な解析用のオブジェクトが用意される。なお、この解析オブジェクトは、処分事業や研究開発の進展に伴い、隨時、追加可能とする。

④ ユーティリティオブジェクト

解析オブジェクトと組み合わせて用いることにより、一連の解析の制御を行う。これにより、解析コードを改良することなしに、不確実性解析等が可能となる。ユーティリティオブジェクトの下位階層には、不確実性解析オブジェクト、感度解析オブジェクト、最適化オブジェクト等、ユーザが利用可能な具体的なオブジェクトが用意される。また、本オブジェクトは、解析オブジェクトと同様に追加可能とする。

⑤ コンテナー

四角形で表現され、オブジェクトへのデータの提供またはオブジェクトから送信されるデータの格納を行う。

⑥ データベースコンテナー

複数の解析コードを用いて、一連の解析を行う場合には、そこで使用されるパラメータの整合性を確保することが必要である。データベースコンテナーは、解析で共通に使用するデータ（物性値等）の管理を目的として作成されたデータベースを、解析ネットワーク内で利用するためのアイテムであり、データフローを用いて、オブジェクトと接続することにより、データベースからオブジェクトへのデータ受渡しを可能とする。

⑦ グローバルコンテナー

グローバルコンテナーは、データフローを用いてオブジェクトと接続することにより、連成解析等を目的として複数のオブジェクト間で共有するデータを管理する。このグローバルコンテナー内のデータは、コントロールサーバのメモリ空間に配置されるため、オブジェクトとグローバルコンテナー間で高速にデータの送受信が可能となる。なお、グローバルデータコンテナーは、座標系等に応じて複数用意される。

⑧ 共通コンテナー

共通コンテナーは、処分場の幾何形状等、解析ネットワーク全体において共通に使用するデータを定義する。共通コンテナーは、データフローにより明示的にオブジェクトと接続することなしに、オブジェクトに共通コンテナー内のデータが受け渡される。

⑨ フロー

方向を表わす矢印付きのグラフで表現され、解析ネットワークの実行制御やオブジェクト間やコンテナーとオブジェクト間でのデータの受渡しを行う。

⑩ コントロールフロー

コントロールフローは、オブジェクト間に作成され、オブジェクトの実行制御を行う。

⑪ データフロー

データフローは、オブジェクト間もしくはコンテナーとオブジェクト間に作成され、各アイテム間での、データ授受に利用される。本アイテムは、複数の解析オブジェクトを用いた接続解析や連成解析、ならびに解析オブジェクトとデータベースとの連携等に利用される。

図 3.1.1-2 に、上記アイテムを利用した解析ネットワークの例を示す。

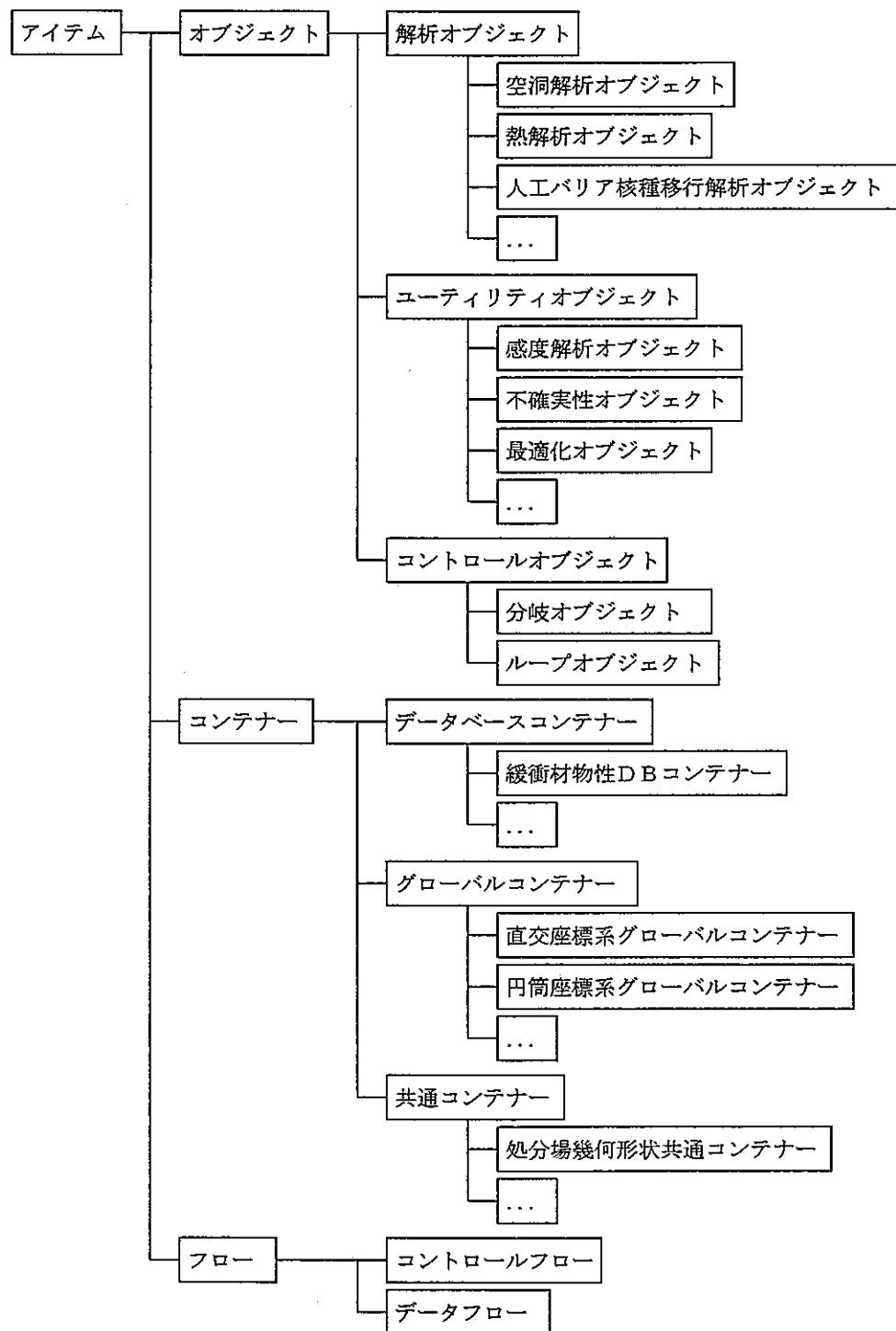


図 3.1.1-1 解析ネットワークのアイテム

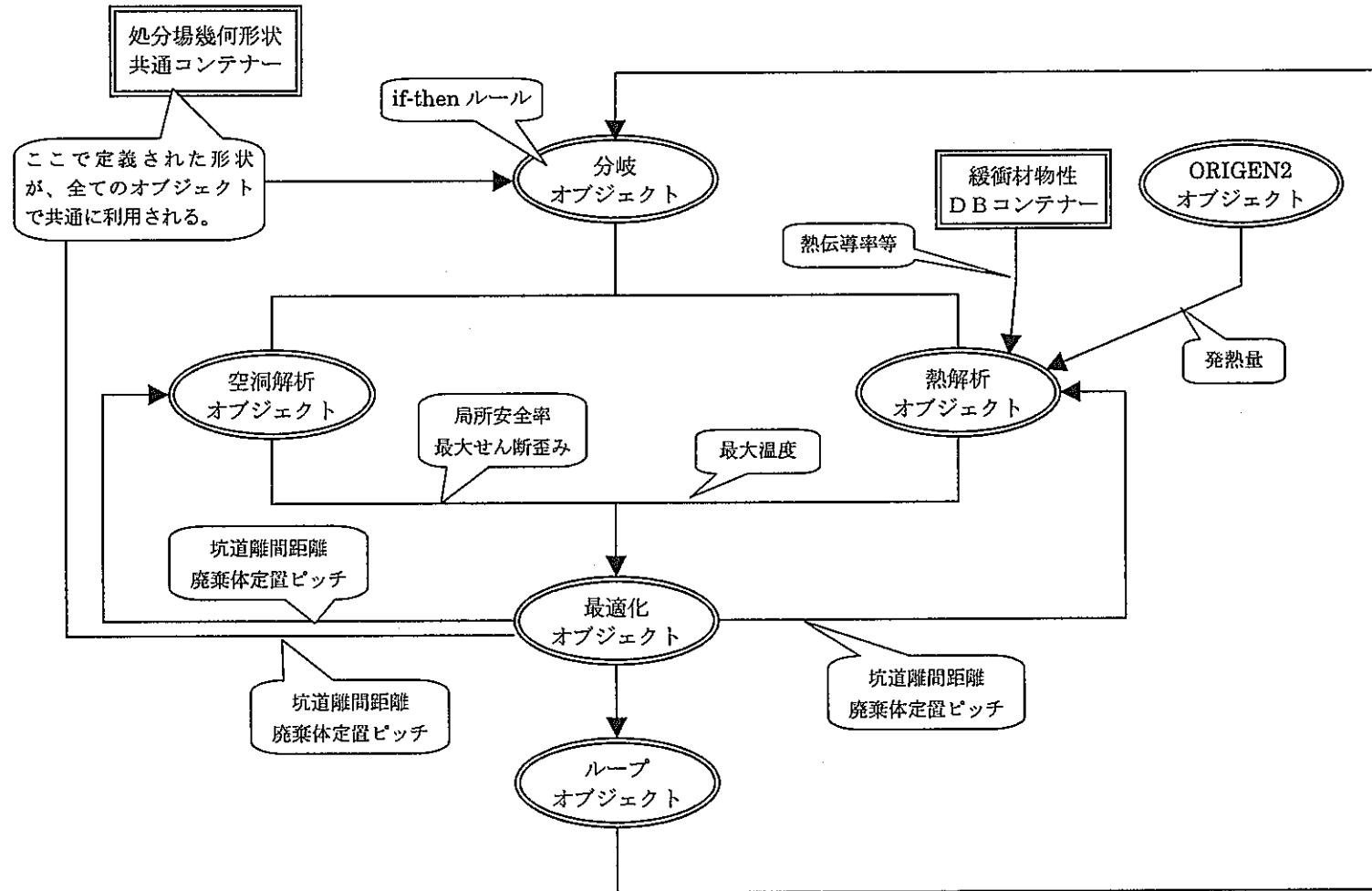


図 3.1.1-2 解析ネットワークの例

(b) 解析ネットワークに基づいた解析手順

統合解析プラットホームにおける解析は、以下の手順で行われる。

- 1) 解析者による解析ネットワーク構築
- 2) システムによる解析ネットワークの実行
- 3) 解析者による解析結果の確認

ここで、1)の解析ネットワーク構築では、統合解析プラットホームが提供するグラフィカルユーザインターフェース（GUI）を用いて、解析者が、自由に図 3.1.1-1 に示すアイテムを、配置することにより、解析の手順を決定する。また、各アイテムに用意された GUI を用いて、アイテムに付属するデータを設定する。例えば、解析オブジェクトの場合には、解析に使用する解析コードの種類（バージョン）や入力データ等を作成する。

2)の解析ネットワークの実行は、図 3.1.1-3 に示すように、基本的に、オブジェクトの実行状態およびフロー（コントロールフローとデータフロー）に基づき制御される。オブジェクトは、そのオブジェクトに入力しているフローの上流側に位置するオブジェクトの実行が終了している場合に、該当オブジェクトが実行される。そして、これを繰り返すことにより、解析ネットワーク全体が実行されることになる。ただし、ループオブジェクトや分岐オブジェクトが解析ネットワークに含まれる場合には、これらオブジェクトにより、解析ネットワーク全体の実行が制御される。また、該当オブジェクトに、データフローが入力している場合には、該当オブジェクトの実行時に、データフロー上流側のオブジェクトの出力結果やコンテナーに格納されているデータが、該当オブジェクトに受け渡される。

3)の解析結果の確認では、解析者が、アイテム毎に用意された GUI 等を通して、各アイテムの実行結果（出力データ）や入力データを確認することができる。

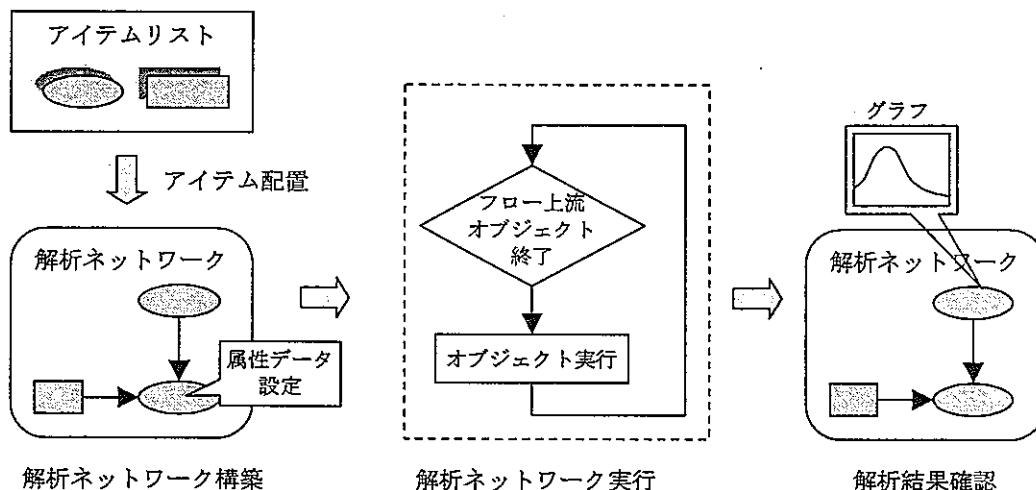


図 3.1.1-3 解析ネットワークに基づいた解析手順

(c) 統合解析プラットホームの概略構成

統合解析プラットホームは、図 3.1.1-4 に示すように、解析ネットワークに基づいたプロセス（解析コード等）の制御等を行うコントロールサーバ、解析コード等の実行が行われる複数台の計算サーバ、解析ネットワークに関するデータを管理するデータベースサーバおよび解析者の操作環境となるクライアントから構成される。なお、計算サーバに関しては、既存の解析コードは、様々な計算機やオペレーティングシステム上で利用されていることを考慮して、様々なタイプのワークステーション（SUN、SGI、IBM 等）を利用可能とする。また、クライアントに関しては、サイクル機構のみに限らず、実施主体、国等においてもシステムを利用するなどを考慮して、コストパフォーマンスに優れた WindowsPC 等を用いる。

ネットワークに関しては、サーバとして利用される計算機は、各計算機間で高速に多量のデータ通信を行う必要があることから、ギガビットイーザー等の高速ネットワークを通じて接続する。また、クライアントとサーバ間のネットワークは、インターネットの利用に加えて、サイクル機構外からの利用も念頭において、インターネットからの利用も考慮する。

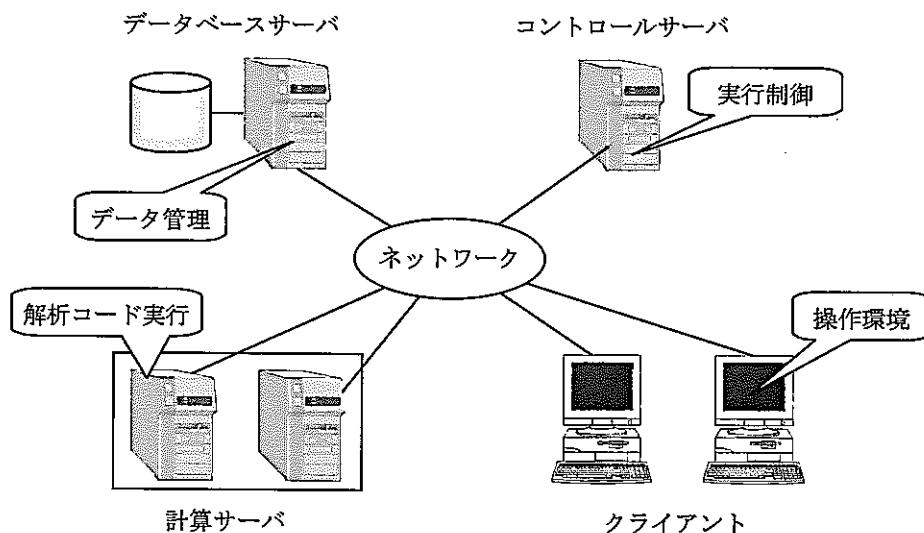


図 3.1.1-4 統合解析プラットホームの概略構成

(2) アイテムの機能

本項では、図 3.1.1-1 に示した解析ネットワークを構成するアイテムの機能や制御方法の詳細について述べる。

(a) 解析オブジェクト

解析オブジェクトは、解析コードに基づき、設計解析や性能評価解析等を行う。解析オ

プロジェクトとして、統合解析プラットホームに組み込まれる解析コードは、現在、サイクル機構にて使用されている既存の解析コードに加えて、新規に開発されるコードも対象とする。また、統合解析プラットホームに組み込む解析コードの規模（ソフトウェアとして規模）は、これまで、第2次取りまとめで利用してきた核種移行解析コードや汎用の3次元有限要素法のコードだけでなく、統合解析プラットホーム上での連成解析を考慮して、より規模が小さい解析コード、例えば、ある単一の現象のみを解析することを目的としたコード等も対象とする。（プラットホーム上での連成解析の詳細は、グローバルコンテナーの項を参照）

新規解析オブジェクト（コード）のシステムへの登録は、統合解析プラットホームに一切の改良を加えることなしに行う。また、解析オブジェクト側の作業（解析コードの改良や新規ソフトウェアの作成）は、解析の目的に応じて以下を行う。

1) 解析コードの組み込み

① 解析コード単体または接続解析を目的とした場合

原則として、解析コード自体には、一切の変更を加えることなしに、図3.1.1-5に示すように、以下のソフトウェアを作成することにより、統合解析プラットホームへの組み込みを行う。

- プレ処理ソフトウェア

2)で述べる入力データ設定ソフトウェアにより、あらかじめデータベースに格納された入力データを検索・取得し、解析コードが利用するデータファイルを作成する。

- ポスト処理ソフトウェア

解析コードが出力したファイル（解析結果）を、データベースに格納する。

解析コードの取り込みに関しては、CAPASAにおいても、上記と同様な方法で行っているが、解析コードの入出力データを構造化してデータベースに格納しているため、解析コード毎に、プレポスト処理ソフトウェアの構築が必要であり、コード導入には、多くのコストを要している。（補足：欄外）

一方、数値地層処分システムでは、システムに組み込むべき解析コードが相当数に及ぶことから、コードの入出力データは、原則として、構造化せずに（データファイルそのままの形式）、データベースに格納する。これにより、上記ソフトウェアは、解析コード毎に用意するのではなく、汎用ソフトウェアとして構築することが可能となり、解析コード導入時のソフトウェア製作作業を少なくすること、もしくは、全く無くすことが可能となる。

CAPASAのコード組み込みアプローチ

CAPASAでは、システムに組み込むべきコードが少ないとから、コード組み込み時のコストよりは、データ検索の応答性や接続計算時の柔軟性（解析結果の検索の容易さ等）を、重要視している。このため、解析コードの入出力データは、オブジェクト指向の概念に基づき、クラス構造化してデータベースに格納している。

② 連成解析を目的とした場合

統合解析プラットホーム上での連成解析を目的とした場合には、①のプレポスト処理ソフトウェアに加えて、図 3.1.1-6 に示すように、オブジェクトインターフェースと呼ばれるプログラムを追加する。このオブジェクトインターフェースは、以下に示すように、解析コードとグローバルコンテナー間での高速なデータ通信や複数の解析コードを対象とした実行の同期制御を行う。

- データ通信機能の追加

解析結果等を、グローバルコンテナーに送信するためのプログラム（関数やサブルーチン）を、解析コードの所定の場所（例えば、タイムステップ毎に結果が输出される場所）に挿入する。なお、本プログラムは、汎用プログラミングライブラリとして事前に用意することにより、解析コードの改良作業を低減することが可能である。

- 同期制御機能の追加

複数の解析コードのイタレーションが、短時間（ミリ秒のオーダー）で行われる場合には、図 3.1.1-7 に示すように、解析コードを、イタレーション毎に起動するのではなく、複数の解析コードの同期を行いつつ、ステップバイステップで実行することが必要となる。（イタレーション毎に、解析コードを実行したのでは、コード起動に時間を要し、全体としての解析時間が極端に延びるため。）このためには、同期制御を行うためのプログラムを、データ通信機能と同様に、解析コードの所定の場所に挿入する。なお、イタレーションが、比較的長い時間で行われ、かつ、解析コード自体にリストアートの機能を備えている場合には、同期制御機能の追加は不要である。

2) 入力データ設定ソフトウェアの作成

テキストエディタや専用のグラフィカルユーザインターフェース（GUI）により、解析コードの入力データを作成し、データベースにデータを格納する。なお、データ作成のためのインターフェースは、図 3.1.1-8 に示すように新規開発のソフトウェアだけに限らず、市販の 3 次元有限要素法のプレポスト処理ツール（FEMAP、IDEAS）等を改良を加えることなく利用可能とする。

3) データ表示ソフトウェアの作成

原則として、解析終了後に、解析結果の表示を行う。データ表示ソフトウェアに関しても、入力データ設定ソフトウェアと同様に、図 3.1.1-8 に示すように既存のソフトウェアの利用が可能である。

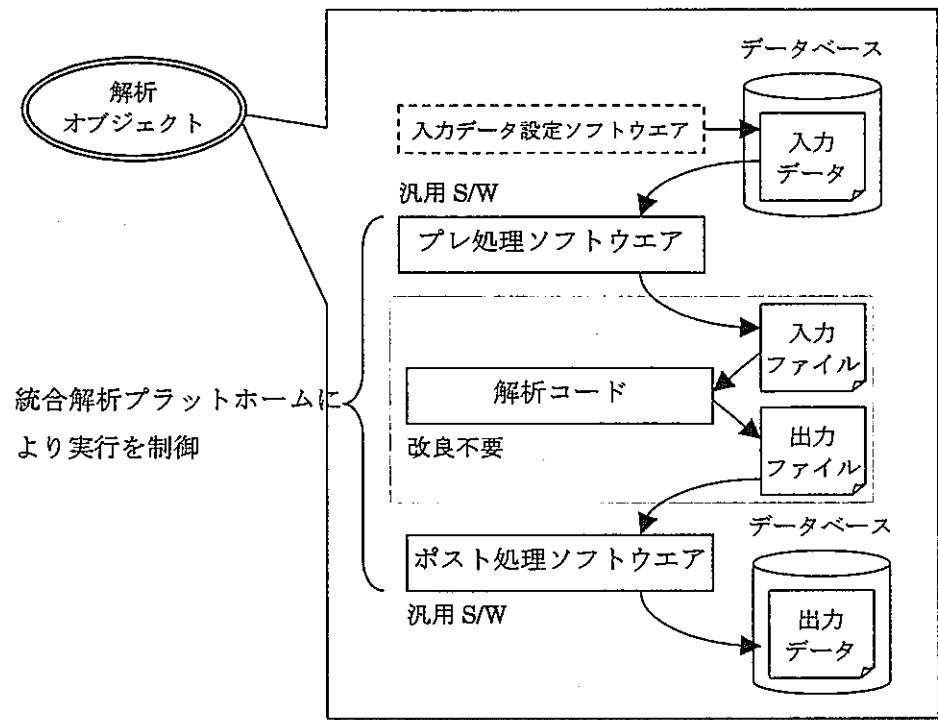


図 3.1.1-5 解析コード単体または接続解析を目的とした場合の解析コード組み込み方法

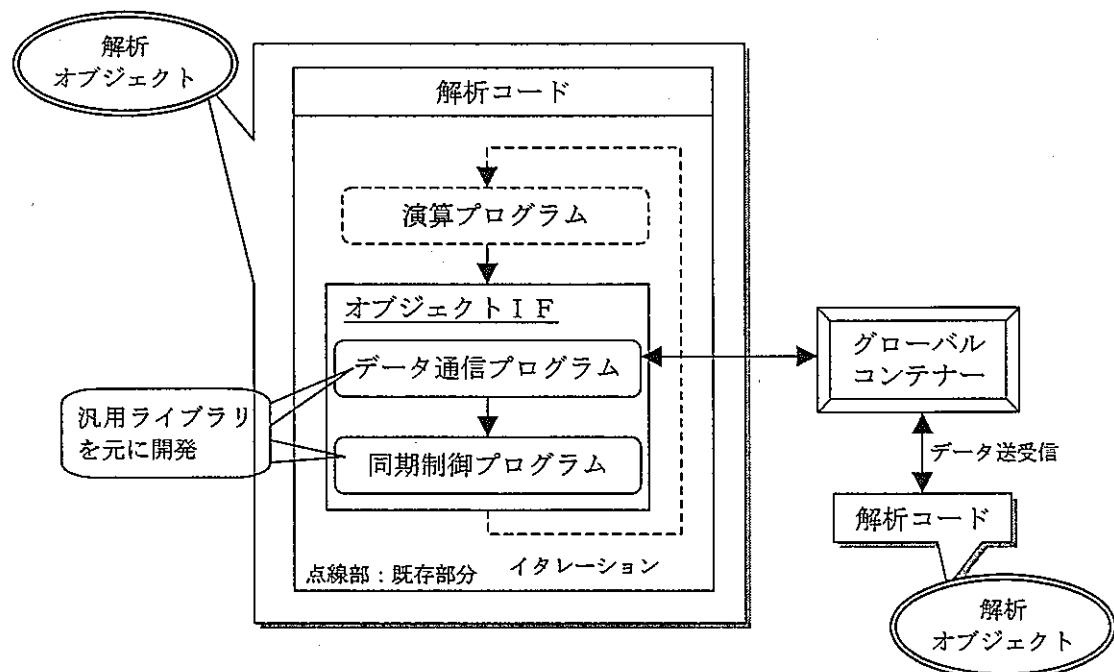
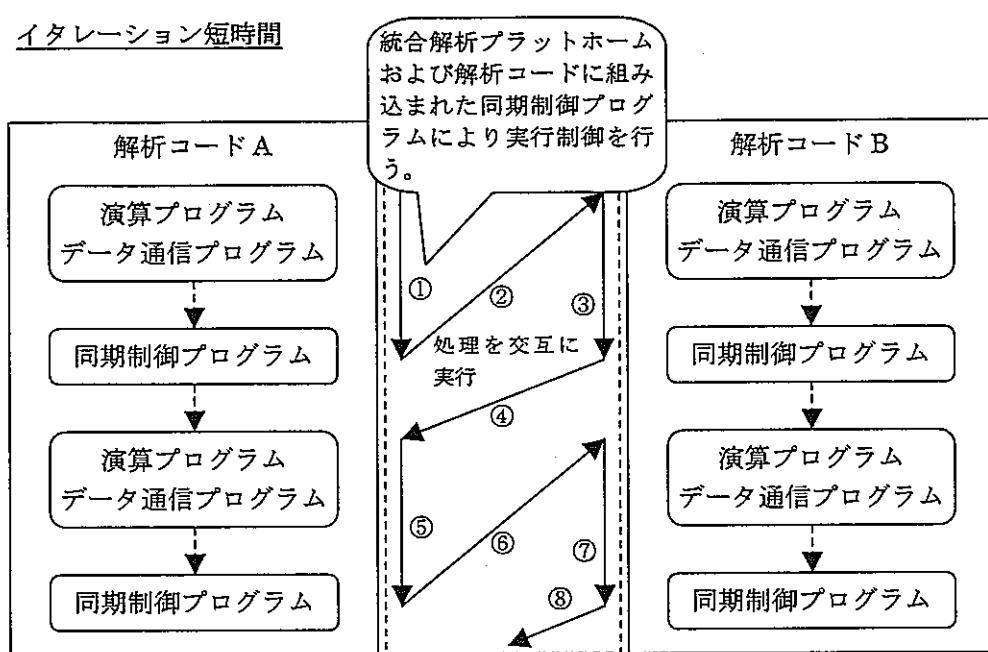


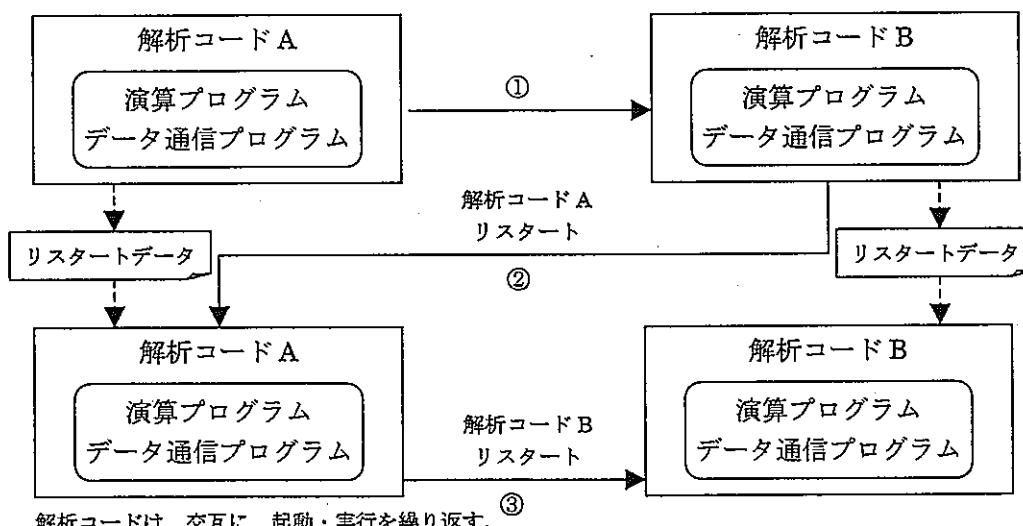
図 3.1.1-6 連成解析を目的とした場合の解析コード組み込み方法

イタレーション短時間



解析コードは、常に実行
同期制御プログラムに制御を移った場合に、一時的に停止

イタレーション長時間



解析コードは、交互に、起動・実行を繰り返す。

図 3.1.1-7 連成解析を目的とした場合の解析コードの実行制御方法

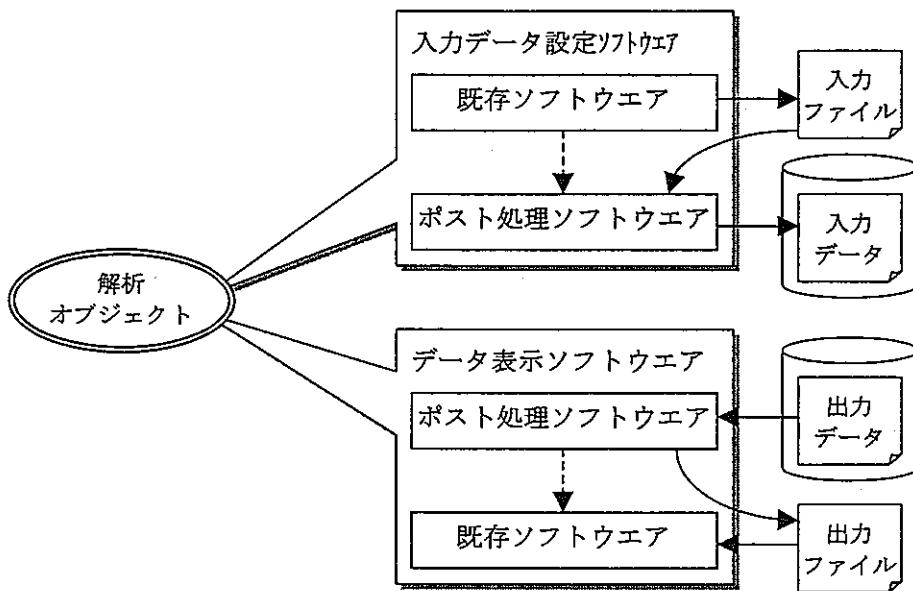


図 3.1.1-8 入力データ設定／データ表示ソフトウェア

(b) ユーティリティオブジェクト

ユーティリティオブジェクトは、解析オブジェクトと組合せて利用することにより、不確実性解析等の様々な解析を可能とする。また、前述したように、解析ネットワークの実行は、原則としてオブジェクトの実行状態とフローに基づき行われるが、ユーティリティオブジェクトを利用することにより、解析ネットワークの実行を、柔軟に制御することが可能となる。以下に、具体的なユーティリティオブジェクトについて示す。

1) 分岐オブジェクト

分岐オブジェクトは、図 3.1.1-9 に示すように、あらかじめ分岐オブジェクトに設定されたルールに従い、分岐オブジェクトにフローを介して接続されているオブジェクトの実行を制御する。本オブジェクトは、解析結果等に従い、実行するオブジェクト（解析コード等）を選択する際に利用する。

分岐オブジェクトのルールは、以下に示すように、「if-then」形式で表現される。

「if(条件) then (処理 T) else (処理 F)」 (下線部省略可)

条件：分岐オブジェクトが備えるデータ領域中の値の判定を行う。

処理 T：「条件」が真の場合に、実行される処理。

処理 F：「条件」が偽の場合に、実行される処理。

処理には、以下のコマンド等が用意される。

go(フロー...) 設定されているフローに続くオブジェクトを起動する。

exit 解析ネットワークの実行を中止する。

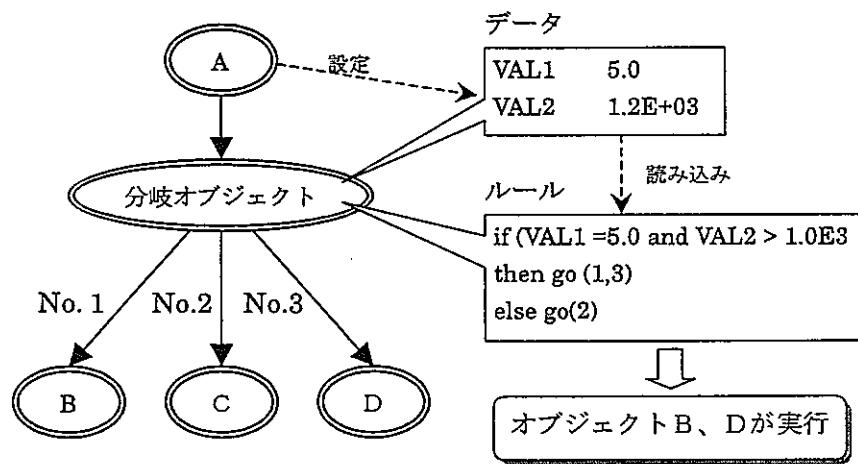


図 3.1.1-9 分岐オブジェクト

2) ループオブジェクト

ループオブジェクトは、図 3.1.1-10 に示すように、解析コード等を、繰返し実行する場合に作成されるループ状の解析ネットワークの制御を行う。

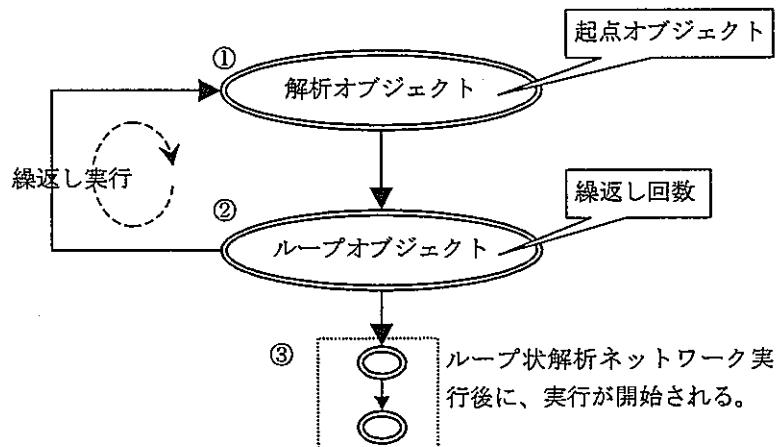


図 3.1.1-10 ループオブジェクト

ループ状解析ネットワークの実行は、最初に、あらかじめ起点として設定されたオブジェクトが実行され、その後、順次、ループオブジェクトを末端として、ループ状に結合されたオブジェクトを対象に実行が繰り返される。そして、ループオブジェク

トの実行回数が、オブジェクトの入力データとして設定された繰返し回数を超えた場合には、ループ状部分の解析ネットワークが終了される。そして、ループオブジェクトから出力しているフローが存在する場合には、フロード下流側に位置するネットワークに解析ネットワークの実行制御が移される。

3) 感度解析オブジェクト

処分場の設計解析や性能評価においては、感度解析により入力パラメータの結果へのインパクトを把握することが、設計合理化の方向性を示す上で重要である。

感度解析は、一般に、乱数に基づき発生された、もしくは、ユーザによりあらかじめ設定された入力パラメータに基づき、解析を繰り返すことにより、そのパラメータの結果へのインパクトを調べることにより行われる。しかし、このような繰返し計算は、多くの計算時間を要するため、パラメータの効率的な発生や計算の高速化が必須となる。

感度解析オブジェクトは、図 3.1.1-11 に示すように解析オブジェクトと組み合わせることにより、感度解析の対象となるパラメータの生成、分散処理環境上での生成されたパラメータを用いた解析の実行、解析結果の統計処理等、感度解析に必要となる一連の処理を行う。

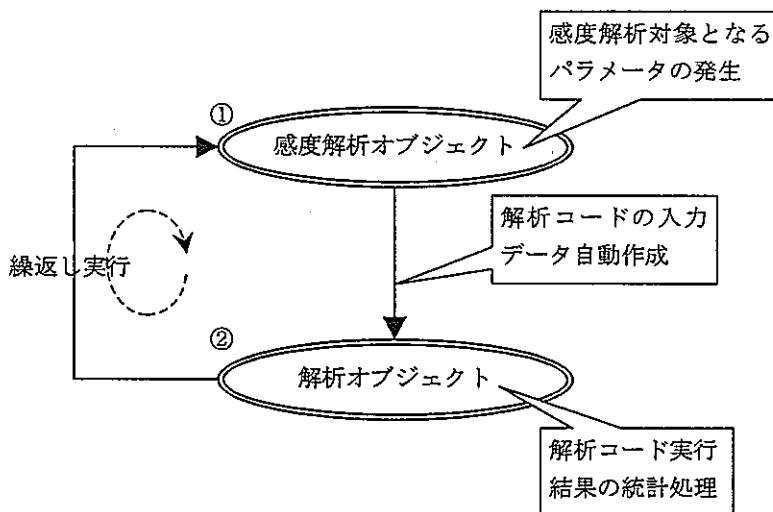


図 3.1.1-11 感度解析オブジェクト

感度解析オブジェクトは、以下の方法により、感度解析対象となるパラメータの自動生成を行う機能を備えると考えられる。

- 解析者定義
- モンテカルロ法
- ラテンハイパーキューブ法

4) 不確実性解析オブジェクト

処分候補地選定段階以降における安全評価解析や処分場の概念設計では、サイトを特定化し、実際の地質環境を対象とした様々な解析を行う必要がある。ここで、地質環境は、天然の地層が持つ不確実性を有するため、サイトを特定したとしても、地質環境は、一意的に決まるものではない。例えば、透水係数等は、ある程度の幅を持った分布データとして与えられることになる。

数値地層処分システムでは、このようなパラメータの不確実性の取扱いを、解析コード毎に対応するのではなく、統合解析プラットホームにおける汎用的な機能として実現する。これにより、既存の解析コードを、改良を加えることなしに不確実性解析を行うことが可能となる。

統合解析プラットホームにおける不確実性解析は、感度解析と同様に、不確実性解析オブジェクトと解析オブジェクトを組み合わせることにより行う。不確実性解析オブジェクトは、図 3.1.1-12 に示すように解析者が、あらかじめ設定したパラメータの分布データに基づき、自動的にパラメータ値を生成する。そして、データフローにより、解析コード実行に必要な入力データが受け渡され、コードが実行される。

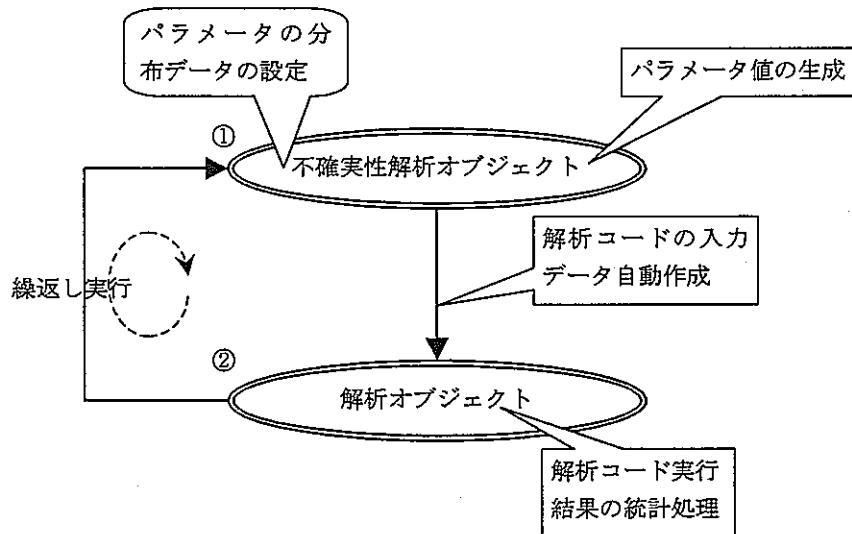


図 3.1.1-12 不確実性解析オブジェクト

5) 最適化オブジェクト

処分場設計においては、よりリアリスティックなモデルに基づいた解析コードを用いて、過度な保守性を排除することにより、処分場の最適化を図ることや、施工上や規制等による制約条件ならびに様々な解析結果を勘案して、システム全体のコストお

より安全性の双方の観点から最適化を図る必要がある。

最適化オブジェクトは、複数の制約条件や設計変数に基づき最適化を図るために汎用的なユーティリティオブジェクトである。本オブジェクトは、複数の解析オブジェクトと組み合わせることにより利用する。(詳細は、4.2.4 項を参照)

(c) データベースコンテナー

解析結果の妥当性を確保するためには、考慮すべき現象に即して適切にモデル化されている解析コードを利用することに加えて、モデルに対応した適切なデータセットが用いることが重要である。また、連成解析や接続解析等、複数の解析コードを用いて一連の解析を行う場合には、そこで使用されるデータセットの整合性を確保することも併せて必要となる。

数値地層処分システムでは、5 章で述べるように、解析に使用される地質環境条件や物性値等のパラメータは、統合データベースとして管理される。統合解析プラットホームは、この統合データベース内の品質保証されたデータを、解析に利用することによりデータセットの整合性確保や品質保証を実現する。

具体的には、図 3.1.1-13 に示すようにデータベースコンテナーにより、解析ネットワークでの統合データベースの利用を定義するとともに、データフローにより、統合データベース内のデータの解析コードでの利用方法(検索条件や単位変換等のデータ処理)を定義する。(詳細は、データフローの項を参照)

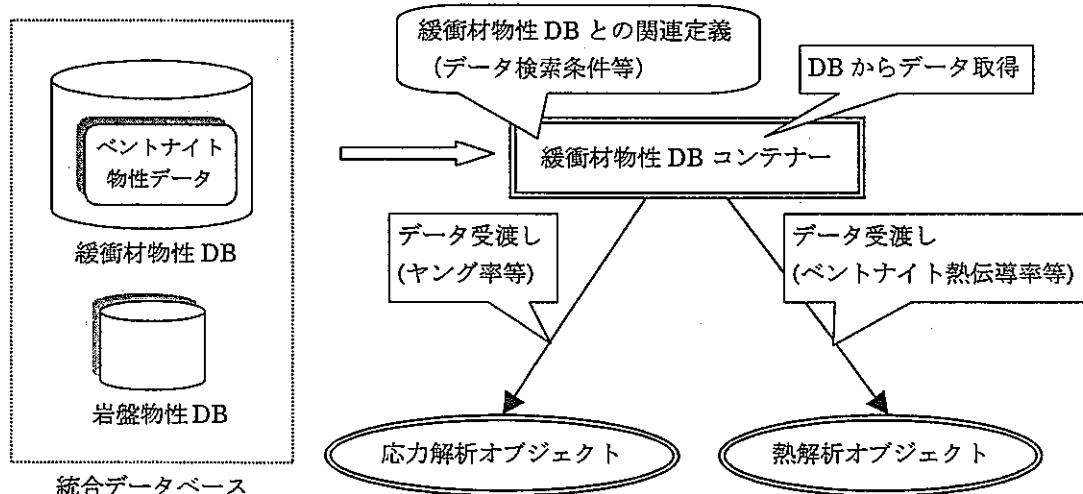


図 3.1.1-13 データベースコンテナー

(d) グローバルコンテナー

連成解析を行うためには、従来、対象となる現象の挙動をすべて含んだ数学モデルを構築し、このモデルに基づき、解析コードを開発している。この従来の方法は、問題に特化してプログラムの最適化（例えば、収束の取扱いや計算の高速化）が可能なことから、複雑な現象の連成解析や高速な演算処理を必要とする場合に適している。しかしながら、この方法は、連成対象となる現象の組み合わせに応じて、解析コードの開発が必要となるため、

- 容易に取捨選択的に現象の組み合わせを試すことが困難である。
- 解析コードの柔軟性や再利用性に欠ける。

といったデメリットが生じる。

よって、統合解析プラットホームは、従来の方法で作成された連成解析コードを、取り込み可能とともに、あらたに、個別現象を対象とした解析コードを、複数用いて連成解析を実現する機能を備える。この方法を採用することにより、

- 数学モデルの構築が困難であった連成現象に対しても、擬似的に連成解析が可能となる。
- あらかじめ用意された解析コードを、統合解析プラットホーム上で組合せることにより、比較的、容易に連成現象の解析が可能となる。
- 取捨選択的に、現象の組合せを行うことができる。

といったメリットが生じる。例えば、熱、浸透流、応力および地球化学の各現象を解析する 4 種類の解析コードを統合解析プラットホーム上に用意し、これを、解析者が自由に組合せて使用することにより、様々な連成現象の解析を行うことが可能となる。

統合解析プラットホームの機能を利用した連成解析は、前述した解析オブジェクトおよび解析オブジェクト間で共通に利用されるデータ、すなわち、現象間の橋渡しとなるデータを格納するグローバルコンテナーにより実現する。一般に、現象間でやり取りするデータは、幾何形状、状態量および時間情報から成る。例えば、核種移行と地球化学の連成解析の場合には、幾何形状、濃度分布、化学種組成、溶解度等が考えられる。また、地下水浸透流と熱伝導の連成現象の場合には、幾何形状、流速分布、温度分布、圧力分布等が考えられる。このように、現象間でやり取りされるデータは様々であるため、グローバルコンテナーでは、扱う現象に応じて柔軟にデータを格納できる機構を設ける必要がある。

よって、グローバルコンテナー内のデータの格納は、図 3.1.1-14 に示すように、扱う現象（格納するデータ）に応じてプログラミングにより対応するのではなく、データ（データ記述言語 DDL : Data Description Language）により記述された形式で、共通データを格納できる汎用的な機能により実現する。これにより、扱う問題（連成現象）に応じて、グローバルコンテナーを作成する必要がなくなる。

グローバルコンテナー内のデータは、現象（解析コード）間で高速にやり取りする必要があるため、解析ネットワークの制御の中心となるコントロールサーバ（図 3.1.1-4 参照）

上のメモリに格納する。なお、大規模空間（大量な空間メッシュを備えた問題）での非定常問題等を解く場合には、連成の様式等に強く依存するが、大量のメモリ（例えば、数 GB）を備えた計算機が必要になることが想定される。

解析オブジェクトとグローバルコンテナー間のデータの授受は、(a)解析オブジェクトにて述べたように、解析コードに埋め込まれたオブジェクトインターフェースにより行う。このオブジェクトインターフェースは、グローバルコンテナーとのデータ授受を行う前に、あらかじめ、DDLにより記述されたグローバルコンテナー内データのフォーマット情報を取得することにより、データを、整合性を持って送受信することが可能である。

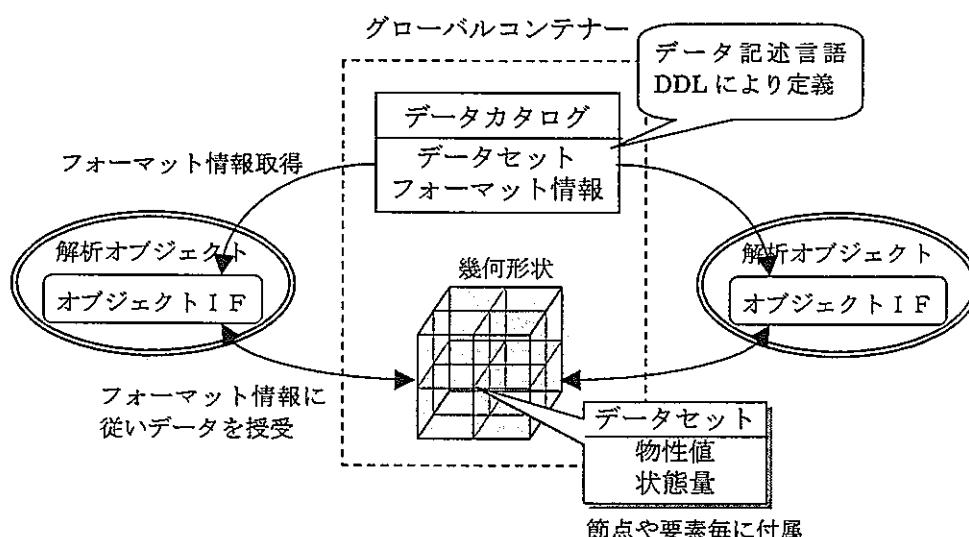


図 3.1.1-14 グローバルコンテナー

(e) データフロー

データフローは、以下に示すようにオブジェクト間もしくはコンテナーとオブジェクト間に作成され、各アイテム間でのデータの受渡しを定義する。

1) オブジェクト間データフロー

本データフローは、フロー上流側に位置するオブジェクトのデータを、フロード下流側に位置するオブジェクトの入力データに受け渡す。本機能は、複数の解析オブジェクト（解析コード）を用いた接続解析や解析オブジェクトとユーティリティオブジェクトとのデータのやり取りに利用する。

オブジェクト間のデータの受渡しは、図 3.1.1-15 に示すように、データフローに付随するオブジェクトインターフェース (OIF) により行われる。このオブジェクトインターフェースは、フロー上流側オブジェクトのデータセット（例えば、解析結果）から、デー

タ接続対象となるデータを取得し、フロー下流側オブジェクトの入力データの所定の位置に挿入する。これにより、複数の解析オブジェクトを用いた接続解析を実現する。

なお、この OIF は、オブジェクト間のデータの受渡しパターン毎に用意する必要があるため、効率的な開発手法を必要とする。よって、統合解析プラットホームでは、下記に示す 2通りの方法にて OIF を構築する。

① 汎用 OIF

簡易言語（スクリプト言語）により記述されたオブジェクト間のデータ受渡し方法に基づき、オブジェクト間のデータ接続を行う汎用的な OIF を開発する。これにより、データ受渡しパターン毎にプログラミングを行わずに、効率的に OIF の構築が可能となる。本 OIF は、簡易言語の記述能力やデータの処理速度の関係から、比較的、簡易かつ小規模（処理対象となるデータ量が、数 MB 以内）なデータ受渡しパターンに適用する。

② 固有 OIF

上記の汎用 OIF では、処理性能に問題がある場合には、C 言語等のプログラミングにより OIF を構築する。

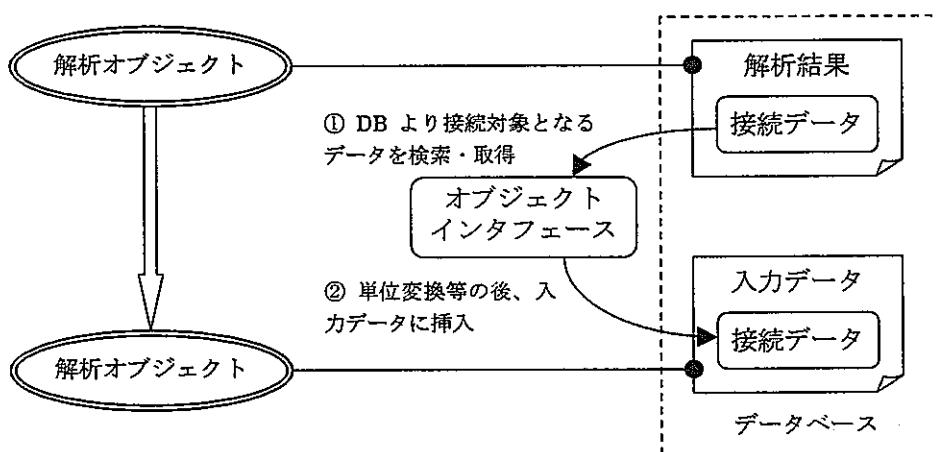


図 3.1.1-15 オブジェクト間データフロー

2) データベースコンテナー・オブジェクト間データフロー

本データフローは、図 3.1.1-16 に示すように、フロー上流側に位置するデータベースコンテナーに関連付けられている統合データベース内のデータを検索し、フロー下流側に位置するオブジェクトの入力データに受け渡す。本機能は、複数の解析オブジェクト（解析コード）と統合データベースとの連携に用いる。

本データフローは、オブジェクト間データフローと同様に、汎用 OIF や固有 OIF により、データの受渡しを実現する。

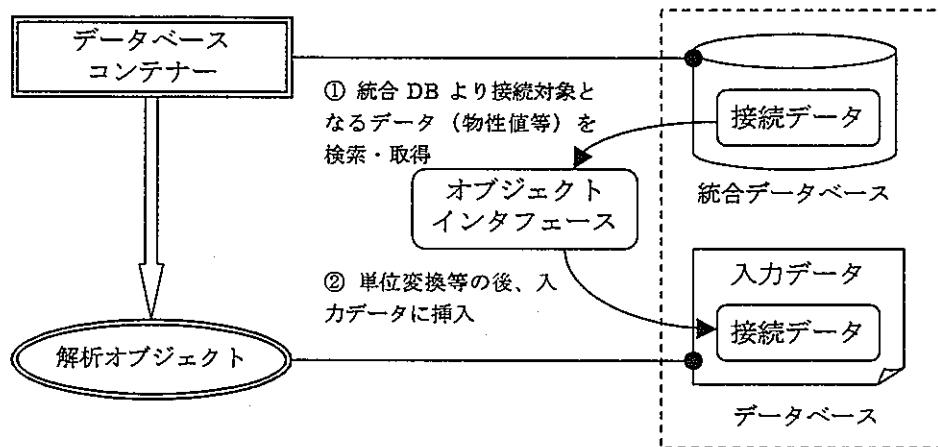


図 3.1.1-16 データベースコンテナー・オブジェクト間データフロー

3) グローバルコンテナー・オブジェクト間データフロー

本データフローは、(d)グローバルコンテナーにて述べたように、複数の解析オブジェクトおよびグローバルコンテナーを用いて連成解析を行う場合に利用する。オブジェクトからグローバルコンテナーへのデータフローは、オブジェクトが持つデータ（解析コードの計算機メモリ中に保持される解析結果等）をグローバルコンテナーに格納する。また、グローバルコンテナーからオブジェクトへのデータフローは、グローバルコンテナー中のデータを、オブジェクトのデータ（解析コードの計算機メモリ中に保持される入力データ等）に設定する。本データフローは、前項で述べたように、解析オブジェクトに組み込まれたオブジェクトインターフェースにより行う。

(3) 解析ネットワークの実行制御

本項では、前項で述べたアイテムの機能も踏まえ、システムによる解析ネットワークの実行制御方法について述べる。

解析ネットワークの実行は、ループオブジェクト等の解析ネットワーク全体の実行制御を行うオブジェクト、フロー（コントロールフロー、データフロー）およびオブジェクトに付属し、実行を強制的に制御する属性（制御属性）により決定される。解析ネットワークの実行が開始されると、最初に、オブジェクトが実行可否の判定が行われる。オブジェクトは、以下のいずれかの条件を満たす場合に、実行可能として判断される。

- ① 該当オブジェクトに入力しているフローが存在しない。
- ② 該当オブジェクトに入力しているすべてのフローの上流側に位置するオブジェクト

の実行が終了している。

- ③ 該当オブジェクトの制御属性が、「実行可」に設定されている。

オブジェクトが実行可能と判断された場合には、最初に、該当オブジェクトに入力しているデータフローに付属するオブジェクトインターフェースが起動され、その後に、該当オブジェクトに実行制御が移され、プレ処理ソフトウェア、メインソフトウェア（解析コード等）、ポスト処理ソフトウェアの順序で実行される。図 3.1.1-17 に、解析ネットワークの実行フローを示す。また、以下に処理内容を示す。

オブジェクト判定部

未実行のオブジェクトに対し、以下の①から③の処理をコントロールサーバ上で行う。なお、全てのオブジェクトの実行が終了している場合は、解析ネットワークの実行が終了したものとみなす。

① 制御属性判定

判定対象となるオブジェクトの制御属性が、「実行可」の場合には、該当オブジェクトを実行キューに追加する。なお、制御属性は、ループ上の解析ネットワーク上で、起点となるオブジェクトを指定する際に使用される。

② 入力フロー判定

判定対象となるオブジェクトに入力しているフロー（データフロー、コントロールフロー）が無い場合には、該当オブジェクトを、実行キューに追加する。

③ 入力フロー上流オブジェクト判定

判定対象となるオブジェクトに入力しているすべてのフロー（データフロー、コントロールフロー）の上流側に位置するオブジェクトの実行が完了している場合は、判定対象オブジェクトを、実行キューに追加する。

④ ステータス変更

オブジェクトの実行終了通知（ステータス変更）があった場合、再度、①に戻り、オブジェクト判定の処理を行う。

キュー取得部

コントロールサーバ上で、オブジェクトの実行開始処理を行う。

⑤ 実行可オブジェクト取得

実行キューより、実行可能なオブジェクトを取得するとともに、該当オブジェクトを、実行キューから削除する。

⑥ オブジェクト実行開始

実行キューから取得されたオブジェクトの実行を開始する。オブジェクトは、解析者が予め指定した計算機（計算サーバ）、または統合解析プラットホームにより最も計算機負荷が少ないと判断された計算機（計算サーバ）上で実行される。

実行開始を行った後、実行キューが「空」でない場合は、直ちに⑤の処理に戻る。（オ

プロジェクトの終了を待たずに、次の処理を行う。) これにより、実行に関して依存関係を持たないオブジェクトは、並列に実行されることとなる。

オブジェクト実行部

オブジェクトは、以下の処理に従い、計算サーバ上で実行される。

⑦ オブジェクトインターフェース実行

処理対象オブジェクトに入力しているすべてのデータフローに付随するオブジェクトインターフェースが実行され、データフロー上流に位置するアイテムから、該当オブジェクトにデータが受け渡される。

⑧ プレ処理ソフトウェア実行

データベースからのデータ取得や⑨の処理実行時に必要となる入力ファイル作成等を行うプレ処理ソフトウェアを実行する。

⑨ メインソフトウェア実行

上記で作成された入力ファイルを用いて、解析コード等のソフトウェアを実行する。

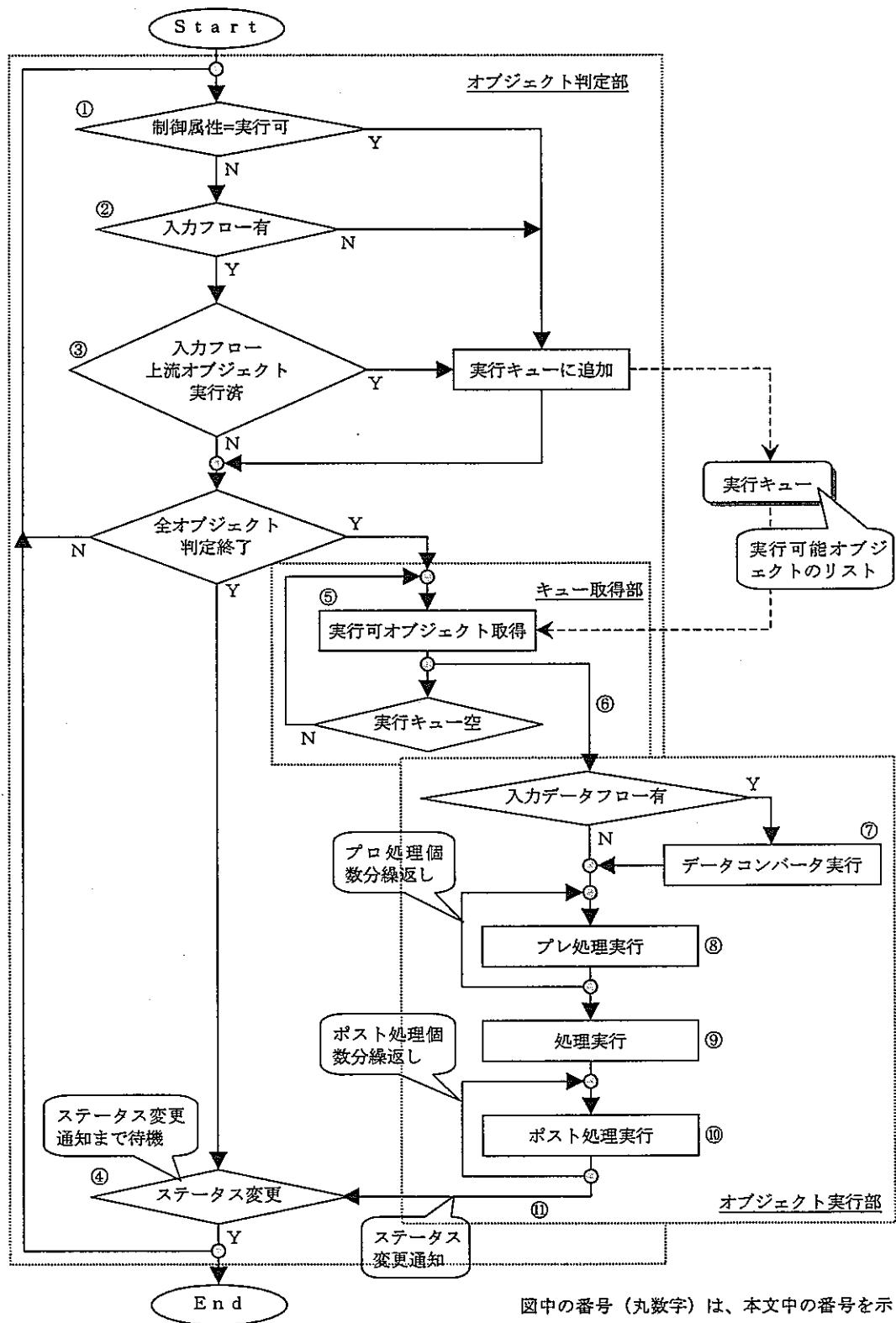
⑩ ポスト処理ソフトウェア実行

データベースへのデータ格納等を行うポスト処理ソフトウェアを実行する。

⑪ ステータス通知

コントロールサーバに、オブジェクトの終了を通知する。(通知後、④の処理を行う。)

図 3.1.1-18 に、上記処理の詳細フローを示す。



図中の番号（丸数字）は、本文中の番号を示す

図 3.1.1-17 解析ネットワーク実行フロー

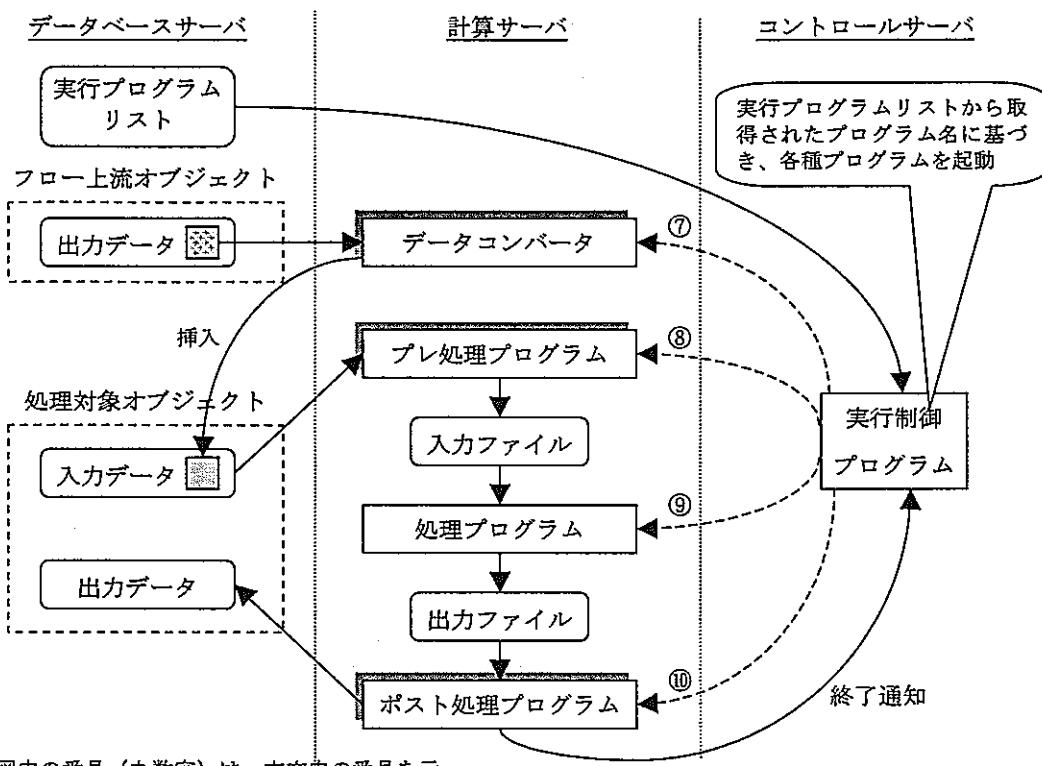


図 3.1.1-18 オブジェクト実行フロー

(4) まとめ

本研究では、数値地層処分システムの中核となるソフトウェアである統合解析プラットホームの機能検討として、解析手順の有効な表現手法として解析ネットワークの概念を導入とともに、解析ネットワークを構成するアイテム（部品）の種類や機能を検討した。これにより、統合解析プラットホーム上での連成解析や接続解析、統合データベースとの連携等についての機能や実現方法を明確にすることことができた。

今後は、さらに検討を進めることにより、解析ネットワークを構成するアイテムの充実を図るとともに、製作手法も念頭において、統合解析プラットホームの設計を進めることが必要である。

3.1.2 解析コード導入のための標準化手法

(1) 解析コード導入に関する要求事項

数値地層処分システムでは、今後の研究開発や処分事業の進展に伴い、第2次取りまとめ用いられた解析コードだけでなく、新規の解析コード（第2次取りまとめ用解析コードの改良版、新規開発コード、第2次取りまとめで使用されている解析コード以外の既存解析コード）の使用が想定される。よって、統合解析プラットホームでは、第2次取りまとめで使用された主要な解析コードに加えて、このような新規解析コードも、迅速に取り込めることが重要である。

このためには、統合解析プラットホームに、ソフトウェアとしての解析コードの特徴、例えば、解析コードの実行環境（計算機、オペレーティングシステム、メモリ等）や機能的な側面（有限要素法コード、差分法コード等）に左右されずに解析コードを導入できることが望ましい。しかしながら、統合解析プラットホームが備える解析ネットワークに基づいた連成解析等の機能やサーバ・クライアント形式に基づいた操作環境等を実現するためには、解析コードの実行環境、特に、オペレーティングシステム（OS）には、何らかの制限を設けることは避けられない。例えば、現在、パーソナルコンピュータのOSとして最も普及しているMS-Windows95/98では、元々、OSの機能としてマルチユーザでの使用を前提としてないことから、計算サーバ（詳細は、2.2.2項参照）、すなわち解析コードの実行計算機として利用することはできない。また、統合解析プラットホームが備える様々な機能は、解析コードの機能的な側面により利用できないケースが存在する。例えば、統合解析プラットホームでは、図3.1.1-3に示すように、最初に解析者が、解析ネットワークにより解析手順（解析コードの実行順序や解析コードの入力データ）を作成すると、その後は、システムがすべて自動的に解析コードの実行や入出力データの管理、解析コード間のデータ授受等を行う。しかしながら、解析コードに、ソルバー以外の機能、例えば、コード実行後に、入力データ作成用のグラフィカルユーザインターフェースが表示される場合には、解析ネットワークの実行が途中で中断され、解析者にデータ入力作業を要求することになる。

次に、解析コードの新規開発の観点から、解析コードへの要求事項を考える。前述したように、統合解析プラットホームは、データベースを用いた解析コードの入出力データの管理や解析に必要となるパラメータを格納したデータベースとの連携、ならびに不確実性解析に関する機能等、多くの汎用的な機能を備えている。このため、解析コード自体に、敢てこのような機能を備える必要がなくなり、本質的なソルバー機能のみに注力して開発すればよいことになる。これは、解析コードの開発コスト低減につながるとともに、統合解析プラットホームの機能により、一貫した解析の品質管理にもつながる。さらに、統合解析プラットホームが持つ連成解析に関わる機能に着目すると、解析問題によっては、従来の解析コード毎に、連成現象を実現した方法と比較して、単体現象を対象に部品化された解析コードの組合せによる連成解析は、現象の組合せの自由度が大きくなるとともに、

比較的容易に連成解析を実現することが可能となる。例えば、人工バリア中のベントナイトの挙動を考えると、熱、水理、応力、地球化学のそれぞれの現象に対応した部品化された解析コードを用意することにより、様々な連成解析が可能となる。また、ここで用意された解析コードは、当然のことながら、ベントナイトの挙動解析以外にも利用できることになる。

表 3.1.2-1 に、上記を踏まえて検討した解析コードへの要求事項を示す。なお、本要求事項は、解析コード固有の計算機環境（必要メモリ量等）への要求は除いたものである。また、本要求事項は、コード導入のための絶対的な制約条件に加えて、要求事項を満たせないことにより、統合解析プラットホームの機能が制約される場合や解析コードの開発効率や使用性の観点から避けるべき事項も併せて記載している。

表 3.1.2-1 解析コードに対する要求事項

要求事項	要求事項が満たされない場合の影響
	要求事項が満たされる場合の利点
解析コードは、UNIX 系 OS または WindowsNT 上で動作可能とする。	<p>サーバクライアント形式でのコードの利用（操作環境とは、別の計算機での解析コードの実行）ができない。 クライアント上で解析コードの実行は可能。 WWWブラウザを用いて、異なった計算機上の解析を行うことができる。</p>
解析コード実行中に、G U I によるデータ入力等、ユーザからのアクションを要求しない。ただし、キャラクターベースによるデータ入力要求は、解析コードが UNIX 系 OS で動作する場合は、基本的には、受入可能である。	<p>システムによる自動的な解析ネットワークの実行が不可能になる。 (解析の途中で、実行が停止され、データ入力等がユーザへ要求される。)</p> <p>解析（コード、データ管理）の実行を、全て自動的に行うことができる。</p>
解析コードの入出力は、ファイルを用いる。 (データベース管理システムとの連携等は含まない。)	<p>該当コードを対象として、入出力データを管理するための固有のプレポスト処理ソフトウェアの開発が必要となる。もしくは、入出力をファイルベースとするとコードの改良が必要となる。（ソースの入手が可能な場合のみ）</p> <p>統合解析プラットホームが提供するデータ管理用の汎用プレポスト処理ソフトウェアの利用が可能となり、コードの導入が容易である。 (必要に応じて、データ入力用 IF やデータ表示用 IF のみの作成で導入可)</p>

表 3.1.2-1 解析コード導入に関する要求事項（続き）

要求事項	要求事項が満たされない場合の影響
	要求事項が満たされる場合の利点
解析コードのソースの入手が可能である。 (1回のイタレーション時間が、短い場合には、解析の高速実行のため、解析コードの改良が必須となるため)	他のコード等との密なコミュニケーションを行う連成解析 ^(注) を行うことが不可能となる。 グローバルコンテナー（3.1.1 参照）を用いた効率的な連成解析 ^(注) が可能となる。
解析コードのリスタートが可能である。 (解析コードのソースの入手が不可能な場合)	連成解析 ^(注) が不可能となる。 1回のイタレーション時間が、長い場合には、解析コードの改良なしに、連成解析 ^(注) が可能となる。
時間的・空間的なパラメータの変遷等の付加的な機能は含まない。	左記機能は、統合解析プラットホームが備える汎用機能で実現されるため、開発が冗長となる。 開発効率が向上する。

注) 複数の解析コードを用いた連成解析を示す。

（2）連成解析のための標準化手法

統合解析プラットホーム上で部品として用意された複数の解析コードを用いて連成解析を実現するためには、前項で述べたように異なった計算機上で実行されている解析コード間で高速にデータ通信を行うことが必要となる。これは、基本的には、解析コード中に、他プロセスとのデータ通信を行うためのプログラム（関数）を挿入することにより実現する。しかしながら、一般的に、このようなデータ通信を行うプログラムは、解析コードの製作者、特に Fortran 言語のプログラマーにとっては馴染みのない場合が多く、プログラム開発が困難になるものと想定される。このため、データ通信に精通していないプログラマーにとっても、容易にデータ通信プログラムを記述できる関数群（サブルーチン群）を用意することが必要となる。

このような状況は、数値地層処分システムだけに限らず、クラスタ型の並列計算機上で並列処理を行う解析コードの開発（例えば、GeoFEM）においても同様な状況にある。このため、米国において、異機種間でのデータ通信やプロセス制御等を行うライブラリ（関数群）として、「MPI」（Message Passing Interface library）が開発され、多方面で利用されている。数値地層処分システムにおいても、本ライブラリを利用することが考えられる。

なお、MPI 等の並列化処理ライブラリに関しては、昨年度に引き続いで、詳細調査を行

うとともに、解析コードへの具体的な組み込み方法等について検討した。詳細を、3.1.3 項に記す。

3.1.3 並列化処理ライブラリの適用性の検討

(1) 計算機クラスタと並列化処理ライブラリ

(a) 計算機クラスタ

近年、科学技術計算の高速化に有効な手段として、計算機クラスタによる並列処理が注目されており、活発に研究開発が進められている。計算機クラスタとは、汎用のマイクロプロセッサを装備した小型計算機複数台と、これら計算機間を接続するイーサネットや高速バス等の通信装置で構成されるシステムである。

従来、科学技術計算の高速化にはベクトル型スーパーコンピュータの利用が主流であった。ベクトル型スーパーコンピュータが装備するプロセッサは、ベクトル計算・行列計算に特化して高速に演算できるよう設計されており、科学技術計算には効果的であった。しかしながら、汎用のマイクロプロセッサと比べて生産数が少ないため高価なものとなり、システムの価格を押し上げる要因となっていた。

これに対し、計算機クラスタでは低価格な汎用マイクロプロセッサを装備している。近年、汎用マイクロプロセッサの性能は急激に向上し続けており、パーソナルコンピュータやマイクロコンピュータのみならず、スーパーコンピュータにも搭載される程に高性能となっている。計算機クラスタは、低価格で高性能な汎用マイクロプロセッサを多数集めて单一の大規模計算をさせることで、従来のベクトル型計算機と比較してより優れた価格性能比を実現している。

現在利用されている高性能な計算機クラスタの例として米国Los Alamos国立研究所のAvalonの概観を図3.1.3-1に示す。Avalonは、コンパック社製のパーソナルコンピュータを68台接続し、15万ドルの投資で19GFLOPSの性能を達成している。



図3.1.3-1 計算機クラスタAvalonの外観

IBM社製のSP2やインテル社製のParagon等現在市販されているスーパコンピュータは並列型スーパーコンピュータと呼ばれ、ベクトル型スーパーコンピュータではない。いずれも内部に汎用マイクロプロセッサを多数装備し高速通信装置で結合した構成をとっている。例えばSP2では、IBM社製のワークステーションと同一機能をもつプロセッ

サユニット複数個を一つの筐体に収めている。各プロセッサユニットではOSが稼動しており、利用者は、個々のプロセッサユニットにログインし通常のワークステーションと何ら相違なく操作できる。また各プロセッサユニットはIBM独自の通信装置で互いに接続されており、したがって、SP2は外観上は一つの計算機であっても実際には計算機クラスタの構成をとっていると言える。したがって本報告では、これらベクトル型でない並列型スーパーコンピュータも計算機クラスタと呼ぶこととする。

計算機クラスタを用いて高速処理を実現するためには、以下のような手順をとる。

①計算の分割

処理対象となる単一の計算ジョブを複数のタスクと呼ばれる並列実行可能な単位に分割する。

②プログラムの記述

並列化処理ライブラリを用いて、各タスクをプログラムとして記述し、実行モジュールを作成する。

③タスクの割り当て

各タスクを計算機クラスタを構成する複数のプロセッサに割り当てる。

④タスクの実行

各プロセッサが、割り当てられたタスクの処理を並列に進めることにより、計算全体の処理時間を短縮する。

(b) 並列化処理ライブラリの特長

並列化処理ライブラリとは、複数のプロセッサを用いる並列処理型のプログラムを記述する際に用いる、プロセッサ間のデータ交換、同期、及びタスクの起動等の機能を提供するサブルーチンの集合である。1989年頃より開発が始まり、並列処理プログラムの記述方式の標準的なスタイルとして普及した。

並列化処理ライブラリの中心は、プロセッサ間でのデータ交換を実現するサブルーチンである。これらは、データの格納アドレス、データサイズ、送受信相手の識別番号等を引数として、CやFORTRAN等から呼び出すことのできる関数またはサブルーチンとして提供される。図3.1.3-2に、並列化処理ライブラリによる並列処理の概念図を示す。

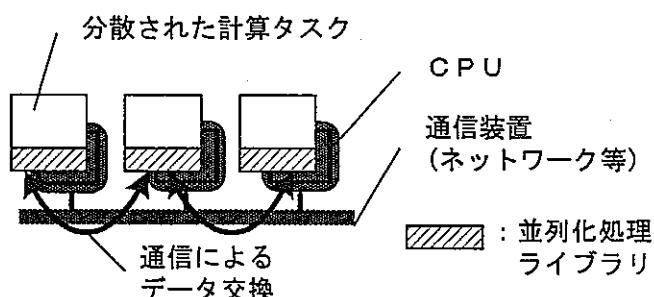


図3.1.3-2 並列化処理ライブラリ

従来のベクトル型計算機やスーパーコンピュータでは、使用する計算機に固有の命令やディレクティブ、あるいは関数等を使用する必要があり、異なるメーカー間では互換性が無かった。そのため、ある計算機で開発したプログラムを別の計算機で動作させようとした場合書き換えが発生し、開発効率を下げる原因となっていた。

これに対し並列化処理ライブラリは、計算機内部の詳細に関わる操作をライブラリ内部に隠蔽し、特定のメーカー、計算機に依存しないプログラミング仕様を提供しており、並列プログラムの移植性を高めている。並列化処理ライブラリ仕様の統一による移植性の向上を図3.1.3-3に示す。

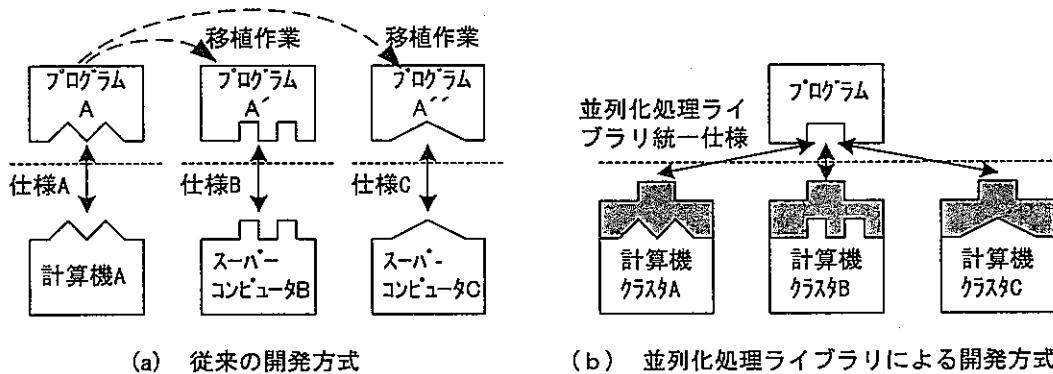


図3.1.3-3 並列化処理ライブラリによる移植性の向上

(2) 並列化処理ライブラリの動向

(a) PVMの普及

PVMは、1989年に登場し広く普及した世界最初の並列化ライブラリである。米国Oak Ridge国立研究所で開発され、TCP/IPネットワークで接続された計算機群を一つの計算機として統合し、仮想的な並列計算機として利用可能にするソフトウェアパッケージとして公開された。

PVMは、特別なハードウェアを一切必要とせず、イーサネットで接続されたワークステーションが複数台あれば直ちに並列処理を始めることができ、新規にスーパコンピュータを導入する場合と比べて安価であった。また既存のプログラミング環境をそのまま利用することができ、ユーザが新たに覚えるべき負担が少なかった。こうした点が支持され、広く普及することへつながった。

PVMは、単なるプロセッサ間のデータ交換だけでなく、異機種間でのデータ表現形式の自動変換機能や動的なタスク生成機能等を備えている。PVMが提供する主な機能を表3.1.3-1に示す。

表3.1.3-1 PVMの機能

機能	ライブラリ関数名
並列処理モジュールの動的な生成	pvm_spawn
1対1通信	pvm_send, pvm_recv
1対多、ブロードキャスト通信	pvm_bcast, pvm_mcast

科学研究振興のため、現在もフリーソフトウェアとして配布されており以下のWebサイトより、無償で入手・利用することができる。

<http://www.epm.ornl.gov/pvm>

PVMは、研究プロジェクトとして開発保守されているため、最新バージョンのリリース時期は不定である。利用者には、計算機科学の研究者や大学関係者が多い。

SGI/CRAY、IBM、Intel等の計算機メーカーは自社の並列処理型スーパコンピュータでもPVM互換な並列化処理ライブラリをそれぞれ提供している。しかしながら、各メーカーとも自社独自規格の並列化処理ライブラリも提供されており、こちらのほうがPVM互換のものと比べて性能向上が図られている場合が多い。

PVMの登場と普及により、計算機クラスタの実用性が実証され、また並列化処理ライブラリをベースとした研究開発が進むこととなった。

(b) MPIによる標準化の進展

1995年頃より、イーサネットスイッチやファーストイーサネット等の高速ネットワーク技術が普及し、安価に高速通信を実現できるようになった。その結果、従来大量のデータ交換をするため通信時間がボトルネックとなって並列処理には向かない、と考えられてきた計算についても、高速ネットワーク技術を活用して計算機クラスタによる高速処理が実現できることになった。大学研究機関やメーカーにて多数の計算機クラスタが開発され、実用に供されるた。

計算機クラスタが多数登場するにつれて、計算機クラスタ毎に異なる並列化処理ライブラリが利用されて移植性が損なわれる恐れがでてきた。そこで計算機クラスタのメーカーや大学研究者らがMPI Forumと呼ばれる団体を1992年に組織し、計算機クラスタで共通して利用可能な並列化処理ライブラリとして、MPI (Message Passing Interface) を1995年に制定した。

MPIの規格策定にあたっては、既存の並列化処理ライブラリの機能をできるだけ多く取り込むべく作業が進められたが、一方でメーカー間で調整がつかないものについては、仕様から削除された。

MPIは、並列化処理ライブラリの呼び出し規約のみを定めている。したがって、各計算機メーカーはライブラリの内部設計を自社製システムに特化した設計とすることで、性能の高い並列化処理ライブラリを提供でき、同時にMPIによる互換性を確保できる。MPIの提供する主な機能を表3.1.3-2に示す。

表3.1.3-2 MPIの機能

機能	ライブラリ関数名
1対1通信	MPI_Send, MPI_Recv
データ分散、収集通信 (1対多、多対1、多対多)	MPI_Bcast, MPI_Scatter, MPI_Gather, MPI_Allgather

MPIは市販の並列処理型スーパーコンピュータでは必ず標準で提供されており、メーカーのサポートを受けることも可能である。また、PVMと同様にネットワークで接続された計算機群でMPIを実現するフリーソフトウェアとして、米国Notre Dame大学のLAM及び米国Algonne国立研究所のMPICHがある。

(c) PVMとMPIの比較

PVMは、利用者が個々の計算機毎に個別にプログラムを作成せずに並列処理を実現することを目的として、Oak Ridge国立研究所が単独で開発した。したがって、仕様には計算機によっては実現の難しいものも含まれている。

一方、MPIは、並列処理型スーパコンピュータ、計算機クラスタのメーカーと研究者が集まって仕様を策定したものであり、ベンダー間で調整がつかないものについては有用な機能であっても仕様から削除された。そのためPVMではできてもMPIではできない、といった機能上の差が生じることとなった。これが現在でもPVMとMPIが並立している主な要因である。

PVMとMPIの最も異なる点は、並列に動作するタスクの起動である。PVMでは、`pvm_spawn`と呼ばれるサブルーチンを呼び出すことで、プログラム実行中に動的にタスクを生成することができる。この機能を活用すれば、プロセッサの利用率を向上させて効率的な並列処理を実現できる。

MPIでは、`pvm_spawn`に相当する動的なタスク生成機能がなくこれを求める要求が利用者から強く出され続けた。その結果、1997年に仕様策定されたMPI-2ではPVMと同様なタスク生成機能が仕様に盛り込まれることとなった。

通信機能においてもPVMとMPIには相違点がある。PVMは1対1、1対他の基本的な送受信機能のみを提供しているが、MPIは、その他に他対1、他対他の送受信機能も提供している。したがって、MPIではプロセッサの間でのデータ交換において適切なサブルーチンを呼び出すことで、PVMよりも簡潔にプログラムを記述できる場合がある。

以上の検討をまとめてPVMとMPIの比較を表3.1.3-3に示す。

表3.1.3-3 PVMとMPIの比較

項目	M P I	P V M
通信機能	◎ 通信、データの分散収集	○ 通信
動的なタスク起動	○ ただしMPI-2でサポート	○
開発サポート	○ 各計算機メーカー	△ フリーソフトウェアとして提供
仕様策定	M P I F o r u m	
通信性能	○ 各社とも自社のハードウェアに合わせ最適化	△ T C P / I P の性能に依存
利用者数	増加中	大学研究者が多い

PVM、MPIいずれにおいても多数の利用者が存在するため、今後も両者は並立していくと考えられる。しかしながら、メーカのサポート、メーカ自身による性能の高いライブラリの提供、及び通信機能の豊富さを考慮すると、今後新規に並列化プログラムを作成する場合にはMPIを利用するのが適切であると考えられる。

(3) M P I の使用方法

(a) プログラム記述例

MPIで実行するサンプルプログラムとして、図3.1.3-3に示すような並列処理を、C言語とMPIライブラリを用いて記述した。このサンプルプログラムを図3.1.3-5及び図3.1.3-6に示す。

本例では、計算機ws1起動されたマスタープログラムmasterが、計算機ws1、ws2及びws3のそれぞれで、スレーブプログラムslaveを生成し、各スレーブプログラムが計算を行う。このような並列プログラムをマスター/スレーブモデルと呼ぶ。MPIで記述できるプログラムは、このモデルに限定されるものではないが、マスター/スレーブモデルは有用な並列処理プログラム構成方法の一つである。

以下に処理の概略を述べる。

- ① マスタープログラムはMPI_Initを呼び出し、MPIライブラリの利用を実行可能にする。次に、MPI_Comm_rankを呼び出して自己のrankを得る。そしてMPI_Spawnを呼び出し、並列処理システムを構成する各計算機間でスレーブプログラムを実行を開始する。
- ② 各スレーブプログラムはMPI_Initを呼び出し、タスク間通信を実行可能にする。次に、MPI_Comm_rankを呼び出して自己のrankを得る。そして、MPI_Recvを呼び出し、初期値を受信する。
- ③ 更に、各スレーブプログラムは、MPI_Recvを呼び出し、自己のrankよりも1小さなrankを持つタスクよりデータを受信する。続いて、自己のrankよりも1大きなrankを持つタスクに対してMPI_Sendでデータを送信する。
- ④ 各スレーブプログラムは、マスタープログラムに計算結果を送信する。マスター

プログラムは、これらを順次受信する。

- ⑤ 処理が終了したら、マスター プログラム及びスレーブ プログラムは `MPI_Finalize` を呼び出して、MPIライブラリの終了を計算機に知らせる。

`MPI_Spawn` を用いない MPI プログラムでは、コミュニケーション MPI_COMM_WORLD のみを用い、相手の rank を指定して通信する。しかしながら、`MPI_Spawn` で生成された子タスクと親タスクとの間の通信では、下記の点が異なっており留意する必要がある。

- 親タスクは、`comm_children` で返されたコミュニケーション MPI_COMM_PARENT と子タスクの rank を指定して通信する。
- 子タスクは、規定のコミュニケーション MPI_COMM_PARENT と親タスクの rank を指定して通信する。その一方で、子タスクの間の通信にはコミュニケーション MPI_COMM_WORLD と相手の rank を指定して通信する。

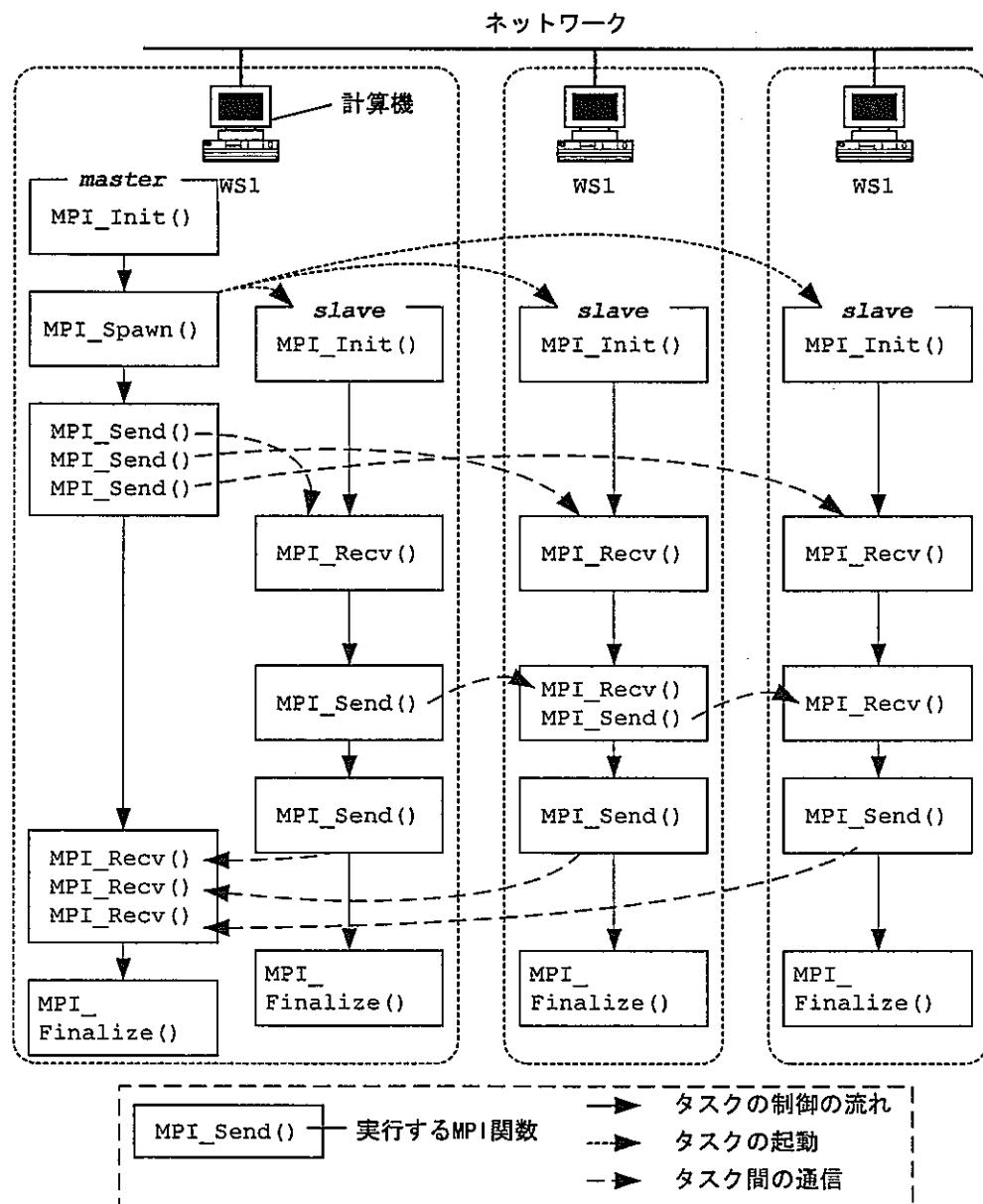


図3.1.3-4 処理の流れ

```

#include <stdio.h>
#include "mpi.h"

#define NUMSLAVES 3 /* 生成するスレーブの数 */
#define NUMDATA 100

#define MSG_DATA 4
#define MSG_RESULT 5

#define SLAVENAME "/usr/local/lam/examples/ex/slave" /* 実行モジュールのファイル名 */

int main(int argc, char *argv[])
{
    int myrank;
    int errs[NUMSLAVES];
    MPI_Comm comm_children;
    MPI_Status status;
    float data[NUMDATA];
    float result;
    int i;

    /* MPIライブラリの利用開始 */
    MPI_Init(&argc, &argv);
    /* 自己のrankの取得 */
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myrank);

    /* スレーブの生成、スレーブとのコミュニケーションはcomm_childrenで返される */
    if(MPI_Spawn(SLAVENAME, ++argv, NUMSLAVES, MPI_INFO_NULL, myrank,
                 MPI_COMM_WORLD, &comm_children, errs) != MPI_SUCCESS){

        fprintf(stderr, "master: error in MPI_Spawn.\n");
        MPI_Finalize();
        exit(1);
    }

    for(i = 0;i < NUMDATA;i++)
        data[i] = 1.0;

    /* スレーブのrankとコミュニケーションを指定し、初期値を送信 */
    for(i = 0;i < NUMSLAVES;i++)
        MPI_Send(data, NUMDATA, MPI_FLOAT, i, MSG_DATA, comm_children);

    /* スレーブのrankとコミュニケーションを指定し、計算結果を受信 */
    for(i = 0;i < NUMSLAVES;i++){
        MPI_Recv(&result, 1, MPI_FLOAT, MPI_ANY_SOURCE, MSG_RESULT, comm_children, &status);

        printf("master: receive from %d, msgtag = %d, reslut = %f\n",
               status.MPI_SOURCE, status.MPI_TAG, result);
    }

    /* MPIライブラリの利用終了 */
    MPI_Finalize();
}

```

図3.1.3-5 マスターの記述

```

#include <stdio.h>
#include "mpi.h"

#define NUMSLAVES 3
#define NUMDATA 100

#define MSG_DATA 4
#define MSG_RESULT 5
#define MSG_PASS 6

float work(int, float *);

int main(int argc, char *argv[])
{
    int myrank;
    MPI_Status status;
    float data[NUMDATA];
    float data[NUMDATA];
    float result;
    /* MPIライブラリの利用開始 */
    MPI_Init(&argc, &argv);
    /* 自己のrankの取得 */
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myrank);
    /* マスターのrank(0)とコミュニケータ(MPI_COMM_PARENT)を指定し、初期値を受信 */
    MPI_Recv(data, NUMDATA, MPI_FLOAT, 0, MSG_DATA, MPI_COMM_PARENT, &status);

    result = work(myrank, data);
    /* マスターのrank(0)とコミュニケータ(MPI_COMM_PARENT)を指定し、結果を送信 */
    MPI_Send(&result, 1, MPI_FLOAT, 0, MSG_RESULT, MPI_COMM_PARENT);
    /* MPIライブラリの利用終了 */
    MPI_Finalize();
}

float work(int myrank, float *data)
{
    float sum;
    float recvsum;
    MPI_Status status;
    int src, dst;
    int i;

    for(i = 0;i < NUMDATA;i++)
        sum += data[i];

    if(myrank != NUMSLAVES - 1)
        dst = myrank + 1;

    if(myrank != 0)
        src = myrank - 1;

    if(myrank == 0)
        /* スレーブのrankとコミュニケータ(MPI_COMM_WORLD)を指定し、値を送信 */
        MPI_Send(&sum, 1, MPI_FLOAT, dst, MSG_PASS, MPI_COMM_WORLD);
    else if(myrank == NUMSLAVES -1){
        /* スレーブのrankとコミュニケータ(MPI_COMM_WORLD)を指定し、値を受信 */
        MPI_Recv(&recvsum, 1, MPI_FLOAT, src, MSG_PASS, MPI_COMM_WORLD, &status);
        sum += recvsum;
    }else{
        MPI_Recv(&recvsum, 1, MPI_FLOAT, src, MSG_PASS, MPI_COMM_WORLD, &status);
        sum += recvsum;
        MPI_Send(&sum, 1, MPI_FLOAT, dst, MSG_PASS, MPI_COMM_WORLD);
    }

    return sum;
}

```

図3.1.3-6 スレーブの記述

(b) LAMでの実行例

本項では、並列化処理ライブラリMPIにより記述したプログラムの実行方法を説明する。

MPIプログラムの実行方法は、MPIをサポートする計算機システムによって異なる。本節では、LAMがインストールされた計算機システムでのMPIプログラムの実行方法について説明する。

1) 個人毎の設定

利用者が並列処理を利用する全ての計算機上で、各種の設定を行う必要がある。ここでは、利用者がCシェルを使用しておりLAMのインストールディレクトリが/usr/local/lamであると仮定する。まず、Cシェル設定ファイル.cshrcの変更手順を以下に示す。

① 以下のように、コマンド検索パスを設定している行を探す。

```
set path = (. ~ ~/bin /usr/bin /usr/sbin /usr/ucb)
```

...

② エディタを用いてファイルを編集し、以下の様に追加変更する。

```
set path = (. ~ ~/bin /usr/bin /usr/sbin /usr/ucb)
```

```
# LAM
```

```
if ( -e /usr/local/lam ) then
```

```
    setenv LAMHOME /usr/local/lam
```

```
    set path = ($LAMHOME/bin $path)
```

```
endif
```

...

2) 実行形式ファイルの作成

実行形式ファイルをhccコマンドを用いて作成する。マスター プログラム及びスレーブ プログラムのソースコードファイル名が、それぞれmaster.c、slave.cとなっている場合の実行例を以下に示す。

```
% hcc -o slave slave.c -lmpi
```

```
% hcc -o master master.c -lmpi
```

コマンドを実行したディレクトリに実行形式ファイルmaster及びslaveが生成される。

3) ホストファイルの設定

次に、並列処理を利用する全ての計算機の名前を記述したファイルを作成する。これをホストファイルと呼ぶ。

ホストファイルの形式は、一行に一つのホスト名を記述した一覧表である。空行及び記号”#”で始まる行は意味をもたないが、見易さのために適宜挿入できる。ホストファイルの記述例を以下に示す。

```
# LAMで用いるホスト  
ws1  
ws2  
ws3
```

4) LAMシステムの起動

MPIプログラムを実行する前には、lambootコマンドを用いてLAMシステムをバックグラウンドで実行しておく必要がある。 lambootコマンドには引数として、ホストファイルの名前を渡さなくてはならない。ホストファイルの名前をlamhostsとしたときの実行例を以下に示す。

```
% lamboot -v lamhosts  
LAM 6.4-a2/IMPI/MPI 2 C++ - University of Notre Dame  
Executing hboot on n0 (ws1)...  
Executing hboot on n1 (ws2)...  
Executing hboot on n2 (ws3)...  
topology done
```

ws1、ws2またはws3のいずれかにおいてlambootコマンドを一度だけ起動すれば、全ての計算機上でLAMシステムがバックグラウンドで実行された状態となる。

5) プログラムの実行

ws1、ws2またはws3のいずれかにおいてマスター プログラムを実行する。

```
% master  
master: receive from 0, msgtag = 5, reslut = 100.000000  
master: receive from 1, msgtag = 5, reslut = 200.000000  
master: receive from 2, msgtag = 5, reslut = 300.000000
```

6) プログラム実行状況の確認

タスクの実行状況の確認には、mpitaskコマンドを利用する。実行中は以下のように表示される。

TASK (G/L)	FUNCTION	PEER ROOT	TAG	COMM
COUNT	DATATYPE			
0 master	<running>			
0/0 slave	Finalize			
1/1 slave	Finalize			
2/2 slave	Finalize			

正常終了後は、以下のように表示される。

```
% mpitask  
TASK (G/L)          FUNCTION      PEER|ROOT  TAG    COMM  
COUNT   DATATYPE
```

7) 再初期化

実行中のタスクや通信を全て削除したい場合には、`lamclean`コマンドを利用する。プログラムのデバッグの際に活用できる。

```
% lamclean -v
killing processes, done
closing files, done
sweeping traces, done
sweeping messages, done
```

8) 終了

バックグランドで実行中のLAMシステムを終了するためには、`wipe`コマンドを利用する。

```
% wipe -v lamhosts
tkill n0 (ws1)...
tkill n1 (ws2)...
tkill n2 (ws3)...
```

(4) ソフトウェアの導入

(a) MPI フリーソフトウェア LAM の導入

1) ソースコードの入手

LAMは、ネットワークで接続された複数のパーソナルコンピュータやワークステーションを利用して、MPIのプログラムを開発及び実行するためのソフトウェアである。現在、米国Notre Dame大学が下記のWebサイトにおいて、LAMのソースコードを公開している。

<http://www.mpi.nd.edu/lam/>

2000年2月現在におけるLAMの最新バージョンは、6.4a2である。最新のソースコード式を格納するファイル名を以下に示す。

<http://www.mpi.nd.edu/lam/downloads/lam/lam-6.4-a2.tar.gz>

利用者は上記のファイルをインターネットを通じて入手する。

2) インストール

本節では、インストール手順の概略を示す。LAMのインストールには、UNIXの稼動する計算機が必要である。

① 計算機にログインし、スーパーユーザの権限を得る。

```
% su  (スーパーユーザになるコマンドを入力)
Password: (パスワードを入力)
# (スーパーユーザをしめすプロンプトが出力される)
```

- ② 入手したファイルを展開する。

```
# gunzip -c lam-6.4-a2.tar.gz | tar xf -
```

上記より作成されたディレクトリに移動し、configureを実行する。

```
# cd lam-6.4-a2
```

```
# ./configure
```

- ③ makeコマンドを実行する。/usr/local/lam-6.4-a2という名称のディレクトリが作成されLAMを利用するためのファイルが全て格納される。

```
# make
```

- ④ 利用者が/usr/local/lamという名称で参照できるように、リンクを作成する。

```
# cd /usr/local
```

```
# ln -s lam-6.4-a2 lam
```

(b) MPIフリーソフトウェアMPICHの導入

- 1) ソースコードの入手

MPICHはLAMと同様に、ネットワークで接続された複数のパーソナルコンピュータやワークステーションを利用して、MPIのプログラム開発及び実行するためのソフトウェアである。現在、米国Argonne国立研究所が下記のWebサイトにおいて、MPICHのソースコードを配布している。

<http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>

2000年2月現在におけるMPICHの最新バージョンは、1.2.0である。最新のソースコード一式を格納するファイル名を以下に示す。

<ftp://ftp.mcs.anl.gov/pub/mpi/mpich.tar.gz>

利用者は上記のファイルをインターネットを通じて入手する。

- 2) インストール

本節では、インストール手順の概略を示す。LAMのインストールには、UNIXの稼動する計算機が必要である。UNIXのコマンド操作については計算機に付属するマニュアル及び一般の解説書等を参考にされたい。

- ① 計算機にログインし、スーパーユーザの権限を得る。

```
% su (スーパーユーザになるコマンドを入力)
```

```
Password: (パスワードを入力)
```

```
# (スーパーユーザをしめすプロンプトが出力される)
```

- ② 入手したファイルを展開する。

```
# gunzip -c mpich.tar.gz | tar xf -
```

- ③ 展開により作成されたディレクトリに移動し、configureを実行する。

```
# cd mpi-1.2.0
```

```
# ./configure --prefix=/usr/local/mpi-1.2.0
```

- ④ makeコマンドを実行する。/usr/local/mpi-1.2.0という名称のディレクトリが作成

されLAMを利用するためのファイルが全て格納される。

```
# make
```

- ⑤ 利用者が/usr/local/mpiという名称で参照できるように、リンクを作成する。

```
# cd /usr/local
```

```
# ln -s mpi-1.2.0 mpi
```

3.2 プロトタイプシステムの開発・検証

統合解析プラットホームは、解析者が、オブジェクトとして定義された解析コードや最適化問題を扱うためのユーティリティ等を組み合わせた解析ネットワークを、分散計算機環境にて、解析コードの入出力データ等を管理するデータベースと連携しながら、適切に実行する必要がある。また、複数の解析コードの組合せにより連成解析を行う場合には、分散計算機環境においてコード間で高速にコミュニケーション（データ通信や同期制御）を行う必要がある。さらに、数値地層処分システムは、サイクル機構だけでなく実施主体等における利用を考慮すると、本システムの操作環境（ユーザインターフェースを提供する計算機）は、多大な開発コストや導入コストを必要とせずに、様々な計算機環境に対応できることが望ましい。

しかしながら、分散計算機環境において、解析ネットワークに従い、プロセス（解析コード等）の実行やプロセス間のデータ通信およびプロセスと連携したデータベースの制御（データ検索・登録）等を、高速に行うプログラムの開発には、様々な基盤技術が必要となり、多くのコストや思考錯誤的な作業が伴う。また、計算機環境に依存しないシステムの開発技術として、近年注目を集めている JAVA 技術の採用が考えられるが、本技術は、発展途上であるため、実用化システムとして利用する場合には、あらかじめ数値地層処分システムへの適用性や開発効率を検討しておく必要がある。

以上を踏まえて、本研究では、下記項目に関して統合解析プラットホームのプロトotypingを行い、開発手法や基盤技術の適用性に関して検討を行った。

① 解析ネットワーク制御プログラム

ユーザが作成した解析ネットワークに従い、解析コード等のプロセスの実行制御やプロセス間のデータ通信を、ワークステーションおよびパーソナルコンピュータを複数台利用した分散計算機環境上で行うプログラムを開発し、プログラムの開発手法や応答性等に関して検討を行う。

② 操作環境

解析ネットワーク作成から解析の実行、結果の評価といった一連の操作を行うユーザインターフェースの開発を通して、JAVA 技術の適用性や安定性について検討する。

③ 使用性

坑道離間距離と廃棄体定置ピッチを最小化する解析に必要なプログラム（解析ネットワークの部品）を、上記で作成したプロトタイプシステムに搭載することにより、統合解析プラットホームの使用性を検討する。

3.2.1 プロトタイプシステムの開発

(1) 解析ネットワーク制御プログラム

解析ネットワーク制御プログラム（以下、コントローラ）は、解析者が、WWWブラウ

ザ上に提供されたグラフィカルユーザインターフェースを用いて作成した解析ネットワークに従い、解析コード等を実行するプログラムである。コントローラは、図 3.1.1-17 に示すフローに従い、解析オブジェクト等を、他のオブジェクトやコンテナーとのデータ送受信を行いながら実行する。また、オブジェクト内では、解析コード等の主要プログラムに加えて、データベースに格納された入力データの取得を行うプレ処理ソフトウェアや出力データのデータベースへの格納を行うポスト処理ソフトウェアを実行する。

ここで、解析ネットワーク上のオブジェクトに付随する解析コードやプレポスト処理ソフトウェアは、分散計算機環境で実行するため、コントローラは、ネットワークを介して接続された計算機上のプロセスを、適切に制御する機構が必要となる。すなわち、図 3.1.1-4 に示すコントロールサーバにて、プロセスの実行順序を決定した後に、このプロセスを、計算サーバ上で実行する機構が必要となる。また、3.1.3 項で述べたように機能は限定されるが、パーソナルコンピュータ上でのみ実行可能な解析コードやプレポスト処理ソフトウェアも扱うため、計算サーバに加えて、クライアント（ユーザ操作環境：WindowsPC）でのプロセス制御も必要となる。

このような、ネットワークを介したプロセスの制御には、EWS だけでなく、WindowsPC も考慮して、プログラミングライブラリ（関数群）や異機種分散計算機環境に適した JAVA が備えるプロセス制御用のクラスを使用することが考えられる。よって、本研究では、異機種分散計算機環境でのプロセス制御手法の検討を目的として、コントローラのプロトタイプ開発を実施した。図 3.2.1-1 に、このプロトタイプシステムでのソフトウェア構成を示す。

なお、プロトタイプシステムは、「4.1 処分場設計解析コード／モデルに関する検討」で述べるように、現状、サイクル機構にて利用している解析コードの大半は、サンマイクロシステムズ社製ワークステーションやシリコングラフィックス製ワークステーションで動作していることから、表 3.2.1-1 に示す分散計算機環境上に構築した。

表 3.2.1-1 プロトタイプシステムの動作環境

種類	機種	用途
コントロールサーバ	サンマイクロシステムズ社製 EWS SUN Enterprise450	コントローラを実行
計算サーバ	サンマイクロシステムズ社製 EWS SUN Enterprise450	発熱量解析オブジェクト (ORIGEN2) および最適化オブジェクト等の各種ユーティリティオブジェクトを実行
計算サーバ	サンマイクロシステムズ社製 EWS SUN Ultra5	核種移行解析オブジェクト (MESHNOTE) を実行
計算サーバ	シリコン・ラフィックス製 EWS SGI OCTANE	空洞解析オブジェクトおよび熱解析オブジェクト (ABAQUS) を実行
データベースサーバ	サンマイクロシステムズ社製 EWS SUN Enterprise450	解析の入出力データ等を格納 データベース管理ソフトウェアには、「PostgreSQL」を採用
クライアント	コンパック社製 Windows98 PC	WWW ブラウザとして「Netscape Navigator4.7」を利用。また、解析結果の表示等のため、FEMAP や EXCEL を利用

コントローラは、図 3.2.1-1 に示すように、2 種類のモジュールから構成されている。以下に、各モジュールの主な機能および実現方法について述べる。

1) メインコントローラ

メインコントローラは、解析ネットワークに基づき、実行可能なオブジェクトを判定し、その結果をクライアントコントローラに送信する。本モジュールは、クライアントコントローラとの通信を行うメイン通信とオブジェクトの実行判定を行うサブモジュールより構成されており、将来的な連成解析機能等を考慮して、処理速度に優れたコンパイラ系言語 (C++ 言語) により開発されている。

2) クライアントコントローラ

クライアントコントローラは、メインコントローラから送信された情報に基づき、オブジェクトやデータフローに関連付けられている以下のソフトウェアを起動する。

- オブジェクト : プレポスト処理プログラム
- オブジェクト : 解析コード
- データフロー : オブジェクトインターフェース

クライアントコントローラは、コントロールサーバ、クライアントおよび計算サーバ間に横断的で構築されるプログラムであり、様々な機種上のソフトウェアの起動を制御するため、JAVA 言語および C 言語と MPI ライブラリを利用して開発されている。以下にクライアントコントローラを構成するサブモジュールを示す。

- クライアント通信 クライアント（WindowsPC）上で動作し、メインコントローラとの通信を行う。JAVA言語により開発されている。
- 起動サーブレット コントロールサーバ上で動作し、計算サーバ上で起動される外部プログラムの起動の起点となる。JAVA言語により開発されている。注) サーブレット：サーバ上で動作するJAVAプログラム
- MPIマスター MPIライブラリとC言語を用いて開発されており、コントロールサーバと計算サーバとの連携を行う。
- MPIスレーブ MPIライブラリとC言語も用いて開発されており、計算サーバとコントロールサーバとの連携および外部プログラムの起動を行う。
- 起動アプレット クライアントにおける外部プログラムの起動を行う。
注) アプレット：他のプログラム（Netscape Navigator等）に組み込んで動作させるJAVAプログラム

上記モジュールおよび次項で述べる操作環境を用いた解析ネットワークの実行は、以下の手順で行われる。

- ① ユーザが、操作環境（図3.2.1-2）にて、解析実行ボタンを選択する。
- ② 解析ネットワークの実行要求がクライアント通信に伝えられる。
- ③ クライアント通信からメイン通信に、実行可能オブジェクトの判定を要求する。
- ④ オブジェクト実行判定にて実行可能オブジェクトを判定した後、その結果を、クライアント通信に送信する。
- ⑤ オブジェクトを実行する計算機（計算サーバまたはクライアント）に応じてクライアント通信が起動要求を行う。

計算サーバでオブジェクトを実行する場合

- ⑥ 起動サーブレットにて、MPIマスターへ解析オブジェクトの起動要求を行う。
- ⑦ MPIマスターが、解析オブジェクトを実行する計算サーバのMPIクライアントに、解析オブジェクトの起動要求を行う。
- ⑧ MPIクライアントが、ABAQUSやORIGEN2等の外部プログラムを起動する。
- ⑨ 外部プログラム実行終了後、オブジェクト終了通知が、順次、MPIマスター、起動サーブレット、クライアント通信を通して、メイン通信に送信される。

クライアントでオブジェクトを実行する場合

- ⑩ 起動アプレットが、FEMAP等の外部プログラムを起動する。
- ⑪ 外部プログラム実行終了後、オブジェクト終了通知が、順次、起動アプレット、

クライアント通信を通して、メイン通信に送信される。

- ⑫ メイン通信からオブジェクト実行判定に、オブジェクト終了通知が送信される。
- ⑬ 再度、オブジェクト実行判定により、実行可能オブジェクトの判定が行われる。

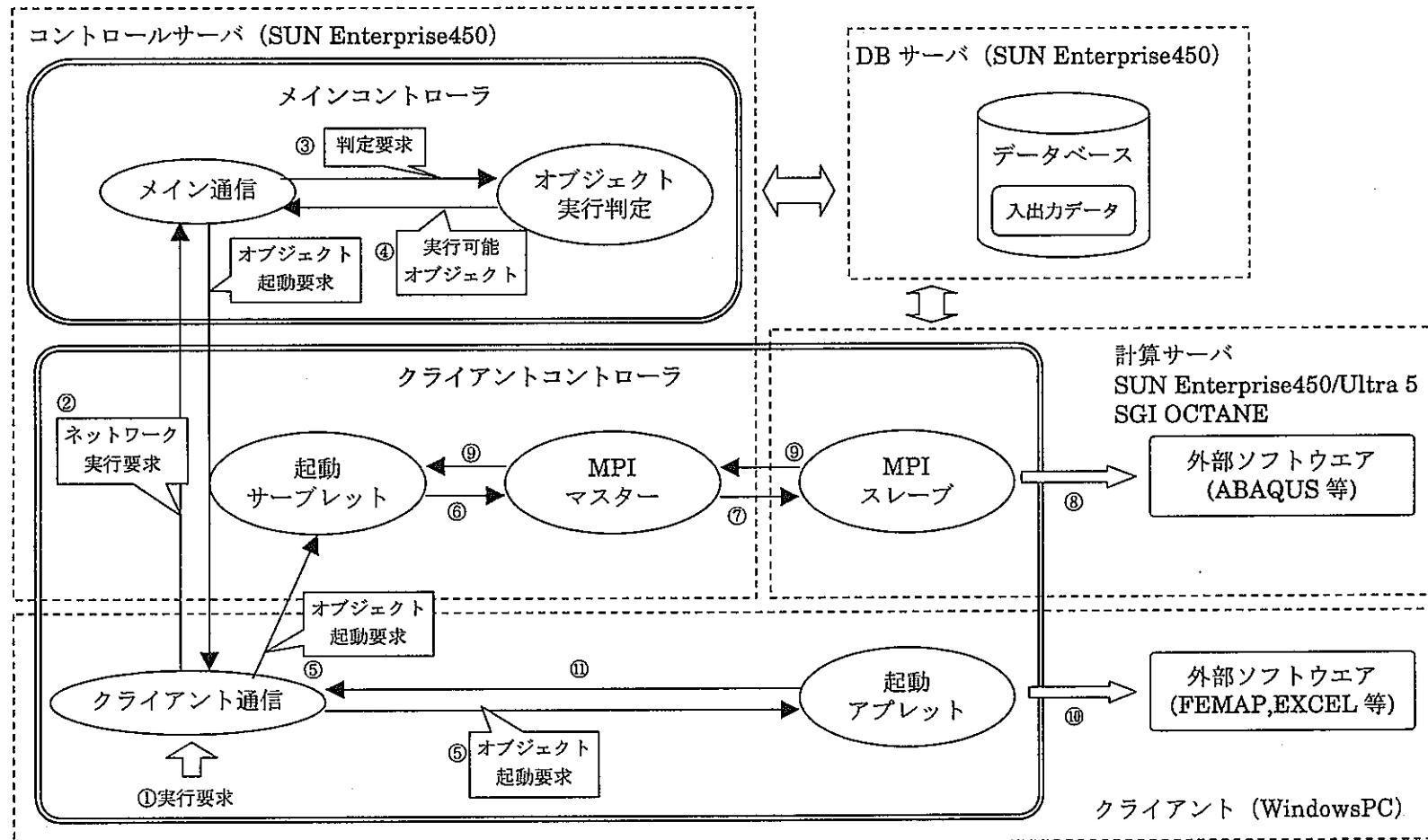


図 3.2.1-1 コントローラプロトタイプの構成

(2) 操作環境

操作環境は、計算機機種に依存せずに実行が可能な JAVA 技術を用いて開発する。JAVA は、計算機のオペレーティングシステム（OS : UNIX や Windows 等）と実行プログラム（ここでは、ユーザインタフェースプログラム）との間に、仮想的な計算機「バーチャルマシン」を配置することにより、OS の違いを吸収し、計算機機種に依存することなくプログラム開発および実行を可能とする技術である。しかしながら、本技術は、発展途上の技術であり、昨年度に実用システムでの利用を対象としたバージョン「JAVA2」が発表されたが、依然、実行速度の問題や安定性等に、問題を抱えているのが実状である。よって、操作環境のプロトタイプでは、特に、JAVA2 から本格的に提供されたグラフィックに関するクラス「Swing」を用いて開発を行い、本クラスの持つ機能やユーザインタフェースの使用性（特に応答性）について検討した。

図 3.2.1-2 に、ユーザインタフェースのプロトタイプを示す。本プロトタイプでは、アイテム欄から、解析ネットワークを構成するアイテムを選択し、ワークエリアに配置することにより、自由に解析ネットワークを構築することが可能である。

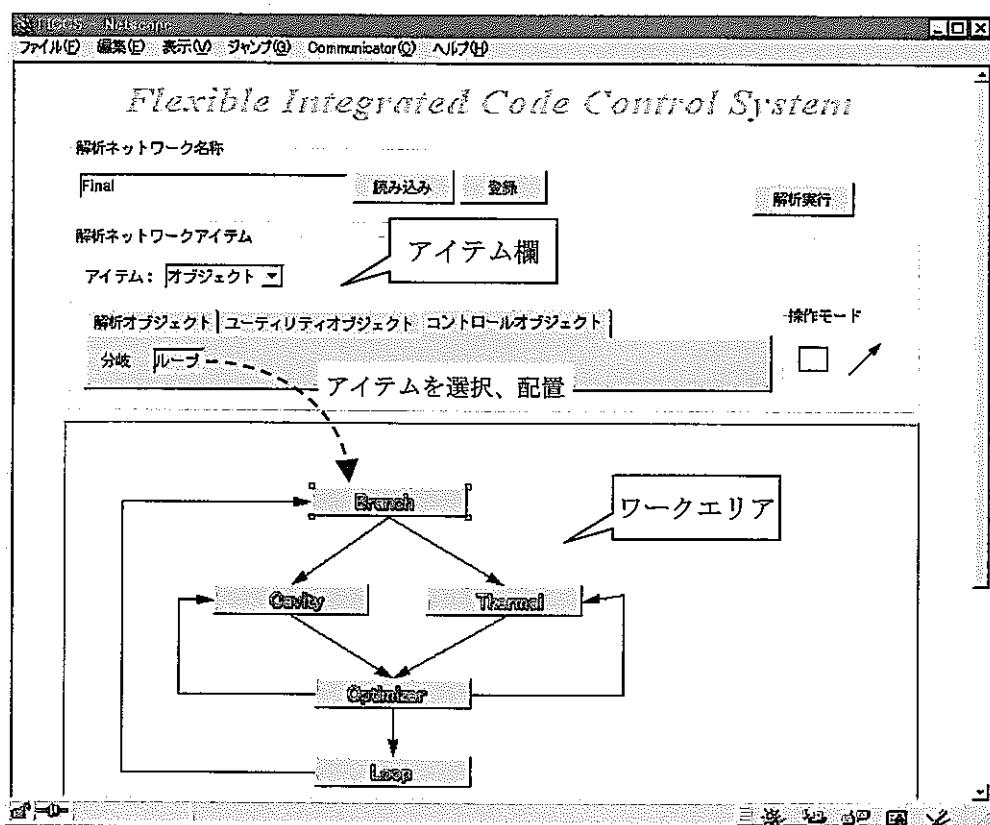


図 3.2.1-2 操作環境プロトタイプ

3.2.2 プロトタイプシステムの検証

本研究では、前項に示した統合解析プラットホームのプロトタイプシステム上に、例題として廃棄体の占有面積（廃棄体定置ピッチと坑道離間距離）を最小化する問題を実現し、実際の解析作業を行うことにより、プロトタイプシステムの検証を実施した。本項では、その中で、プラットホームの機能に焦点を当てて、プロトタイピングを通して得られた知見および技術課題を述べる。（統合解析プラットホーム上に実現された問題に関する検証結果は、3.3.1 項を参照）

(1) 解析ネットワーク制御プログラム

- 本プログラムは、従来の分散環境におけるプロセス制御やデータ通信に用いられてきたC/C++言語等を用いた開発手法に加えて、JAVA技術を採用することにより、UNIX系ワークステーションに限らず、WindowsPCにおいても、プロセス制御（FEMAP等の実行）を容易に行えることを確認できた。しかしながら、パーソナルコンピュータ(PC)上のプロセスの起動に関しては、ネットワーク環境（ネットワーク負荷や構成）やPCの性能によっては、時間を要することから、今後、さらなる検討が必要である。さらに、連成解析のように、解析コードのイタレーション（解析コードの起動）が頻繁に行われる場合に、本プロトタイプで採用した方法（JAVAとC言語/MPIによりプロセス起動を行う方法）は、起動時のオーバーヘッドが問題となるため、異機種分散計算機環境上での高速なプロセス起動方法を検討する必要がある。
- プログラム開発には、複数のプログラミング言語やMPIライブラリを用いているため、言語間のインターフェース等に多数の制約があり、プログラム構成が複雑になっている。今後は、プログラミング言語の統一やプログラム構成の見直しを図ることにより、システムの開発効率や保守性・拡張性を向上する必要がある。
- 現状のプログラム構成では、クライアント（WindowsPC）が主体となり、処理を行っているため、クライアントは常に稼動しておく必要がある。しかしながら、現状のWindowsPCは、連続運転に向いていないことから、今後は、長時間の解析も念頭において、コントロールサーバと計算サーバを主体に、バックグラウンド処理として解析を実行できるように、開発手法やプログラム構成を見直す必要がある。

(2) 操作環境

- JAVA技術（Swing）を採用することにより、柔軟にグラフィカルユーザインターフェース（GUI）の開発が可能であることを確認できた。また、本技術を採用することにより、インターネット（サイクル機構）だけでなく、インターネット（実施主体や国等）からの利用可能性を示すことができた。
- JAVA言語で記述されたプログラムを解釈するバーチャルマシン（VM）は、WWWブ

ラウザ (Netscape Navigator、Internet Explorer) に付属して提供されるが、これは、WWWブラウザ毎に仕様が異なり、同一のプログラムであっても、動作が異なるか、または、動作しないことがある。このため、現状では、WWWブラウザの種類やバージョン、すなわち VM を特定する必要がある。

- 本プロトタイプで開発したような JAVA 技術により構築された GUI を利用するためには、比較的高性能のパーソナルコンピュータ (Pentium III 500MHz、メモリ 64MB 以上) を必要とする。
- Swing 自体に若干の不具合 (バグ) を含んでおり、複雑な処理を行う場合、例えば、オブジェクトの移動やデータフロー作成等の処理は、動作が不安定となる。また、グラフィックスの描画等に不具合が含まれる。

3.3 解析手法の導入

統合解析プラットホームのプロトタイプ上に、典型的な処分技術に係わる解析手法を展開することにより、実現性や操作性の検証に加えて、数値地層処分システムの活用イメージの把握を目的として、4章にて検討されたコードや市販の汎用プレポストプロセッサー(FEMAP)を組み込み、一連の解析を実行可能とした。また、統合解析プラットホームを用いた連成解析に係わる機能の検証を目的として、個別事象解析コード間のデータの受け渡しによる連成解析の適用例を例示するとともに、統合解析プラットホーム上で連成解析を行うための具体的な手順を明確にした。

3.3.1 解析手法の検証

プロトタイプシステムの例題として取り上げる設計最適化のケーススタディ（詳細については4.2節にて後述）について、具体的な条件の下で解析ネットワークとして記述された一連の解析を実行させ、前節までに検討したプラットホームの操作性を含めた解析手法の実現性を検証した。

3.1.1項に示されたとおり、統合解析プラットホームを用いた解析手順は以下のようになる。

- ・解析ネットワークの構築（入力フェーズ）
- ・解析ネットワークの実行（実行フェーズ）
- ・解析結果の確認（出力フェーズ）

解析ネットワークの作成に際しては、予め解析モデルやコードを選定し、各々の役割を明確にするとともに、それらの関係をデータの流れとして定義する必要がある。本項ではこれを定式化フェーズと呼ぶことにする。

ここでは、これらの各フェーズにおける解析者の具体的な作業手順を確認しながら、段階的に検証を進める。

(1) プロトタイプシステムを用いた解析の流れ

a. 設計プロセスの整理（定式化フェーズ）

処分坑道離間距離と廃棄体定置間隔を決定するための設計プロセスを整理し、必要なモデル／コードとそれぞれの処理内容ならびにデータの流れを明確にする。また、各解析コードを連携させるために必要なインターフェイスを洗出し、詳細仕様の検討と製作を行う。

b. 解析ネットワークの構築（入力フェーズ）

入力フェーズでは、図3.2.1-1に示した操作環境（GUI：グラフィカルユーザインターフェース）を用いて、解析ネットワークを構築し、以下の手順で全てのアイテムに関する入力データを作成する。

1) 処分場幾何形状共通コンテナー

まず始めに、ここで作成した解析ネットワーク内の解析オブジェクトが共通に使用する場のデータ（処分坑道径、緩衝材厚さ、ガラス固化体高さなどの主要寸法）を定義する。

2) 空洞解析オブジェクト、熱解析オブジェクト

次いで、GUI 上で空洞解析オブジェクトないし熱解析オブジェクトの入力データ作成を選択すると、FEMAP が起動し、処分場幾何形状共通コンテナーで定義した主要寸法に従い、FEM 解析メッシュが自動生成される（サイクル機構所有の処分場基本設計システムのマクロ機能を活用）。解析メッシュが生成された後、解析種別（空洞解析、熱解析）に応じた材料データ、境界条件、荷重条件等を指定する。その後、FEMAP 標準搭載のコンバータを利用して ABAQUS の入力データを作成する。

3) 核種移行解析オブジェクト

同様にして、核種移行解析オブジェクトの入力データ作成を選択すると、予めデータベースに登録されたテンプレートデータのリストが表示され、これを選択することで入力データの指定を行う。

4) 燃焼計算オブジェクト

核種移行解析オブジェクトと同様の手順で入力データを指定する。

5) 最適化オブジェクト

最適化オブジェクトの入力データ作成を選択すると、廃棄体 1 体当たりの処分面積を最小化する際に必要な下記データを定義するための画面が表示される。これらのデータを入力し、最適化オブジェクトに必要な入力データを設定する。

- ・設計変数初期値（坑道離間距離、廃棄体ピッチ）
- ・許容温度
- ・最大せん断ひずみ
- ・局所安全率最小値
- ・坑道離間距離最小値
- ・廃棄体ピッチ最小値

6) 緩衝材物性 DB コンテナー

緩衝材物性 DB コンテナーの入力データ作成を選択すると、予めデータベースに登録されたテンプレートデータのリストが表示され、これを選択することで以下に示す緩衝材に関する諸データの指定を行う。

- ・緩衝材名称
- ・熱伝導率[W/mK]
- ・比熱[-]
- ・単位体積重量[kg/m³]
- ・空隙率[-]

7) 分岐オブジェクト

入力データ作成用 GUI を用いて、以下に示す分岐ルールを定義する。

ルール 1) 繰返し計算における各反復で、廃棄体ピッチ、坑道離間距離のいずれか

一方または双方が変更された場合は熱解析オブジェクトを実行する。

ルール 2) 坑道離間距離が更新されていない場合は、空洞解析オブジェクトは実行しない。

8) ループオブジェクト

入力データ作成用の GUI を用いて、繰返し計算回数の上限値を設定する。

c. 解析ネットワークの実行（実行フェーズ）

この段階で解析ネットワーク内に配置された全てのアイテムが実行可能となるため（解析オブジェクトは実行可能状態を示す橙色となる）、解析ネットワークの実行を行う。（プロトタイプシステムの実行制御の流れについては図 3.2.1-1 参照）

d. 解析結果の確認（出力フェーズ）

解析が正常に終了したことを確認した後、出力表示メニューを選択することで、解析オブジェクト毎にビューアとなるアプリケーション（FEMAP、EXCEL）が自動的に起動し、それぞれ解析結果が自動的に読み込まれる。図 3.3.1-1～図 3.3.1-4 に、主な解析オブジェクトの出力表示例を示す。

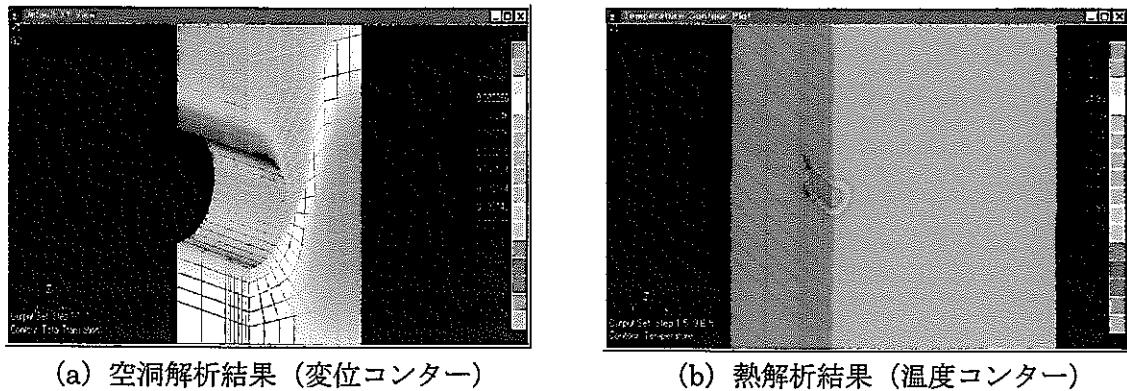


図 3.3.1-1 空洞解析、熱解析オブジェクト出力表示例 (FEMAP)

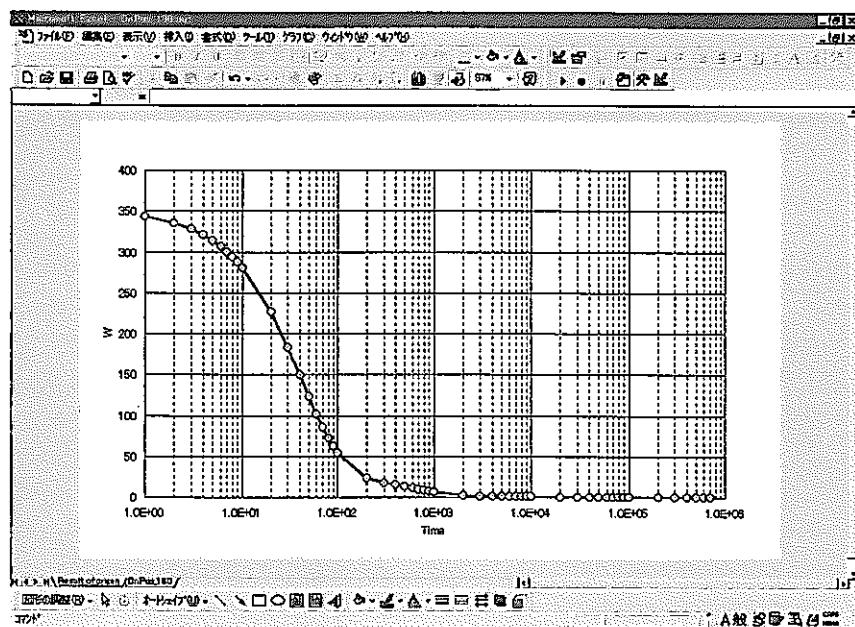


図 3.3.1-2 ORIGEN2 オブジェクト出力表示例 (発熱履歴 ; EXCEL)

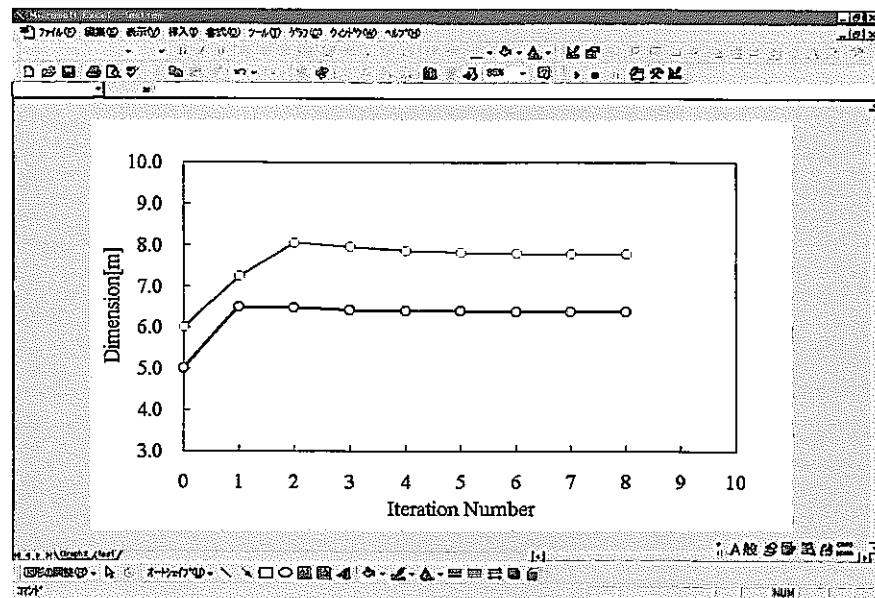


図 3.3.1-3 最適化オブジェクト出力表示例（設計変数の収束履歴；EXCEL）

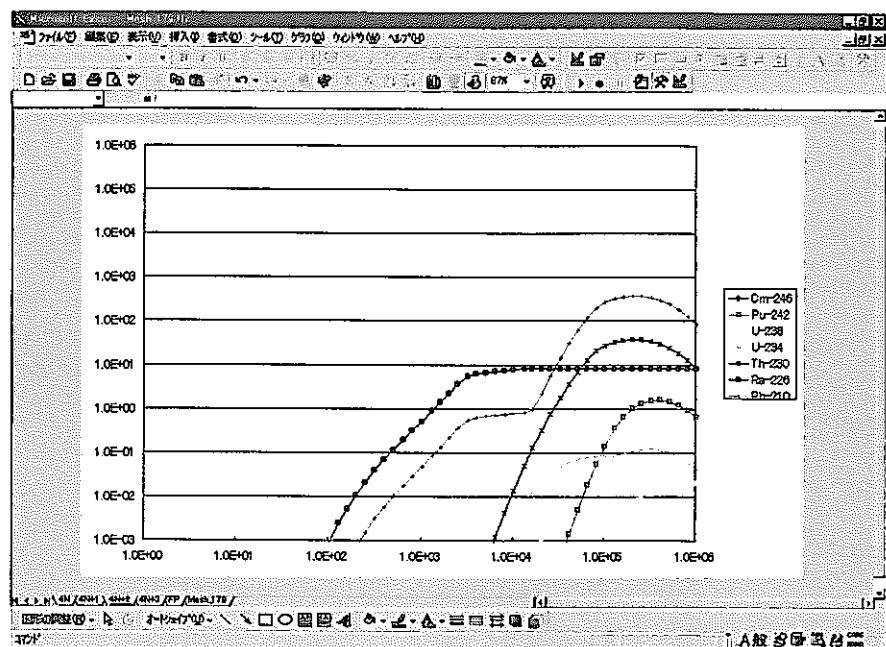


図 3.3.1-4 核種移行解析オブジェクト出力表示例（核種放出率；EXCEL）

(2) 空洞解析／熱解析

a. 前提条件

- ・硬岩系処分坑道横置き方式を対象とし、空洞解析／熱解析で同じ形状モデルを用いる。
- ・処分深度は地下 1000m とする。
- ・空洞解析では支保工は考慮しない。
- ・深さ方向のモデル化範囲はガラス固化体近傍のみとし、地表までのモデル化は行わない。
- ・空洞解析モデルの側面境界は深さ方向にローラ境界とし、底面は固定境界とする。
- ・熱解析モデルの側面境界は断熱条件とし、上下面是地温勾配 $3^{\circ}\text{C}/100\text{m}$ のみを考慮した温度規定境界とする。
- ・非定常熱伝導解析では計算時間の短縮のため、処分後 5 年のみを評価期間とする。また、自動時間ステップ機能は使用しない。

b. 解析条件（材料物性値、解析モデル）

表 3.3.1-1 岩盤物性値（空洞解析）

ヤング率 E	MPa	3.7×10^3
単位体積重量 γ_t	kg/m ³	2670.0
ポアソン比 ν	—	0.25
内部摩擦角 ϕ	Deg	45.0
粘着力 c	MPa	15.0
側圧係数 K _o	—	1.0

表 3.3.1-2 熱物性値（熱解析；非定常熱伝導解析）

	ガラス固化体	オーバーパック	緩衝材	岩盤
熱伝導率[J/y·m·K]	3.78×10^7	1.63×10^9	2.46×10^7	8.83×10^7
比熱[kJ/kg·K]	0.96	0.47	0.59	1.0
密度[kg/m ³]	2855.20	8015.00	1745.80	2670.0

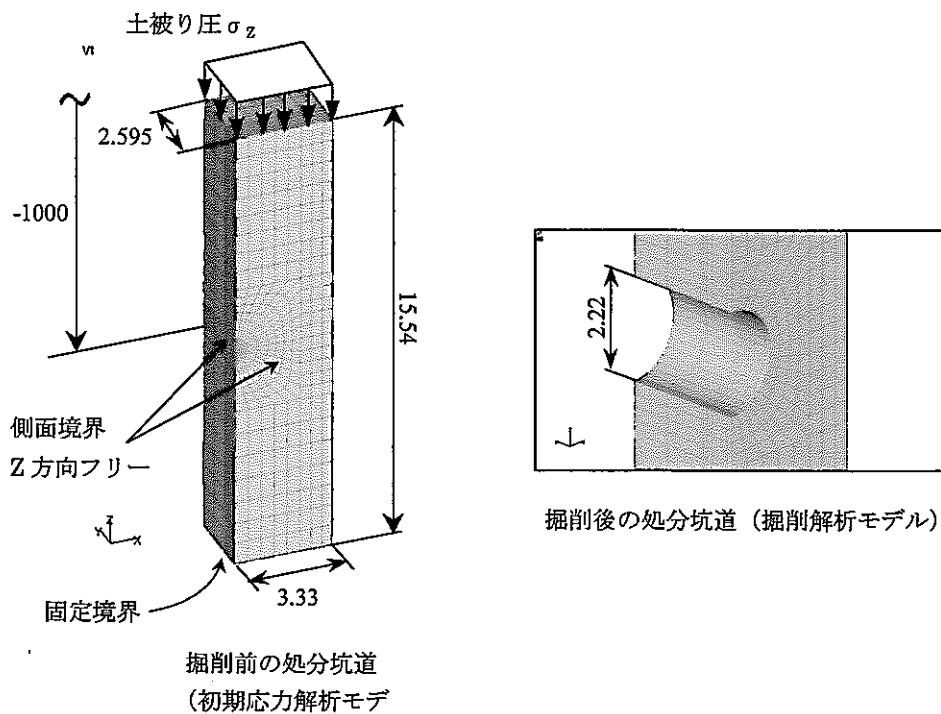


図 3.3.1-5 空洞解析モデル (単位 ; m)

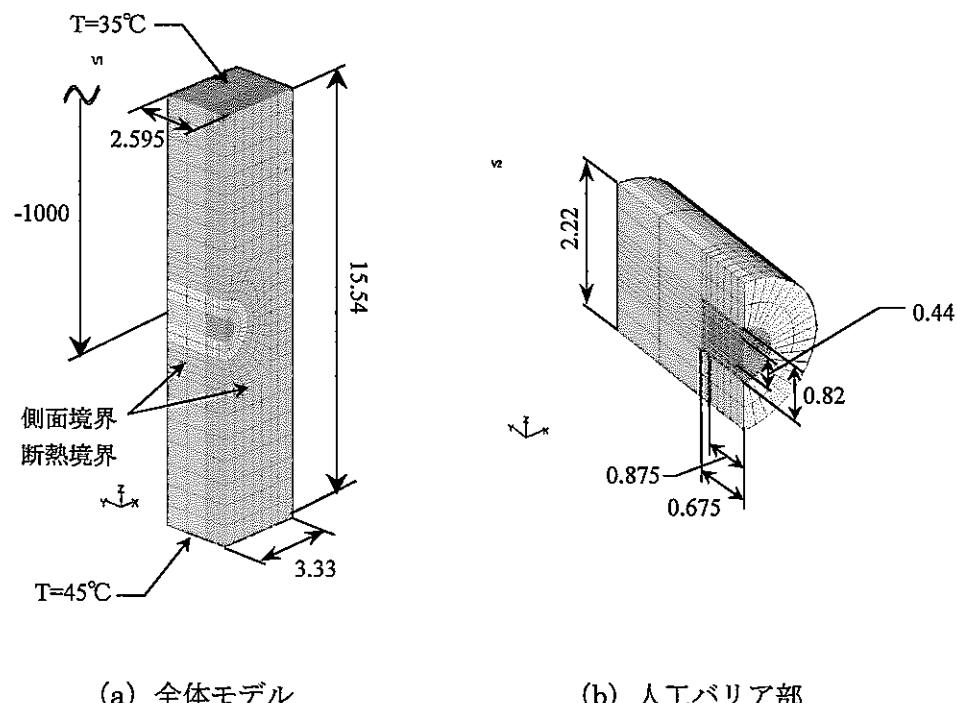


図 3.3.1-6 热解析モデル (単位 ; m)

(3) 最適化計算

a. 最適化問題の構成

表 3.3.1-3 本試解析で対象とする最適化問題の構成

設計変数	坑道離間距離 X 廃棄体ピッチ Y	6.66[m] 5.19[m]	3.0D に相当
制約条件	最大せん断ひずみ γ_{\max}	0.01 以下	仮定
	局所安全率 F	1.0 以上	〃
	最大温度 T_{\max}	94°C 以下	〃
評価関数	ガラス固化体 1 体当たりの処分占有面積	$XY [m^2] \rightarrow \text{Min}$	

b. 最適化手法の選定

本試解析で検討する最適化問題を以下に示すとおり一般化する。

$$\text{Minimize} \quad ; \quad f(\mathbf{x}) \quad (3.3.1-1)$$

$$\text{Subject To} \quad ; \quad \mathbf{x} \in \mathbf{S} \quad (3.3.1-2)$$

ここで、 \mathbf{X} は設計変数ベクトル、 $f(\mathbf{x})$ は目的関数、 \mathbf{S} は制約条件を満足する解の集合（実行可能領域）である。一般に、数理的手法による最適化問題に対するアプローチは最適解のもつべき一般的な性質を明らかにし、これを満足する解を試行錯誤的に見つけることである。そのためには、目的関数 $f(\mathbf{x})$ の勾配 ∇f と勾配をもう一度微分したヘッセ行列 $\nabla^2 f$ を用いて、解空間を構成する $f(\mathbf{x})$ の幾何学的性質を調べる必要がある。

数値地層処分システムで扱う最適化問題に対しては、問題の性質に応じた手法を任意に選択できることが望ましく、研究開発ないし処分事業が進められる様々な場面で現れる最適化問題に柔軟に対処できることが望ましい。本検討では、最急降下法やニュートン法などの多くの最適化手法に内在する一般的な性質を含んでいると考えられる逐次二次計画法を適用することで上記の最適化問題を解くこととした。

逐次二次計画法は、繰返し計算の各反復において元の問題を近似した二次計画問題を逐次解いてゆく方法であり、制約条件のない最適化問題に対する準ニュートン法を制約付きの問題へ拡張したものと考えることができる。

c. 解析結果

図 3.3.1-7 に最適解に至るまでの設計変数の変化を示す。また、第二次取りまとめにおける検討結果との概略の比較を図 3.3.1-8 に示した。収束回数は 5 回で最適解に達しており、主に坑道離間距離の変化の寄与が大きい（図 3.3.1-9 出力リスト参照）。初期値として用いた設計変数は、第二次取りまとめで予め検討されたデータであり、もともと制約条件をほぼ満足しているため、最適解に至るまでの変動はわずかなものとなつて

る。

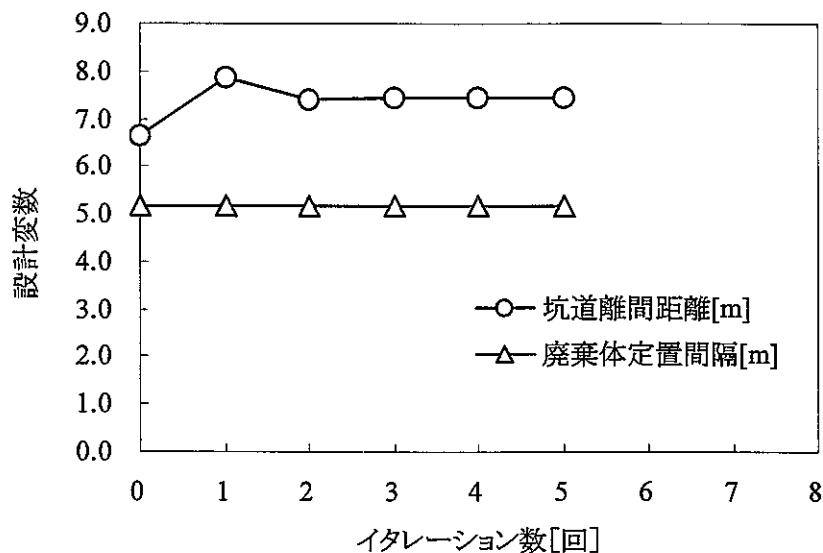


図 3.3.1-7 設計変数の変化

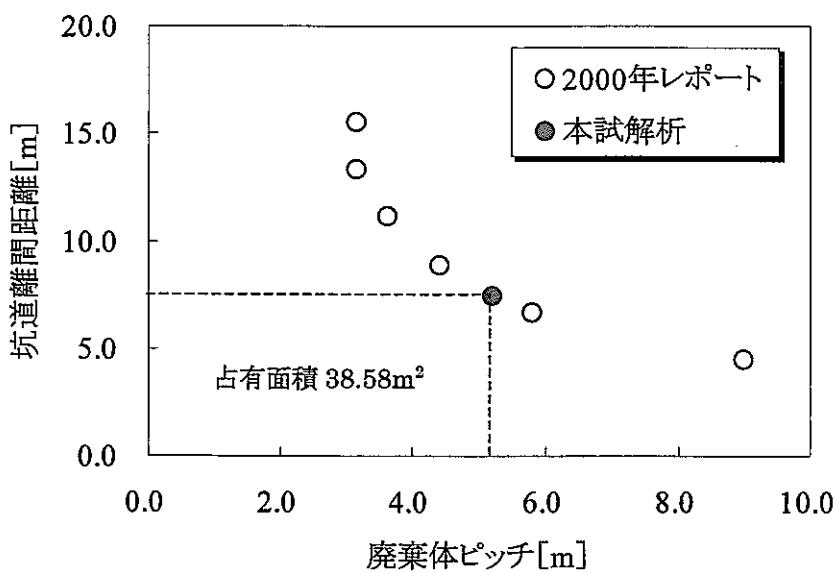


図 3.3.1-8 2000 年レポートとの概算比較
(参考図 ; 本試解析と 2000 年レポートで解析条件は異なる)

*** INPUT DATA READ FROM ***

NUMBER OF VARIABLES = 2
NUMBER OF EQUALITY CONSTRAINTS = 0
NUMBER OF INEQUALITY CONSTRAINTS = 5

CURRENT POINT:

x(1)= 3.71704
x(2)= 2.59500

*** COMPUTATIONAL RESULTS ***

OPTIMAL SOLUTION:

OBJECTIVE FUNCTION = 9.64571
PENALTY FUNCTION = 9.71922
(PENALTY PARAMETER = 100.00000)

VARIABLES: (GRADIENT OF LAGRANGIAN:)
X(1)= 3.71704 (0.00257)
X(2)= 2.59500 (0.00264)

PROBLEM CONTAINS NO EQUALITY CONSTRAINT

INEQUALITY CONSTRAINTS: LAGRANGE MULTIPLIERS:
C(1)= 0.00051 U(1)= 0.76212
C(2)= 6.18102 U(2)= 0.00000
C(3)= -0.00074 U(3)= 100.00000
C(4)= 0.38704 U(4)= 0.00000
C(5)= 0.00000 U(5)= 1.08842

NUMBER OF MAJOR ITERATIONS 5
NUMBER OF QP PROBLEMS SOLVED = 0

Iteration Number - Design Variables		
0	3.330000000000000	2.595000000000000
1	3.929670407003990	2.594999994859660
2	3.709372735464440	2.595000003030300
3	3.715973895389220	2.594999985744330
4	3.717661619653020	2.594999996626600
5	3.717037917269310	2.595000015473020

TERMINATED

図 3.3.1-9 最適化オブジェクト出力リスト

(4) 結論および課題

プロトタイプシステムの例題として取り上げた設計最適化のケーススタディについて、解析ネットワークとして記述した一連の解析を具体的な条件下で実行させ、プラットホームの操作性を含めた解析手法の実現性を検証した。

以下に本試解析を通じて得られた課題を列挙する。

a. 簡単に試行錯誤が行える環境

最適解を得るための収束状況が悪いケース等では、初期値や制約条件を変えた試行錯誤的なプロセスが必須となる。現状では、坑道離間距離や定置間隔などの初期値を変える場合に、解析メッシュを自動的に更新するために基準となる節点座標データ（強制変位解析の結果）が複数パターン必要となり、必ずしも迅速に試行錯誤を行うことはできない。解析に必要となるデータ群の蓄積ならびに、それらを容易に利用できる環境の構築が重要である。

b. 解析の効率化

本検討では解析時間を短縮するため、解析ネットワーク内で最も時間の要する非定常熱伝導解析モデルを大幅に簡略化しているにもかかわらず、1ケースあたり約5~6時間が必要としている。これは、上述の簡単に試行錯誤が行える環境を構築する上でも大きな負担となる。現状で最も処理時間を使っている原因是、1回の試行計算に必要な情報（制約関数や目的関数の微係数）を収集するために空洞解析、熱解析を何度も実行するためである。これらの効率化に向けては、以下の対策が重要な位置付けとなる。

① 応答曲面近似手法の導入

② タスク分散

なお、②項のタスク分散を実現するためには、しばしば計算機毎にライセンスを購入する必要性が生じ、高価なアプリケーション等についてはコスト増などの現実的な問題に直面することが考えられる。

c. プラットフォームの安定化

計算の途中で、プラットフォーム制御部で使用している公開ソフトウェア（無償で公開されているMPIライブラリなど）に起因すると思われる異常終了が数回発生することがあった。計算中に解析ネットワークで記述された以外の処理が始まったり（例えば、リモートマシン上の熱解析オブジェクトが連続で起動される等）、障害発生のメッセージを出力し異常終了となるなど、現時点ではいずれも原因は明らかになっていない。このような場合は、現状では最初から計算をやり直す必要があり、作業効率の低下に直接的に影響する。不具合発生時の原因特定と復旧を迅速に行うためには、少なくともプラットフォーム制御部に実装するソフトウェアについては新規開発する方向性が望まし

48.

3.3.2 連成解析に関する検討

(1) 検討方針

複数の個別事象解析コード間の双方向通信により連成解析を行うための具体的検討を行う。コード間の双方向通信が必要となるものは、個別の非定常解析が2つ以上ある複数プロセス間の連成である。

この種の連成解析を統合解析プラットホーム上で実現するには、とくに以下に示す観点からの検討が重要となる。

- 連成変数の空間的取り扱い
- 連成変数の時間的取り扱い

連成変数の空間的取り扱いについては、例えばメッシュ構成の異なるモデル間での節点データ、要素データの平均化や補間などがあげられる。前提としている座標系やモデル化領域が異なる場合は、ベクトルやテンソル量の座標変換等が必要となる。これらの取り扱いは、着目する連成解析毎にそれぞれ異なるため、代表的な連成パターンに対して処理方法を整理しておくことが重要となる。

時間的取り扱いについては、解析時間ステップの設定があげられる。とくに時間ステップの設定については、解の安定性や精度に直接的に関係するものであり、単純にデータのやり取りを行うだけでは、実際の物理現象を精度良くモデル化することができない。

もともと連立微分方程式で記述される工学問題には、一般に「硬度 (stiffness)」と呼ばれる重要な概念があり、問題を時間離散化して数値計算により得られる解の精度や安定性を確保する1つの指標として用いられている。化学反応系や制御問題などでは、いわゆる硬い微分方程式系が多く現れており、実用上重要な問題になっている。

以上の取り扱いに応じて、統合解析プラットホーム上の個別解析コードの制御方法が異なってくる。すなわち、解析コードの実行順序やデータの受け渡しや受け取り方法が異なるため、統合解析プラットホーム上で効率的に連成解析を実現する方法・手順を明確にしておくことも重要である。

これを踏まえ、ここでは処分場設計に関する例題として熱伝導一浸透流プロセスを対象とした非定常連成解析を取り上げ、以下に示す検討を通じて、統合解析プラットホーム上の連成解析手法を具体化する。

① 連成系の安定性指標に関する検討（図3.3.2-1）

非定常連成系に固有の性質から、非定常時間積分の効率的運用方法に関する検討を実施。

② 非定常連成解析コードに関する検討（図3.3.2-2）

時間積分法の安定性を確保するための最適な時間積分間隔 Δt を導入する方法を具体化する。また、非定常連成解析を効率的に実施するため、各解析コードで異なる時間積分間隔 Δt を用いることができるかを検討する。

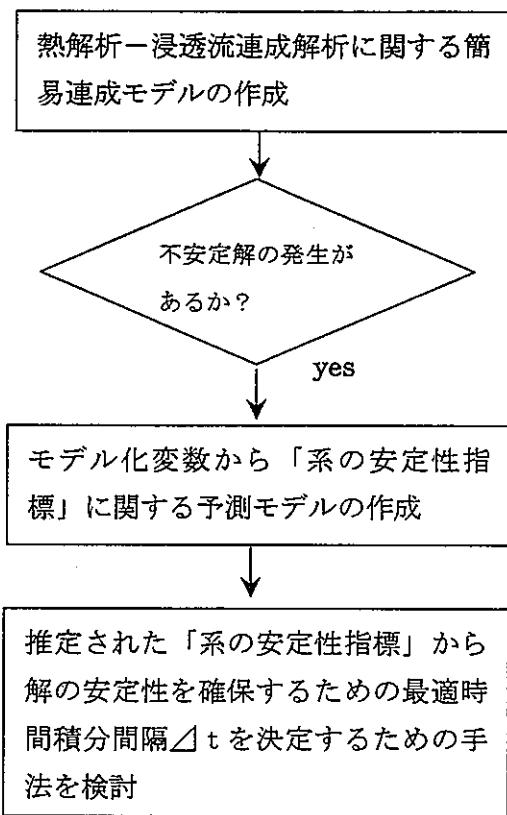


図 3.3.2-1 連成系の安定性指標に関する検討の流れ

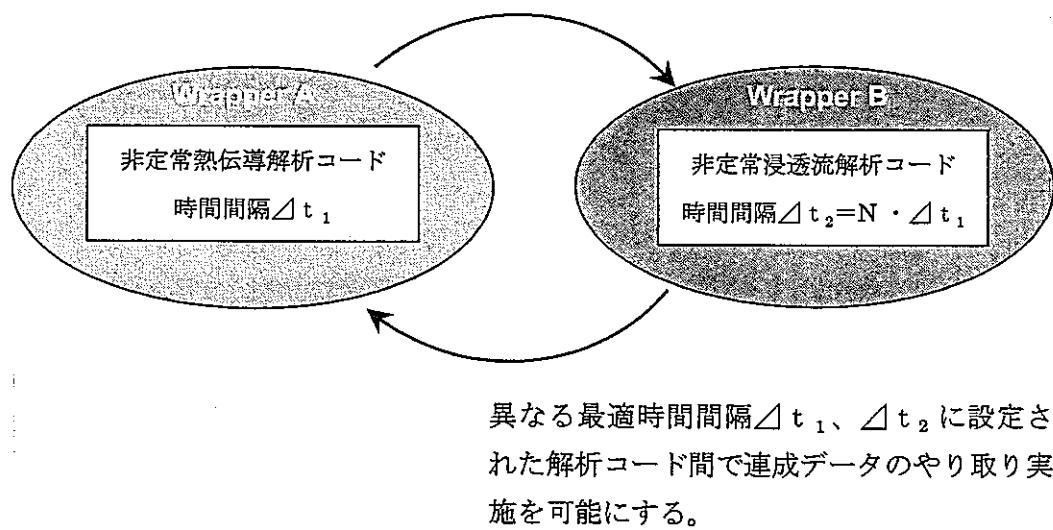


図 3.3.2-2 非定常熱伝導－浸透流の連成概念

(2) 連成解析へのアプローチ

応力、熱、流れなど各々個別の物理現象を、一定空間領域 V_0 に対する有限要素法や差分近似により、節点（差分近似の場合は格子点＝グリッド）に空間離散化して得られる方程式は、節点変位、節点温度、節点圧力など、節点に関する未知変数間の連成方程式になるが、これらの系はひとつの連成系とみなすことができる。

一方、解析対象とする一定空間領域内に発生する複数の種類の異なる物理現象や状態（応力・熱・流れ・相変化・電場・磁場 etc、また、これらの定常・非定常）の相互作用を考慮した組合せ現象は、別の意味での連成現象として捉えることができる。この場合、連成解析とはこれらの組合せによる物理的自然的連成状態を、数学的にモデル化し、予測・解明しようとするアプローチである。このような連成状態を表す解析モデルを開発しようとするとき、個々の事象をモデル化するのに有限要素法や差分近似などの既製の人為的モデルが必要になり、実用上このふたつの連成系は常に混在するものと考えなければならない。

本項では、地層処分システムでしばしば問題となる廃棄体の発熱現象に起因する周囲の地層内における熱伝導と地下水浸透の連成問題モデル化に関して取り上げている。

①連成系に関する標準形式

一般に、次式の時間 t に関する 1 階連立常微分方程式により表される非定常連成系についての空間離散化解析モデルはつぎのように表すことができる。

$$\{ \dot{u} \} = [A] \{ u \} + \{ f \} \quad (3.3.2-1)$$

ここに、 $\{ u \}$: N 元から成る時間 t での未知ベクトル $\{ u \} = \{ u_1, u_2, \dots, u_N \}$ 、 $\{ \dot{u} \}$: $\{ u \}$ の時間微分ベクトル、 $\{ f \}$: 時間 t での非線形連成荷重ベクトル $\{ f \} = \{ f_1, f_2, \dots, f_N \}$ 、 $[A]$: 時間 t において連成系を空間離散化してえられるマトリックス ($N \times N$ 正方マトリックス) である。また、マトリックス $[A]$ や荷重ベクトル $\{ f \}$ が未知数 $\{ u \}$ または $\{ \dot{u} \}$ に関して定数である場合、式 (3.3.2-1) は線形連立常微分方程式、未知変数 $\{ u \}$ 対する依存性がある場合は非線形連立常微分方程式となる。

②数値地層処分での連成解析

2 系に関する非定常連成問題に対し、空間離散化手法により得られた数値解析モデルにおいて、未知変数ベクトル $\{ u_1 \}$ 、 $\{ u_2 \}$ およびその時間微分 $\{ \dot{u}_1 \}$ 、 $\{ \dot{u}_2 \}$ とする。時間 t でのこの連成問題についての非定常時間微分方程式は以下のように書き表すことができる。

$$\begin{Bmatrix} {}^t \dot{u}_1 \\ {}^t \dot{u}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t A_{11} & {}^t A_{12} \\ {}^t A_{21} & {}^t A_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^t u_1 \\ {}^t u_2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} f_1 \left({}^t u_2 \right) \\ f_2 \left({}^t u_1 \right) \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-2)$$

2系の連成効果は、右辺係数マトリックスの連成項（非対角項）と系1については連成変数 u_2 により表された連成荷重ベクトル $\{ {}^t f_1 \} = \{ f_1 ({}^t u_2) \}$ 、系2については連成変数 u_1 により表された $\{ {}^t f_2 \} = \{ f_2 ({}^t u_1) \}$ により発生する。

右辺係数マトリックスから1番目の系に対する第1式の連成項 $[{}^t A_{12}]$ を形式的に除外して表し、さらに第1番目の系に関してさらに連成項による影響を1時間ステップ前の変数値 $\{ {}^{t-\Delta t} u_2 \}$ および $\{ {}^{t-\Delta t} f_1 \}$ を用いて近似的に表すとすると、第1番目の系に関しては非連成で、第2式で与えられる2番目の系に関しては1番目の系との連成が保たれた形の方程式（前進代入形式）が得られる。

$$\begin{Bmatrix} {}^t \dot{u}_1 \\ {}^t \dot{u}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t A_{11} & 0 \\ {}^t A_{21} & {}^t A_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^t u_1 \\ {}^t u_2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} {}^t A_{12} {}^t u_2 \\ 0 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} {}^t f_1 \\ {}^t f_2 \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-3)$$

$$\approx \begin{bmatrix} {}^t A_{11} & 0 \\ {}^t A_{21} & {}^t A_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^t u_1 \\ {}^t u_2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} {}^{t-\Delta t} A_{12} {}^{t-\Delta t} u_2 \\ 0 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} {}^{t-\Delta t} f_1 \\ {}^t f_2 \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-4)$$

さらに2番目の系に対する第2式に関しても、係数マトリックスから連成項 $[{}^t A_{21}]$ による影響を形式的に除外して表すことにより、つぎのような見かけ上非連成の方程式が得られる。

$$\begin{Bmatrix} {}^t \dot{u}_1 \\ {}^t \dot{u}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t A_{11} & 0 \\ 0 & {}^t A_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^t u_1 \\ {}^t u_2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} {}^{t-\Delta t} A_{12} {}^{t-\Delta t} u_2 \\ {}^t A_{21} {}^t u_1 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} {}^{t-\Delta t} f_1 \\ {}^t f_2 \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-5)$$

3系の連成を問題にする場合は、つぎのような形として取扱う。

$$\begin{Bmatrix} {}^t \dot{u}_1 \\ {}^t \dot{u}_2 \\ {}^t \dot{u}_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t A_{11} & 0 & 0 \\ 0 & {}^t A_{22} & 0 \\ 0 & 0 & {}^t A_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^t u_1 \\ {}^t u_2 \\ {}^t u_3 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} {}^{t-\Delta t} A_{12} {}^{t-\Delta t} u_2 + {}^{t-\Delta t} A_{13} {}^{t-\Delta t} u_3 \\ {}^t A_{21} {}^t u_1 + {}^{t-\Delta t} A_{13} {}^{t-\Delta t} u_3 \\ {}^t A_{31} {}^t u_1 + {}^t A_{32} {}^t u_2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} f_1 ({}^{t-\Delta t} u_2, {}^{t-\Delta t} u_3) \\ f_2 ({}^t u_1, {}^{t-\Delta t} u_3) \\ f_3 ({}^t u_1, {}^t u_2) \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-6)$$

3系の連成を考慮する場合の非定常の解析スキームは図3.3.2-3に示すような、手順により構成される。

数値地層処分システムでは、以上の手続きによって定義された見かけ上非連成の連成方程式において、連成現象を構成している各々個別現象モデルは、“個別解析オブジェクト”として定義されている。各個別オブジェクトに対しては専用解析プログラムを用意し、

統合解析プラットホーム上で、各プログラムを同時並行的に実行しつつ、プログラム間で連成のために必要とされるデータをやりとりすることによって、種々の複合現象に関する非定常連成解析に対応することを目的としている。このとき個別の各解析オブジェクト（解析プログラム）で独自に指定する非定常の計算時間間隔 Δt に関しては、各個別解析オブジェクト毎の最適な値を独立に定義できる場合と連成系で共通の時間間隔を共有しなければならない場合があると考えられる。

- ・解析オブジェクト毎の最適時間間隔 Δt_{OPT} 相対的大きさ
- ・解析オブジェクト間の連成データ通信が片方向か？双方向か？

また時間積分間隔 Δt については各解析オブジェクト間でのデータのやりとりに支障をきたさないように整合した間隔でなければならない。図 3.3.2-4(a)から(e)に時間間隔についての整合したいいくつかのパターンを示す。

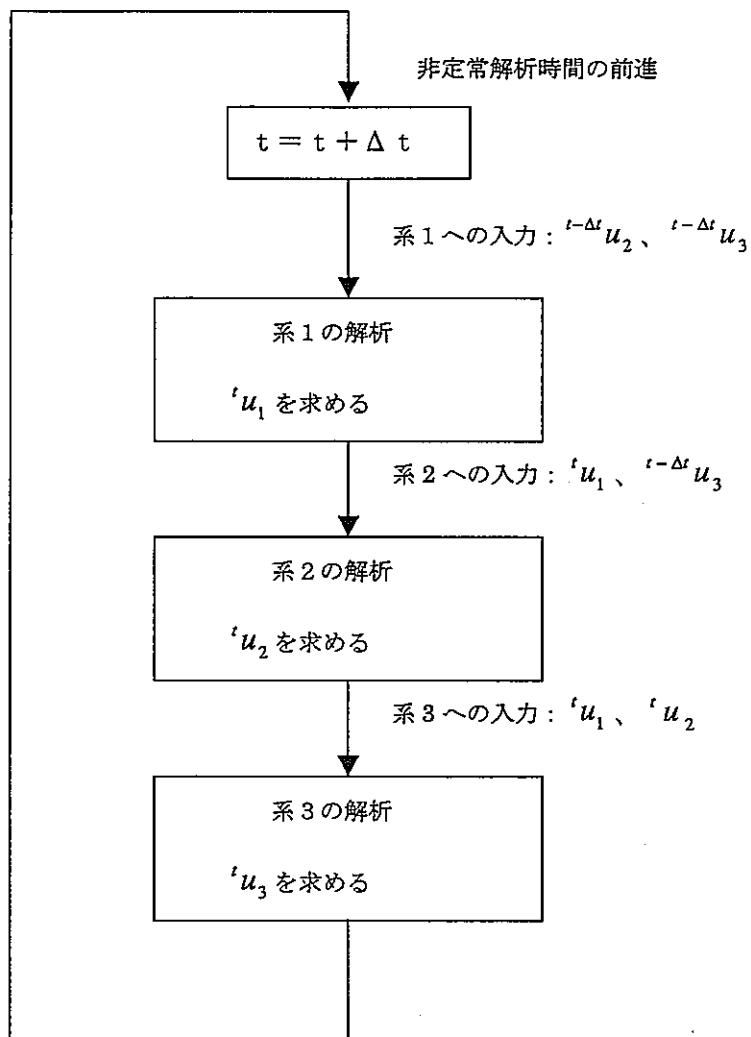


図 3.3.2-3 3 系の連成解析に対する非定常解析スキーム



解析オブジェクトの非定常計算時間 t に同期して、連成情報
を取り取りする時間点

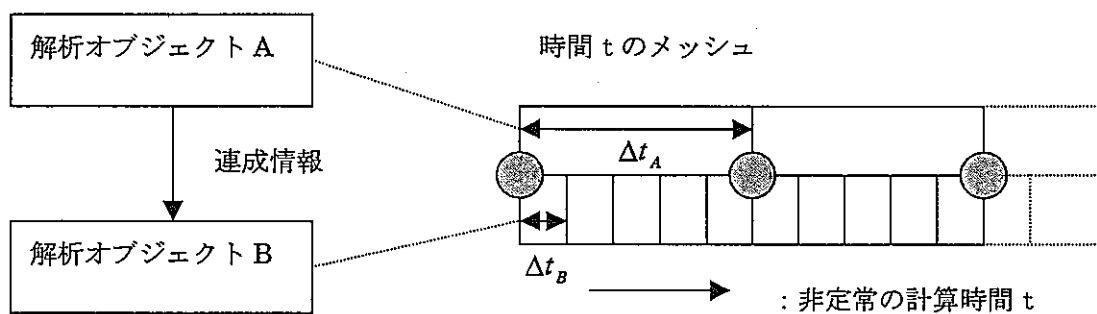


図 3.3.2-4(a) 連成パターン I : 連成情報のやり取りが片方向 $A \Rightarrow B$ の場合

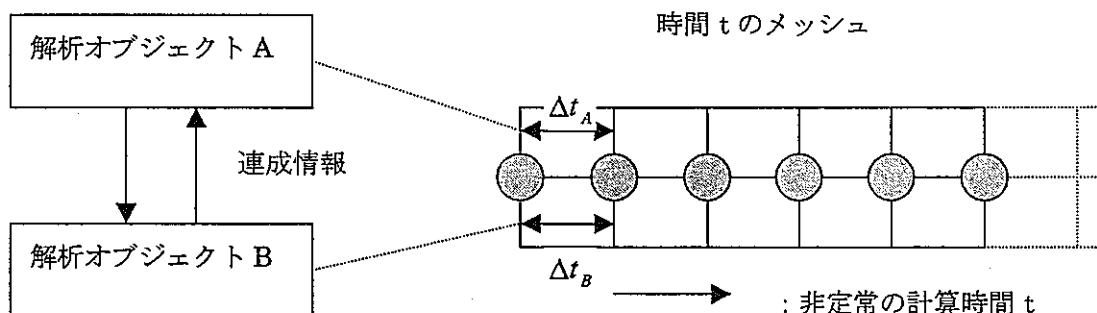


図 3.3.2-4(b) 連成パターン II : 連成情報のやり取りが双方 $A \Leftrightarrow B$ の場合

・パターンIII-①

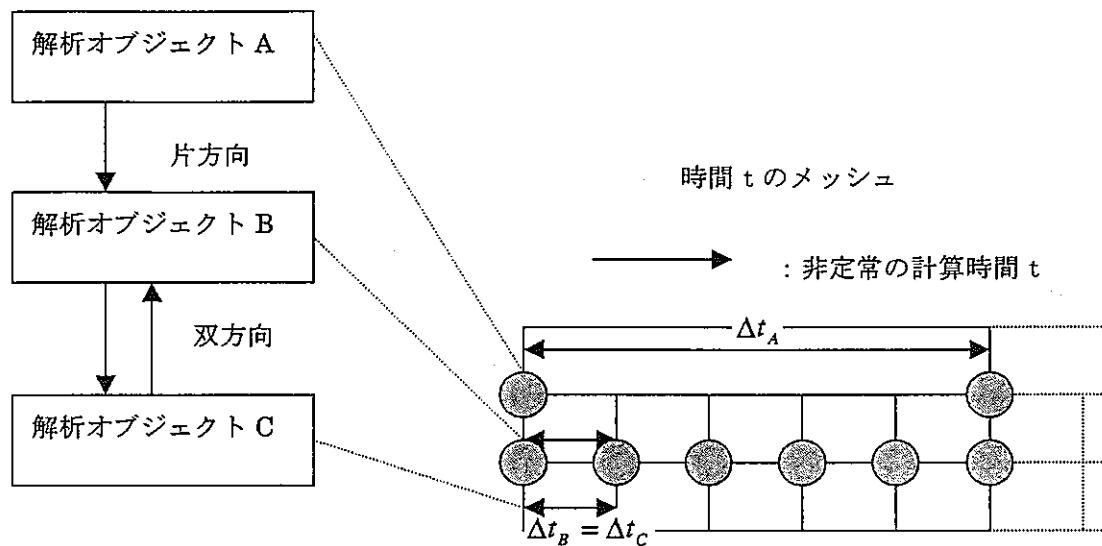


図 3.3.2-4(c) 連成パターンIII-①：3連成の場合

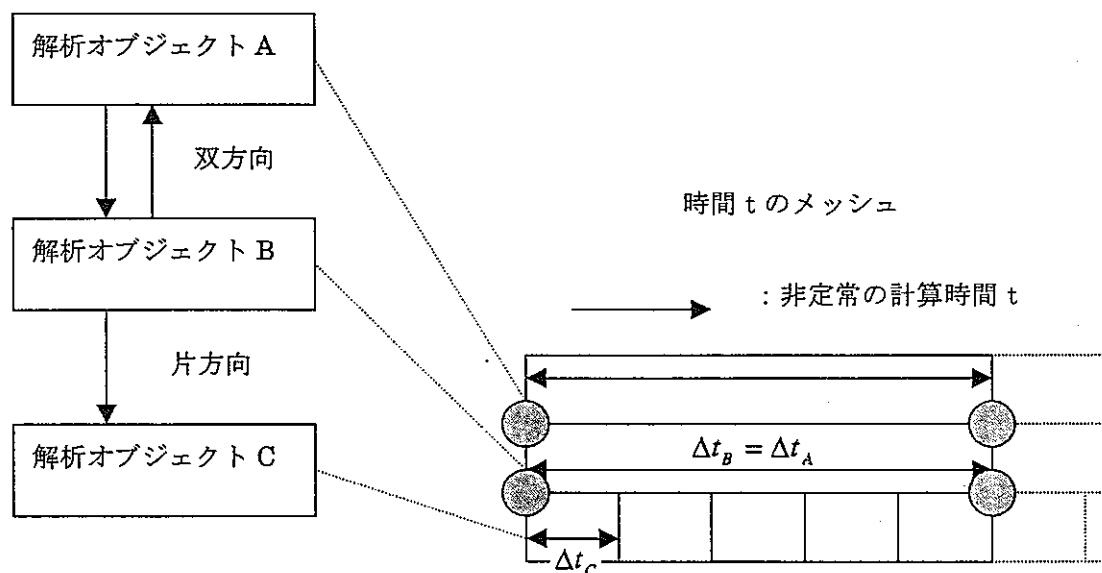


図 3.3.2-4(d)・パターンIII-②：3連成の場合

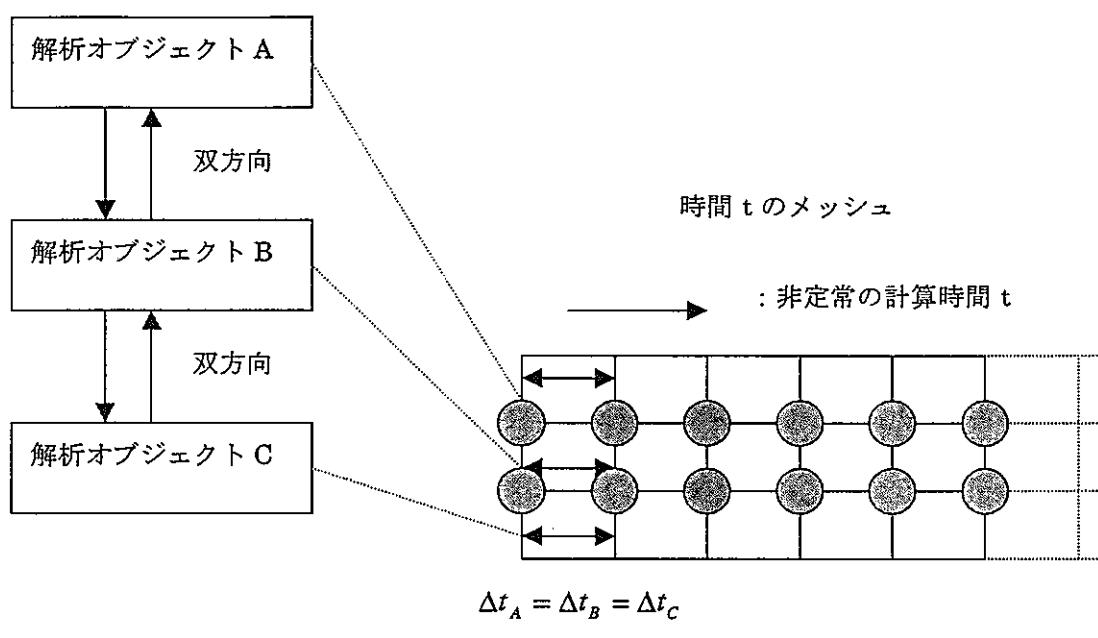


図 3.3.2-4(e) パターンIII-③：3連成の場合

(3) 地下水浸透と熱伝導現象に関する連成方程式の有限要素定式化例

①非定常浸透方程式

間隙水で飽和した地層内の閉じた空間領域 V における流体運動を考える場合、流体に関する単位時間・単位体積あたりの質量保存法則は、つぎの非定常連続方程式により表される。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = - \frac{\partial}{\partial t} (n\rho) \quad (3.3.2-7)$$

ここに、

ρ ; 間隙水質量密度

u_i ; 三次元成分ダルシー流速成分

n ; 間隙率

また、左辺項に関しては 3 次元ベクトル・テンソルに関する総和規約 $\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \equiv \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i}$ を適用して考える。地層内流体平均流速についての Darcy 法則は

$$u_i = - \frac{k_f}{\mu} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} (p + \rho g z) \right\} \quad (3.3.2-8)$$

ここに、

k_f ; 固有透水係数

μ ; 動粘性係数

p ; 間隙水圧

g ; 重力加速度

z ; 位置水頭

全水頭としては、流体の基準密度により次式より定まる値を用いる。

$$h = \frac{p}{\rho_0 g} + z \quad \text{または} \quad p = \rho_0 g h - \rho_0 g z \quad (3.3.2-9)$$

ここに ρ_0 : 流体基準密度

式 (3.3.2-8) を式 (3.3.2-7) に代入して

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \rho \frac{-k_f}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \right\} = - \frac{\partial}{\partial t} (n\rho) \quad (3.3.2-10)$$

さらに、式 (3.3.2-9) を式 (3.3.2-10) に代入し変形することにより

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \rho \frac{\kappa_f}{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_0 gh - \rho_0 gz) + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \right\} \\ &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \rho K_f \left(\frac{h}{\partial x_i} - \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \right\} = -\frac{\partial}{\partial t} (n\rho) \end{aligned} \quad (3.3.2-11)$$

ここに、 K_f は次式のように置いた。

$$K_f = \frac{\kappa_f \rho_0 g}{\mu} \quad (3.3.2-12)$$

また、右辺の非定常項をさらに展開してあらわす。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \rho K_f \left(\frac{h}{\partial x_i} - \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \right\} = n \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial n}{\partial t} \\ &= n \left(\frac{\partial \rho}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \right) + \rho \frac{dn}{dh} \frac{\partial h}{\partial t} \\ &= \left(n \frac{\partial \rho}{\partial h} + \rho \frac{\partial n}{\partial h} \right) \frac{\partial h}{\partial t} + n \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.3.2-13)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial h} = \rho_0 \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) = \rho_0 \beta_p \quad (3.3.2-14)$$

$$\frac{dn}{dh} = \alpha_p \quad (3.3.2-15)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} = \rho_0 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) = \rho_0 \beta_T, \quad \beta_T = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) = -\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{V}{V_0} \right) \quad (3.3.2-16)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \rho K_f \left(\frac{\partial h}{\partial x_i} - \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \right\} = \left(n \rho_0 \beta_p + \rho \alpha_p \right) \frac{\partial h}{\partial t} + n \rho_0 \beta_T \frac{\partial T}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.3.2-17)$$

ここに、 α_p : 地層骨格構造の圧縮率

β_p : 流体の圧縮率

β_T : 流体の熱膨張率

上の連続方程式は、次のような閉領域 V とその境界 S に関する積分形式すなわち弱形式 (Weak Form) に変換する。

$$\begin{aligned} & \int_S \delta h \cdot \rho K_f \left(\frac{\partial h}{\partial n} - \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{\partial z}{\partial n} \right) dS - \int_V \frac{\partial \delta h}{\partial x_i} \rho K_f \left(\frac{\partial h}{\partial x_i} - \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) dV \\ &= \int_V \delta h \left((n\rho_0 \beta_p + \rho \alpha_p) \frac{\partial h}{\partial t} \right) dV + \int_V \delta h \left(n\rho_0 \beta_T \frac{\partial T}{\partial t} \right) dV \end{aligned} \quad (3.3.2-2)$$

ここに、 $\frac{\partial}{\partial n}$ ；境界 S の外向き法線方向微分である。弱形式として Galerkin 流の定式化を使用する。アイソパラメトリック有限要素法の仮定による節点離散化を行うため、領域 V における全水頭値分布に関して、節点値から補間して表される関係を、次式により導入する。

$$\delta h = \sum_k N^{(k)} \delta h^{(k)}, \quad h = \sum_k N^{(k)} h^{(k)} \quad (3.3.2-19)$$

ここに、 $N^{(k)}$ ：V 内の各部部領域（要素）および要素の各離散点毎に対し定義されるアイソパラメトリック有限要素法の補間関数である。式 (3.3.2-19) を式 (3.3.2-18) に代入することにより、

$$\begin{aligned} & \sum_p \delta h^{(p)} \int_S N^{(p)} q_n dS - \sum_p \sum_q \delta h^{(p)} h^{(q)} \int_V \frac{\partial N^{(p)}}{\partial x_i} \frac{\partial N^{(q)}}{\partial x_i} \rho K_f dV + \sum_p \delta h^{(p)} \int_V N^{(p)} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \frac{\partial z}{\partial x_i} dV \\ &= \sum_p \sum_q \delta h^{(p)} \frac{\partial h^{(q)}}{\partial t} \int_V N^{(p)} N^{(q)} (n\rho_0 \beta_p + \rho \alpha_p) dV + \sum_p \delta h^{(p)} \int_V N^{(p)} \left(n\rho_0 \beta_T \frac{\partial T}{\partial t} \right) dV \end{aligned} \quad (3.3.2-20)$$

ここに、 $q_n = \rho K_f \left(\frac{\partial h}{\partial n} - \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \frac{\partial z}{\partial n} \right)$ と置いた。

式 (3.3.2-20) は、行列とベクトルを用いることにより

$$\{\delta h\}^T \left(\{F_1\} - [K_f] \{h\} + \{F_2\} - [S_s] \left[\frac{\partial h}{\partial t} \right] - \{F_3\} \right) = 0 \quad (3.3.2-21)$$

ここで、左辺のベクトルで表した項の p 番目成分および行列の p q 成分は、次のようにおかれている。

$$F_1^{(p)} = \int_S N^{(p)} q_n dS \quad (\text{境界での体積流量})$$

$$F_2^{(p)} = \int_V N^{(p)} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \frac{\partial z}{\partial x_i} dV \quad (\text{浮力項})$$

$$F_3^{(p)} = \int_V N^{(p)} \left(n\rho_0 \beta_T \frac{\partial T}{\partial t} \right) dV \quad (\text{熱膨張排斥項})$$

$$K_f^{(pq)} = \int_V \frac{\partial N^{(p)}}{\partial x_i} \frac{\partial N^{(q)}}{\partial x_i} \rho K_f dV \quad (\text{透水係数行列})$$

$$S_s^{(pq)} = \int_V N^{(p)} N^{(q)} (n\rho_0 \beta_p + \rho \alpha_p) dV \quad (\text{貯留係数行列})$$

式 (3.3.2-21) より節点離散化した浸透方程式が得られた。

$$\{F_1\} - [K_f]\{h\} + \{F_2\} - [S_s]\left\{\frac{\partial h}{\partial t}\right\} - \{F_3\} = \{0\} \quad (3.3.2-22)$$

これを次のように置く。

$$[K_f]\{h\} + [S_s]\left\{\frac{\partial h}{\partial t}\right\} = \{F_0\}, \quad \{F_0\} = \{F_1\} + \{F_2\} - \{F_3\} \quad (3.3.2-23)$$

②熱伝導方程式

浸透方程式の場合と同じく間隙水で飽和した地層内の閉領域 V での単位時間・単位体積あたりのエネルギー保存法則は、次の非定常熱伝導方程式により表される。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (K_{Tm} \frac{\partial T}{\partial x_i}) + \dot{Q} - \rho c_{pf} u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} = (c_p \rho)_m \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.3.2-24)$$

ここに、

K_{Tm} ; 等価熱伝導率

T ; 温度

c_{pf} ; 単位質量あたり流体熱容量

$(c_p \rho)_m$; 単位体積あたり等価熱容量

\dot{Q} ; 単位体積当たりの発熱量

上の熱伝導方程式（エネルギー保存式）は、浸透方程式の場合と同様に、閉領域 V とその境界 S に関する弱形式に変換される。

$$\int_S \delta T \bullet K_{Tm} \frac{\partial T}{\partial n} dS - \int_V \frac{\partial \delta T}{\partial x_i} (K_{Tm} \frac{\partial T}{\partial x_i}) dV + \int_V \delta T \dot{Q} dV - \int_V \delta T \rho c_{pf} u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} dV = \int_V \delta T \bullet (c_p \rho)_m \frac{\partial T}{\partial t} dV \quad (3.3.2-25)$$

浸透方程式の場合と同様に、アイソパラメトリック有限要素法の仮定による節点離散化を行うため、温度分布に関する節点値から補間して表される関係を次式により導入する。

$$\delta T = \sum_k N^{(k)} \delta T^{(k)} \quad , \quad T = \sum_k N^{(k)} T^{(k)} \quad (3.3.2-26)$$

式 (3.3.2-26) を式 (3.3.2-25) に代入して

$$\begin{aligned} & \sum_p \delta T^{(p)} \int_S N^{(p)} \cdot q_{Tn} dS - \sum_p \sum_q \delta T^{(p)} T^{(q)} \int_V \frac{\partial N^{(p)}}{\partial x_i} \frac{\partial N^{(q)}}{\partial x_i} K_{Tm} dV + \sum_p \delta T^{(p)} \int_V N^{(p)} \dot{Q} dV \\ & - \sum_p \sum_q \delta T^{(p)} T^{(q)} \int_V N^{(p)} \frac{\partial N^{(q)}}{\partial x_i} \rho c_{pf} u_i dV = \sum_p \sum_q \delta T^{(p)} \frac{\partial T^{(q)}}{\partial t} \int_V N^{(p)} N^{(q)} \cdot (c_p \rho)_m dV \end{aligned} \quad (3.3.2-27)$$

ここに、 $q_{Tn} = K_{Tn} \frac{\partial T}{\partial n}$ と置いた。

式 (3.3.2-27) は行列とベクトルを用いることにより、次のように表すことができる。

$$\{F_{T1}\} - [K_{T0}][T] + \{F_{T2}\} - [K_{Tc}][T] - [C]\left[\frac{\partial T}{\partial t}\right] = \{0\} \quad (3.3.2-28)$$

ここで、左辺のベクトルで表した項の p 番目成分および行列の p q 成分は、つぎのようにおかれている。

$$F_{T1}^{(p)} = N^{(p)} q_{Tn} \quad , \quad F_{T2}^{(p)} = \int_V N^{(p)} \dot{Q} dV \quad (3.3.2-29)$$

$$K_T^{(pq)} = \int_V \frac{\partial N^{(p)}}{\partial x_i} \frac{\partial N^{(q)}}{\partial x_i} K_{Tm} dV \quad , \quad C^{(pq)} = \int_V N^{(p)} N^{(q)} \cdot (c_p \rho)_m dV$$

(3.3.2-30)

これを次のようにおく。

$$[K_T][T] + [C]\left[\frac{\partial T}{\partial t}\right] = \{F_{T0}\} \quad (3.3.2-31)$$

ここに $[K_T] = [K_{T0}] + [K_{Tc}]$ 、 $\{F_{T0}\} = \{F_{T1}\} + \{F_{T2}\}$ とおいた。

③ 非定常連成方程式の標準形式

式 (3.3.2-23) および式 (3.3.2-31) を一括して表示すると

$$\begin{bmatrix} K_f & 0 \\ 0 & K_T \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} h \\ T \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} S_s & 0 \\ 0 & C \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{h} \\ \dot{T} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_0 \\ F_{T0} \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-32)$$

または

$$\begin{Bmatrix} \dot{h} \\ \dot{T} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -S_s^{-1} K_f & 0 \\ 0 & -C^{-1} K_T \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} h \\ T \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} F_0 \\ F_{T0} \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-33)$$

(4) 1 次元の場合の数値解析例

本連成解析手法による具体的な数値解析例として有限要素法による 1 次元熱伝導と地下水浸透現象の連成解析モデルによる試験解析を実施した。

①解析対象領域の形状・寸法・境界条件

解析モデルの形状・寸法・境界条件を図 3.3.2-5(a)に示す。有限要素解析モデルのメッシュ分割を図 3.3.2-5(b)に示す。また、使用した材料物性値データを表 3.3.2-1 に示す。

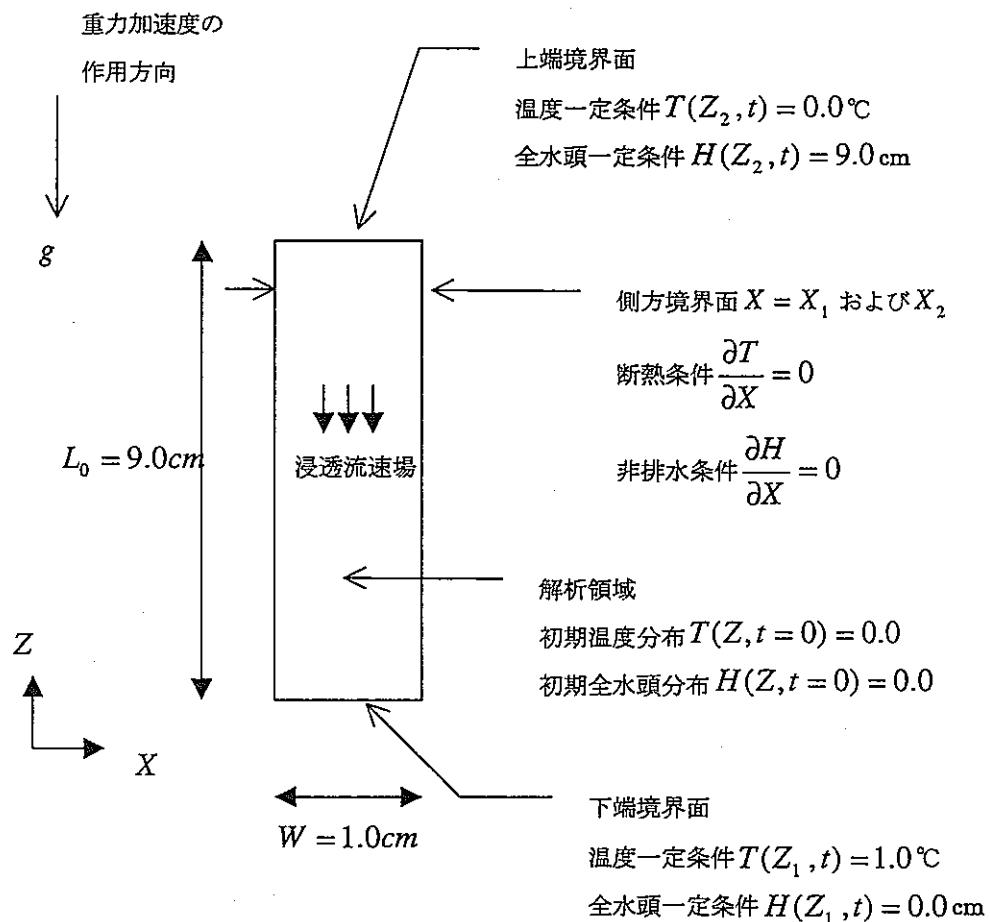


図 3.3.2-5(a) FEM 解析モデルの形状・寸法・境界条件

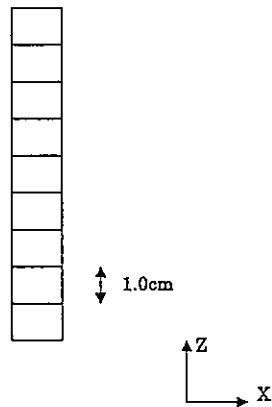


図 3.3.2-5 (b) FEM 解析モデルの要素分割図 (Z 方向均等 9 分割)

表 3.3.2-1 材料物性値

記号	名称	入力データ
ρ	地下水質量密度	1.0 g/cm ³
K_f	透水係数	1.0 cm/sec
K_{Tm}	地層熱伝導率	2.0 erg/cm • deg • sec
c_{pf}	地下水単位質量あたり熱容量	1.0 erg/g • deg
$(c_p \rho)_m$	地層と地下水の単位体積あたり熱容量	1.0 erg/g • deg
S_s	貯留係数	0.0 cm ⁻¹
β_T	熱膨張率	0.3 deg ⁻¹

② 热移流を含む 1 次元熱伝導方程式に対する解析的厳密解

浸透流速 v の移流による熱伝導を考慮した非定常の 1 次元熱伝導方程式方程式は

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial T}{\partial x} v \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.3.2-34)$$

ここで、次式の変数変換を行う。

$$x = x^* L_0, \quad v = v^* v_0, \quad t = t^* t_0, \quad T^* = \frac{T - T_0}{\Delta T} \quad (3.3.2-35)$$

ここに、 L_0 : 基準長さ、 v_0 : 基準流速、 t_0 : 基準時間、 T_0 : 基準温度、 ΔT : 基準温度差である。式 (3.3.2-34) に出てくる時間 t および座標 x に関する微分係数を無次元時間 t^* および無次元座標 x^* に関する微分係数に変換すると、式 (3.3.2-34) は

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{dt^*}{dt} \frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{1}{t_0} \frac{\partial}{\partial t^*} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{dx^*}{dx} \frac{\partial}{\partial x^*} = \frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial x^*} \quad (3.3.2-36)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{t_0} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} \Delta T \quad , \quad \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{L_0} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \quad (3.3.2-37)$$

$$\rho c_p \left(\frac{1}{t_0} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} \Delta T + \frac{1}{L_0} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \Delta T v^* v_0 \right) = \frac{1}{L_0} \frac{\partial}{\partial x^*} \left(K \frac{1}{L_0} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \Delta T \right) \quad (3.3.2-38)$$

ここで、基準時間として: $t_0 = \frac{L_0}{v_0}$ をとるとすると、

$$\rho c_p v_0 L_0 \left(\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\partial T^*}{\partial x^*} v^* \right) = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(K \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) \quad (3.3.2-39)$$

次式の無次元化された熱伝導方程式が得られる。

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\partial T^*}{\partial x^*} v^* = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \quad : \text{ 無次元化方程式} \quad (3.3.2-40)$$

ここに、

$$Pe = \frac{\rho c_p v_0 L_0}{K} \quad : \text{ Peclet 数} \quad (3.3.2-41)$$

と置かれている。

浸透流速 v が一定(定常)で両端境界温度が固定値(一定値)境界条件のとき、式(3.3.2-40)で時間依存項をゼロとおいた方程式

$$\frac{\partial T^*}{\partial x^*} v^* = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \quad (3.3.2-42)$$

に対する解析的厳密解(定常解)は

$$T(z) = \frac{\exp\left(\frac{Pe}{L_0} z\right) - 1}{\exp(Pe) - 1} (T_R - T_L) + T_L \quad (3.3.2-43)$$

により与えられる。

③ 解析結果の温度分布

本解析モデル化では、連成条件として

- ・地下水の浸透流速場が地下の熱伝導に与える影響
 - ・不均一な温度分布による地下水の熱膨張により発生する浮力の影響
- の 2 点を考慮できる。

図 3.3.2-6 に浮力の影響を考慮しない場合の有限要素モデルによる非定常 1 次元温度分布についての解析結果を示す。この場合の連成パターンは、浸透流速解析の結果得られる地下水水流速場が温度分布に与える影響を考慮する片方向連成となる。

本解析結果は式 (3.3.2-43) により与えられる解析的厳密解 ($Pe=4.5$ に対する定常解) に収束してゆくものとなった。次ぎに図 3.3.2-7 に地下水熱膨張による浮力の影響を考慮した場合の解析結果の定常温度分布を示す。この場合は、浸透流解析と熱伝導解析オブジェクト間で浸透流速場と地下水密度を連成パラメータとした双方向連成の連成パターンに相当する。また、図 3.3.2-7 で片方向の場合は前述の浮力なしの場合に相当し、連成なしの場合はさらに浸透流速がゼロの場合の定常解析結果に相当する。浮力を考慮した場合(双方向連成)の場合の温度分布形状は、浮力なしの場合の分布形状に比べ、全体的に浮力による上昇流速の影響を受けた形状となる。

流速が大きく、移流による熱伝導が著しく優位の場合 ($Pe=45.0$ の場合) の解析結果を図3.3.2-8に示す。このような場合、通常の有限要素解析モデル化では図3.3.2-8のような空間軸に沿った方向に、解の振動現象が発生することがある。この振動現象は空間メッシュ Δx によるもので、 Δx をさらに細分することにより徐々に解消してゆくが、時間メッシュ Δt の大きさに係わらず発生する。移流のある熱伝導問題などの特定のケースに限ってみれば、粗いメッシュのままでも、上流型有限要素法などを用いて、空間離散化の方法を工夫することで改善できる。

非定常離散時間間隔 $\Delta t = 0.1 \text{ sec}$

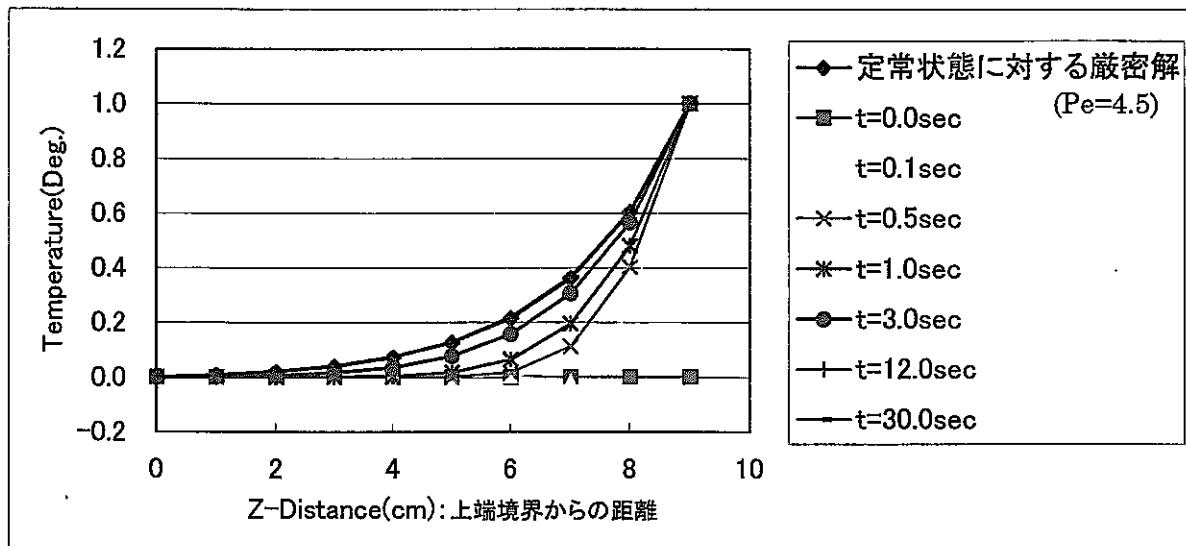
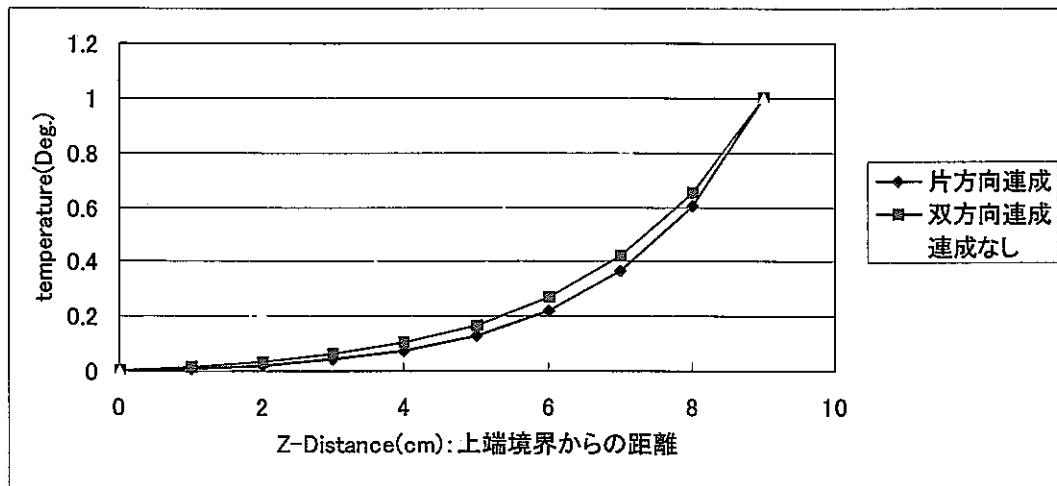


図 3.3.2-6 热移流ありの場合の热伝導解析結果・非定常温度分布



ここに、「片方向連成」…地下水流れによる熱移流を考慮した連成解析

「双方向連成」…熱移流と地下水熱膨張による浮力（上昇流速）を同時に考慮した連成解析

「連成なし」…熱移流も浮力も考慮しない熱伝導のみの解析

図 3.3.2-7 热伝導解析結果の定常温度分布の比較

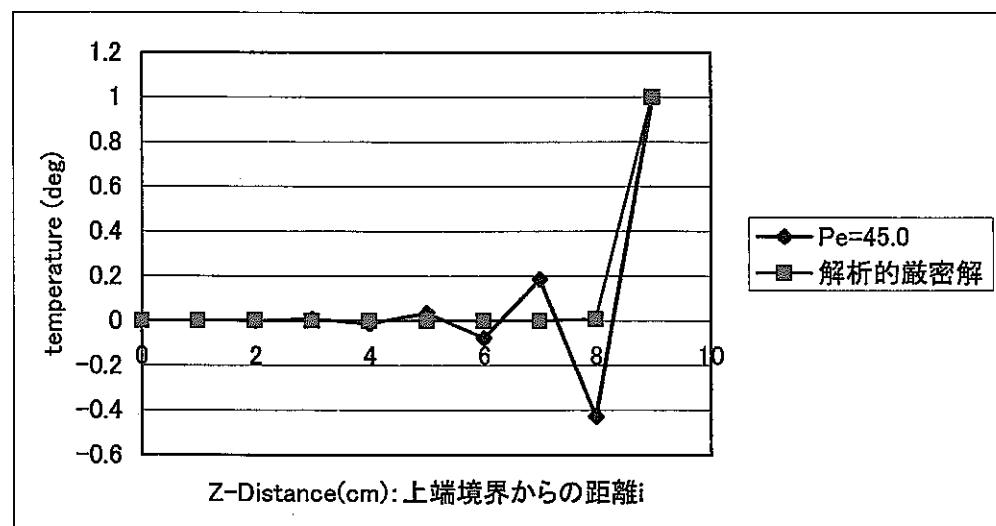


図 3.3.2-8 極端な移流支配の系の場合 ($Pe=45.0$) に対する定常温度分布

(5) 2質点の連成運動モデルによる時間積分法に関する安定性の考察

今回使用した地下水浸透と熱伝導に関する有限要素法連成解析モデルでは、得られた非定常解析結果の挙動は、非定常離散時間点間隔 Δt の大きさに対して常に安定的であり、非定常の時間積分による解の発散・振動など不安定現象は確認されなかった。このため、式 (3.3.2-44) の運動方程式により表される図 3.3.2-9 の 2 質点連成運動モデルによる動的問題に関して、非連成の時間離散方程式を用いるという点で、有限要素解析で実施した連成解析と類似性のある時間離散化法（陽的離散化法）による連成解析を実施した。

$$\begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}' \ddot{u}_1 \\ {}' \ddot{u}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}' u_1 \\ {}' u_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} {}' f_1 \\ {}' f_2 \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-44)$$

ここに、 $K_{11} = k_1$ 、 $K_{21} = -k_1$ 、 $K_{12} = -k_1$ 、 $K_{22} = k_1 + k_2$

解析条件：

$$\begin{array}{lll} K_{11} = 6.0 & K_{22} = 4.0 & K_{12} = K_{21} = -2.0 \\ m_1 = 2.0 & m_2 = 1.0 & \\ f_1 = 0.0 & f_2 = 10.0 & \end{array}$$

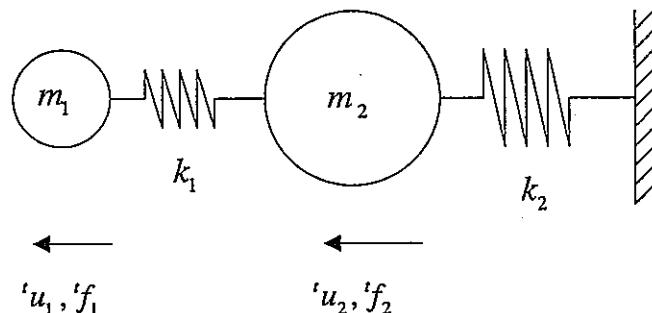


図 3.3.2-9 2 質点からなる連成系の解析モデル図

式 (3.3.2-44) に対する時間離散化法として、比較のため安定な方法である陰的時間積分法を用いた数値計算も併せて実施した。

①陽的時間離散化法の場合

本方法は条件安定な時間離散化法であり、時間積分安定性確保のための離散時間間隔 Δt の大きさには式 (3.3.2-45) で示される制約がある。

$$\Delta t < \Delta t_{cr} = \frac{T_n}{\pi} \quad (3.3.2-45)$$

ここに、 T_n : 連成系の最高次数固有周期である。

本方法により時間離散化した運動方程式 (3.3.2-44) は非連成の形になることから有限要素連成解析で行ったのと類似手法であると考えられる。変位 ' u_1 '、' u_2 ' の 2 階時間微分係数に関する中心差分近似により、

$$\begin{aligned} {}^t\ddot{u}_1 &= \frac{{}^{t+\Delta t}u_1 - 2{}^tu_1 + {}^{t-\Delta t}u_1}{\Delta t^2} \\ {}^t\ddot{u}_2 &= \frac{{}^{t+\Delta t}u_2 - 2{}^tu_2 + {}^{t-\Delta t}u_2}{\Delta t^2} \end{aligned} \quad (3.3.2-46)$$

$$\begin{aligned} m_1 \frac{{}^{t+\Delta t}u_1 - 2{}^tu_1 + {}^{t-\Delta t}u_1}{\Delta t^2} + K_{11} {}^tu_1 + K_{12} {}^tu_2 &= {}^tf_1 \\ m_2 \frac{{}^{t+\Delta t}u_2 - 2{}^tu_2 + {}^{t-\Delta t}u_2}{\Delta t^2} + K_{21} {}^tu_1 + K_{22} {}^tu_2 &= {}^tf_2 \end{aligned} \quad (3.3.2-47)$$

運動方程式 (3.3.2-44) は次の非連成な形になる。

$$\begin{bmatrix} \frac{m_1}{(\Delta t)^2} & 0 \\ 0 & \frac{m_2}{(\Delta t)^2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^{t+\Delta t}u_1 \\ {}^{t+\Delta t}u_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 - \frac{m_1}{(\Delta t)^2} (-2{}^tu_1 + {}^{t+\Delta t}u_1) \\ f_2 - \frac{m_2}{(\Delta t)^2} (-2{}^tu_2 + {}^{t+\Delta t}u_2) \end{Bmatrix} \quad (3.3.2-48)$$

②陰的時間離散化法の場合

前述の陽的時間離散化法に対して、本陰的離散化法は無条件安定な時間積分法である。安定性に関しては陽的方法と異なり、時間積分間隔 Δt の大きさに影響を受けない。

質点 m_1 についての線形加速度法により

$$\begin{aligned} {}^{t+\Delta t}\dot{u}_1 &= {}^t\dot{u}_1 + \frac{\Delta t}{2} ({}^t\ddot{u}_1 + {}^{t+\Delta t}\ddot{u}_1) \\ {}^{t+\Delta t}u_1 &= {}^tu_1 + {}^t\dot{u}_1 \Delta t + \frac{(\Delta t)^2}{2} ({}^t\ddot{u}_1 + {}^{t+\Delta t}\ddot{u}_1) \\ {}^{t+\Delta t}\ddot{u}_1 &= \frac{4}{(\Delta t)^2} \left({}^{t+\Delta t}u_1 - {}^tu_1 - {}^t\dot{u}_1 \Delta t \right) - {}^t\ddot{u}_1 \end{aligned} \quad (3.3.2-49)$$

質点 m_2 についても同様に、

$$\begin{aligned} {}^{t+\Delta t} \dot{u}_2 &= {}^t \dot{u}_2 + \frac{\Delta t}{2} ({}^t \ddot{u}_2 + {}^{t+\Delta t} \ddot{u}_2) \\ {}^{t+\Delta t} u_2 &= {}^t u_2 + {}^t \dot{u}_2 \Delta t + \frac{(\Delta t)^2}{2} ({}^t \ddot{u}_2 + {}^{t+\Delta t} \ddot{u}_2) \\ {}^{t+\Delta t} \ddot{u}_2 &= \frac{4}{(\Delta t)^2} ({}^{t+\Delta t} u_2 - {}^t u_2 - {}^t \dot{u}_2 \Delta t) - {}^t \ddot{u}_2 \end{aligned} \quad (3.3.2-50)$$

これから、質点 m_1 と m_2 間の連成方程式として式 (3.3.2-51) が得られる。

$$\begin{aligned} m_1 {}^{t+\Delta t} \ddot{u}_1 + K_{11} {}^{t+\Delta t} u_1 + K_{12} {}^{t+\Delta t} u_2 &= {}^{t+\Delta t} f_1 \\ m_2 {}^{t+\Delta t} \ddot{u}_2 + K_{21} {}^{t+\Delta t} u_2 + K_{22} {}^{t+\Delta t} u_1 &= {}^{t+\Delta t} f_2 \\ m_1 \left(\frac{4}{(\Delta t)^2} ({}^{t+\Delta t} u_1 - {}^t u_1 - {}^t \dot{u}_1 \Delta t) - {}^t \ddot{u}_1 \right) + K_{11} {}^{t+\Delta t} u_1 + K_{12} {}^{t+\Delta t} u_2 &= {}^{t+\Delta t} f_1 \\ m_2 \left(\frac{4}{(\Delta t)^2} ({}^{t+\Delta t} u_2 - {}^t u_2 - {}^t \dot{u}_2 \Delta t) - {}^t \ddot{u}_2 \right) + K_{21} {}^{t+\Delta t} u_2 + K_{22} {}^{t+\Delta t} u_1 &= {}^{t+\Delta t} f_2 \\ \begin{bmatrix} \frac{4m_1}{(\Delta t)^2} + K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & \frac{4m_2}{(\Delta t)^2} + K_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^{t+\Delta t} u_1 \\ {}^{t+\Delta t} u_2 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} {}^t f_1 + m_1 {}^t \ddot{u}_1 - \frac{4m_1}{(\Delta t)^2} (-{}^t u_1 - \dot{u}_1 \Delta t) \\ {}^t f_2 + m_2 {}^t \ddot{u}_2 - \frac{4m_2}{(\Delta t)^2} (-{}^t u_2 - \dot{u}_2 \Delta t) \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (3.3.2-51)$$

③ 2 質点連成運動モデルに関する解析結果

表 3.3.2-2 (a)に時間離散間隔 $\Delta t = 28.0 \times 10^{-4}$ sec による解析結果の質点変位時間的変化を示す。解析結果は陽的、陰的時間積分法ともに計算した最後の時間離散点 (120,000 点目) までよく一致したものとなっている。次に表 3.3.2-2 (b)に $\Delta t = 28.0$ sec による結果を示す。図 3.3.2-45 に示した解析条件から、この 2 質点連成系に対する固有周期は $T_1 = 4.947$ sec および $T_2 = 1.785$ sec であるが、陰的方法による安定した解析結果に比べて、陽的解法では式 (3.3.2-45) で与えられる安定条件 $\Delta t < \Delta t_{cr} = T_2 / \pi = 0.568$ sec の予測に従い、変位解析結果は無限大の方向に発散してしまっている。

表 3.3.2-2 質点変位時間変化に関する解析結果

(a) 時間積分間隔 $\Delta t = 28.0 \times 10^{-4}$ sec / (時間積分 1 サイクルあたり) の場合

時間積分 サイクル数	時間(sec)	陽的離散化法		陰的離散化法	
		質点1変位U1(cm)	質点2変位U2(cm)	質点1変位U1(cm)	質点2変位U2(cm)
0	0.00E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
10000	2.80E+01	2.18740E+00	2.23641E+00	2.18723E+00	2.23638E+00
20000	5.60E+01	2.92265E+00	3.11630E+00	2.92263E+00	3.11681E+00
30000	8.40E+01	1.36254E-01	5.63090E-01	1.36089E-01	5.64063E-01
40000	1.12E+02	9.95058E-01	1.73218E+00	9.93923E-01	1.73295E+00
50000	1.40E+02	2.95952E+00	4.06883E+00	2.95865E+00	4.07070E+00
60000	1.68E+02	5.12648E-01	2.03780E+00	5.12171E-01	2.04090E+00
70000	1.96E+02	-2.34611E-01	1.72966E+00	-2.36643E-01	1.73192E+00
80000	2.24E+02	2.31395E+00	4.71909E+00	2.31184E+00	4.72178E+00
90000	2.52E+02	1.03728E+00	3.86343E+00	1.03675E+00	3.86793E+00
10000	2.80E+02	-1.05273E+00	2.15394E+00	-1.05454E+00	2.15702E+00
110000	3.08E+02	1.24171E+00	4.76976E+00	1.23899E+00	4.77139E+00
120000	3.36E+02	1.57495E+00	5.34947E+00	1.57493E+00	5.35283E+00

(b) 時間積分間隔 $\Delta t = 28.0$ sec / (時間積分 1 サイクルあたり) の場合

時間積分 サイクル数	時間(sec)	陽的離散化法		陰的離散化法	
		質点1変位U1(cm)	質点2変位U2(cm)	質点1変位U1(cm)	質点2変位U2(cm)
0	0.00E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
1	2.80E+01	0.00000E+00	3.92000E+03	1.99288E+00	5.98880E+00
2	5.60E+01	3.07328E+06	-1.22774E+07	2.84096E-02	4.47029E-02
3	8.40E+01	-1.68477E+10	4.32964E+10	1.93638E+00	5.89978E+00
4	1.12E+02	7.35365E+13	-1.62108E+14	1.12353E-01	1.77260E-01
5	1.40E+02	-2.99904E+17	6.23352E+17	1.82594E+00	5.72484E+00
6	1.68E+02	1.19348E+21	-2.42383E+21	2.48027E-01	3.93078E-01
7	1.96E+02	-4.70497E+24	9.46767E+24	1.66658E+00	5.47002E+00
8	2.24E+02	1.84793E+28	-3.70491E+28	4.29272E-01	6.84689E-01
9	2.52E+02	-7.24729E+31	1.45087E+32	1.46552E+00	5.14413E+00
10	2.80E+02	2.84060E+35	-5.68341E+35	6.47834E-01	1.04204E+00
11	3.08E+02	-1.11312E+39	2.22659E+39	1.23196E+00	4.75838E+00
12	3.36E+02	4.36148E+42	-8.72350E+42	8.93713E-01	1.45288E+00

(6) 結論

- ① 今回、数値地層処分での連成解析手法として考案した解析手法の実例として、地下水浸透流と熱伝導の連成解析モデルを作成し、非定常での試験解析を実施した結果、この種の連成モデルに関しては、実用に耐えうる精度の解析結果が得られることが確認できた。ただし、他の熱伝導・地下水浸透の連成系に対しても適用可能性を確認する必要がある。
- ② 今回採用した有限要素法連成解析モデルでは、得られた非定常解析結果の挙動は Δt に対しては安定的であり、解の発散・振動など不安定現象は確認されなかった。ただし、流速場支配の系に対しては空間メッシュ Δx の設定に注意する必要がある。
- ③ このため、2質点の連成運動モデルにより、本連成解析手法と類似性のある時間離散化手法（陽的時間積分法）により連成解析を実施した結果、計算時間間隔 Δt の大きさによっては、時間積分が不安定になり、理論的予測による安定指標に従い、解が発散することを確認した。実用的連成解析では、解こうとする問題の種類によってはこの種の安定性を事前に確保する必要がある。

4. 解析手法に関する検討

前項までに検討された統合解析プラットホームの枠組みを踏まえ、設計最適化ツールとしての活用を例にとり、具体的な解析手法の検討と前述のプロトタイプピングを含めた細部の検討を行う。

まず始めに、サイクル機構で使用されている設計解析コード（主として第2次取りまとめ採用された解析コード）に関しての現状調査を行い、数値地層処分システムの構成要素として利用する際の課題と今後の方向性について検討する。それぞれの解析コードの運用環境や実行方法を整理しておくことは、今後、統合解析プラットホームに実装する際の重要な情報となる。次いで、処分場全体の設計を階層化された合成問題として捉え、これを構成する1つの因子として、最適化に着目したケーススタディを例示的に取り上げ、プロトタイプシステムの開発を念頭においていた具体的な手法の検討を行う。この検討に先立ち、数値地層処分システムにおける最適化問題への活用例を整理し、統合解析プラットホームが狙うべき最適化計算支援機能のゴールを設定した。そこから、とくに処分場の基本仕様を設定するための形状最適化問題、具体的には空洞の力学的安定性および人工バリアシステムの熱的安定性から定まる処分坑道離間距離、廃棄体の定置間隔を設計変数として、廃棄体一体当たりを処分するために必要な占有面積を最小化する問題を取り上げ、これらを数値地層処分システム上で扱うための具体的検討へと議論を進める。この検討では、より具体的な課題を抽出しながら、今後の開発計画へ反映することを目的とし、プロトタイプシステムの開発と併せて行った。

4.1 処分場設計解析コード/モデルに関する検討

第2次取りまとめ示された設計プロセスや使用された設計解析コード／モデル（表4.1-1 参照）は、処分事業ならびに研究開発の進展等に伴い、今後とも継続的に改良されていくものと思われる。数値地層処分システムの統合解析プラットホームに搭載される解析コードは、これらの既存の研究資源はもちろん、これから新規に開発される解析コードやデータを柔軟に取込めることを想定している。しかしながら、これまでに使用されている解析コードの運用形態や必要となるデータは様々であり、必ずしも体系的に把握できていない。数値地層処分システムへ取り込むためには、解析コードの形態によっては、個別に対応をとる必要があり、その第一ステップとしては、それらの解析コードの現状認識とそれに応じた課題の抽出が不可欠である。本検討では、表4.1-1に示した設計解析コードを例示的に取り上げ、それらの機能、入出力等の詳細をまとめ、主として運用環境に着目した情報の整理を行うこととした。さらに、3.1.3項で述べた統合解析プラットホームにおける標準化の検討結果を踏まえて、統合解析プラットホーム上での運用に向けた課題を整理し、将来的な利用に向けた具体的対応策を検討する。

各解析コードに関する調査項目と狙い（調査の観点）を以下に示す。

a. 機能

第2次取りまとめで利用された機能を中心に、各解析コードの解析機能を明かにする。以降に示す項目（例えば、入力項目、出力項目）は、ここで挙げた解析機能に対応するものである。

b. 利用環境

使用可能な計算機種（EWS、PC 等）やオペレーティングシステムを明らかにする。数値地層処分システムの計算サーバ群のもつべき構成（機種、数など）に関して見通しを得る。

c. ソースコード

ソースコードの利用可否。ソースコードの改良を前提とした連成解析（3.3.3 節参照）への対応について見通しを得る。

d. ライブライ

ライブラリの有無とその内容、種類を明らかにする。3.1.1 節で述べたコンテナー（共通コンテナー、グローバルコンテナー）への反映事項ならびにコンテナーのバリエーションについて見通しを得る。

e. プログラム言語

プログラム言語とコンパイラを明らかにする。3.3.3 節で述べた連成解析への対応（主として MPI を介した通信ライブラリの使用可否）について見通しを得る。

f. 実行方法

対話型、非対話型のいずれの実行方法かを明らかにする。また、グラフィカルユーザインターフェイスの併用の有無およびソルバ一部と一体型か分離型かを明かにする。3.1.1 節で述べた解析ネットワークの実行制御手法への対応について見通しを得る。

g. 入出力ファイル

入出力ファイルの種類と内容を明らかにする。3.1.1 節で述べた解析ネットワークの実行制御手法およびファイル操作（主としてデータベースサーバとの通信）への対応について見通しを得る。

h. 入出力項目

入出力ファイル内のデータ項目の種類と内容を明らかにする。3.1.1 節で述べたコンテナー（共通コンテナー、グローバルコンテナー）への反映事項、ならびに後述の第5章で検討するデータモデルの開発ならびに統合データベースへの反映に関する見通しを得る。

表 4.1-1 「地層処分の工学技術」において使用されている解析コード

No.	評価項目	手法	コード	参考文献
1	ガラス固化体発熱量	核種生成・崩壊	行列指数関数	—
2	耐食性	腐食深さ	簡易式	1
3	耐圧性	耐圧厚さ	簡易式	1
4	放射線遮蔽性	放射線輸送	モンテカルロ	3
5	放射線分解	カソード電流密度	簡易式	—
6	緩衝材仕様(ブロックの強度的自立)		FEM	
7	放射線遮蔽に必要な緩衝材厚さ	放射線輸送	FDM	1
8	空洞の力学的安定性	処分深度	簡易式	1
9	〃	弾塑性	FEM	2~3
10	坑道の耐震安定性	自重(静的弾性)	〃	
11	〃	掘削(静的弾性)	〃	
12	〃	応答震度	重複反射理論	1
13	〃	耐震(静的弾性)	FEM	2
14	熱的影響に関する検討	非定常伝熱	FEM	3
15	埋め戻し材の設計(緩衝材の膨出)			
16	緩衝材流出		FEM	ABAQUS
17	圧密反力		手計算	
18	構造力学安定性評価	岩盤クリープ	FEM	2
19	〃	オーバーパック腐食膨張	FEM	2
20	〃	オーバーパック沈下	FEM	2
21	ニアフィールドの耐震安定性評価	深部地震波	重複反射理論	1
22	〃	固有値	FEM	3
23	〃	緩衝材自重分布	FEM	3
24	〃	岩盤地圧	FEM	3
25	〃	動的応答	FEM	3
26	再冠水時的人工バリア挙動解析	熱・水・応力	FEM	2
27	コスト評価			
28	ガス移行評価	非定常2相流	FDM	TOUGH2

(1) 調査結果

上記項目に関する調査結果を、表 4.1-2 に示すとおり整理した（詳細については付録一2 を参照）。殆どの解析コードは EWS での利用を前提としており、一部で PC 専用のパッケージソフトや EWS/PC の双方で運用できるものがある。

表 4.1-2 設計解析コードの現状

解析コード	利用環境	ソースコード	ライブラリ	実行方法※4	GUI との分離
耐震性評価※1	EWS	可	無	コマンド/GUI	可
ORIGEN2	EWS	可	有	コマンド	—
ANISN	EWS/PC	可	有	コマンド	—
NASTRAN※3	EWS	不可	無	コマンド	—
ABAQUS※3	EWS	不可	無	コマンド	—
SHAKE※2	PC	不可	無	GUI	不可
DACSAR	EWS/PC	可	無	コマンド	—
THAMES	EWS	可	無	コマンド	—
TOUGH2	EWS	可	無	コマンド	—
FINAS※3	EWS	不可	無	コマンド	—
MCNP4a	EWS	可	有	コマンド	—

※1 人工バリアシステムの地震応答解析コード

※2 サイクル機構所有の k-SHAKE for Windows Ver1.0 を前提。SHAKE の発表論文 (Per B.Schnabel et al, 1972) ではソースコードが公開されている。EWS での利用も可能と思われる。

※3 サイクル機構所有の解析コードを前提。他に商用で Windows 版パッケージソフトも販売されている

※4 コマンド：コマンドプロンプトからの非対話型の実行、GUI：GUI を介しての対話型の実行

ソースコードの利用可否については、サイクル機構で独自に開発したコードや国際的にオーソライズされたコードは原則公開されており、利用者の用途に応じてカスタマイズされた独自の解析ツールとして利用されるケースが多い。ソースレベルで改良可能なコードは、データベースや可視化システムとの連携や並列分散環境での運用を見据えた機能拡張が可能となる。ABAQUS、NASTRAN などの構造解析を主体とした汎用アプリケーションの多くはソースレベルでの入手・利用は困難なため、統合解析プラットホーム上ではブラックボックスとしての利用が前提となる。

設計解析コードの多くが体系的に整備されたライブラリを必要とするケースは少なく、その多くは性能評価サポートコードに付随するものである (ORIGEN2 や MCNP4a の核定数ライブラリ)。従って、これらのライブラリの取扱いについては、該当する解析コード入力時にプラットホームを介して自由に選択することができる CAPASA と同様な方法が適切である。とくに、ライブラリのフォーマットのみが多岐にわたり、格納項目が冗長となるケースでは、コンテナー等を用いて対象データを再格納し利用するアプローチが考えられる。その場合にはライブラリ内のデータを利用する解析コード側の改良やプレ処理プログラムの構築が前提となる。

実行方法については、上記解析コードのほぼ全てがコマンドプロンプト上で行えるものであり、唯一 SHAKE コードのみが GUI を介しての実行のみが可能である。

以上、現在サイクル機構で使用されている設計解析コードの運用状況を整理した。以

降では、これらの現状認識を踏まえながら、これから数値地層処分システムに解析コードを搭載するためのアプローチならびに解析プラットホームおよび統合データベースとの連携等を念頭に置いた課題について整理する。

(2) 検討結果

① 計算サーバー群の構成

前記のとおり、SHAKE コードを除く全ての解析コードは EWS で利用可能である。EWS 版の SHAKE コードを公開文献等から入手できるものとすれば、数値地層処分システムの計算サーバとして最低限下記の機種の EWS が構成されている必要がある。

- ・サンマイクロシステムズ社製ワークステーション
- ・シリコングラフィックス製ワークステーション

② 連成解析コードとしての利用

3.3.2 節で示されたように、個別解析コード間の双方向通信により非定常連成挙動をシミュレーションする場合、時間に関する離散化手法は陽解法的なアプローチを探ることになる。すなわち、ある時刻 t における状態量 x を求める解析コード（解析オブジェクト）の結果を、同じ時間 t における他の状態量 y を求める解析コードへ受け渡さなければならない。非定常解析を行う既存の解析コードは、それぞれ独自の時間離散化手法を採用しているため、これらを合せるための改良が必須となる。従って、ここで取り上げた設計解析コードを、非定常連成解析挙動をシミュレートするための 1 つの解析オブジェクトとして利用する場合は、ソースレベルで改良できることが前提となる。

以上を踏まえると、以下に示す汎用構造解析コードの類はソースレベルでの改良ができないため、3.3.2 節で検討した連成解析手法を実現するための構成要素としては適当でない。

- ・ABAQUS
- ・NASTRAN
- ・SHAKE
- ・FINAS

③ 解析オブジェクトの実行制御手法

前記のとおり、SHAKE コードのみが GUI を介しての実行のみが可能である。コマンドプロンプト上で実行する解析コードについては、解析プラットホームからの実行、停止等の解析コードの制御が比較的容易に行うことができ、さらに入力データ作成、実行、結果表示の一連の解析作業を解析プラットホーム上に構築した解析ネットワーク単位で自動化しやすい。SHAKE コードのように GUI を介してのみ実行が許されるアプリケーションの場合は、一連の解析作業を全て自動化することは困難であり、ユーザによるイ

ンターラクション（他の解析コードにデータを受け渡すためのデータ設定など）が発生する。SHAKE コードの場合は、むしろソースコードが公開されているため（Per B.Schnabel et al,1972）、これを直接利用することにより、これらの制約を回避するアプローチが適当である。

④ 統合データベースとの係わり

表 4.1-2 に取り上げた設計解析コードの入出力データは、それぞれの解析コードの扱う現象が多岐にわたるため、様々な情報が含まれている。必然的に、それらを格納するファイル構成もまちまちとなる。これらのデータを全てデータベースに構築し直すことは明らかに現実的でない。設計解析を行った際の付属情報の位置付けで、入出力データをそのまま格納する方が適当である。しかしながら、設計解析コードの多くを占める有限要素解析コードに限って言えば、それらのデータ構成は体系化されており、多くの情報を共有することができる。すなわち、冗長な情報を排除した新しいデータベースを構築する意味がある。例えば、設計解析で対象とする場の情報は、3 次元の座標成分をもつ節点データと複数の節点で構成される要素データから構成される。これらの情報は、同じ場を対象としているのであれば、複数の解析コード間で共有することができる。この考えは 3.1 節で示された共通コンテナーの概念に適している。ネットワーク内の解析オブジェクト間で共有すべき情報を共通コンテナーに格納することで、それぞれの解析コードが自動的に共有することができる。この共通コンテナーに格納すべき情報の 1 つが、有限要素解析で必要となる節点データや要素データであり、さらに、様々な場のバリエーションを統合データベース内に格納し、利用者の用途に応じてコンテナーに取出すことができれば便利である。

以上を踏まえると、本検討で取り上げた設計解析コードの対象とする入出力データは様々であり、入出力データをそのままデータベースで管理する場面もあれば、共有すべき情報をデータベースに再構築する場面も考慮する。データベースとコンテナーとを連携させるなどした工夫と併せることにより、用途に応じたデータ操作を行うことが重要となる。

⑤ アイテム間の連携と解析コード搭載手順

本検討で取り上げた設計解析コードは、いずれも現在検討を進めている数値地層処分システムのプラットホームへ搭載可能である。しかしながら、既存の解析コードを数値地層処分システムの一構成要素として利用しようとした場合、少なからず、それらをプラットホームに実装するための作業が発生する。解析コードによって、極端に搭載が困難なものはなく、概ね同様の手続きを踏むことで実現可能である。共通して言えることは、他の解析コードとのデータのやり取りの頻度やその処理内容が複雑になれば、解析コード間のインターフェイス開発に多くの労力を要する。この負担を可能な限り低減す

るために、共通のルールの基で、かつ比較的少ない労力でプラグイン的に解析コード間のデータのやり取りを取込める枠組みの開発が必須となる。

以下に本検討で取り上げた設計解析コードを数値地層処分システムに搭載するための一般的手順を示す。

- ・解析コードの入出力項目、ファイル構成の整理
- ・他のアイテムとの関係（接続パターン）の整理
- ・（必要に応じて）解析コードの改良
- ・オブジェクトインターフェイスの開発

4.2 設計最適化に関する検討

地層処分システムの全体構成を決めるためには、お互いに関連を持つ多数のサブシステムの設計が不可欠であり、階層化された合成問題として捉える必要がある。昨年度の概念検討では、この観点から数値地層処分システムに期待するニーズを検討し、その1つとして地層処分システムにおける現象解析コードの開発のみならず、制約条件の決定、システム構成の決定、評価等を行うための手法と一連の手順を定め、かつその一連の作業の追跡性なども含めた品質管理が可能なプラットホームとしての役割を考えてきた。例えば、人工バリア設計から処分場レイアウト設計までの一連の設計作業を支援するための設計ツール、さらにその結果を経済性評価あるいは性能評価ツールとリンクさせ最適化を図るためのツールなどを数値地層処分システムの1つの目標として設定した。

本項では、このような活用を実現するための第一ステップとして、上記の階層化された合成問題を構成する最適化問題を取り上げ、幾つかの活用例を示すとともに、前章で検討した統合解析プラットホームが担うべき機能の全体像を明らかにする。さらに、具体的なケーススタディとして、処分場の基本仕様を規定する坑道離間距離および埋設廃棄体ピッチを合理的に設計するためのツールをプロトタイプシステムの開発と併せて検討を進める。

通常、設計は最適解のみで行われることは無く、様々な設計条件を勘案したバウンダリを抑えながら行われる。図4.2-1に、空洞の力学的安定性および人工バリアシステムの熱的安定性から定まる廃棄体1体当たりの処分必要面積を定めるためのアプローチを示す。設計変数は廃棄体ピッチ（横軸）と坑道離間距離（縦軸）である。設計上の制約が何もなければ、坑道ないし廃棄体が物理的に干渉しない最低限の距離を確保した図中A点が設計点となる。空洞の力学的安定性や人工バリアシステムの温度制限からくる幾つかの制約を考慮することで、例えば設計でとることのできる解（図中斜線部）が定まる。設計の論拠を定量的に示すには、この領域を把握することが最も重要となる。そのためには、坑道離間距離を2D（Dは坑道直径）ないし3Dと固定し、そのときの制約を満足する最適な廃棄体ピッチを求め、これを何点かの坑道離間距離について行うことにより斜線部の領域を明かにしていく。処分場設計で扱うべき最適化問題での活用としては、以上のようなイメージを念頭においている。

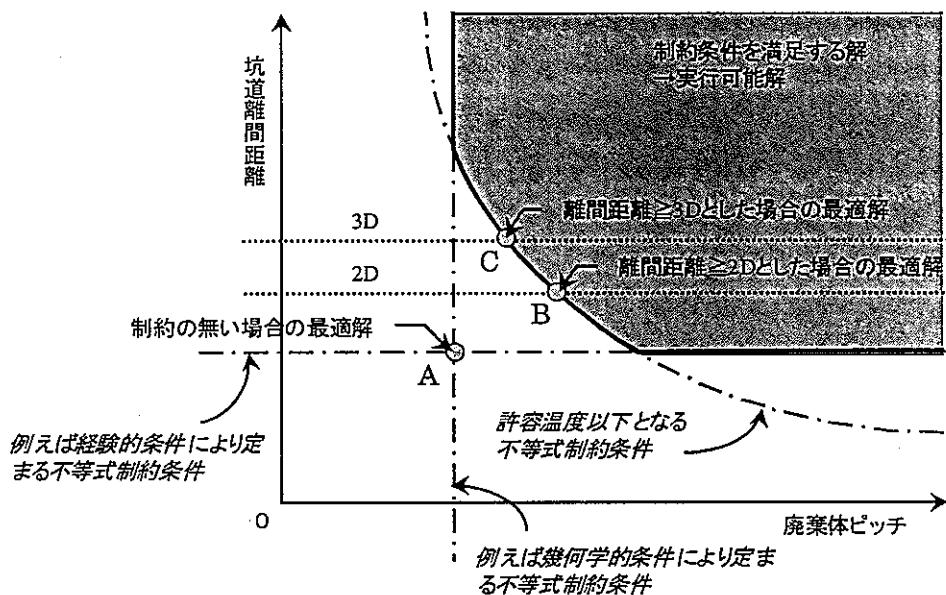


図 4.2-1 空洞の力学的安定性および人工バリアシステムの熱的安定性
から定まる廃棄体 1 体当たりの処分必要面積

4.2.1 処分場設計における最適化問題への活用例

工学分野で扱う最適化問題は、一般に、目的関数、設計変数および制約条件を定式化することから始まり、制約条件を満足する設計変数（実行可能解）の組み合わせから、目的関数を最小化（あるいは最大化）する解を見つけだす行為であり、問題の規模や非線形性などの性質は定式化の捉え方により様々である。

地層処分場の設計においても、人工バリアシステムの設計やそれらの構成要素を設計する様々な場面で、幾つかの最適化問題を構築することができる。表 4.2.1-1 に処分場設計に関する深い最適化問題の例を示す。ここでは、少し広い観点から実測データに基づくパラメータ同定等の逆問題をも含めている。

処分場の基本仕様（形状、物性など）の設計では、ガラス固化体の発熱による人工バリアシステムの熱的安定性および空洞の力学的安定性から要求される処分場基本仕様を設定するものである。坑道離間距離や廃棄体ピッチをはじめとした、システムの熱的安定性、力学的安定性に影響を及ぼすパラメータを設計変数として、例えばガラス固化体 1 体当たりの埋設占有面積を最小化する最適化問題を考えることができる。

モニタリングネットワーク、調査ボーリングの配置計画では、操業前の地質環境調査や処分場閉鎖後の環境モニタリング等において、観測コストと観測精度からくる要求事項をトレードオフするための最適化問題（例えば本多、鈴木ほか、1998、A.Trujillo.Ventura,

J.H.Ellis, 1990) が考えられる。このとき、調査ボーリングの配置やモニタリングネットワークの構成に関する観測位置やその数が設計変数となる。

処分場設計と性能評価の連携では、放射性核種のバリア性能を設計要件として考慮した最適化問題が考えられる。すなわち、核種移行率や被曝線量を最小化するための処分場の基本仕様を定めることができになる。設計要件のみから定めることができない緩衝材厚さやプラグ、埋め戻し材の物性等の同定が目的となる。

操業時の情報化施工では、空洞掘削時に得られる実測データに基づき、地盤の物性や挙動を予測し、施工修正等へ反映する逆問題への適用であり、同じく物性パラメータのキャリブレーションについても、動的三軸試験などの室内試験より得られる実測データに基づき、土質材料のせん断剛性や履歴減衰などを予測する逆問題への活用である。

これらの活用例の多くは、個別の目的関数に対する最適化問題を構成しているが、実用上は複数の目的関数を同時に考慮した最適化問題として扱わなければならないことが多い。これは、一般に多領域最適化問題 (Multi-Disciplinary Optimization、以下「MDO」と呼ぶ) として扱われるものであり、主として航空宇宙分野を中心に精力的な研究が進められている。例えば、飛翔体の機械強度、空力、制御を同時に考慮した形状最適化問題はその代表例である (例えば Timothy W.S, et al, 1998)。四輪車両についても、構造強度からくる重量最小化、走行時の流体抵抗の最小化および、いわゆる燃費からくるコストの最小化を同時に満足させる形状最適化問題などがある (J.Bennett, P.Fenyes et al, 1998)。これらの事例は、いずれも設計変数や制約条件が数十～数百にものぼり、最適解を得るために計算機の利用が不可欠となる。

表 4.2.1-1 数値地層処分システムの最適化問題への活用例（目的関数、設計変数、制約条件は例示的に表示）

概要	目的関数	設計変数	制約条件
【処分場の基本仕様設計】 ガラス固化体の発熱による人工バリアシステムの熱的安定性および空洞の力学的安定性から要求される処分場基本仕様を設定する。坑道離間距離や廃棄体ピッチをはじめとした、システムの熱的安定性、力学的安定性に影響を及ぼすパラメータを設計変数として、例えば埋設占有面積を最小化する最適化問題を構成。	<ul style="list-style-type: none"> 坑道掘削量 埋設占有面積 処分コスト 	<ul style="list-style-type: none"> 坑道離間距離 ガラス固化体ピッチ 坑道長 坑道径 処分深度 緩衝材厚さ オーバーパック厚さ 	<ul style="list-style-type: none"> 温度 応力、ひずみ 幾何学的条件（例えば、隣接する坑道間で幾何学的な干渉を生じない等）
【モニタリングネットワーク、調査ボーリングの配置計画】 操業前の地質環境調査や処分場閉鎖後の環境モニタリング等において、観測コストと観測精度からくる要求事項をトレードオフするための最適化問題。調査ボーリングの配置やモニタリングネットワークの構成に關係する観測位置やその数が設計変数となる。	<ul style="list-style-type: none"> ネットワークコスト モニタリング精度 モニタリングの範囲 	<ul style="list-style-type: none"> 観測位置 観測点数 	<ul style="list-style-type: none"> モニタリング対象領域 最大観測点数
【処分場設計と性能評価の連携】 放射性核種のバリア性能を設計要件として考慮した最適化問題。核種移行率や被ばく線量を最小化するための処分場の基本仕様を定める。設計要件のみから定めることができない緩衝材厚さやプラグや埋め戻し材の物性等が主な設計変数となる。	<ul style="list-style-type: none"> 核種移行率 被ばく線量 	<ul style="list-style-type: none"> 処分深度 断層までの距離 アクセス坑道径 緩衝材厚さ オーバーパック厚さ プラグ物性 埋め戻し材物性 	<ul style="list-style-type: none"> 幾何学的条件
【操業時の情報化施工】 空洞掘削時に得られる実測データに基づき、地盤の物性や挙動を予測し、施工方法へ反映する逆問題への適用。	<ul style="list-style-type: none"> 実測値との残差 (掘削時の内空変位など) 	<ul style="list-style-type: none"> 地盤の剛性 " の減衰比 " の密度 	<ul style="list-style-type: none"> 物理的条件
【物性パラメータのキャリブレーション】 動的三軸試験などの室内試験より得られる実測データに基づき、土質材料のせん断剛性や履歴減衰などを予測するパラメータ同定問題への活用。	<ul style="list-style-type: none"> 実測値との残差 (室内試験より得られた応力値) 	<ul style="list-style-type: none"> 緩衝材の剛性 " のポアソン比 " の減衰 " の密度 	<ul style="list-style-type: none"> 物理的条件

4.2.2 フレームワークの検討

はじめに、ここで検討を進める設計最適化ツールの全体構成と処理の流れを概略で示し、それぞれの構成要素の役割を明確にする。そこから、本ツールを用いた解析作業のフレームワークについて、利用者の操作性を含めた検討を行い、プロトタイプシステム全体の骨子を明らかにする。

図 4.2.2-1 に設計最適化ツールの概略の構成と処理の流れを示す。図中の二重線で囲んだプロセスは、解析コード等の計算機上で実行されるオブジェクトである(3.1.1 項参照)。その他のプロセスは、構成要素間を連携させるインターフェイスの類を表している。さらに、オブジェクト間を太線で示した経路が幹となる処理の流れとなり、細線はデータベース等からのデータの流れを表している。

空洞安定性評価では、所要の地下施設仕様に従った応力解析を通じて、力学的な安定性を論じることができる状態量（局所安全率、せん断ひずみなど）を予測する。熱的安定性評価では、ガラス固化体の発熱による人工バリアシステムの温度分布を予測する。これらの評価はそれぞれ独立に行うことができるが、どちらも空洞径、坑道離間距離などの幾何形状や物性値の整合性がとれていなければならなく、これに関しては 3.3.1 節で述べたデータベースコンテナーや共通コンテナーの概念を適用することが適当である。最適化ツールでは、上記 2 つの解析の結果得られた状態量を予め与えられた制約条件を満足する範囲で設計変数（ここでは坑道離間距離と廃棄体ピッチ）を更新させ、廃棄体 1 体あたりの処分面積を最小化する最適化問題を解くことになる。設計変数の更新に伴う解析領域の修正や形状の補正は、後の自動メッシュ生成部が行い、それらを反映させた新しい入力データを用いて次イタレーションの試行計算へつながる。最適化計算の結果を知識ベースとして蓄えることができれば、他のケースでの利用に際して重要な情報源となる。核種崩壊・生成部はガラス固化体の発熱量を算出し、熱的安定性評価に受け渡される。性能評価では、最終的に得られた最適解、つまり廃棄体 1 体当たりの埋設占有面積を最小化する人工バリア仕様に基づいて、人工バリア中の核種移行解析を行い、当該システムのバリア性能に関する見通しを得る。最適化を行う際の設計変数として、とくに坑道離間距離や廃棄体ピッチのみを設計変数としたケースでは、MESHNOTE のように人工バリアを一次元円筒座標系に仮定したモデル体系への影響はなく、人工バリア性能の感度としては現れない。緩衝材厚さやガラス固化体高さなどを設計変数に選択して初めて感度が現れる。しかし、岩盤物性などの地質環境条件や処分概念のバリエーションを考慮すると、上記の最適化計算の結果から複数の設計仕様が得られることになり、それらに対して、設計者が容易にシステム性能への感度を確認できることは、性能評価の結果を設計にフィードバックさせる観点から意味がある。さらに、ブラックボックス化された性能評価テンプレートとして機能することで、性能評価に精通していない設計者が容易に利用できるメリットがある。

以上の枠組みを、第 3 章で検討した統合解析プラットホームに解析者の操作性を含めて展開する。このとき、プロトタイプシステムの実現に必要な全ての構成要素を洗い出すた

めには、解析ネットワークに基づいた解析手順（3.1.1 節（1）（b）参照）の各フェーズを踏まえる必要がある。すなわち、解析者による解析ネットワークの構築、解析ネットワークの実行、解析結果の確認から構成される 3 つのフェーズに応じて検討を進める必要がある。

図 4.2.2-2 に実行フェーズの解析ネットワークの構成を示す。ここに示されたアイテムは、3.1.1 節で述べた解析オブジェクトおよびユーティリティオブジェクトを表しており、実際に利用者がグラフィカルユーザインターフェイスを通じて構築すべき解析ネットワークに対応している。それぞれのアイテムは、データベースサーバと情報のやり取りを行っているため、データの受信（図中「Pre」で表示）および送信（図中「Post」で表示）を担う通信機能が埋め込まれなければならない。また、オブジェクト間のインターフェイス（図中「OIF」で表示、以下「オブジェクトインターフェイス」と呼ぶ）は、その前後にリンクしているオブジェクトとのデータのやり取りを記述したものであり、フォーマット変換やメッシュ生成などの処理を行うことになる。このオブジェクトインターフェイスは、リンクしているオブジェクトに依存した固有の処理を行うものである。なお、空洞解析モデルや熱解析モデルを構築する入力フェーズにおいては、サイクル機構で別途開発中の処分場基本設計システム（図 4.2.2-3 参照）と連携させた活用が有効と考えられる。同システムは、人工バリアの主要寸法ならびに有限要素メッシュの分割方法を指定することで、形状モデルを自動生成するものであり、さらに空洞解析、熱解析、地震応答解析など、現在サイクル機構で運用中の解析コードの入力データを効率的に作成支援する機能までを有するものである。

次節以降では、図 4.2.2-2 に示した解析ネットワーク内の主要なオブジェクトについて、本プロトタイプシステムにおける役割と具体的な実現手法を検討する。このとき、当該オブジェクトにリンクしているデータフローの役割、各オブジェクトの入力フェーズならびに出力フェーズの操作イメージについても併せて検討する。

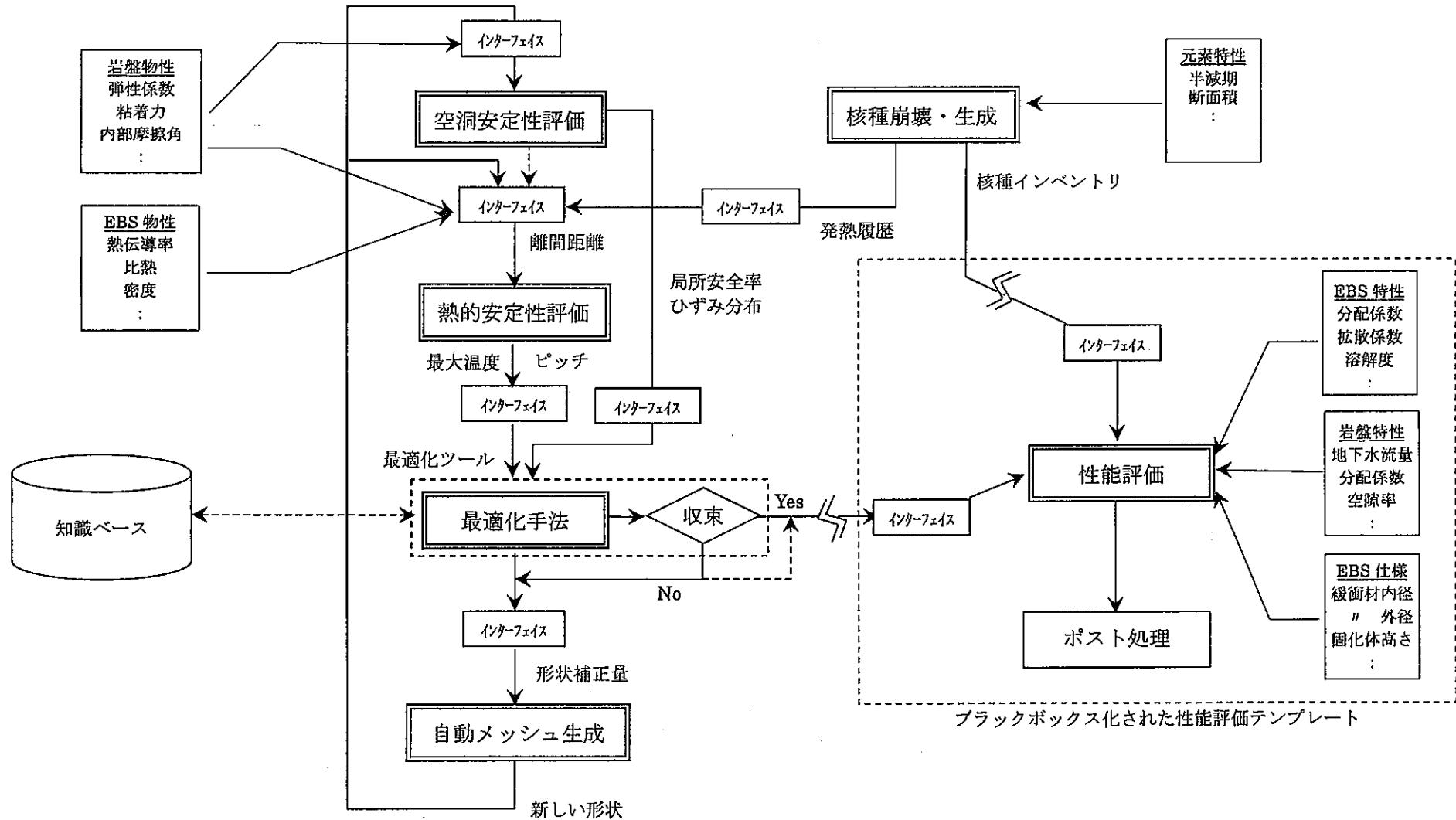


図 4.2.2-1 設計最適化プロトタイプシステムの構成概念

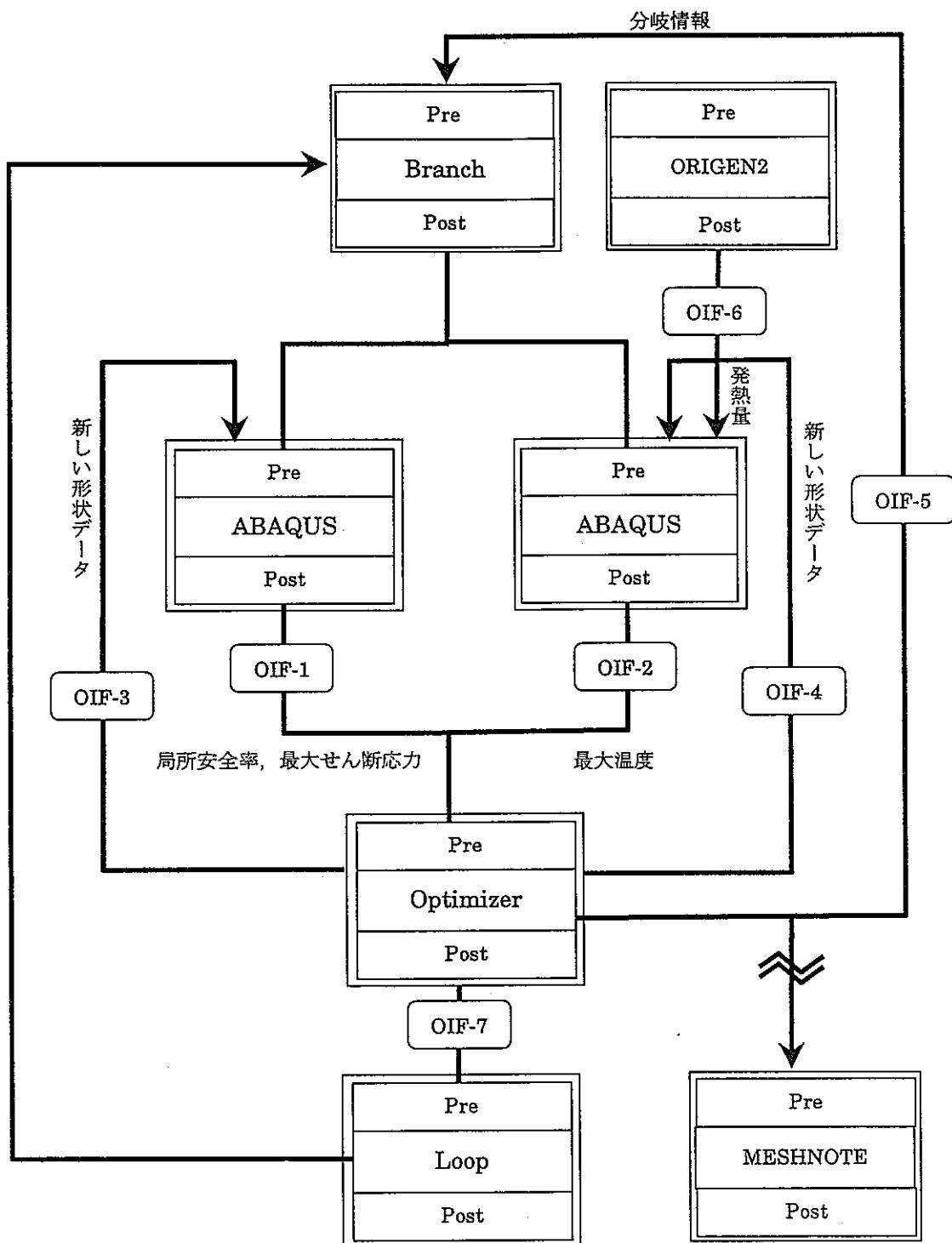


図 4.2.2-2 解析ネットワークの内部構成（実行時）
(Pre : Pre Processor, Post : Post Processor)

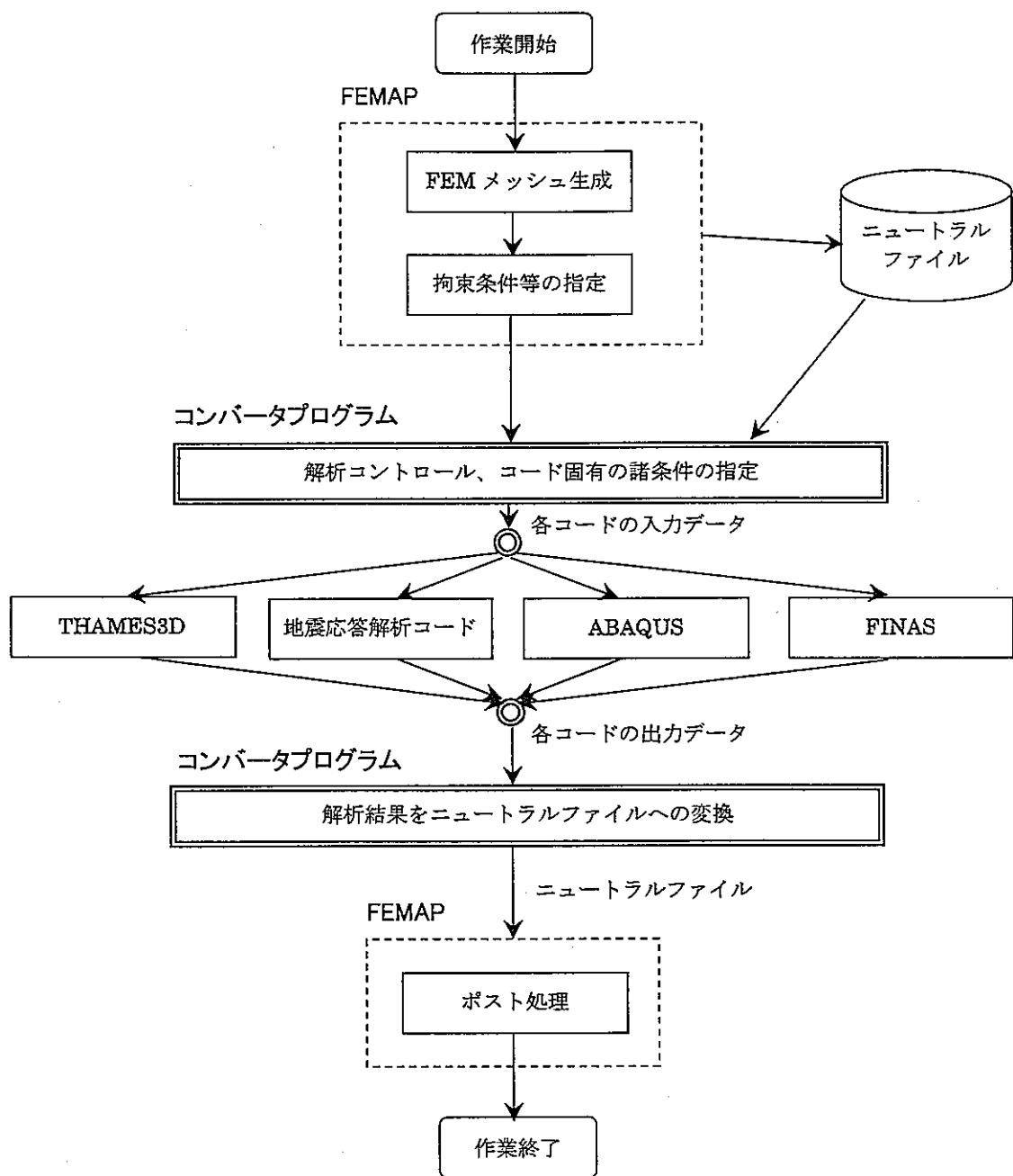


図 4.2.2-3 処分場基本設計システムを用いた解析作業の流れ
(サイクル機構殿 開発中システム)

4.2.3 設計解析コードに関する検討

第2次取りまとめに基づく空洞の力学的安定性評価では、アクセス坑道、主要・連絡坑道などの空洞種別を考慮した解析・評価を進めており、それぞれの支保工仕様を概略で設定した後、それらの妥当性を検証する二段階のアプローチをとっている。すなわち、弾塑性理論に基づく理論解を用いた支保工仕様の設定を行い、それらの妥当性を確認する位置付けで二次元ないし三次元の弾性・弾塑性有限要素法を用いた解析・評価が行われている。具体的な解析方法は、対象とする空洞種別や岩種により異なってくる。また、熱的安定性評価では、坑道離間距離や廃棄体占有面積等に関するパラメータサーベイが三次元有限要素法を通じて行われている。

ここで採られたアプローチは、事業化や地下施設を用いた研究開発の進展に伴い、処分場設計における、より実際的な方法論の構築へと集約されていく。また、その過程で利用されていく解析コードについても、様々な分野で幅広く使われ、かつ使用実績が十分にある信頼性の高いコードが重要視されるであろう。サイクル機構では、熱解析（非定常熱伝導解析）で使用している FINAS が、同様の計算を ABAQUS で行った場合に比較して、多くの計算時間を要している等の理由から、ABAQUS への移行を念頭においている。ABAQUS は、第2次取りまとめにも示されたオーバーパックの腐食膨張解析、緩衝材流出解析においても使用されており、さらに SKB で実施された異なる処分概念におけるキャニスターへの力学的影響解析（L.Borgesson, 1992）や幾つかのシナリオに対する緩衝材の挙動解析（L.Borgesson, 1988）をはじめ、電力やメーカー等でも広く使用されていることから、現段階において適したコードとして選定できる。

これらの状況を踏まえ、本検討では汎用有限要素解析コード ABAQUS を用いた空洞解析および熱解析を前提とし、それぞれの具体的な解析手法は、原則として第2次取りまとめ記載のアプローチを採用することとする。ただし、プロトタイプとして扱う系は処分坑道横置き方式のみを対象とする。

市販で利用されている ABAQUS は、通常ソースコードレベルで利用することはできない。実行モジュールのみの利用である。図 4.2.2-2 に示した解析ネットワークの中で他のオブジェクトとの連携を図るために、最適化計算の各繰返し毎に必要な入力ファイルを作成する前処理ならびに後処理機能を持たせてやらなければならない。これらの処理は、図 4.2.2-2 に示したオブジェクトインターフェイス OIF-1、OIF-2、OIF-3 および OIF-4 が該当する。以下に、これらの処理内容について整理する。

(1) 前処理機能

オブジェクトインターフェイス OIF-3、OIF-4 は、それぞれ最適化オブジェクトの出力情報となる新しい設計変数に基づいて幾何形状を更新し、次の解析に必要な新しい入力データ（空洞解析、熱解析）を作成する。幾何形状の更新には、後述のメッシュ生成

手法（ベーススペクトル法：4.2.3 節）を採用する。一般に、有限要素解析コードの入力データは、節点データ、要素データ、材料データ、境界条件、初期条件、荷重条件および出力指示等の形式化されたデータ群から構成されており、ABAQUS では「*」で始まる文字列（例えば、「*NODE」、「*ELEM」など）に応じて、これらのデータグループの指定が行われる。図 4.2.3-1 に ABAQUS の入力データの一例を示す。幾何形状の更新等の理由により入力データを変更しなければならない場合は、この入力データから該当個所を検索し、データグループ単位で新しい情報に置換できれば良い。

```

*HEADING, SPARSE
SAMPLE DATA FOR ABAQUS
*NODE, SYSTEM=R
    1, 0. 0000000E+00, 0. 0000000E+00, -0. 36480000E+02
    2, 0. 3700000E+00, 0. 0000000E+00, -0. 36480000E+02
    3, 0. 7400001E+00, 0. 0000000E+00, -0. 36480000E+02
    4, 0. 11099999E+01, 0. 0000000E+00, -0. 36480000E+02
    5, 0. 13874999E+01, 0. 0000000E+00, -0. 36480000E+02
    :
    8576, 0. 8750000E+01, 0. 44399996E+01, 0. 31599998E+02
    8577, 0. 1000000E+02, 0. 44399996E+01, 0. 31599998E+02
    8578, 0. 11250000E+02, 0. 44399996E+01, 0. 31599998E+02
    8579, 0. 12500000E+02, 0. 44399996E+01, 0. 31599998E+02
*ELEMENT, ELSET=BALL, TYPE=C3D8
    1, 2073, 2074, 2081, 2073, 2371, 2369, 2375, 2371,
    240, 3989, 4211, 4099, 3997, 4272, 4362, 4365, 4276,
    :
    10002, 297, 297, 321, 320, 1, 1, 25, 24,
    10001, 297, 297, 320, 298, 1, 1, 24, 2,
    12647, 3070, 3058, 3354, 3366, 3071, 3059, 3355, 3367,
*SOLID SECTION, ELSET=EALL, MATERIAL=ROCKC
*MATERIAL, NAME=ROCKC
*ELASTIC
    3.50E+09, 0. 300000
*Mohr COULOMB
    28.0, 28.0
*Mohr COULOMB HARDENING
    3.00E6
*DENSITY
    2.20E+03
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=STRESS, GEOSTATIC
    EALL, 0.0, 500.0, -10.780E6, 0.0, 1.070, 1.070
*BOUNDARY, OP=NEW
    XMIN, 1, 1, 0.0
    XMAX, 1, 1, 0.0
*STEP, INC=30
*GEOSTATIC
*DLOAD
    EALL, GRAV, 9.8, 0.0, 0.0, 0.0, -1.0
    LOADE, P2, 10.0987E6
*END STEP

```

図 4.2.3-1 ABAQUS の入力形式

入力データの内容（使用するデータグループ）は、対象とする解析種別に応じて様々となる。また、連携させるアイテム（解析コードやコンテナー）や解析ネットワークで対

象とする問題の種別に応じても異なってくる。従って、ここでの前処理を行いうインターフェイスとしては、ABAQUS 入力データ内の任意のデータグループを検索することができ、さらに必要な情報を加えた新しい入力データを生成できる汎用的な機能が適当である。

(2) 後処理機能

ABAQUS の後処理を行うオブジェクトインターフェイス OIF-1 および OIF-2 では、後に続く最適化オブジェクトに必要な情報を出力データから取り出すことにある。ABAQUS の出力データは、以下に示す複数のファイルとして出力される。

- ・データファイル (*.dat)
- ・リストアットファイル (*.res)
- ・結果ファイル (*.fil)
- ・メッセージファイル (*.mes)
- ・ステータスファイル (*.sta)

主出力ファイルはデータファイルであり、入力データのエコーバックを含めた全ての解析情報が出力される。後処理用の出力ファイルは上記の結果ファイルに相当し、出力するデータの内容に応じた可変長のレコード単位で、バイナリないし ASCII 形式で出力される。図 4.2.3-2 に結果ファイルの一例を示す。

```
*I 19I 41921A5.8-14 A08-FEB-2A000 A17:56:29I 3448I 3469D 7.888197585077021D
-01*I 18I 41900I 11ACPE4 I 3527I 3526I 210I 211*I 18I 41900I 12ACPE4 I 13I
3527I 211I 212*I 18I 41900I 13ACPE4 I 14I 13I 212I 213*I 18I 41900I 14ACPE4
I 15I 14I 213I 214*I 18I 41900I 15ACPE4 I 3531I 15I 214I 215*I 18I 41900I
16ACPE4 I 3532I 3531I 215I 216*I 18I 41900I 17ACPE4 I 18I 3532I 216I 217*I
18I 41900I 18ACPE4 I 3534I 18I 217I 218*I 18I 41900I 19ACPE4 I 211I 210I
219I 220*I 18I 41900I 210ACPE4 I 212I 211I 220I 221*I 18I 41900I 211ACPE4
I 213I 212I 221I 222*I 18I 41900I 212ACPE4 I 214I 213I 222I 223*I 18I 41900I
213ACPE4 I 215I 214I 223I 224*I 18I 41900I 214ACPE4 I 216I 215I 224I 225*I
18I 41900I 215ACPE4 I 217I 216I 225I 226*I 18I 41900I 216ACPE4 I 218I 217
I 226I 3100*I 18I 41900I 217ACPE4 I 220I 219I 228I 229*I 18I 41900I 218ACPE4
I 221I 220I 229I 230*I 18I 41900I 219ACPE4 I 222I 221I 230I 231*I 18I 4190
0I 220ACPE4 I 223I 222I 231I 232*I 18I 41900I 221ACPE4 I 224I 223I 232I 23
3*I 18I 41900I 222ACPE4 I 225I 224I 233I 234*I 18I 41900I 223ACPE4 I 226I
225I 234I 235*I 18I 41900I 224ACPE4 I 3100I 226I 235I 3109*I 18I 41900I 225AC
PE4 I 229I 228I 237I 238*I 18I 41900I 226ACPE4 I 230I 229I 238I 239*I 18I
41900I 227ACPE4 I 231I 230I 239I 240*I 18I 41900I 228ACPE4 I 232I 231I 240
I 241*I 18I 41900I 229ACPE4 I 233I 232I 241I 242*I 18I 41900I 230ACPE4 I 2
34I 233I 242I 243*I 18I 41900I 231ACPE4 I 235I 234I 243I 244*I 18I 41900I 232
ACPE4 I 3109I 235I 244I 3118*I 18I 41900I 233ACPE4 I 238I 237I 246I 247*I
18I 41900I 234ACPE4 I 239I 238I 247I 248*I 18I 41900I 235ACPE4 I 240I 239I
248I 249*I 18I 41900I 236ACPE4 I 241I 240I 249I 250*I 18I 41900I 237ACPE4
I 242I 241I 250I 251*I 18I 41900I 238ACPE4 I 243I 242I 251I 252*I 18I 41900I
239ACPE4 I 244I 243I 252I 253*I 18I 41900I 240ACPE4 I 3118I 244I 253I 312
```

レコード単位

図 4.2.3-2 ABAQUS 出力形式 (fil ファイル)

1行は最大80カラムとなっており、その中で変位や応力などのデータ項目に応じたレコードフォーマットが繰返し出力される。データ項目の識別は、各レコード内に現れるキー番号により容易に識別することができる。

最適化オブジェクトに必要な情報、すなわち制約条件として規定される最大温度や最大せん断ひずみ、最小局所安全率などは、この結果ファイル内を検索することにより抽出する。先の前処理と同様に、結果ファイルから任意のデータを抽出する汎用的な後処理プログラムを作成しておけば、ここで取り上げた熱解析や空洞解析以外の解析種別を対象とした場合への対処が容易になる。

4.2.4 プレポストプロセッサーに関する検討

ここでは、形状最適化を行う際の有限要素解析コードのインターフェイス（メッシュ生成エンジン）となるプレポストプロセッサーの機能に関して、以下に示す2つのアプローチについて、その適用性を検討する。

- ① 市販アプリケーション搭載のメッシュ生成エンジンを用いた自動処理
- ② 形状パラメータ依存の節点座標ベクトルに基づく自動処理

上記①については、IDEAS および FEMAP などの市販ツール搭載自動メッシュ生成エンジンの利用を前提とするものであり、マクロプログラムによる自動処理を行うものである。②については、基本形状と形状パラメータ依存の節点座標ベクトルの組み合わせにより、形状を変更するプログラムで、形状パラメータの変更を反映した新らしい形状を作成するものである。形状最適化問題で一般的に利用されているのは後者の手法である。

これらに共通する論点としては、最適化計算の各イタレーションにおいて解析者の操作を一切要求しない非対話形式の処理環境を実現しなくてはならないことである。

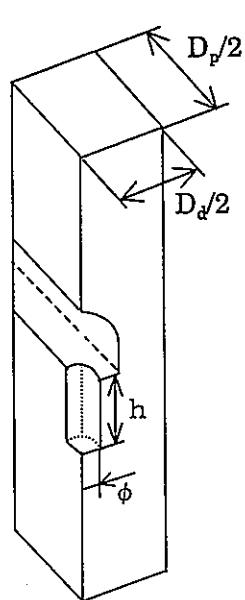
以下に、処分場設計における形状最適化問題の特徴と上記2つの具体的手法を要約する。さらに、これらの手法の長所、短所について考察し、本プロトタイプシステムで採用するアプローチを検討する。

(1) 処分場設計における形状最適化問題

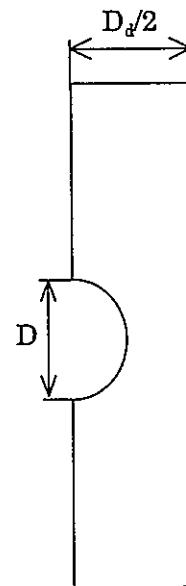
人工バリアやレイアウトの設計に際しては、人工バリア構成要素の寸法や地下施設構成、廃棄体の配置間隔など、形状を定めるための多くの意思決定問題が伴う。例えば、空間的に大きな広がりをもつ不均質な岩盤や発熱特性の異なるガラス固化体の処分を設計の前提条件として考慮するとなれば、個々の人工バリアの特性や設置環境に応じた設計を行うことになるため、設計者が定めるべき形状パラメータの数は膨大になる。

図4.2.4-1は第2次取りまとめで使用された熱解析、空洞解析モデルの概略図である。第2次取りまとめでは、処分パネル内のガラス固化体が全て同じ環境に処分されるものと仮定し、そのうちのガラス固化体1体を対称モデルとして取り出したものを用いている。図中に併記した寸法は、熱的ないし力学的安定性に寄与する形状パラメータの一例

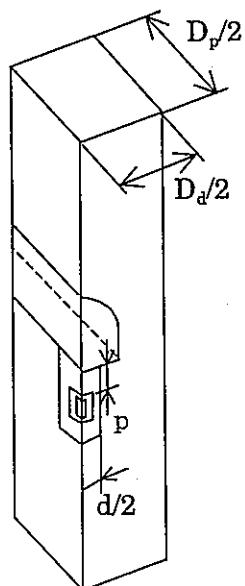
である。ただし、これらの形状パラメータの全てが熱的・力学的安定性に影響を及ぼす支配的要因とは限らない。設計で定めるべき形状パラメータは、前提とする設計条件や性能へのインパクトに依存するものであり、問題の枠組みを固定的に定めることできない。すなわち、処分場設計における形状最適化問題では、様々な形状パラメータを自由に組み合わせることができ、かつ最適化計算の各繰返しにおいて、解析者の操作を必要としない完全な自動処理を実現する必要がある。このとき、形状パラメータの取り方により解析モデルの構築方法（メッシュ生成手法）が変わらない汎用的な手法を用いることができれば、少ない労力で幅広い形状最適化問題を扱うことが可能になる。これを踏まえ、以下に前記2つのメッシュ生成手法について要約する。



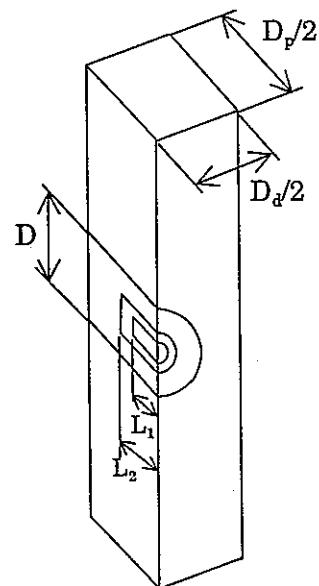
空洞解析モデル
処分孔豎置き方式



空洞解析モデル
処分坑道横置き方式



熱解析モデル
処分孔豎置き方式



熱解析モデル
処分坑道横置き方式

図 4.2.4-1 解析領域と形状最適化に関する設計変数の例

(2) 市販アプリケーション搭載のメッシュ生成エンジンを用いた自動処理

設計解析モデルの多くは、対象とする領域の幾何形状が単調であり、メッシュ生成が困難になる複雑な領域は比較的少ない。人工バリアシステムの構成は限られた寸法が定まれば、容易に決定できるものである。プロトタイプシステムにおけるメッシュ生成の基本方針の1つとして、人工バリアシステムのテンプレートとなるべきスケルトンモデルを構成要素毎に予め作成し、そこから任意の属性（例えば、処分坑道径や坑道間距離）を継承させることで具体的な人工バリア構成要素を作成し、最終的にこれらの構成要素を組み合わせることで人工バリアシステムの解析モデルを構築するアプローチが考えられる（図4.2.4-2参照）。スケルトンモデルからの属性継承を想定しない場合は、様々なパターンのジオメトリ修正やメッシュ再分割を繰り返し計算の中で毎回行わなければならなく、それらを行うための具体的な方法を個別かつ自動的に適用することは困難である。

FEMAP や IDEAS などの市販されている汎用プレポストプロセッサーでは、通常、有限要素解析モデルを効率的に構築するための以下の機能が備わっている。

- ジオメトリエンジン
- 自動メッシュ生成エンジン
- 形状演算
- マクロ

有限要素解析に必要となるモデルデータ（幾何形状）は、節点座標と要素データ（要素を構成する節点や要素種別）である。これらのデータはライン、カーブ、サーフェイスなどの代表的なジオメトリを作成し、その上にメッシュ分割を行っていくジオメトリベースのメッシュ生成により作成される。机上で節点座標や交点を算出したり、要素構成節点を個々に指定したりする必要がなく、比較的大きな領域であっても多数のデータを短時間で作成することができる。自動メッシュ生成エンジンは、任意の三次元領域を四面体要素や六面体要素に自動分割するものである。六面体要素のメッシュ生成では、必ずしも自動処理が実現できない等の理由から半自動メッシュ生成と呼ばれることが多い。形状演算は、2つの異なるソリッドを演算（ブーリアン演算）させることで、それらが組み合わされた新しいソリッドを作成することができる。マクロは、上記の機能をはじめとした全てのコマンドをキーボード操作として記憶することができ、利用者の用途に応じてアプリケーションをカスタマイズできる点で便利である。

一例として、サイクル機構で利用が進められている FEMAP を取り上げ、上記の方法の適用性を考える。この方法のメリットは、人工バリア構成要素のスケルトンモデルを用いるため、様々な設計仕様に幅広く対応できる点である。FEMAP 搭載のメッシュ生成エンジンは基本形状のみから完全な自動処理を行うことはできない。しかしながら、全ての操作をマクロプログラムに記憶させることで、自動処理を実現することが可能と

なる。デメリットとしては、最適化計算の各繰返しでメッシュ生成エンジンを通過するため、節点番号や要素番号がその都度変わってしまう点である。節点番号や要素番号は、通常、拘束条件および荷重条件との対応付けがなされているため、これらのデータも更新しなければならないことになる。その他、FEMAP 自体が構成要素の FEA エンティティをデータベース内に格納することができない点やマクロ実行中のクライアント機は一切使用できない（キーボード操作、メール受信などのあらゆる操作が不可能）、バックグラウンドでのマクロ実行ができない（つまり、マクロ実行中は FEMAP のメイン画面が常に表示されている）等の細かい問題点があげられる。マクロ実行中にクライアント側のマシンが一切使用できないという点は、最適化計算のように処理時間をするケースでは大きな制約となる。

(3) 形状パラメータ依存の節点座標ベクトルに基づく自動処理（ベースベクトル法）

この方法は、多くの工学分野の形状最適化問題で一般的に使用される方法である。設計変数として定められた形状パラメータの変更およびメッシュの再構築を、節点座標データのみを変更させることにより対処するものである。このとき、修正すべき形状パラメータの変化のみを許容する拘束条件と荷重条件（単位の強制変位）の弾性解析結果を用いる。変形後の節点座標データに適当なスケールファクターを乗じることで、変更すべき新しい節点座標データを算出する。複数の形状パラメータの変更を同時に考慮するためには、同様にして、それぞれの形状パラメータの変更を独立に許容する条件下で弾性解析を行い、それらの結果を重ね合わせることにより、形状修正後の新しい節点座標データを得る。すなわち、

$$\mathbf{P}_{new} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_n \\ z_n \end{bmatrix} = \alpha_1 \mathbf{P}_1 + \alpha_2 \mathbf{P}_2 + \cdots + \alpha_m \mathbf{P}_m = \sum_{i=1}^m \alpha_i \cdot \begin{bmatrix} x_1^i \\ y_1^i \\ z_1^i \\ x_2^i \\ y_2^i \\ z_2^i \\ \vdots \\ \vdots \\ y_n^i \\ z_n^i \end{bmatrix} \quad \dots \quad (4.2.4-1)$$

ここで、

i ; 独立な設計変数の数 (形状関連のみ)

\mathbf{P}_{new} ; 形状更新後の新しい節点座標ベクトル

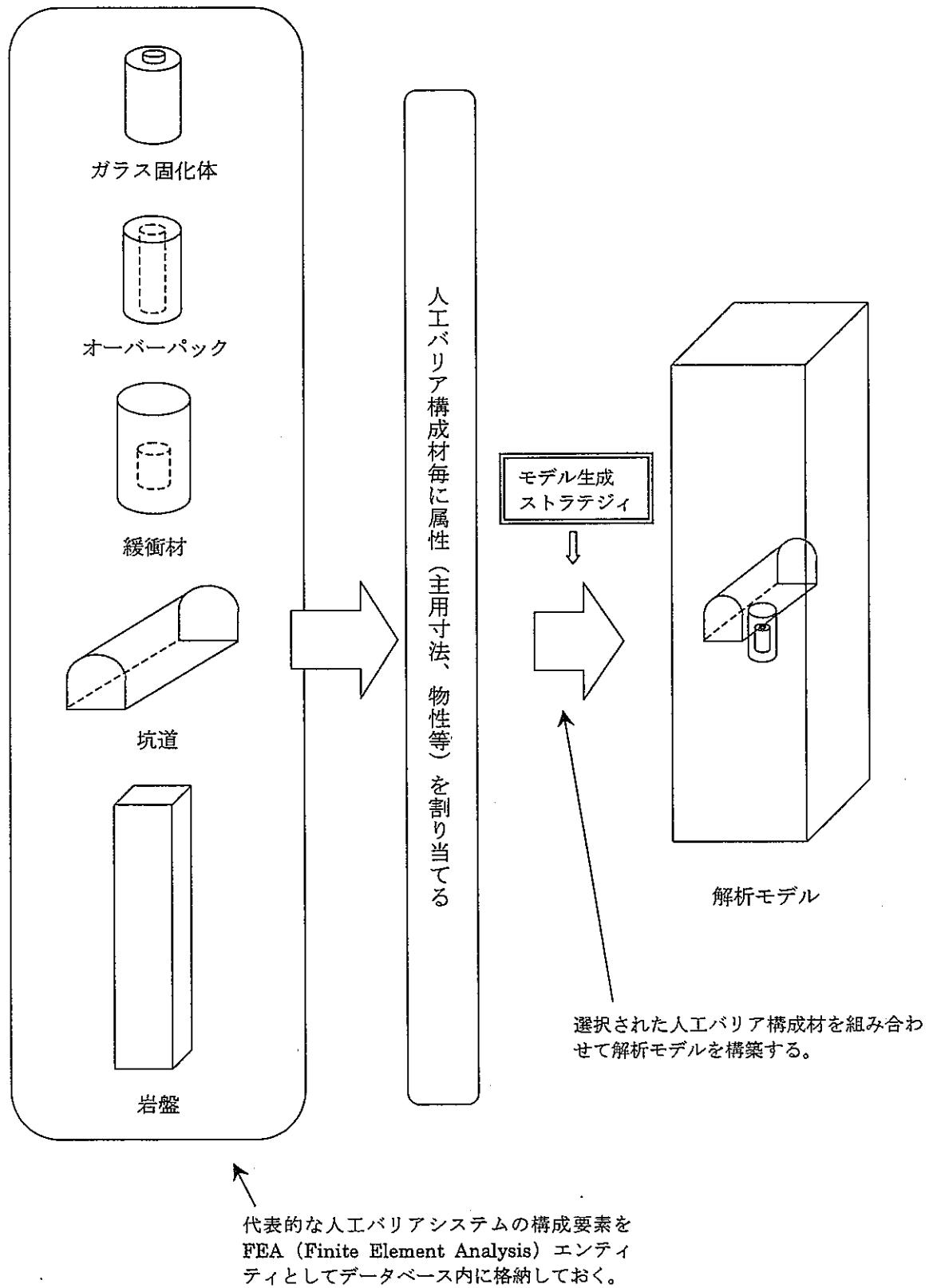


図 4.2.4-2 メッシュ生成の基本方針 (その 1)

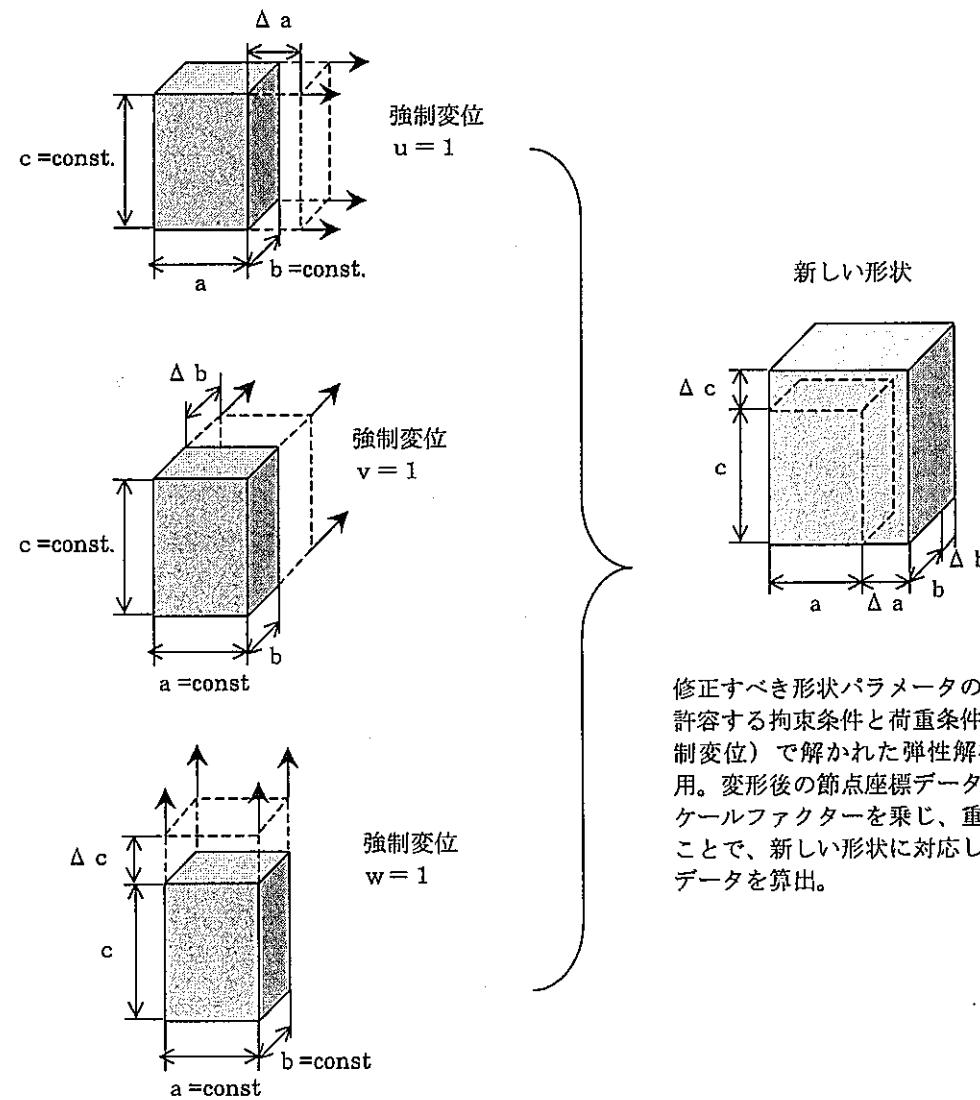
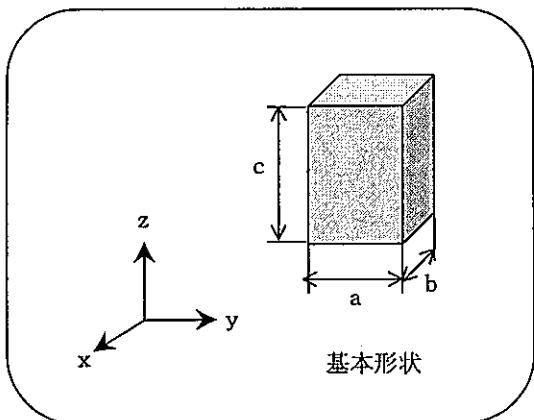
P_i	； 設計変数 i に対応する基準形状ベクトル
m	； 設計変数総数
n	； 節点座標総数
α_i	； スケールファクター
x	； x 座標値
y	； y 座標値
z	； z 座標値

これらの概念を図 4.2.4-3 に示した。基準形状ベクトル P_i が、形状パラメータの変更のみを許容する荷重条件、拘束条件の下で、単位の強制変位を作用させた静解析を行った解析結果である。具体的には、変形後の各節点の位置ベクトルを並べた列ベクトルとなる。図 4.2.4-4 は処分坑道断面の二次元対称モデルについて、処分坑道離間距離および処分坑道径を形状パラメータとした場合の弾性計算の例である。(a)、(b) 図は、坑道中心断面を固定境界、上下端をローラ境界として、右側面に単位の強制変位を与えた場合の変形モードを表している。同様に (c)、(d) 図は坑道壁面に単位の強制変位を与えた場合の変形モードである。それぞれの形状パラメータは独立に変化しており、それに伴う節点座標データが変化することになる。

この方法の最大のメリットは、形状更新に伴う解析モデルの修正が節点座標データのみとなる点である。従って、各有限要素を構成している節点は形状更新の過程において変化することはない。また、各節点に対して関係付けられている拘束条件や荷重条件も変更する必要がない。形状更新に伴い変更すべきデータが限られている点は、最適化ループ内で完全な自動処理を実現する際に好都合である。また、上記の簡単な演算処理のみにより新しい節点座標データを算出することができ、プログラミングも容易である。必然的に、市販アプリケーションで課せられた制約、例えばバックグラウンド処理ができないとか、バージョンアップへの対処などの煩わしさからは解放される。デメリットとしては、独立な形状パラメータ毎に基本形状ベクトルを事前に作成（弾性計算を形状パラメータの数だけ実施）しなければならないため、形状最適化で対象とする設計変数の数が増えるほど、これらのデータ整備に労力を要することがあげられる。

(4) メッシュ生成手法の選定

上記の手法の統合解析プラットホームへの適用性を、それぞれの特徴を踏まえて検討する。表 4.2.4-1 は、上で述べた両手法のメリットとデメリットを整理したものである。最適化に伴う繰返し計算を完全に自動化するためには、解析モデルの節点構成、要素構成に変更が生じることだけは避けたい。節点番号や要素番号の相違に伴う、荷重条件、初期条件等の変更に複雑かつ膨大な処理を要するからである。



修正すべき形状パラメータの変化のみを許容する拘束条件と荷重条件（単位の強制変位）で解かれた弾性解析結果を使用。変形後の節点座標データに適当なスケールファクターを乗じ、重ね合わせることで、新しい形状に対応した節点座標データを算出。

図 4.2.4-3 メッシュ生成の基本方針（その 2）

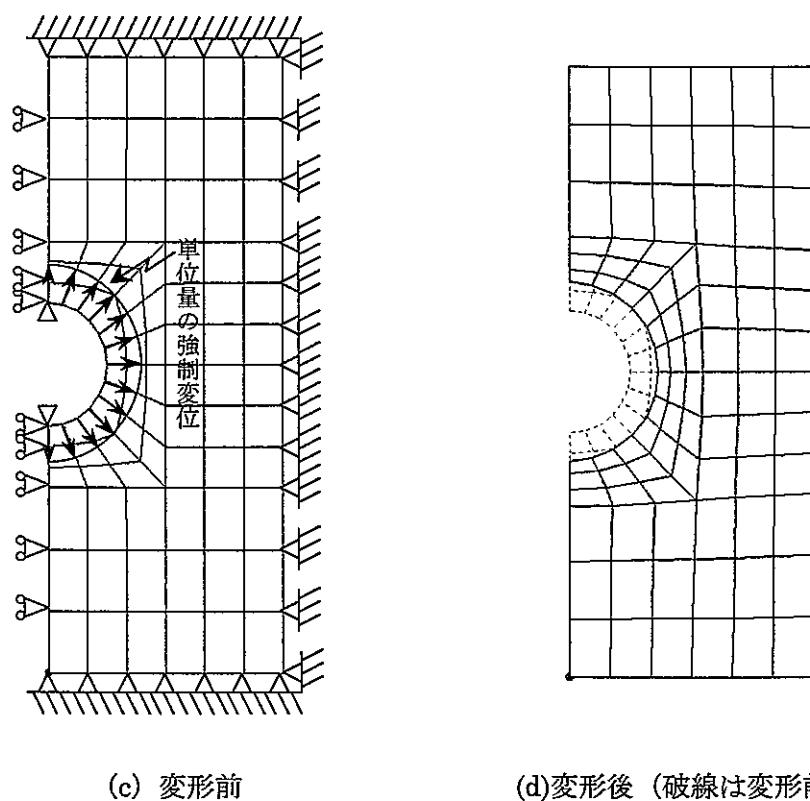
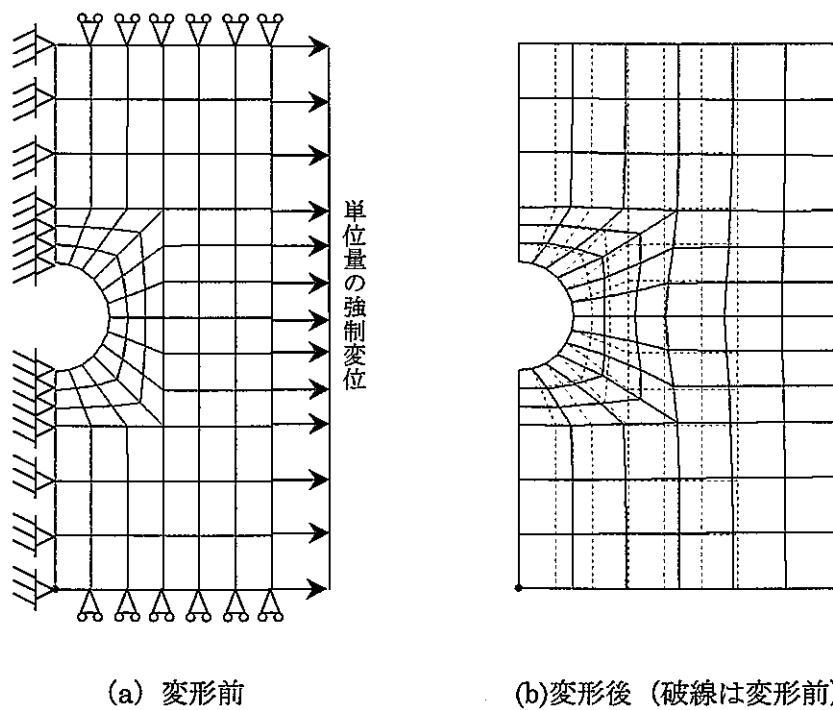


図 4.2.4-4 形状最適化に用いる形状修正ベクトルの作成（弾性解析例）

表 4.2.4-1 メッシュ生成手法の比較

	メリット	デメリット
市販アプリケーション搭載のメッシュ生成エンジンを用いた自動処理	<ul style="list-style-type: none"> 人工バリア構成要素のスケルトンモデルを用いるため、様々な設計仕様に柔軟に対応可能。 全ての操作をマクロプログラムに記憶させることで、自動処理化が可能（プログラミングが不要）。 六面体メッシュ生成エンジンを利用できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 構成要素の FEA エンティティを FEMAP 自体のデータベース内に格納することができない。 マクロ実行中のクライアント機は一切使用できない。 バックグラウンドでのマクロ実行ができない。 最適化計算の各繰返しで節点番号、要素番号が変わること。 FEMAP のバージョンアップ等への対応が困難。
形状パラメータ依存の節点座標ベクトルに基づく自動処理（ベースベクトル法）	<ul style="list-style-type: none"> 形状変更に対するメッシュ生成は節点座標データのみで対応可。 新しい節点座標データは、簡単な代数計算のみで算出可。 バックグラウンドでの処理が可能。 最適化計算の各繰返しで節点番号、要素番号が変わらない。 市販アプリケーションのバージョンアップなどの外的要因に影響されない。 	<ul style="list-style-type: none"> 独立な形状パラメータ毎に基本形状ベクトルを作成（弾性計算を形状パラメータの数だけ実施）しなければならない。

したがって、プロトタイプシステムで実現する自動メッシュ生成手法は、上記の形状パラメータ依存の節点座標ベクトルに基づくベースベクトル法を適用することとする

4.2.5 最適化手法の検討

前記のとおり、地層処分システムの全体構成を決めるためには、お互いに関連を持つ多数のサブシステムの設計が不可欠であり、階層化された合成問題として捉える必要がある。階層化されたそれぞれの部分問題では、与えられた制約条件の下で、安全性と合理性のトレードオフを勘案した部分設計（最適設計）が進められることになる。より大きな見方をすれば、システム全体の安全性やコストを評価関数に取込んだ最適化問題を考えることになる。

ここでは、数理的な最適化手法として最小二乗法や実験計画法等の古典的な最適化手法（例えば伊理、今野ほか、1998）の適用と併せて、近似モデル（例えばJ.F.M.Barthelemy、1993）を併用した手法について検討を行う。

まず始めに、図 4.2.2-2 に示した解析ネットワークについて、少し広い観点から形状最適化問題としての一般的定式化を行う。すなわち、空洞の力学的安定性および人工バリアシステムの熱的安定性を考慮した最適化問題のバリエーション（設計変数、制約条件および目的関数のバリエーション）を見通しながら、プロトタイプシステムにおける具体的な最適化問題の定式化を行う。そこから、数値地層処分システムが担うべき最適化ユーティリティの役割、機能を明確にするとともに、それらに対して幅広く適用可能な数理的最適化手法の候補を選定し、部分的にプロトタイプシステムへの展開を図る。

a. 一般的定式化

表 4.2.1-1 に示したとおり、数値地層処分システムは処分場設計に関する様々な最適化問題への活用が期待される。いま、最適化すべきシステムとして、図 4.2.2-2 に示したニアフィールドの熱的安定性および岩盤の力学的安定性を対象とした場合を考える。このとき、候補となる設計変数としては以下のものが考えられる。

【形状に関するもの】

- 坑道離間距離
- 坑道径
- 支保工厚さ
- 緩衝材厚さ
- ガラス固化体ピッチ
- オーバーパック厚さ
- ガラス固化体直径
- ガラス固化体高さ

【材料物性に関するもの】

- ヤング率（岩盤、支保工）
- ポアソン比（岩盤、支保工）
- 密度（岩盤、支保工、緩衝材、オーバーパック、ガラス固化体）
- 比熱（岩盤、支保工、緩衝材、オーバーパック、ガラス固化体）
- 熱伝導率（岩盤、支保工、緩衝材、オーバーパック、ガラス固化体）
- 応力一ひずみ構成則に関するパラメータ（例えば、岩盤のモールクーロン則）

【荷重条件に関するもの】

- 土被り厚
- 静水圧

これらの設計変数は、着目する目的関数や制約条件との組み合わせにおいて適切に選択しなければならない。とくに目的関数に感度を及ぼす設計変数の数が多くなるケースでは、個々のイタレーションに要する解析時間が膨大になるケースも考えられ、結果的に最適解が得られるまでの計算時間が非現実的となる可能性がある。この場合、通常、近似モデルを用いた感度解析を行い、設計変数のスクリーニングが行われる（例えば R.H.Myers et al, 1995）。

多領域最適化問題、すなわち MDO (Multi-Disciplinary Optimization) について再度ここで触れておく。前記のとおり、処分場設計に關係の深い最適化問題としては、単一の評価関数を最小化するものから、複数の評価関数を同時に最小化する MDO 問題までが含まれる。例えば、物量と処分コストの最小化を同時に考慮するものや、放射性核種に対するバリア性能からくる状態量を加味した MDO 問題が考えられる。これらは互いに關係のある量であり、それぞれの評価で相互の関連を制約条件等で適切に取込む必要がある。統合解析プラットホームで構築する解析ネットワークの構成は利用者が自由に設定できるものであり、そこで使用する解析コードも固定することはできない。また、上で述べたとおり、最適化問題の特徴は設計変数、制約条件、目的関数の定め方により様々である。したがって、数値地層処分システムの最適化ユーティリティとしては、最適化問題を自由に定式化することができ、それに必要な解析コードを容易に取込むことができ、さらに問題に応じた最適化アルゴリズムを複数の手法から自由に選択できるものが望ましい。

これらを踏まえ、図 4.2.2-2 に示したプロトタイプシステムでは、設計変数として、さらに条件を限定した以下の最適化問題を想定するとともに、比較的に幅広い最適化問題に適用可能な逐次二次計画法に基づく最適化アルゴリズムを採用することとする。

【設計変数】

- 坑道離間距離 D_d [m]
- ガラス固化体ピッチ D_p [m]

【制約条件】

- 岩盤の局所安全率が許容値を超えない為の不等式制約条件
- 岩盤のせん断応力が許容値を超えない為の不等式制約条件
- 人工バリア構成材及び岩盤内の温度が許容温度を超えないための不等式制約条件
- 隣接空洞が幾何学的に干渉しないための不等式制約条件
- 既往の研究成果に基づく経験的坑道離間距離に関する不等式制約条件

【目的関数】

- 廃棄体 1 体当たりの処分面積の最小化

b. 数値地層処分システムにおける最適化オブジェクトへの要求事項

利用者が自由に最適化問題を定式化するためには、設計変数、制約条件および目的関数を任意に指定できなければならない。リンク機構設計における多領域最適化システム（藤田、赤木、三木ほか、1994）では、これらの定式化処理を自動的に行うべく Fortran 言語を用いたユーザサブルーチンを介して最適化ソルバー部に受け渡す方式をとっている。この方法は、設計変数や制約条件、目的関数の種類、すなわち最適化問題としての枠組みが比較的限定されており、部材同士の力学的干渉や部材に生じる応力、モーメントなど代数的な力学計算によりリンク機構の性能を評価することができるため有効であるが、数値地層処分システムのように広範な用途への適用を狙っているケースでは限界がある。

数値地層処分システムにおける最適化ユーティリティとしては、以下の役割を持つ必要がある。

- イ) 解析ネットワーク内に配置された任意数の解析コードから設計変数を識別する。
- ロ) 任意数の解析コードからの解析結果より目的関数、制約条件に関する諸量を取出す。
- ハ) 上記イ)、ロ) で得た設計変数および目的関数、制約条件に関する諸量を用いて、最適化問題を定式化する。

- 二) 制約条件を満足する次の試行値を求める。

上記イ)、ロ) 項のように、解析ネットワーク内に配置された任意数の解析コードから設計変数を識別したり、目的関数や制約条件に関する諸量を取出すには、最適化オブジェクト自身が解析ネットワーク内の他のアイテム（解析コードやコンテナー）の情報を得る必要がある。問題の設定によって、使用する解析コードの数や種別は様々であり、必然的にデータを取出す入力や出力の形態も様々になる。不特定多数の入力データから

欲しいデータを取出すには、解析コード側にデータを取出すための新しいルールを課し、これに従い入力データを作成するのが適当である。設計変数として取出したいデータにマーキングをするなどの処置がこれにあたる。最適化オブジェクト側では、入力データ内にマーキングがされたデータを設計変数とみなして抽出していけば良い。必要であれば、抽出したデータ間で演算が加わっても良い。同様にして、不特定多数の出力データから任意のデータを取出す場面も多く存在する。この場合、解析コード毎に出力データの一部にマーキングを行うことは困難であるため、最適化オブジェクトとの連携を前提とした標準化されたデータテーブルの類を用意することが現実的である。幸い、有限要素解析を主体とした多くの設計解析コードは、形式化されたポスト処理専用の出力ファイルがあり、これを用いることで任意のデータを取出すことは比較的容易である。従って、利用者は上記の標準化されたデータテーブルと使用する解析コードのポスト処理ファイル間のインターフェイスのみを作成すればよいことになる。

上記ハ) 項の要求は、抽出した設計変数や目的関数、制約条件に関する諸量を用いて、具体的な最適化問題を記述し、定式化する機能を実現することである。一口に定式化と言っても、目的関数や制約条件の表現は様々である。設計変数である廃棄体ピッチと坑道離間距離の乗算により廃棄体 1 体当たりの占有面積を目的関数とする単純なケースもあれば、さらにそれらの総和を取ったり、積分したものを利用函数とする複雑なケースもある。このような任意の表現に対応するためには、最適化オブジェクトが設計変数、目的関数および制約条件を記述するための演算処理を行い、それらを識別するための機能をもつ必要がある。市販数学ソフトとして知られている MATHCAD や MATLAB のような「As Seen」に数式を記述できる枠組みが便利である。

上記ニ) 項の要求は、最適解を収束計算により見つけるための 1 回の試行計算に相当する。通常、これらの試行を行う場合は、制約条件を満足する試行解（実行可能解）を、収束を速くするための補償措置をとりながら探し出すことが多い。そこで、1 回の試行計算を行う間に、他の解析コードの応答感度、例えば ABAQUS の出力より得られる最大温度やひずみなどをどれだけ必要とするかが重要となる。最適化のための試行計算を繰返し行うためには、このような応答感度を少なからず必要とし、これが目的関数や制約関数の勾配を定めたり、次の試行点を見つけるための重要な情報となる。応答感度を多く必要とするほど、1 回の試行計算の間に解析コードを何度も実行することになり、最適解を求めるまでの計算時間が膨大になる可能性がある。逆に、応答感度に関する情報が少ない場合は、収束が遅くなったり、解の精度が落ちたりするため、これらの関係は互いに相反するものとなる。解の収束性や精度を確保しつつ、現実的な時間で最適解を求める 1 つの方法が、前述の応答局面や直交表を用いた感度解析との併用である。

c. 最適化手法

数値地層処分システムで扱う最適化問題に対しては、問題の性質に応じた手法を自由

に選択できることが望ましく、研究開発ないし処分事業が進められる様々な場面で現れる最適化問題に柔軟に対処できなければならない。ここで取り上げる逐次二次計画法は、最急降下法やニュートン法などの多くの最適化手法に内在する一般的な性質を含んでいると考えられるため、数値地層処分システムで扱える最適化手法を今後充実させる観点からも適当な検討材料と考える。従って、ここでは逐次二次計画法に関する理論的詳細は付録一3に譲り、最適化問題を解く上での共通の特徴に着目しながら、前項で挙げた要求を支持するための方策について検討し、さらに、その中から統合解析プラットホーム上で実現するプロトタイピングの範囲を明確にする。

今、最適化問題の一般形を以下のとおり記述する。

$$\text{Minimize} \quad ; \quad f(\mathbf{x}) \quad (4.2.5-1a)$$

$$\text{Subject To} \quad ; \quad \mathbf{x} \in \mathbf{S} \quad (4.2.5-1b)$$

ここで、 \mathbf{x} は設計変数ベクトル、 $f(\mathbf{x})$ は目的関数、 \mathbf{S} は制約条件を満足する解の集合（実行可能領域）である。一般に、数理的手法による最適化問題に対するアプローチは、最適解のもつべき一般的な性質を明らかにし、これを満足する解を試行錯誤的に見つけることである。そのためには、目的関数 $f(\mathbf{x})$ の勾配 ∇f と勾配をもう一度微分したヘッセ行列 $\nabla^2 f$ を用いて、解空間を構成する $f(\mathbf{x})$ の幾何学的性質を調べる必要がある。

逐次二次計画法は、繰返し計算の各反復において元の問題を近似した二次計画問題を逐次解いてゆく方法であり、制約条件のない最適化問題に対する準ニュートン法を制約付きの問題へ拡張したものと考えることができる（茨木ほか、1991）。 n 次元空間 \mathbb{R}^n で定義された二回連続微分可能な目的関数、制約関数を対象とする。

前記のとおり、繰返し計算の各反復においては、解析コードの応答感度を必要とする場面に多く直面する。これは目的関数や制約関数の勾配を求めたり、次の繰返し計算に必要な試行解を検索するために重要な情報となる。勾配を求めるには、例えば図4.2.5-1に示した中心差分等により近似勾配を求めるのが通常である。 k 回目の試行値 $\mathbf{x}^{(k)}$ における近似勾配を求めるには、 $\mathbf{x}^{(k)}$ の他に $\pm \Delta \mathbf{x}$ を含めた計3点の応答感度が必要となる。すなわち、解析コードを3回実行して初めて近似勾配が1つ定まる。これを繰返し計算毎に行えば、常に繰返し計算数の3倍回も解析コードを実行しなければならないことになり、さらに目的関数や制約関数が複数有る場合には、膨大な回数で解析コードを実行しなければならない事態に陥る。

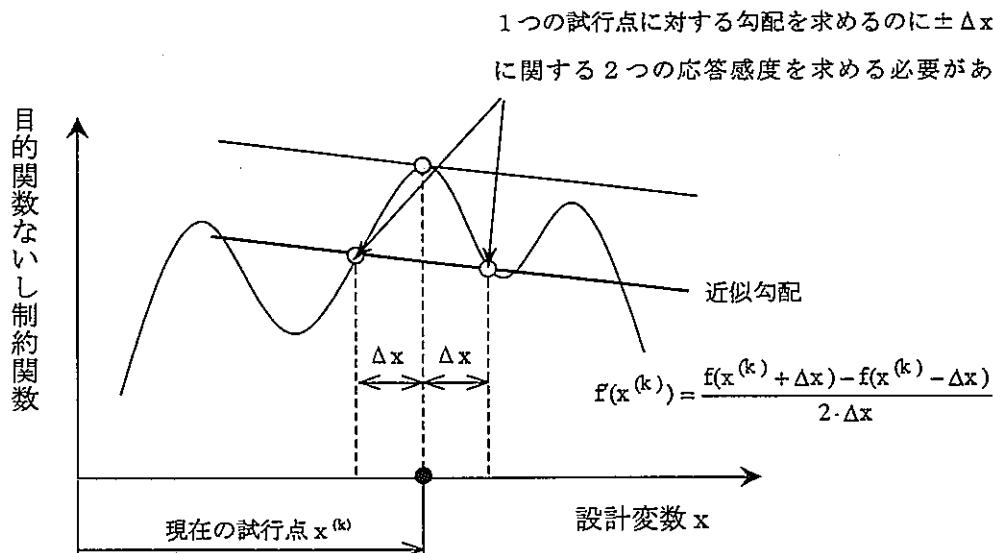


図 4.2.5-1 目的関数、制約関数における近似勾配の算出概念

また、次ステップの繰返し計算における試行点を求めるため、以下に示す直線検索を行う場合についても同様の事態が生じることが予測できる。

$$F_p(x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)}) \underset{\alpha \geq 0}{\approx} \min F_p(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) \quad (4.2.5-2)$$

$$x^{(k+1)} \approx x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)} \quad (4.2.5-3)$$

ここで、

F_p ; ペナルティ関数

$d^{(k)}$; 偏差ベクトル ($x^{(k+1)} - x^{(k)}$)

$\alpha^{(k)}$; ステップ幅 (4.2.5-2式を満足する十分小さい正の定数)

ペナルティ関数は、制約条件を破ることに対する罰（ペナルティ）の大きさを表すものであるため、ペナルティ関数を十分小さくすることができるステップ幅 α を試行錯誤的に求めることになる。この場合、ペナルティ関数には目的関数の項が含まれているため、ステップ幅を検索するための試行計算毎に解析コードを実行しなければならないことになる。

以上の内容は、多くの最適化手法に共通する一般的な性質と考えられるため、解の収束性や精度を確保しつつ、現実的な時間で最適解を求めるアプローチの採用が必要である。その一つの方策として、前述の応答曲面を用いた感度解析との併用が挙げられる。

一般に、応答曲面を記述する近似モデルは次式で表される。

$$y(x) = f(x) + \varepsilon \quad (4.2.5-4)$$

ここで、 $y(\mathbf{x})$ は推定すべき未知の関数であり、 $f(\mathbf{x})$ は設計変数ベクトル \mathbf{x} に関する既知の多項式関数である。 ϵ は平均値ゼロ、分散 σ^2 の正規分布に従うものと仮定した誤差である。それぞれの観測における誤差 ϵ_i は互いに独立であり、同様の分布に従うものと仮定する。 $y(\mathbf{x})$ の近似に使われる多項式関数 $f(\mathbf{x})$ は、通常、低次の多項式で記述され、以下に示す線形モデルが用いられる。

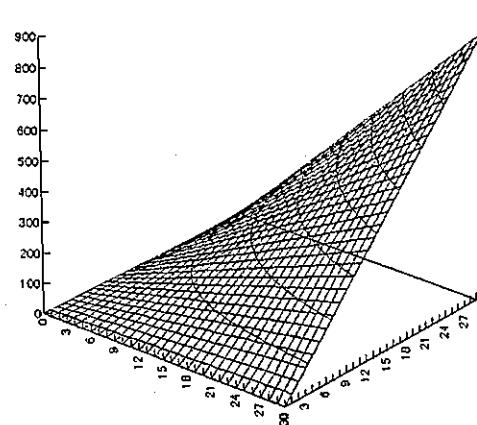
$$\hat{y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i \quad (4.2.5-3)$$

$$\hat{y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \beta_{ij} x_i x_j \quad (4.2.5-4)$$

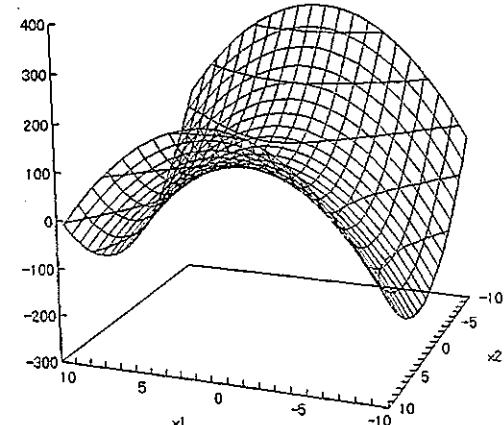
β_0 、 β_i 、 β_{ij} および β_{ii} は実際の値 $y(\mathbf{x})$ と推定値 $\hat{y}(\mathbf{x})$ の偏差を最小にする最小二乗回帰を通じて決定されるパラメータである。一般に (4.2.5-3) 式を一次の応答曲面、(4.2.5-4) 式を二次の応答曲面という (図 4.2.5-2 参照)。一次の応答曲面は、局所的な小さい領域を近似するのに適しており、二次の応答曲面は複雑な関数形を柔軟に近似することができる。最小二乗法に従うと、上式のパラメータ β は次式により見積もることができる。

$$\beta = [\mathbf{X}^T \mathbf{X}]^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (4.2.5-5)$$

ここで、 \mathbf{X} はサンプルデータからなる設計マトリクスであり、 \mathbf{y} はそれぞれのサンプル点に対する応答値を表す列ベクトルである。



(a) 一次応答曲面



(b) 二次応答曲面

図 4.2.5-2 応答曲面の例

最適化計算に伴う繰返し計算を行う前に、全ての目的関数、制約関数について、上記の応答曲面を得ておけば、多くの応答感度を要する最適化計算には（4.2.5-3）式の値から応答感度を求める単純計算として扱うことができる。図 4.2.5-3 に処理概念を示す。

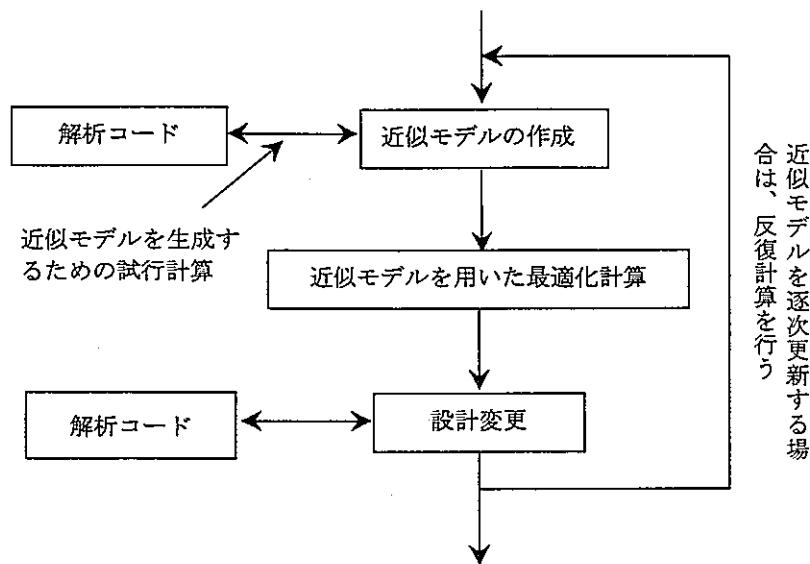


図 4.2.5-3 近似モデルを用いた最適化計算の概念

近似モデルを生成するための試行計算では、解析コードを行う試行点を生成し、それに従った複数の解析を行う。ここで作成された近似モデルを用いて、実際の最適化計算が行われる。試行点は応答曲面の精度を左右する重要な位置付けとなり、実験計画法に基づく直交表を用いたり、乱数を発生させたサンプリング手法を適用する方法が一般に用いられる。

プロトタイプシステムで実現する最適化オブジェクトでは、上記の機能を実現する第一ステップとして、近似モデルを含まないシンプルな最適化手法を適用することとする。

4.2.6 性能評価ツールの統合化

処分場の合理化検討を進める中では、設計条件となる地質環境条件のバリエーションや複数の設計概念に対してシステムのバリア性能を容易に把握することができ、これらの情報を設計の上流工程へフィードバックさせたり、詳細な性能評価を行う際の情報提供を行う必要性が生じてくる。また、上記の最適化手法の枠組みに取り込むことにより、システム性能を勘案した設計最適化を図る場面も考えられる。これに対して昨年度の概念検討では、数値地層処分システムの活用として、処分場設計と性能評価のリンクを容易に図ることができ、かつ性能評価に関しては専門家以外の技術者が容易に解析・評価を行うことができる統合化環境を 1 つの目標として検討してきた。

ここでは、その第一段階として、人工バリア中の核種移行解析コード MESHNOTE を

対象に、前記の最適化手法との連携を考慮したプロトタイピングを行う。すなわち、設計された人工バリアシステムの諸形状や支配核種を対象とした核種移行パラメータを設定することにより、人工バリアシステムからの核種移行率を設計者が容易に評価できるテンプレート機能の検討を行った。

設計者により、容易に評価可能な支援を実現するためには、以下の要求事項が挙げられる。

- ① 設計者が核種移行解析コードの入力データを作成する必要がないこと
- ② 設計された人工バリアの寸法、物性等のデータを共有できること
- ③ 設計者が核種移行解析の結果を容易に見ることができる

これに対して、本プロトタイプでは次の機能を実現することで対処する。すなわち、①項の入力データを作成する手間を無くすためには、核種移行解析コードの主要な入力データを予めテンプレートとしてデータベースに登録しておき、設計者はそこから計算したいデータを適宜取出せるようにすればよい。さらに、処分場幾何形状共通コンテナーや緩衝材物性 DB コンテナーと連携させることにより、設計解析に用いた主要データを核種移行解析コードに受け渡すことができれば、②項に挙げたデータの共有化が実現できる。③項の解析結果の表示については、広く利用されている EXCEL 等のアプリケーションを利用することにより、核種移行解析コードから得られる結果を自動的に EXCEL にインポートし、トレンド表示を自動化することが可能になる。

4.2.7 まとめ

以上、本項では設計最適化ツールとしての一つの活用例に着目し、プロトタイピングを含めた一連の解析手法について具体化した。以下に、本項での検討内容と結果についてまとめる。

(1) 処分場設計解析コード/モデルに関する検討

数値地層処分システムへ既存の設計解析コード取り込むには、解析コードの形態に応じて個別に対応をとる必要があり、第 2 次取りまとめ用いられた設計解析コードについて、個別の運用状況に関する現状認識とそれに応じた課題の抽出を行った。これにより、いずれの解析コードについても、3 章で検討した統合解析プラットホームに概ね決まった手続きで搭載可能となり、さらに、この段階における計算サーバの最低限の構成、連成解析コードとしての利用可能性について見通しを得ることができた。

(2) 設計最適化に関する検討

階層化された合成問題を構成する最適化問題を取り上げ、幾つかの考えられる活用例を示しながら、最適化オブジェクトが担うべき機能の全体像を具体化した。また、処分

場の基本仕様を規定する坑道離間距離および埋設廃棄体ピッチを合理的に設計する問題をケーススタディとし、解析ネットワークによる記述を行い、各構成要素が持つべき役割について明かにした。

(3) 最適化手法の検討

空洞の力学的安定性および人工バリアシステムの熱的安定性を考慮した最適化問題のバリエーション（設計変数、制約条件および目的関数のバリエーション）を見通しながら、プロトタイプシステムにおける具体的な問題の定式化を行った。さらに、数値地層処分システムが担うべき最適化ユーティリティの役割・機能を明確し、比較的幅広い問題に適用可能な逐次二次計画法をソルバーに採用した。これらの機能は、一部プロトタイプシステムに反映した。

(4) 性能評価ツールの統合化

設計条件となる地質環境条件のバリエーションや複数の設計概念に対してシステムのバリア性能を容易に把握することができ、これらの情報を設計の上流工程へフィードバックさせたり、詳細な性能評価を行う際の情報提供を行える枠組みを考案した。その第一段階として、人工バリア中の核種移行解析コード MESHNOTE を対象に、さきの最適化手法との連携を考慮したプロトタイピングを検討し、設計された人工バリアシステムの仕様と一貫性のある情報（緩衝材厚さや物性など）を用いて、人工バリアシステムからの核種移行率を設計者が容易に評価できるテンプレート機能の開発を行った。

4.3 経験的手法の適用性検討

平成10年度における処分場設計での活用検討（JNC TJ1400 99-044）において示したように、数値地層処分システムの適用範囲を、研究開発、処分場の設計、建設、操業から閉鎖に至るまでのすべてのフェーズにおける工学活動の支援と設定することにより、データ管理、処分場設計方法論の開発、知識の蓄積などの観点から、システム開発のメリットを最大限に活かすことが可能となる。

そこで検討では、この前提のもとで、数値地層処分システムが扱う工学的問題について検討し、表2.1-2に示すような数値地層処分システムの適用事例が整理された。ここに記述された問題には、現象を定式化し、数値解析手法により解を求める問題のだけでなく、例えば、スケジューリング、処分場の自動レイアウトなどのように、あらかじめ定められたアルゴリズムだけでは、解を出せない、あるいは効率的に解を求められないような問題も含まれている。また、いわゆる最適化問題に関しても、計算量を考えた場合には、人間の専門家が行うように、いくつかの計算結果より当たりを付け、より少ない計算量で近似解を求める意義のある問題も考えられる。

これらの、いわゆる数値解析手法では扱いにくい問題（知識工学の分野では、「悪構造問題（ill-structured problem）」と呼ぶことがある）の多くは、人間の専門家が問題解決を図る際に、経験で得た知識を活用し、効率的に解を求めている例が多い。このように、人間（主に専門家）のこれまでの経験的知識を問題解決に利用することは、時として非常に有効となる。ここでは地層処分施設設計における最適化問題を中心とし、その他の設計、建設、操業における問題解決への適用についても考察を加えて検討し、今後の数値地層処分システム開発の中での知識工学的手法（経験的手法）の位置づけを明確にする。

地下数百メートル以深に放射性廃棄物を埋める地層処分システムのような大規模地下施設の設計、建設、操業の経験はこれまでなされていないため、経験的知識としては、これまでの経験から蓄積されたもの以外に、今後の設計、建設、操業により新たに取得されるものも多いと考えられる。また、現時点では予想できない問題に対しても、蓄積した知識を有効活用できる可能性もあると考えられる。

そこで、経験的知識をその時々の状況に応じて柔軟に活用できる仕組みについて検討する必要がある。

まず、このような仕組みを作成する上で、必要となる条件を整理した。その結果を下記に示す。

①経験的知識の追加、変更が容易に行える。

新たに取得された知識を反映するために、知識の追加・変更が容易である必要がある。

②情報を共有できる。

研究開発および設計／建設／操業の全ての段階で、関係者が情報を共有できる必要がある。

③経験的知識の記述が理解しやすい。

複数の関係者が知識を記述・変更することになるので、その記述は、直感的に理解しやすいものであることが望ましい。

④あいまいな知識を扱える。

経験的知識には、数値等で表すことのできない、人間の感覚的なものも多いため、このような知識の表現、活用が可能であることが望ましい。

⑤経験的知識の活用方法を柔軟に変更できる。

蓄積された経験的知識を様々な問題に活用可能な、柔軟性をもった仕組みにする必要がある。

上記の条件を満たすしくみとして、エキスパートシステムが考えられる。エキスパートシステムは、専門家の知識を使用して問題解決を行うシステムである。エキスパートシステムにおいては、専門家の知識を特有な表現で記述するが、この記述はいわゆる一般的のプログラムとは異なり、直感的に理解し易く、あいまいな知識を記述することも可能である。さらに、知識を追加、変更することも容易であり、蓄積された知識を利用して求める解答（支援項目）についても、柔軟に変更、追加できる。また、システム化することにより、知識は整理され、共有されることになる。

そこで、ここでは、エキスパートシステムについての概要と基礎知識について整理し、その上で地層処分施設の設計への適用可能性について検討する。

4.3.1 エキスパートシステムの概要

ここでは、エキスパートシステムの利点、欠点等の特徴と、基礎技術、適用分野について述べる。

(1) エキスパートシステムの特徴

エキスパートシステムとは一言でいうと、専門家に変わってタスクを実行するシステムのことであるが、その規模、形態はさまざまである。職場における熟練者が減少し、その代役を担ったり、専門家に変わって判断を下すという目的のシステム開発がさかんに行われたこともあるが、最近では専門家の作業支援および効率向上を目指したものが多い。また、大規模システムのサブシステムの形態に変わりつつある。

以下にエキスパートシステムの利点を示す。

①汎用性がある

アルゴリズムを確立して実行順序が定められた一般的なプログラムとは異なり、エキスパートシステムは知識部分のみ定め、処理部分は定めないので、汎用性がある。

②知識の変更・追加が容易である。

知識と処理を分離しているため、知識の変更・追加が容易である。

③知識の記述が理解しやすい。

専門家の経験的知識を計算機に移植しやすい表現方法（自然言語に近い表現方法）で記述可能なため、専門家が直接知識を理解し、追加・変更が可能である。そのため、専門家自身がシステムを成長させることが可能となる。

④予期できない事態にも対処可能。

アルゴリズムが定まらない問題を対処可能である。

⑤不確定な知識の利用が可能。

不確実な知識から、なんらかの結論を導きだす。

エキスパートシステムの難点を下記に示す。

①知識の全体構造が分かりづらい。

②処理速度が遅い

③システムの検証が難しい

(2) エキスパートシステムの基礎知識

エキスパートシステムは、知識工学に関する技術を適用するシステムである。知識工学は人工知能の応用分野で、その主な手法には、知識表現、知識利用、知識獲得がある。知識表現は、人間（専門家）の知識やノウハウを計算機上に表現・記憶させるための手法である。知識利用は、知識表現を利用して人間（専門家）の思考を実現するため手法で、「推論」が中心となる。知識獲得は、専門家のもつ知識を整理して計算機に組み込む手法である。

エキスパートシステムの基礎知識について、付録1に記述する。

(3) エキスパートシステムの適用分野

(1) 述べた利点を活かし、エキスパートシステムは様々な分野で活用されている。その適用分野を機能的に分類したものを下記に示す。

①診断

対象のデータから、異常の原因や対策を推論する。医療診断、機械故障診断等。

②制御

対象のデータから、対象の状態を分析し、適切な状態になるよう操作量を決定する。

プラントやエンジン制御等。

③コンサルテーション

判断に必要な入力情報より、適切な解答を提示する。投資相談、相続診断等。

④予測

対象のデータから、現在の事象を説明したり、将来の予測を行う。プラント監視等。

⑤設計・配置

制約条件、仕様を満足する解を提示する。LSI設計、計算機室レイアウト設計等。

⑥計画・スケジューリング

作業手順、必要資源の制約を満たす解を求め、その中から最適解または比較的に良い解を選択する。生産計画、プロジェクト管理等

4.3.2 地層処分施設設計への適用検討

これまでに述べてきたエキスパートシステムの手法を利用して、地層処分施設の設計支援の可能性の検討を下記の2項目について行った。

- ①最適化問題への適用可能性
- ②処分場レイアウト設計等に関する支援機能

以下にそれぞれについて、検討した結果を述べる。

(1) 最適化問題への適用可能性

最適化問題を扱う場合、その計算量が問題になる。しかし、人間の専門家は数回の試行から次の解析条件の当たりをつけて再計算させ、効率良く近似解を求める例も多い。ここでは、専門家が近似解を求める方法を参考とし、下記の3項目について経験的手法を適用することを検討した。

- ①解析条件の絞り込み
- ②解析結果の予測
- ③候補解からの解の選択

各項目の詳細について以下に述べる。

①解析条件の絞り込み支援

建設上の制約、規制・基準および経験的な制約等から、解析条件（入力データ）の絞り込みを行うことを支援する。これらの定量的、定性的な条件は、エキスパートシステムの知識表現手法に基づき、計算機上に表現する。知識表現は、追加、変更が容易なため、今後の設計や処分場建設に係わる工学技術の研究等を通じて得られる知識を逐次蓄積していくことが可能となる。

②解析結果の予測

解析結果を予測する手法として、下記の2手法について検討した。

イ) 事例ベース推論

事例ベース推論を適用して、過去に実施した解析の条件と結果からその相関関係を推定し、新たな解析条件による解析結果を予測する。

まず、過去の解析条件とそれにより得られた解析結果を事例とし、事例ベースに格納する。格納された事例の中から、新たな解析条件と類似する事例を検索し、その事例と

の類似点や相違を評価した上で、事例の解析結果を修正して予測結果とする。

事例の検索にあたっては、解析条件間の類似性を判断する基準が必要となる。また、解析条件の修正にあたっては、その修正知識が必要になるが、一般的には、これらの知識を抽出するには、多くの問題分析、検討を要する。

本手法を適用するにあたっては、事例が多数必要である。また事例に用いた解析条件からかけ離れた条件においては精度が著しく落ちるため、使用者がそれを意識しながら活用する必要がある。

ロ) ニューラルネットワークの適用

ニューラルネットワークを用いて、過去の解析条件とそれにより得られた結果を学習させ、新たな解析条件による解析結果を予測する。

本手法においては、事例ベース推論のように、解析条件間の類似性を判定する基準や、解析条件を修正する知識を必要とせず、全て内部数値演算処理により行われる。そのため、対象問題によっては、ヒューリスティクス（過去の問題解決体験に基づく経験的知識）等の知識を介在できないため、非効率になる場合もある。しかし、実験データと異なり、解析計算により得られる結果は、同一条件で異なる結果が出る等の理論上の矛盾を含まないため、比較的に有効に活用可能と考えられる。

本手法を適用するにあたっては、学習に使用する過去の解析結果等が多数必要であり、また学習に用いた解析条件からかけ離れた条件の予測は精度が著しく落ちるため、使用者がそれを意識しながら活用する必要がある。

③候補解からの解の選択

専門家や新たな経験等から得られた知識を活かして、複数の候補解から効率的に解空間の絞り込みを行うことを支援する。専門家が解としてふさわしくないと判断する基準または解としてよりふさわしいと判断する基準について整理し、確信度着付き推論やファジィ推論を利用して、解空間の絞り込みを支援する。この場合、専門家が主観的に解を評価する仕組みをいかに知識表現するかが、支援の有効性を左右することになる。

(2) 処分場レイアウト設計等に関する支援機能の検討

専門家や、今後の設計や処分場建設に係わる工学技術の研究を通じて新たに得られる知識（制約条件および設計因子間の因果関係等）を蓄積し、処分パネルや各種坑道のレイアウト設計等における意志決定を支援する計算機システム（以下支援システムと記述する）について検討した。

①支援システムの要件

[建設・操業の実現性] [長期安全性] [操業時安全性] [経済性] の4つの観

点から、合理的な処分場レイアウトの設計支援を、各開発段階に応じて行なえることが必要である。

この4観点について考慮すべき内容および項目を下記に示す。

[建設・操業の実現性]

建設、操業の実現可能性について考慮する。考慮すべき項目例を下記に示す。

- ・サイト条件（地質環境、地形等）による制約
- ・建築技術による制約
- ・建築上の規制・基準
- ・作業員、廃棄体、ズリ、資材等の物流路の確保の実現性
- ・坑道の掘削、廃棄体定置、埋め戻し等に関する規制および物理的制約
- ・給水・排水路の規制および物理的制約
- ・電力供給、通信設備の規制および物理的制約
- ・経験から得られた制約（これまでの経験により得られている制約、および新たな経験により発見された制約）

[長期安全性]

核種の閉じ込め性能の観点から、長期的な安全性を考慮する。考慮すべき項目例を下記に示す。

- ・人工バリア設計との整合性（オーバーパックによる放射線遮蔽効果や緩衝材仕様による核種移行遅延効果等）
- ・廃棄体の発熱影響
- ・地質環境条件との整合（核種移行に対する遅延効果）
- ・力学的安定性

[操業時安全性]

操業期間中に想定される事象に対して、作業員の安全が確保できるかどうかを考慮する。考慮すべき項目例を下記に示す。

- ・火災や放射能もれ等の緊急時の避難経路、通信手段、換気路の確保の可能性。

[経済性]

建設、操業、閉鎖を通じてのコストを考慮する。考慮すべき項目例を下記に示す。

- ・設備材料費
- ・建設費用（トータルな掘削費用を含む）

② 支援システム機能

①で記述した要件を考慮し、支援システムの機能を検討した。

理想的な支援は、〔建設・操業の実現性〕、〔操業時安全性〕を制約条件として、〔長期安全性〕〔経済性〕の2つの観点を総合的に勘案して、最適なレイアウトを設計することである。

しかし、数値解析的な最適解を求めるることは、制約条件があいまいでかつ多数あるため困難である。そこで、経験的に得た知識に基づき、入力されたレイアウトを基準として、微調整を行うことにより、制約条件を満足し、かつ経済性の観点からより有利なレイアウトを探索していく方法を一例として検討した。そして、それを支援するために必要な機能についても検討した。その結果、検討された支援システムの処理フローを図4.3-1に、支援機能を下記に示す。

- イ) レイアウト情報入力機能
- ロ) 制約条件入力／チェック機能
- ハ) レイアウト微調整機能
- ニ) 物流シミュレーション
- ホ) 経済性評価機能
- ヘ) 長期安全性評価機能

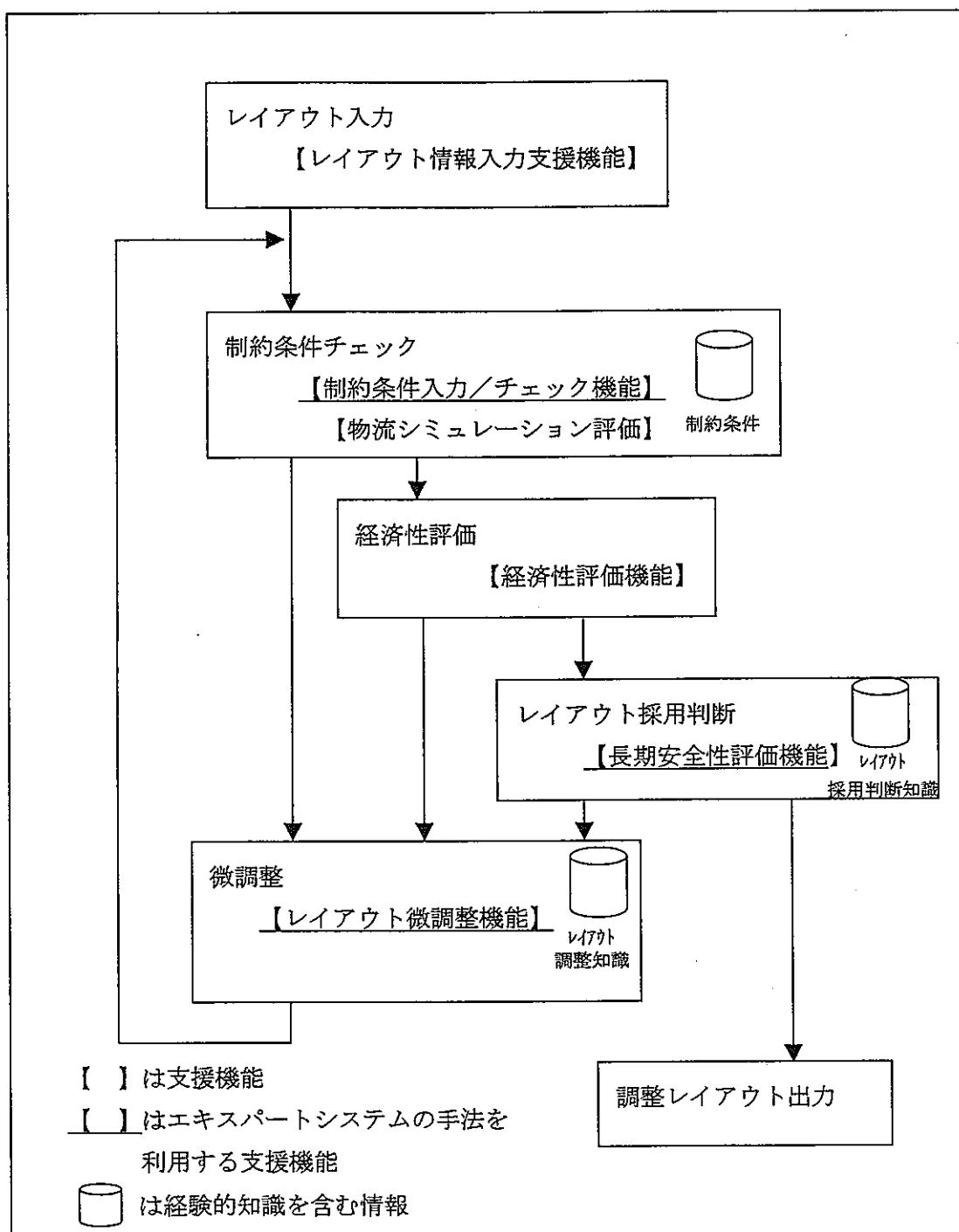


図4.3-1 支援システムの処理フロー

各機能の詳細について以下に述べる。

イ) レイアウト情報入力機能 (CAD)

【概要】

あらかじめ設定された地質環境に対して、処分場レイアウトを構成する要素（坑道、処分区画、換気設備、排水設備、通信設備、電力供給設備等）をCAD的に入力することを可能とする。各要素はその形状および位置、性質等の情報（属性情報）を保有し、これらの情報の追加・変更を可能とする。（図4.3-2）

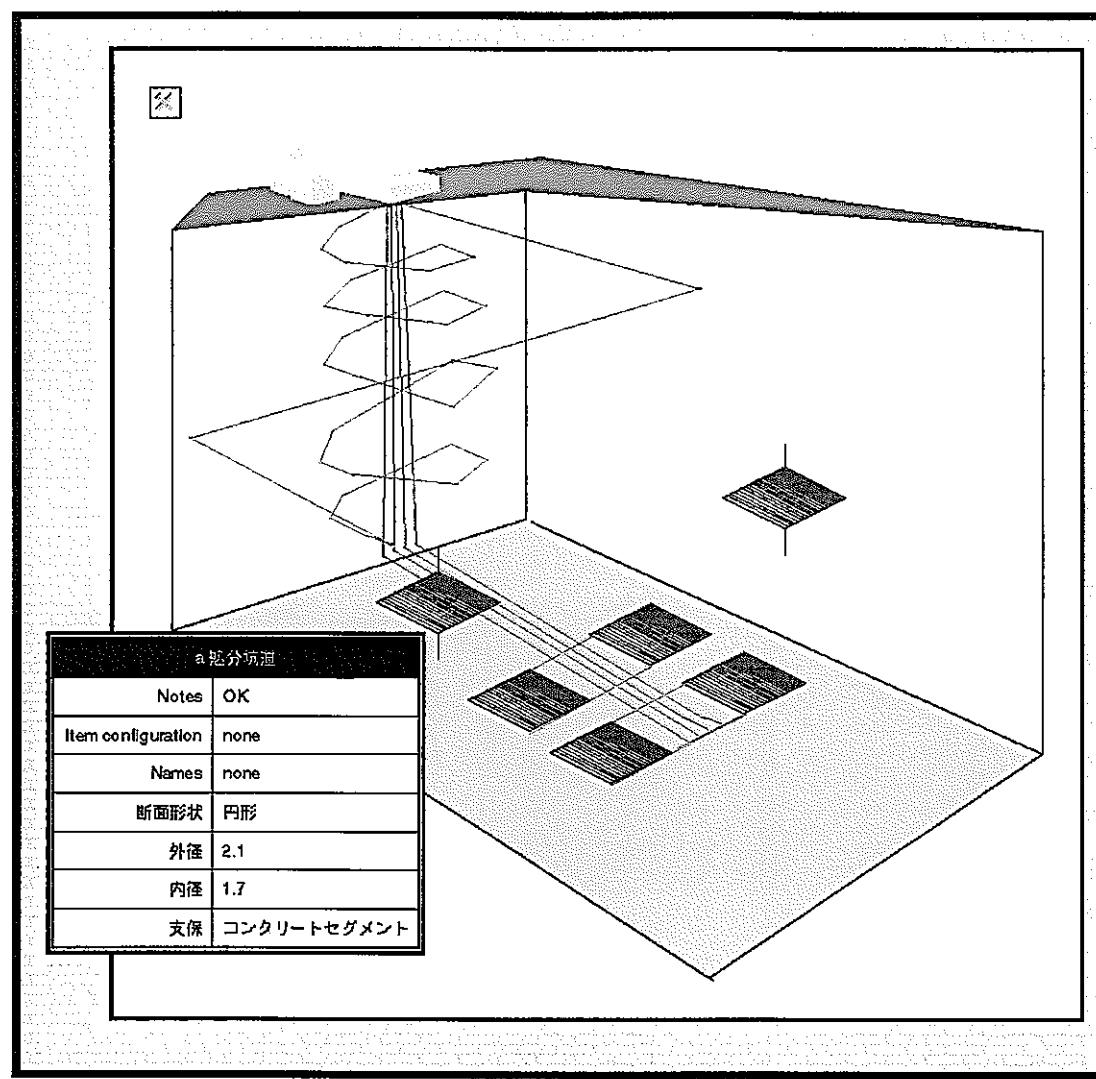


図4.3-2 レイアウト入力機能－イメージ図

【情報共有ツールとしての可能性】

利用者（各分野の関係者）がテキストデータ等で新たに得られた情報等（レイアウトに関係しない情報も含む）を関係する要素の属性等に追加していき、他の利用者がその情報を参照可能なしきみを作成することにより、各実施段階において、経験情報や新たに得た情報を共有することが可能となる。入力情報の分類・整理および整合性等の管理を適切に行なえば、有効な情報共有ツールとして活用できる。

イ) 制約条件入力／チェック機能

【概要】

定性的、定量的制約条件および設計因子間の因果関係をエキスパートシステムの知識表現を用いて入力可能とし、レイアウトが制約条件等を満たしているかどうか推論等によりチェックを行う。但し、【操業の実現性】および【操業時安全性】に関する制約は、物流シミュレーションによりチェックする。

制約条件を満足しない場合は、その内容を提示する。また、制約を満たさない原因やその回避方法が経験的知識として蓄積可能な場合には蓄積し、次回試行時の参考情報として提示可能とする。蓄積する情報は、自由記述によるテキスト情報、または後述する「レイアウト調整知識」である。

実施段階に応じて制約条件の追加・修正を行うことにより、本支援システムを各実施段階で有効活用することが可能となる。

ロ) レイアウト微調整機能

【概要】

入力レイアウトが制約条件を満たさない場合にこれを回避したり、経済性の観点からより有利なレイアウトに変更する知識（レイアウト調整知識）に基づいて、レイアウトを自動的に微調整する。このような微調整をシステムが試行錯誤的に何度も繰り返し、より適切なレイアウトを探索する。

レイアウト調整知識はエキスパートシステムの知識表現を用いて追加・修正を可能とする。人が手動により微調整を行った後、制約条件のチェックを行い、この操作を繰り返すことにより得られるレイアウト調整のノウハウ、すなわち過去の問題解決体験に基づく経験的知識（ヒューリスティクス）を、追加していく。

ハ) 物流シミュレーション

【概要】

火災、放射能もれ等の災害を想定し、レイアウト情報に基づき作業員の避難シミュレーションを行い、避難経路、通信手段、換気路が確保可能かどうかを確認し、操業時

の安全性を判断する。

また、平行して行われる、掘削、ずりの搬出、廃棄体の搬入、定置、埋め戻し作業による物流をシミュレーションし、その実現性、効率を評価する。

二) 経済性評価機能

【概要】

レイアウト情報から、掘削量、設備数、設備規模、建築方法を得ることができるために、これにより設備材料、建築のコストを推定することが可能となる。これを評価関数として経済性評価を行う。

ホ) 長期安全性評価機能

【概要】

レイアウト情報を基に、核種の閉じ込め性能の観点から長期的な安全性を評価する。レイアウトの変更情報により再評価すべき項目を自動判別し、それに必要な解析コードが選択され、計算される。計算結果は、そのレイアウトを採用するか否かを判別する知識（レイアウト採用判断知識）に基づいて評価され、その結果により、レイアウトの微調整を行うか、あるいは最終結果とするかを判定する。

レイアウト採用判断知識はエキスパートシステムの知識表現を用いて追加・修正を可能とする。専門家が主観的に解析結果を評価する仕組みをいかに知識表現するかが、機能の有効性を左右することになる。

本節では、経験的手法の適用として、エキスパートシステムを利用した地層処分場の設計支援の可能性を検討した。

この検討は、設計効率化を主な目的として行ったが、本節における最適化問題への適用における「候補解からの解の選択」や、レイアウト設計支援における「レイアウト採用判断」に関しては、専門家の主観的な判断知識を定式化することに経験的手法を用いている。

処分場の設計をはじめ、これまで実績や経験のない対象に関する何らかの判断を下す場合、全てに定量的な基準を設け、それにより判断することは難しく、専門家の主観的な判断を現実には採用することが多い。このような専門家による主観的な判断を定式化する手段として、経験的手法を用いることは有効と考える。

4.4 GeoFEM/Tiger に関する検討

領域分割法を用いた GeoFEM/Tiger の全体像を示し、数値地層処分システムで利用可能なリソースの特定とそれに伴う諸課題を整理し、今後の適用性に関する見通しを具体化する。これまでに公開されている GeoFEM/Tiger は、バージョン 3.0 として RIST ホームページ (<http://geofem.tokyo.rist.or.jp/>) より入手可能である。ここでは、これらの情報に基づき、とくに並列有限要素法関連（線形ソルバー、領域分割プロセッサーなど）のプログラム資源の活用を検討する。

4.4.1 Tiger コードの全体構成

科学技術庁では、地球環境問題の解決、自然災害に対する対策等への貢献を図るため、地球変動プロセス研究、地球観測、およびシミュレーションを三位一体として、高度シミュレーションによる地球変動予測を目指した地球シミュレータ計画を平成 9 年度より 5 カ年計画で進めている（高度情報科学技術研究所、1999）。本計画は、超高速並列計算機「地球シミュレータ（GS40）」の開発および GS40 用大規模並列ソフトウェアの開発とからなる。後者に関しては、大気・海洋分野、固体地球分野および情報科学分野の知見を結集した体制が敷かれ、いくつかの応用ソフトウェア開発が進行中である。GeoFEM はその内のひとつで、固体地球分野を対象とした並列有限要素解析システムである。固体地球の諸問題は、時間／空間／物理のマルチフィズィックス／マルチスケール問題として整理できる。現在 GeoFEM は開発途上であるが、本項で述べる Tiger は多目的の汎用的な並列有限要素コードであり、固体地球の諸モデル（諸計算コード）をプラグイン方式で取り込めるようなプラットフォームとなることを目指していると同時に、理工学の広い範囲にわたっての応用を目的とした有限要素解析コードの基盤となり得るものである。

現在、GeoFEM/Tiger の開発環境およびシステム構成は次の(1)～(3)のようになっている。

(1) ハードウェア環境

Tiger では Alpha クラスタおよび SR2201 を主な開発環境として、ポータビリティを維持した。GS40 のアーキテクチャを意識した開発環境への移行は開発の次のフェーズである GeoFEM/Snake で考慮される。

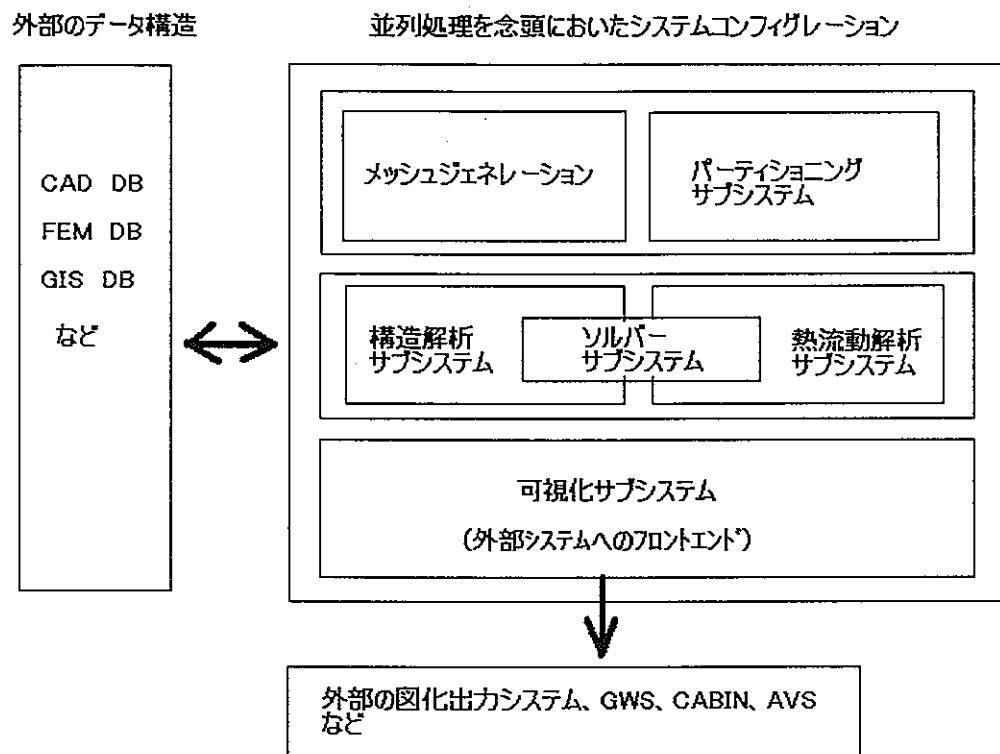
(2) ソフトウェア環境

主な演算には Fortran90、メッセージパッシングライブラリには MPI を用いている。サブシステム間でのインターフェイス記述としてデバイスによらないデータ受け渡し方式の仕様を定め、サブシステム間を遮蔽して開発時の独立性を高めた。このことはプラグイン方式にシステムを構築することにつながっている。

(3) システム構成

GeoFEM/Tiger は、図 4.4.1-1 に示すようなサブシステムおよび統合化環境からなる。各サブシステムは MPI によってメモリ上にリンクされる。すなわち、大規模なデータ

の効率的な取扱いと高速計算の追求を優先させるためにデータのコピー発生を極力避けている。



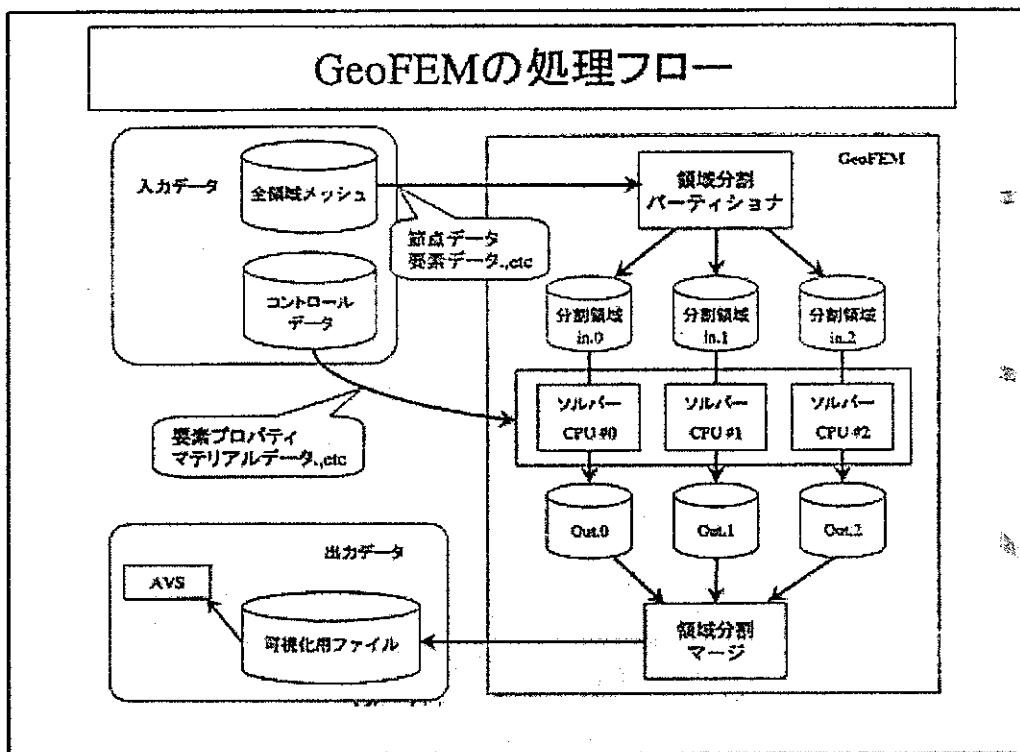
第1回 GeoFEM セミナー資料、1999年7月より引用

図 4.4.1-1 GeoFEM/Tiger のサブシステムおよび統合化環境

GeoFEM/Tiger 開発に際しては、変遷の激しいハードウェアに応じて、並列計算をはじめとする様々なハイパフォーマンスコンピューティング技法による最適化手法が参考とされている。GeoFEM/Tiger が満たすべき必要条件として、設計段階で考慮された条件は次の①~⑥のようである。

① 堅実で安定 (robust) な反復アルゴリズムの選択

線形方程式解法（ソルバー）が、一般の理工学の問題から特殊な固体地球の問題まで幅広く対応するには、方程式で扱うマトリックスの数値的性質が明確に規定できないので、ある程度計算時間を犠牲にしても安定に収束する解法が必要である。その上でソルバーが選択できるようにして最適化できることが望ましい。一般に反復解法の収束は1領域での反復演算を前提とした場合が最も速く安定である。この意味で、並列計算を行った場合でも1領域での反復演算となるべく等価なアルゴリズムで、かつ、領域分割（データの局所化）が前処理の効果をなるべく悪化させないようにする必要がある。領域分



第1回 GeoFEM セミナー資料、1999年7月より引用

図 4.4.1-2 GeoFEM での領域分割法による解析手順

割法では第二の反復として、部分領域間反復を導入する場合も多い。しかしながら、GeoFEM では、収束性、大規模性双方に関する検討を行った結果、この第二の反復は導入しない。すなわち、ソルバーで解くべき自由度は領域全体の自由度とする。

② 領域分割（データシェアリング、ワークシェアリング）の解析者からの隠蔽

並列解析では多くの場合領域分割を行うことになる。実際の解析は幾何的に分割された各小領域毎に要素プロセッサ（PE とも呼ばれる）を割り当てて行われる。領域分割の仕方は負荷分散や CPU 利用率など計算効率に大きく影響する重要な事柄ではあるが、解析者あるいは並列解析応用プログラムを開発する者にとって、領域分割に伴うデータシェアリングあるいはワークシェアリングなどの処理は並列化のために発生した余分な作業であり、できる限り少ないほうが望ましい。このことから解析者が扱うのはあくまで 1 領域状態（全体領域）のデータであり、領域分割後のデータは意識する必要がないものとする。さらに、解析プログラム中にも領域分割に起因する処理、たとえばデータの分散化やプロセッサー間通信などは陽に現れないものとする。これらを実現するには、

解析プログラム中の処理を完全に局所化したうえで、入力データはプロセッサー間隣接情報を含むように自動生成させ、プロセッサー間隣接情報はソルバーのみで考慮する（すなわち、プロセッサー間通信はソルバー内のみで発生する）ようにすればよい。この設計思想により、單一プロセッサー用に開発されたプログラムは、ソルバーへのリンクとデバイスに依存しないインターフェイス仕様への準拠を行うことで、並列化を意識することなく、並列計算プログラムに変換される。

③ デバイスに依存しないプラットフォーム

サブシステムとしての様々な解析コードをプラグイン化技術により共通のプラットフォーム上で使用する。このときサブシステム間でデータ隠蔽されるため開発作業の独立性が確保できる。また、固体地球分野の力学モデルや各種の有限要素解析コードをプラグイン方式で統合化できる。

④ 自己増殖的

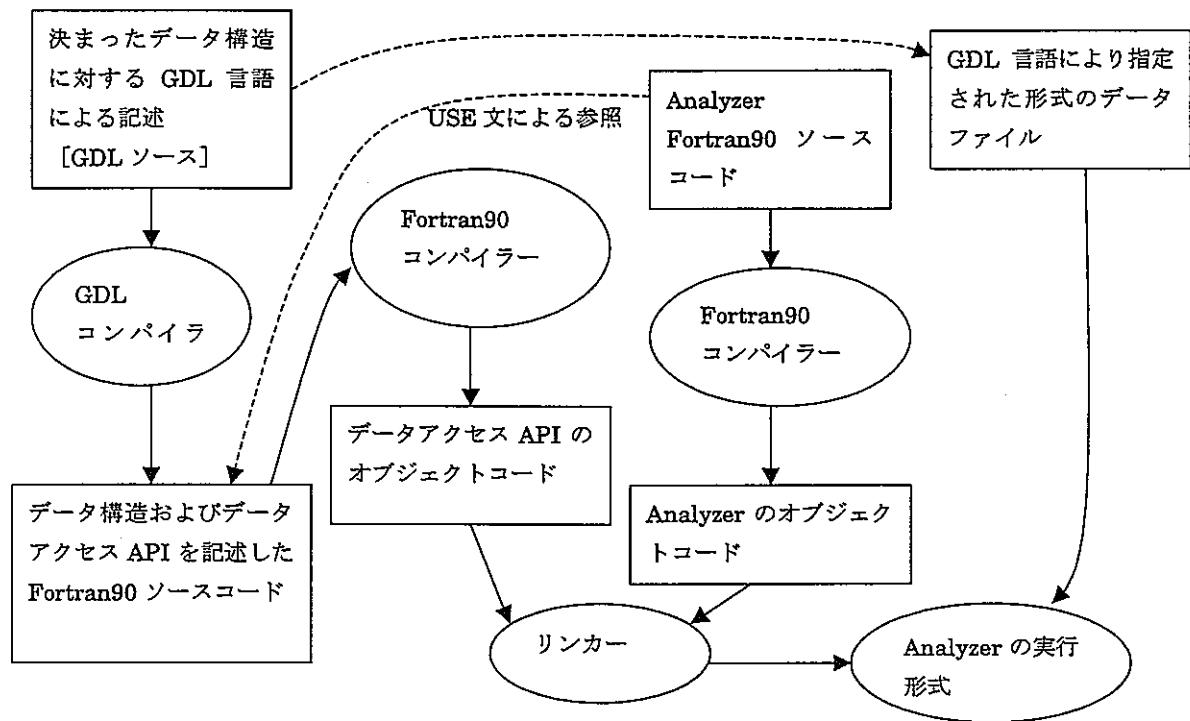
並列化を意識しないで済むデータ構造と、デバイスに依存しないプラットフォーム上でのシステム構築、という上記戦略の有効性は、様々な既存プログラムの並列化や固体地球モデルのプラグイン化を通じてはじめて検証される。そのためには開発されたプログラム資産は利用可能・修正可能な形で公開されなければならない。ソースコードレベルの公開とユーザーからのフィードバックによって、より発展可能な形への自己修復や、プラグインされる解析サブシステムの自己増殖が期待される。

⑤ 共通データの扱い

各種プラグインサブシステムで共通に必要とされる共有データのために、決まった一定のデータ形式が設定されている。これらの形式は並列解析のときの各要素プロセッサ毎に各々個別のファイルとして作成することができる。共通データはファイルのみならずメモリ上のデータに関しても、統いて説明するデータ定義言語 GDL により Fortran90 のデータ構造として定義することが可能である。

⑥ 共通ではないデータの扱い

データ記述言語 GDL (Data Definition Language) は、GeoFEM の主要記述言語である Fortran90 の文法に規定される構造体のサブセットになっている。各個別のプラグイン毎の個別データを GDL 文法に規定される方法で表現・GDL コンパイラでコンパイルすることにより、図 4.4.1-3 に示す手順にしたがった方法で、各解析プラグイン用の個別データ入力が可能となる。また、個別のプラグイン内では、GDL で読み込み可能なファイルは全要素プロセッサ (PE) に対してひとつだけである。



第1回 GeoFEMセミナー資料、1999年7月より引用

図 4.4.1-3 データ記述言語 GDL による処理手順

4.4.2 数値地層処分システムでの利用可能性

数値地層処分システムでは、廃棄体およびその周囲の地層を対象として様々な解析および評価が実施される。

- ・ 岩盤クリープ解析
- ・ オーバーパック腐食膨張解析
- ・ オーバーパック沈下解析
- ・ ニアフィールド地震応答解析
- ・ ニアフィールド熱一水一応力解析
- ・ ガス移行解析
- ・ 緩衝材膨出解析
- ・ 地下空洞力学的安定性評価
- ・ 人工バリア構造力学的安定性評価

これらの解析・評価手段のうち多くは有限要素的手法により個別の項目ごとに完全に独立してコード化され、プログラム資産として蓄積されている。

(1) 構造解析および熱解析などの各解析毎に用意されたプラグインモジュール

GeoFEM プラグインモジュールの例として、熱解析用として用意されたプラグインモジュールの構成を示す。プラグインモジュールは Fortran90 の仕様に沿ってコーディングされており、Fortran のメインプログラムから始まる一個の完全に独立した単体のプログラムとして、分割領域毎のメッシュデータ（節点要素データ）とコントロールデータ（メッシュデータ以外のデータ）を各自の入力ファイルから読み込むことにより、これ単独で稼動するようになっている。

熱解析の場合のプラグインモジュールの全体構成を、図 4.4.2-1 に示す。プラグインモジュールは解析器、可視化器（フロントエンド）、データ入力部などは Fortran90 の言語仕様にある Module という形で構造化された共通の形式を有している。また、いくつかの頻度または汎用性の高い処理については Module geofem_util という形に、また入力データ読み込みに係わる処理は、Module gd_heat_static（熱解析の場合）にまとめられている。Module geofem_util や Module gd_heat_static で使用されるデータ入出力処理や前処理付き共役勾配法の並列・分散処理で使用する MPI の制御には C 言語でコーディングされたプログラムも多数含まれている。これらの混合言語からなるソースプログラムから UNIX 上で make コマンドにより、実行形式プラグインモジュールを構築できる開発環境が提供されている。

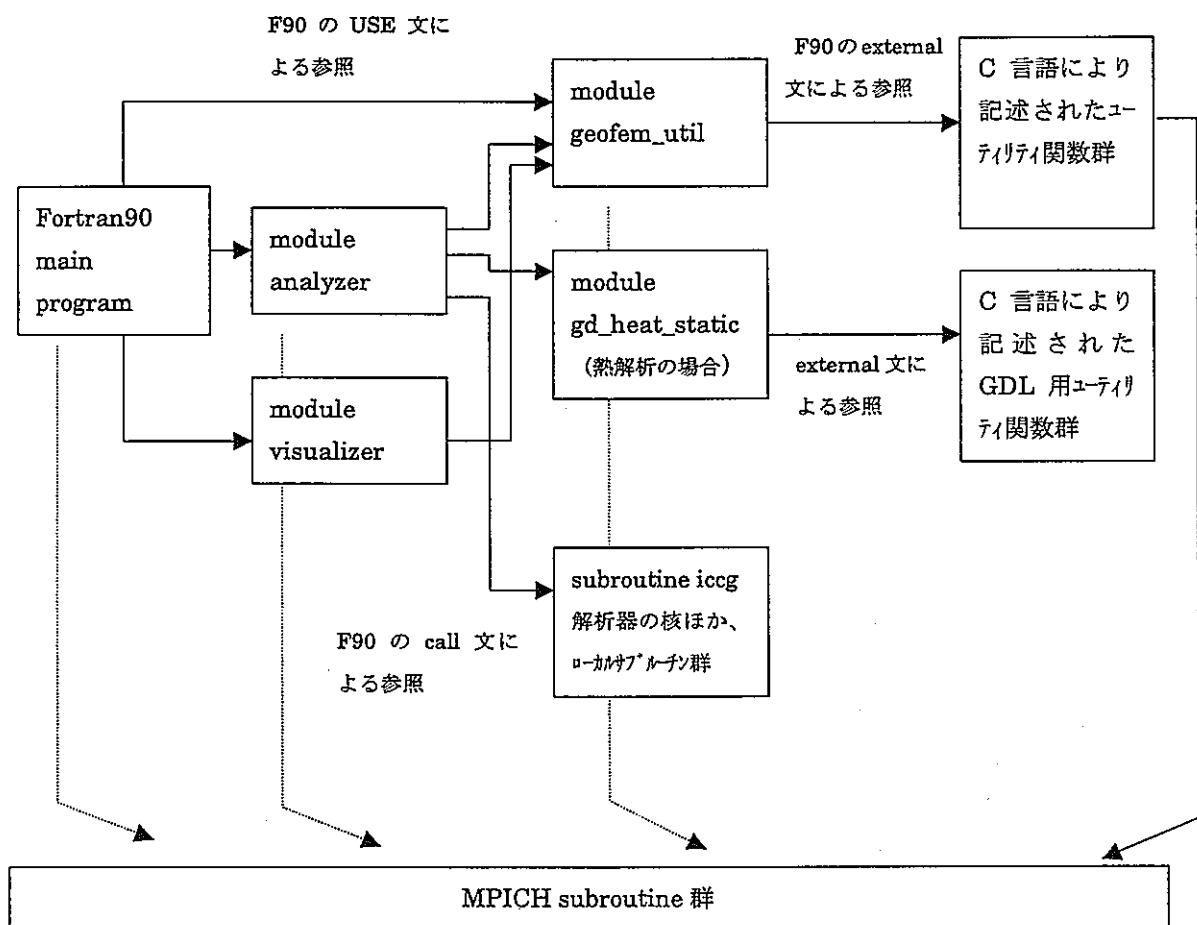


図 4.4.2-1 GeoFEM の Fortran90 の module により階層化された構成一覧

表 4.4.2-1 モジュールライブラリ構成サブルーチン一覧表

Module 名	メンバサブルーチン名	機 能
Analyzer	Init_analyzer	解析初期化(データ入力)
	Analyze	解析器本体
geofem_util	Geofem_init	実行の初期化
	Geofem_set_input_datum	入力データ用内部変数の初期化
	Geofem_set_grp_name	要素データにグループ名を付ける
	Geofem_set_surf_name	面データにグループ名を付ける
	Geofem_set_input_datum_c	入力データの内部配列への取込
	Geofem_get_input_datum	入力データを内部変数に設定
	Geofem_get_input_datum_inner	データ入力
	group_init_aux	データのグループ化(配列処理)
	group_init	データのグループ化(配列処理)
gd_heat_static	gdr_option_type	gdr_*_type は、GDL コンパイラによってソースプログラムが生成される。解析によってメンバサブルーチンは異なるが、各サブルーチンはデータ設定を行う。 例 : gdr_bc_type は境界条件設定
	gdr_solver_type	
	gdr_control_type	
	gdr_isotropic_type	
	gdr_material_type	
	gdr_temperature_type	
	gdr_heat_flux_type	
	gdr_heat_input_type	
	gdr_bc_type	
	gdr_model_type	
	gdr_heat_static	

表 4.4.2-2 GeoFEM から利用している MPI の機能

MPI の機能を利用するための関数またはサブルーチン呼び出し名	使用プログラム言語	機能
<code>MPI_Barrier</code>	Fortran90	すべてのグループメンバーにメッセージを送る。
<code>MPI_FINALIZE</code>	Fortran90	MPI を終了する。
<code>MPI_ISEND</code>	Fortran90	ノーブロッキング通信時に、標準モードでメッセージを送信する。
<code>MPI_IRecv</code>	Fortran90	ノーブロッキング通信時に、標準モードでメッセージを受信する。
<code>MPI_WAITALL</code>	Fortran90	全保留中要求完了。
<code>MPI_Bcast</code>	C	すべてのグループメンバーにメッセージを送る。
<code>MPI_Abort</code>	C	異常終了
<code>MPI_Comm_size</code>	C	グループのプロセスを得る。
<code>MPI_Comm_dup</code>	C	新しいコンテキスト用にコムニケータをコピーする。
<code>MPI_Comm_rank</code>	C	グループ内での自分のランクを得る。
<code>MPI_Comm_split</code>	C	分類された sub-group に分割する。
<code>MPI_Send</code>	C	ブロッキングモードで標準メッセージを送信する。
<code>MPI_Recv</code>	C	ブロッキングモードで標準メッセージを受信する。
<code>MPI_Init</code>	C	MPI を初期化する。
<code>MPI_Finalize</code>	C	MPI を終了する。
<code>MPI_Barrier</code>	C	すべてのグループメンバーにメッセージを送る。
<code>MPI_Reduce</code>	C	すべてのメンバーからのメッセージを結合する。
<code>MPI_Allgather</code>	C	集めそれからブロードキャストする。
<code>MPI_Comm_free</code>	C	コムニケータを解放する。

(2) 領域分割パーティショナーおよび分割領域に対する分散型並列化ソルバーの利用

一般に有限要素解析で解法適用の対象とする線形方程式には形式的な一貫性があり、各解析個別の事情に依存しない共通した特徴がある。各個別解析プログラムで独自にコード化・組み込まれている既存ソルバーを、GeoFEM 地球規模解析システムで使用している領域分割法による要素プロセッサ (PE) 方式に置換え、複数台の EWS により構成されるネットワーククラスタ上で、このソルバーを使用することにより、強力で汎用的な並列分散方式の計算環境を構築することができる。GeoFEM に組み込まれている解法は「分割領域に対する前処理付き共役勾配法」と呼ばれるものである。このため、全体領域に関するメッシュデータをほぼ均等に各部分領域に分割するための専用ソフトウェア（領域分割パーティショナー）が付属している。このパーティショナーは一個の独立したプログラムであり、対話形式で動くようになっている。領域分割の方法としては、1) RCB 法、2) Greedy 法、3) MeTiS 法の三者選択で選ぶことができるようになっている。

複数の EWS で構成されるネットワーククラスタ上で利用できる環境下で、GeoFEM の「領域分割法による前処理付き共役勾配法」による連立方程式ソルバーを、GeoFEM 以外の他の解析プログラムに移植・流用することの利点は、

- ・領域分割によりプログラム実行時のメモリ消費量を分散でき、どのような規模の問題でも対応可能になり、メモリに関する制限を受けない
- ・計算処理に消費される演算量（処理時間）を分散できること、モデル全体に関する計算時間を短縮できることの 2 点である。

以下に、GeoFEM の主要解法である共役勾配法および前処理付き共役勾配法の実施手順について解説する。

① 前処理なしの共役勾配法 (Conventional Conjugate Gradient Method)

連立一次方程式 $[K]\{U\} = \{R\}$ の解法として、理屈が明快で効率のよい反復的方法のひとつに共役勾配法がある。この方法は、ある種の物理現象を定式化して得られる連立方程式 $[K]\{U\} = \{R\}$ を満たす解 $\{U\}$ は系の全エネルギー $\Pi(U)$ を最小にするという事実をもとにして考案された。この解法の計算手順は以下に従う。

式(4.4.2-1), (4.4.2-2)によりイタレーションの初回 ($s=1$) での残差ベクトル $\{r\}$ および未知ベクトル $\{U\}$ に対する修正方向 $\{p\}$ の値を各々計算する

$$\{r\}^{(1)} = \{R\} - [K]\{U\}^{(1)} \quad (4.4.2-1)$$

$$\{p\}^{(1)} = \{r\}^{(1)} \quad (4.4.2-2)$$

イタレーションカウント $s=1, 2, 3, \dots$ に対して下記計算を、残差ベクトル $\{r\}^{(s)}$ が収束する

まで反復する。

$$\begin{aligned}
 \alpha_s &= \frac{\{r\}^{(s)T} \{r\}^{(s)}}{\{p\}^{(s)T} [K] \{p\}^{(s)}} \\
 \{U\}^{(s+1)} &= \{U\}^{(s)} + \alpha_s \{p\}^{(s)} \\
 \{r\}^{(s+1)} &= \{r\}^{(s)} - \alpha_s [K] \{p\}^{(s)} \\
 \beta_s &= \frac{\{r\}^{(s+1)T} \{r\}^{(s+1)}}{\{r\}^{(s)T} \{r\}^{(s)}} \\
 \{p\}^{(s+1)} &= \{r\}^{(s+1)} + \beta_s \{p\}^{(s)}
 \end{aligned} \tag{4.4.2-3}$$

収束判定条件、実数値で指定される ϵ を残差荷重の最大許容値として残差荷重ベクトル $\{r\}^{(s)}$ ノルムが $\|r^{(s)}\| \leq \epsilon$ を満たした時点で収束とみなす。また別の収束判定基準としては、方程式の未知数ベクトル $\{U\}^{(s)}$ に対するノルム $\|U^{(s)}\|$ を使用することも可能である。共役勾配法による計算過程では、イタレーションの i 番目段階での未知変数に対する近似 $\{U\}^{(i)}$ に対して、修正方向を与えるベクトル $\{p\}^{(i)}$ と残差ベクトル $\{r\}^{(i)}$ に関する二つの重要な直交性が成立する。

$$\{p\}^{(i)T} [K] \{p\}^{(j)} = 0 \quad \text{かつ} \quad [P]^{(i)T} \{r\}^{(j+1)} = 0 \tag{4.4.2-4}$$

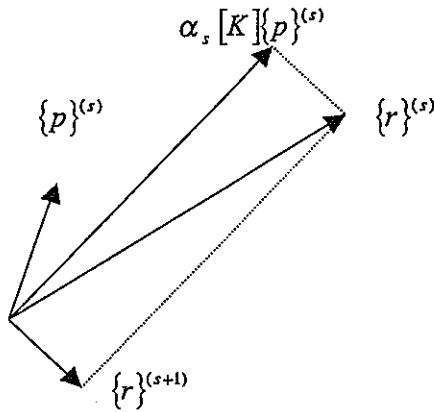
ここに、 $[P]^{(i)T} = [p^{(1)}, \dots, p^{(i)}]$ 。

一般に共役勾配法による連立方程式解法の特徴として、以下の事項が列挙できる。

- ◎ 他の反復的解法とは異なり、残差ベクトルと解 U に関するの修正方向ベクトルに関する直交法則 $[P]^{(i)T} \{r\}^{(j+1)} = 0$ があるので、次元数 n^2 の非特異な係数マトリックス $[K]$ による線形問題では、 $n+1$ 回の反復の後では：残差が完全にゼロベクトル $\{r\}^{(n+1)} = \{0\}$ となり厳密な解に到達することが保証されている。
- ◎ 非特異の係数マトリックス $[K]$ が正定値マトリックスのならば、必ず収束する。しかし、 $[K]$ の正定値性は、収束解が得られることに関する十分条件のひとつにすぎないので、 $[K]$ が正定値でない場合にも収束する場合が十分起こり得る。

イタレーションの連続する 2 ステップにおける残差ベクトル $\{r\}^{(s)}$ および $\{r\}^{(s+1)}$ に関する改良状況を図式的に説明すると図 4.4.2-2 のようになる。

反復ステップ $s+1$ での残差についての改良近似 $\{r\}^{(s+1)}$



反復ステップ $s+1$ での解の方向についての改良近似 $\{p\}^{(s+1)}$

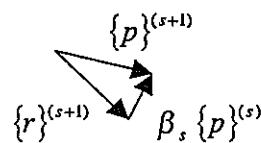


図 4.4.2-2 反復ステップ $s+1$ での改良近似

式 (4.4.2-1) から式 (4.4.2-4) で表されるこの解法アルゴリズムでは、計算労力のほとんど大部分は下記の演算に費やされる。

- ◎マトリックスとベクトルの積
- ◎ベクトルとベクトルの内積
- ◎SAXPY 演算つまり、 $\{S\} = [A]\{X\} + \{Y\}$ の形の演算およびベクトルにスカラー乗数を掛ける演算

これらの 3 種類の演算処理に関しては、現在ではベクトルプロセッサやそれに対応したコンパイラの発達・普及に伴い並列化して処理する環境が容易に利用できる。

②前処理付き共役勾配法 (Preconditionned Conjugate Gradient Method)

解法の収束を速める手段として、前処理 (Preconditionning) と呼ばれる操作が使用される。もとの方程式 $[K]\{U\} = \{R\}$ の代わりに、次式 (4.4.2-5) で表される形を考える。

$$[\tilde{K}]\{\tilde{U}\} = \{\tilde{R}\} \quad (4.4.2-5)$$

$$\{\tilde{U}\} = [C_R]\{U\} \quad , \quad \{\tilde{R}\} = [C_L]^{-1}\{R\} \quad (4.4.2-6)$$

式 (4.4.2-5) による変換の目的はより改善された条件数 (condition number) のマトリックス $[\tilde{K}]$ を得ることであり、式(4.4.2-7)で定義されるマトリックス $[K_p]$ はプリコンディショナー PreConditionner と呼ばれる非特異の行列である。

$$[K_p] = [C_L][C_R] \quad (4.4.2-7)$$

前処理付き共役勾配法ではイタレーションの初回 ($s=1$) での残差ベクトル $\{r\}$ および未知ベクトル $\{U\}$ に対する修正方向 $\{p\}$ の計算方法は下記のように変更される。

$$\{r\}^{(1)} = \{R\} - [K]\{U\}^{(1)} \quad (4.4.2-8)$$

$$\{z\}^{(1)} = [K_p]^{-1}\{r\}^{(1)} \quad (4.4.2-9)$$

$$\{p\}^{(1)} = \{z\}^{(1)} \quad (4.4.2-10)$$

イタレーションカウント $s=1,2,3,\dots$ に対して下記計算を、残差ベクトル $\{r\}^{(s)}$ が収束するまで反復する。また問題が線形のとき、 $[K_p]=[K]$ の場合に限り上記アルゴリズムは一回で収束する。

$$\begin{aligned} \alpha_s &= \frac{\{z\}^{(s)T}\{r\}^{(s)}}{\{p\}^{(s)T}[K]\{p\}^{(s)}} \\ \{U\}^{(s+1)} &= \{U\}^{(s)} + \alpha_s \{p\}^{(s)} \\ \{r\}^{(s+1)} &= \{r\}^{(s)} - \alpha_s [K]\{p\}^{(s)} \\ \{z\}^{(s+1)} &= [K_p]^{-1}\{r\}^{(s+1)} \\ \beta_s &= \frac{\{z\}^{(s+1)T}\{r\}^{(s+1)}}{\{z\}^{(s)T}\{r\}^{(s)}} \\ \{p\}^{(s+1)} &= \{z\}^{(s+1)} + \beta_s \{p\}^{(s)} \end{aligned} \quad (4.4.2-11)$$

③ GeoFEM での前処理付き共役勾配法の特徴

・不完全 LU 分解法

非特異なマトリックス $[K]$ を用いて表される連立一次方程式 $[K][U] = \{R\}$ において、適当な $[L]$ ：下半分三角マトリックスおよび $[U]$ ：上半分三角マトリックスを用いて近似的に $[K] \approx [L][U]$ を満たすようなマトリックスの因子分解を求めることを $[K]$ に対する不完全 LU 分解と言い ILU (Incomplete Lower-Upper Decomposition) と表す。また、GeoFEM ではプリコンディショナー $[K_p]$ を構成するのに、もとの方程式に現れるマトリックス $[K]$ に対し、ILU(0)法による不完全な $[L][U]$ 分解を行う手法を用いている。

ILU(0)法に前処理の例として、3次元の7点（中心点1点と3次元の各座標軸正負2方向のグリッド点合計6点から成る7点）差分による空間離散公式により得られる7重対角マトリックス $[K]$ の場合について示す。

GeoFEM ではプリコンディショナーを構成するためのマトリックスの LU 分解法として、以下のような SOR 法で用いられる三角分解を用いている。

$[K]$: 非特異の n^2 マトリックス (7重対角マトリックス)、

a_i, b_i, c_i : 7重対角マトリックス $[K]$ の下三角の成分、

e_i, f_i, g_i : $[K]$ の上三角の成分、

d_i : 対角成分、

r_i : RHS 成分、

$$\tilde{d}_i^{-1} = d_i - a_i g_{i-mn} \tilde{d}_{i-mn} - b_i f_{i-m} \tilde{d}_{i-m} - c_i e_{i-1} \tilde{d}_{i-1} \quad (4.4.2-12)$$

として、以下の手順により前進後退代入 (BFS) を行う。

$$y_i = \tilde{d}_i (r_i - a_i y_{i-mn} - b_i y_{i-m} - c_i y_{i-1}), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.4.2-13)$$

$$z_i = d_i - \tilde{d}_i (e_i y_{i+1} - f_i y_{i+m} - g_i y_{i+mn}), \quad i = n, n-1, \dots, 1 \quad (4.4.2-14)$$

前進後退代入の処理については、解析対象としてモデル化した空間領域全体に伝播するデータの相互依存性があり、並列処理には適さない。

・局所的 LU 分解による方法

◎局所的不完全 LU 分解法の部分領域分割による並列化

前進後退代入の演算処理を並列に処理する目的で、全体を部分領域分割する。GeoFEM では、方程式の解を得るために、このように領域を分割して処理することを領域分割法と言っている。その各局所領域に対応し、全体系の係数マトリックス $[K]$ を図 4.4.2-3 に示すような各局所系に対応した区画に分割し、全体の $[K]$ における部分領域間の連成項をゼロとみなす。これにより、前進後退代入処理の間、全体の $[K]$ における部分領域間の連成効果を無効とし、部分領域の前進後退代入を並列処理が可能となる。(各部分領域毎に ILU(0) を擬似的に実施する。) この手法のことを GeoFEM 領域分割法では局所的不完全 LU 分解法と言っている。一般にこのような方法では領域分割数が増すに従い、ゼロ項（無効）とした連成項の影響により、収束に至るまで多くの反復回数を必要とするようになる。

式 (4.4.2-13～14) の 7 重対角行列に対する前進後退代入は以下のように変更された形になる。

$$y_i = \tilde{d}_i (r_i - P_{i,i-mn} a_i y_{i-mn} - P_{i,i-m} b_i y_{i-m} - P_{i,i-1} c_i y_{i-1}), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.4.2-15)$$

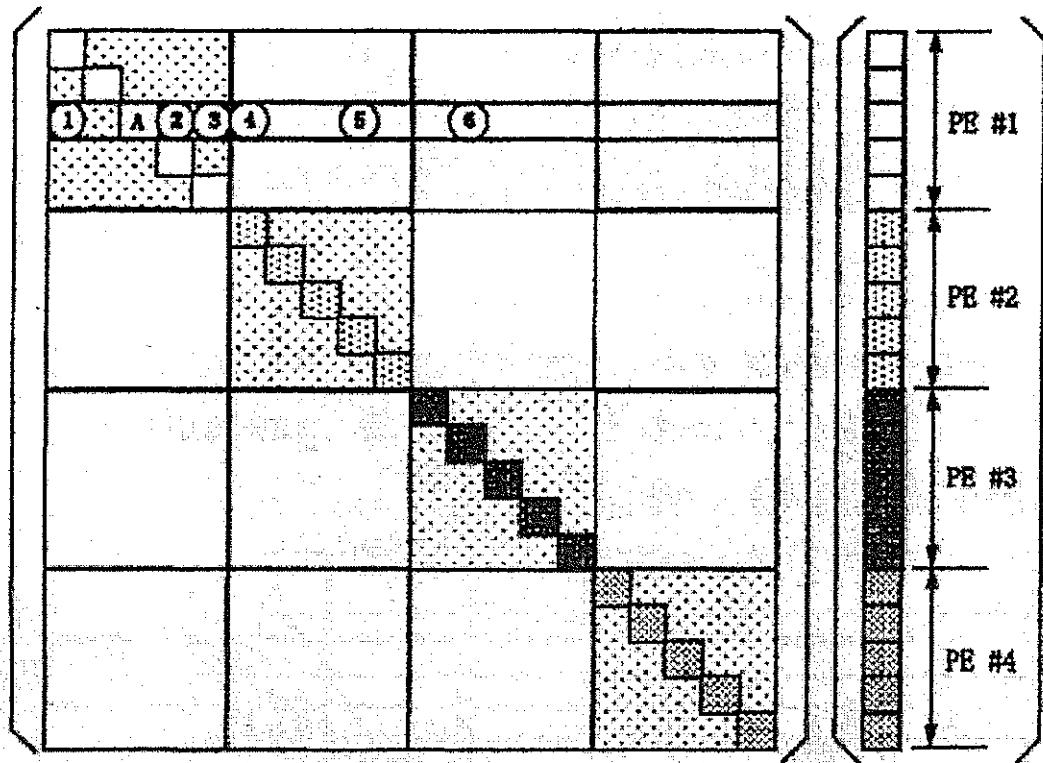
$$z_i = d_i - \tilde{d}_i (P_{i,i+1} e_i y_{i+1} - P_{i+m} f_i y_{i+m} - P_{i+mn} g_i y_{i+mn}), \quad i = n, n-1, \dots, 1 \quad (4.4.2-16)$$

ここに、

$P_{i,j} = 1$: i 番目と j 番目の離散点（グリッド）は同じ部分領域に属する。

$P_{i,j} = 0$: i 番目と j 番目の離散点（グリッド）は異なる部分領域に属する。

有限要素法による空間離散化の結果で生じるような必ずしも整った形の n 重対角マトリックスとはならないような対角優位マトリックスをもとに構成される連立方程式に対しても、式 (4.4.2-15) および式 (4.4.2-16) で与えられる ILU(0) 法による前処理のアルゴリズムは有効であることが報告されている。



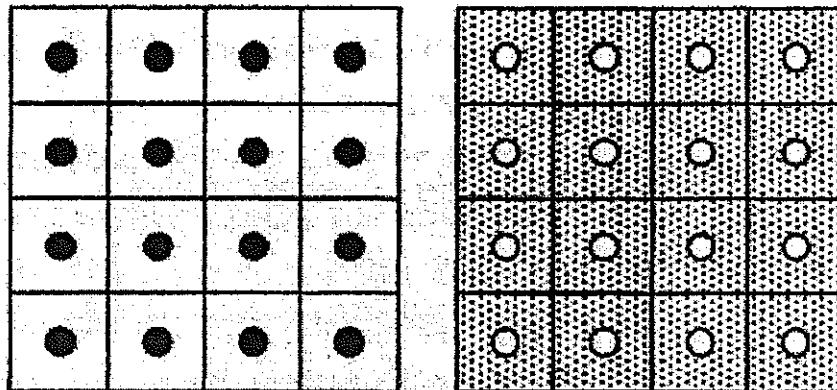
ここに、要素プロセッサー 1 (PE#1) の成分 A はこれに連成する成分として 6 個の非ゼロ成分を有しているが、このうち同じ PE#1 に属する①②③に関しては考慮するが、PE#1 の外側の PE に属する成分④⑤⑥に関してはゼロとみなす。

Kengo Nakajima & Hiroshi Okuda(RIST): Parallel Iterative Solvers with Localized ILU Preconditioning for Unstructured Grids on Workstation Clusters, IJCFD, pp.315-322(1999, Vol.12)より引用

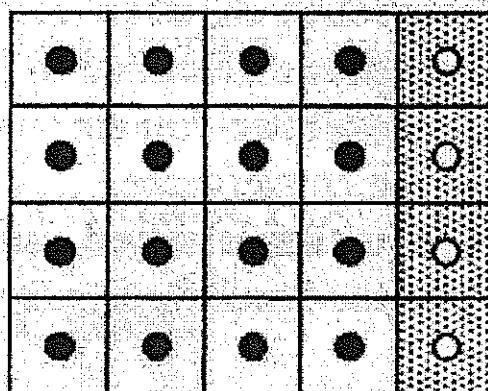
図 4.4.2-3 局所的不完全 LU 分解法 (ILU(0)法) の適用例

◎部分領域間の袖領域 (Overlapped Region)

GeoFEM の領域分割法では、ある部分領域とこれと接する別の部分領域の境界において、袖領域と呼ばれる領域を定義することができる。このような袖領域を工夫して活用することにより、収束に至るまでの反復回数が少なくなることが報告されている。

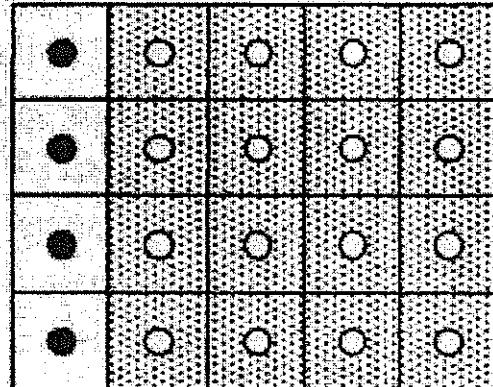


No Overlapping



PE#1

PE#2



Overlapping

Kengo Nakajima & Hiroshi Okuda(RIST): Parallel Iterative Solvers with Localized ILU Preconditioning for Unstructured Grids on Workstation Clusters, IJCFD, pp.315-322(1999, Vol.12)より引用

図 4.4.2.4 PE 間の袖領域 (Overlapped Region)

④ GeoFEM 並列分散処理の試解析

GeoFEM で導入されている前処理付き共役勾配法並列分散処理ソルバーの性能を確認するため、有限要素モデルを用いた解析を 2 ケース実施した。解析に使用した環境は以下に示すとおりである。

GeoFEM : Ver.3.0(2000 年 3 月リリース)

EWS 分散処理系: Compaq ProWS XP-1000 (DEC Alpha シングルプロセッサ搭載) × 2 台
または x 1 台

OS : DIGITAL UNIX Japanese, Support V4.0E(rev.120)

MPI ライブ : mpich ver.1.2.0

また、試解析には、GeoFEM ver.3.0 に添付されている例題を使用した。

解析モデル（1）

日本列島周辺のプレート境界（断層）

モデル（静的接触問題）

解析条件

ヤング率 : 50kPa

ポアソン比 : 0.3

総節点数 : 7220 (1PE)

分割領域に対する節点数: 4317, 4340

(2PE の場合)

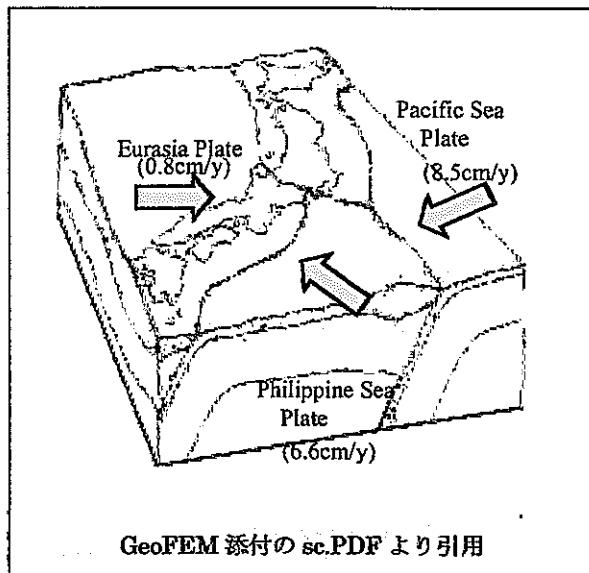


図 4.4.2-5 解析モデル(1) イメージ

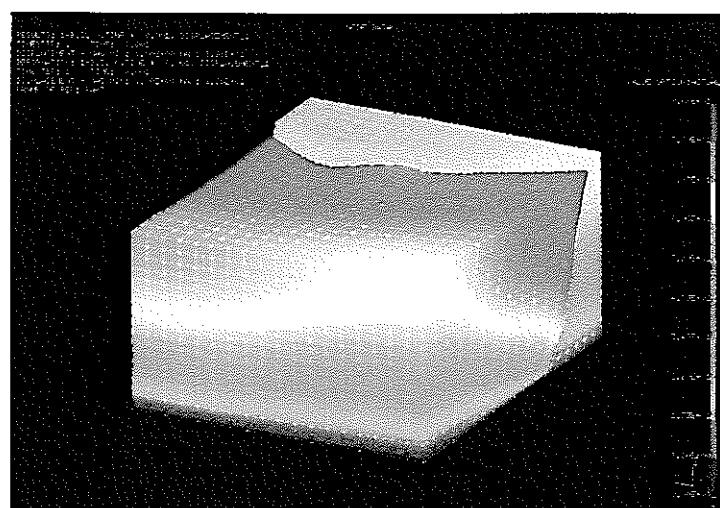


図 4.4.2-6 断層モデル解析結果 (I-DEAS による可視化)

解析モデル（2）

弾性波（動的線形解析問題）

（例題 elastic_wave/primary_wave/のうち、control_dynamic を使用）

解析条件

ヤング率 : 50GPa

ポアソン比 : 0.25

ステップ数 : 240

総節点数 : 3696 (1PE)

分割領域に対する節点数: 2079, 2079 (2PE の場合)

解析モデル（1）および（2）に対する解析時間とメモリ使用量を表 4.4.2-3 および表 4.4.2-4 に示す。

表 4.4.2-3 解析モデル(1) 解析概要

case		全処理時間 [秒]		最大消費メモリ [byte]	ソルバーの 反復回数	処理時間指數 (1pe/1cpu を 100)
PE 数	EWS 台数					
1	1	76.887	※1	30,599,400	61	100
2	1	69.398	※2	16,810,944	74	90
2	2	55.030	※3	16,810,944	74	72

表 4.4.2-4 解析モデル(2) 解析概要

Case		全処理時間 [秒]		最大消費メモリ [byte]	タイムステップ 数	処理時間指數 (1pe/1cpu を 100)
PE 数	EWS 台数					
1	1	11.848		12,947,248	240	100
2	1	15.336		7,226,912	240	129
2	2	6.780		7,226,912	240	57

解析モデル（1）に対する表 4.4.2-3 より、※3 / ※1 = 0.715…となり、1PE/1CPU → 2PE/2CPU では、約 28% の時間短縮効果が得られたことが分かる。また、※3 / ※2 = 0.792…となり、2PE/1CPU → 2PE/2CPU では、約 20% の時間短縮効果が得られた。この時間短縮効果は、それほど大きくないよう感じられる。しかし、これは解析種別が線形静的問題のため、計算時間全体に占める並列・分散ソルバー（連立方程式組み立てから解法に至る部分）の処理時間の割合がそれほど多くないためだと考えられる。

解析モデル（1）に対する総使用メモリは、1PE → 2PE で $16,810,944 / (30,599,400 / 2) = 1.098\cdots$ となり、1PE の場合の消費メモリに対し約 10% の増加となっている。このメモリ増加は分割領域間にとられる袖領域の影響が大であると考えられる。ソルバーの収束までの反復回数は、 $74 / 61 = 1.213\cdots$ となり、約 21% 増加となっている。これは ILU(0) 法による前処理において、分割領域間の連成項をゼロとして扱っている影響である。ILU(0) 法による前処理では分割領域数を増やすことで、共役勾配法では収束までにより多くの反復数が必要となる。しかしながら、反復回数は増加するものの解析時間は短縮されるということから、ここで使用した解析モデル（1）に対しては GeoFEM の並列・分散処理は有効であることが確認された。

次に解析モデル（2）についての解析結果を示した表 4.4.2-4 より、結果として、解析時間で約 43% 向上となっている。この解析ケースは動的線形問題（解析時間ステップ数 = 240 ステップ）であるので、計算時間全体に占める並列・分散ソルバーの処理時間の割合は、解析モデル（1）の静的線形問題の場合に比べて大きい。一般にソルバーの付加が大きい動的問題や非線形問題では、GeoFEM 並列・分散ソルバーの有効性は特に大であると考えられる。なお、解析モデル（2）についての 2PE モデルの作成は、1PE モデルをもとにして、GeoFEM 付属のパーティショナー用いることにより、分割手法として RCB 法の x 方向分割を使用して、領域分割を行った。

（3）データ記述言語 GDL による入力データ記述形式の統一

各個別解析オブジェクトでは解析領域の幾何的定義情報（節点・要素情報）や各プログラムで個別に設定される解析条件をおのおの独自の形式（フォーマット）により作成しなければならない。これらのデータの表現形式をデータ記述言語 GDL による表現に変更することで、各個別のプログラム間で共通のデータを共有する用途に使用できる可能性は有望である。現状の GeoFEM では、分割領域毎に別々のファイルとして作成されるメッシュデータ（節点および要素データ）以外のデータ（共通データ）は、すべて GDL 形式に統一されている。

GDL コンパイラはそれ自体が単独で動く一個のプログラムであり、Fortran90 の言語仕様に類似形式で記述されたデータソースの記述ファイルを、これらのデータをメモリに読み込むための Fortran90 データ入力サブルーチンのソースプログラムコードへ自動的に変換するため、この作業にかかるプログラマの負担が大幅に軽減できるという点で意義深い。

各解析オブジェクトの独自データに関しても、形式的なデータの類似性（たとえば応力解析での節点変位や熱解析での節点温度）を最大限活用したプログラミングが可能となり、解析者のデータ管理にかかる負担なども軽減することができる。

図 4.4.2-7 にソルバーとデータを共有化したシステムの概念的構成を示す。

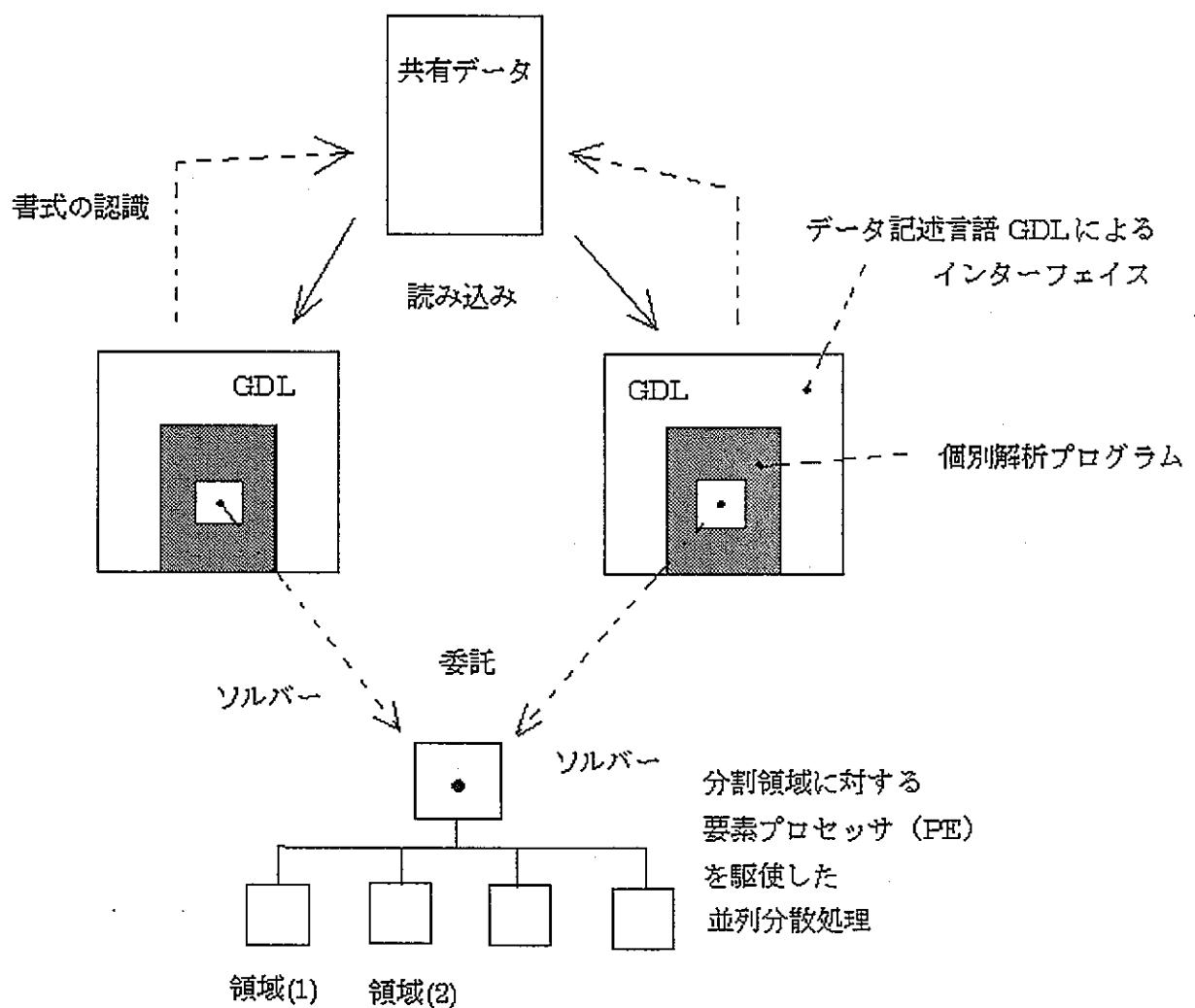


図 4.4.2-7 ソルバーとデータを共有化した数値処分システムの概念的構成

(4) 結論

GeoFEM/Tigerの最新バージョンに関する調査・検討を行った結果、数値地層処分システムで利用可能なリソースとして以下の機能を挙げる。

- ① 構造解析・熱解析などのプラグインサブシステム
- ② 領域分割パーティショナーおよび分散並列処理ソルバー（ソルバーサブシステム）

ただし、この分散処理系はクラスタを構成する各EWSの処理能力が、均等に配置構成されているとき、100パーセントの効率を発揮できる。また、分割領域数または領域分割手法によって前処理付共役勾配法の収束速度（収束までの反復数）が遅く（多く）なる傾向がある。領域分割と収束特性の関係に関して、統一して定量化するのは難しく、解こうとする問題固有の検討が必要である。

- ③ GDLによるデータ共有化のアプローチ

5. 統合データベースに関する検討

数値地層処分システムは、地層処分システムを構成する人工バリア等の物理的な要素やそれら要素間の関連、ならびに、そこで生起すると想定される様々な現象を、計算機システム上に展開することにより構築される。ここで、構成要素や要素間の関連は、計算機システム内では、データとして表現される。また、現象は、その挙動を記述した解析コードおよび解析コードにより導き出されるデータ（解析結果）として表現される。さらに、連成現象は、現象間の関連として表現される。ここで、構成要素や関連等を示すデータ構造はデータモデルと呼ばれ、一般に、データベースは、最初に概念的なデータモデルを構築し、これを段階的に詳細化し、最終的にはソフトウェア製作の観点から実装レベルに展開することにより開発される。

本研究では、統合データベースに関する検討として、地層処分システム全般に亘る概念的なデータモデルを検討した。さらに、この概念的なデータモデルに基づき、坑道離間距離と廃棄体定置ピッチを決定する空洞安定性解析および熱解析を対象として、データモデルを構築した。

5.1 データモデルの概念検討

地層処分システムは、人工バリアや坑道等の人工的な構造物、深部地下の化学環境や断層等の地質環境、ならびに河川等の地表環境等、様々な要素により構成される。また、地層処分システムで生起する現象は、多岐に渡るとともに、互いに影響し合う現象が多数ある。よって、データモデルの検討は、このような複雑なデータの分析に優れたオブジェクト指向の概念に基づき、地層処分システムを構成する要素をオブジェクトとして捉えるとともに、要素間の関連を、オブジェクト間のリンクとして捉えることにより行った。

地層処分システムを構成する物理的な要素は、人工バリア等に代表される構造物と天然の地層や地形等から成っている。オブジェクト指向に基づいたデータモデルの構築は、この「実体」に着目し、これをオブジェクト指向の特徴である継承関係や関連（リンク）に着目し、整理することから始める。一方、地層処分システムで考慮すべき現象や現象間の関連は、第2次取りまとめにおいて、FEPリストやインフルエンスダイアグラムとして整理されており、現象に係わるデータモデル構築は、これらをオブジェクト指向の概念に基づき、整理することにより行う。

(1) 処分場の構成に関するデータモデル

高レベル放射性廃棄物処分場は、人工バリアと処分施設から構成される。よって、処分場の構成要素に関するデータモデルは、オーバーパックや坑道等の要素（物理的な実体）、ならびに要素間の繋がりや位置・幾何形状を表現することが必要である。また、オーバーパックには、材料や製造方法等、様々な情報が付属するため、これら情報も、データモデル中に表現する必要がある。よって、要素（オーバーパック等）は、オブジ

エクト指向の概念であるクラスとして、構成要素間の関係はリンクとして、また、位置情報や構成要素毎の固有情報は、クラス属性として表現する。図 5.1-1 に、処分場構成要素に関するデータモデルの例を示す。

(2) 地質環境に関するデータモデル

処分場およびその周辺における地質構造や地形は、物理的な実体より構成される。よって、これらに関するデータモデルは、処分場構成と同様に、地層や岩盤等を、構成要素として捉え、幾何形状・位置情報等と併せて表現する必要がある。また、水理情報等は、3 次元的な分布をとることから、地質構造等と同様に表現することが考えられる。さらに、岩盤特性や pH、Eh 等の情報は、各構成要素の属性として表現することが適切である。

(3) 現象に関するデータモデル

地層処分で生起すると想定される現象は、FEP リストとして整理されている。よって、現象に関するデータモデルを構成する要素（クラス）は、この FEP リストで記載されている項目とする。また、現象間の関係、すなわちクラス間のリンクは、FEP の相關関係についてまとめられたインフルエンスダイアグラムにおける現象間の繋がりに相当する。そして、これらを現象に関するデータモデルの主要部分として捉え、これに、安全評価シナリオおよびシナリオと現象の関係、ならびに現象解析コードおよびコードと現象の関係を加えることにより、地層処分システムにおける現象、安全評価シナリオ、コードを、それらの関連も含めて適確に表現できる。図 5.1-2 に、現象に関するデータモデルのイメージを示す。

地層処分システムに係わるデータモデルは、複雑かつ大規模になることから、上記に示したように、処分場施設、地質環境、現象の観点から、それぞれ部分的なデータモデルを構築し、その後、これら部分的なデータモデル間の関連を明確にすることにより、地層処分システム全般に亘るデータモデルを構築することが適切である。例えば、処分場構成と地質環境のデータモデルは、3 次元空間（位置情報）を、共通な情報として関係付けることができる。また、現象との関係は、実体（人工バリアや断層等）と、そこにおける現象から関係付けることが可能である。これにより、データモデルを構成する全てのクラスが、有機的に関連付けられることになる。

次に、利用者の観点から立ったデータモデルの利用、すなわち統合データベースの利用方法について述べる。

データモデルは、大規模および処分場施設、性能評価等、3 種類のデータモデルから構成されることを考慮すると、利用者が、データモデル全般を把握することは、極めて困難である。また、地層処分に係わる研究開発は、地質環境、工学技術、安全評価といった 3

つの分野にて進められることから、それぞれの分野の専門家により、データモデル（統合データベース）の着目する点が異なる。よって、データモデルの利用は、利用者に応じて、視点（ビュー）および視野（スコープ）を設定できることが重要である。例えば、処分場設計に携わる専門家は、処分場全体のレイアウトを、最初のビューとして、そこからスコープを狭めることにより、徐々に、パネル、人工バリア、オーバーパックというように、目的とするデータモデルに焦点を当てることが大切である。また、オーバーパックにて起こる現象を把握する場合には、ビューを「現象」に切り換えることにより、考慮すべき現象やその現象を解析するための解析コードを、確認することができる。このように、ビューおよびスコープの概念を活用することにより、大規模かつ複雑なデータモデルを、効率的に利用することが可能になる。

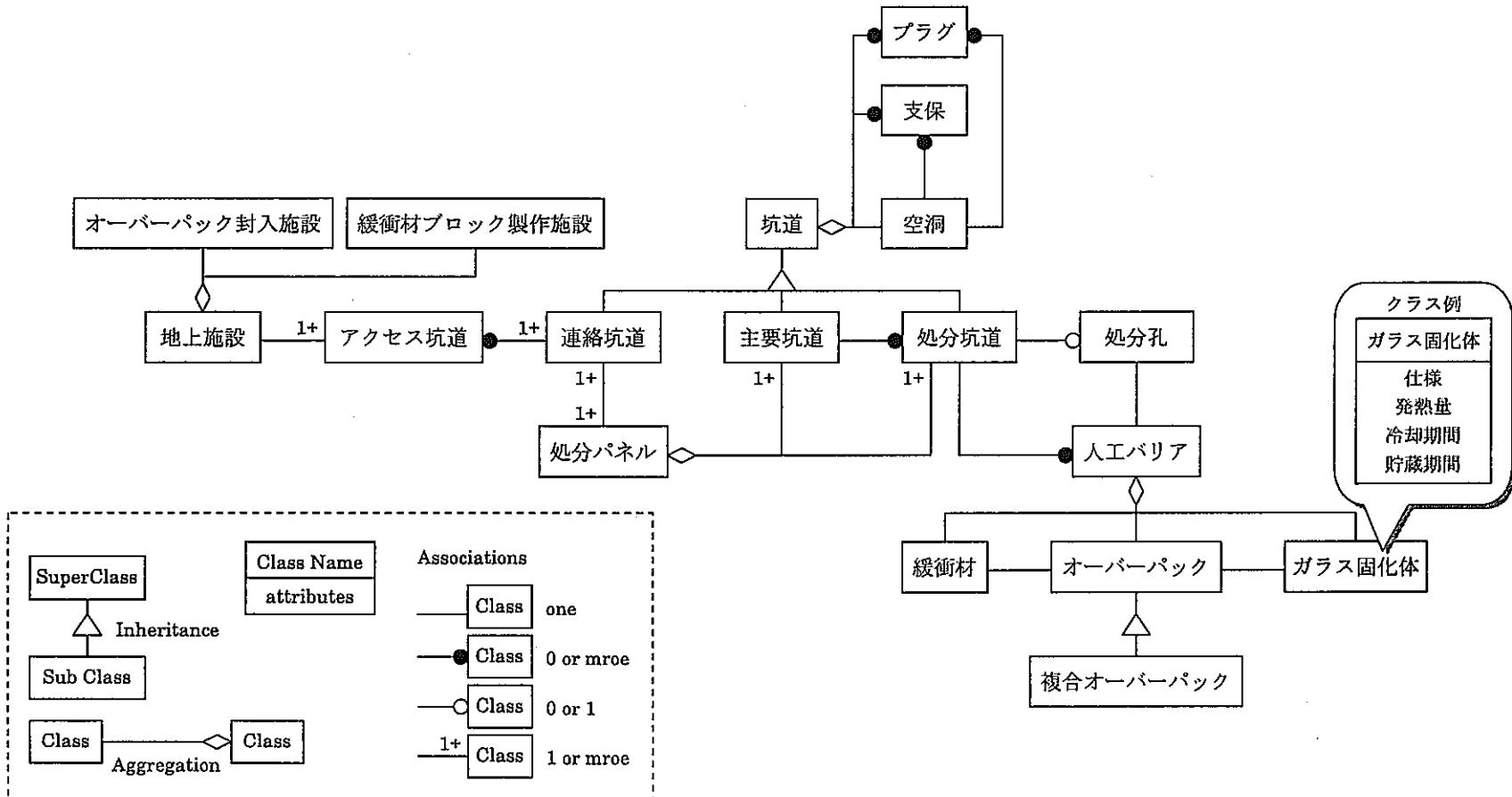


図 5.1-1 処分場の構成に関するデータモデル

FEP リスト

	G.ガラス固化体及び近傍	OP.オーバーパック	...
1.熱的現象・特性			
4.化学的現象・特性	G4.3 固化体の溶解	OP4.5 腐食生成物の生成	
6.物質移動現象・特性	G6.1 固化体周辺からの物質移動特性 G6.2 固化体からの核種溶出 <ul style="list-style-type: none"> G6.2.1 核種の調和的溶出 G6.2.2 沈殿／溶解 		

インフルエンスダイアグラム

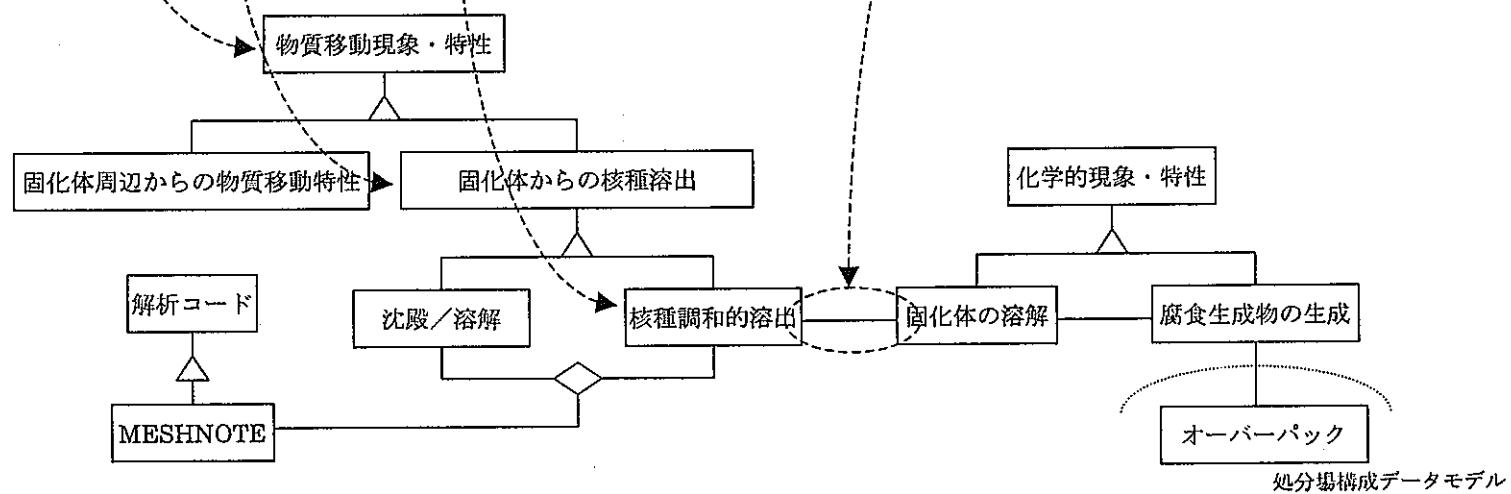
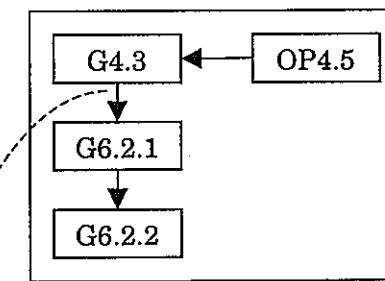


図 5.1-2 現象に関するデータモデル（イメージ）

5.2 要求機能の検討

前項で述べたデータモデルの概念に基づき、4.2.5 項にて処分場設計最適化問題の例として挙げた熱伝導解析および空洞安定性解析を対象として、データモデルの検討を行う。また、この検討結果に基づき、統合データベースに要求される機能について述べる。

(1) 热解析／空洞安定性解析に関するデータモデル

4.1 節で述べた熱解析や空洞安定性解析のような3次元有限要素法に基づいた解析に関しては、解析コードのデータ構成は体系化されており、空間情報等は、共通の枠組み（クラス）として構成することができる。よって、熱解析モデルおよび空洞安定性に関するデータモデルの構築に当たっては、最初、解析コード（ABAQUS）の入力データ項目を整理し、その後、これに基づき、汎用性や拡張性を念頭においてデータモデルを構築した。

表 5.2-1 に熱解析の入力データ項目を、また、表 5.2-2 に、空洞安定性解析の入力データ項目を示す。また、図 5.2-1 にデータモデルを示す。

熱解析および空洞安定性解析に関するデータモデルは、図 5.2-1 に示すように、節点データや要素データおよび抽象クラスとして定義されている境界条件のように、有限要素法の解析全てに共通に用いられるクラス、ならびに各解析固有のクラスから構成される。しかしながら、今後、様々な解析を対象としてデータモデルの分析を進めることにより、大部分に関し、より汎用的なデータモデルの構築が可能と思われる。また、このように解析コードの入出力データに着目してデータモデルを構築する場合と前節のように物理的な実体（オーバーパック等）に着目してデータモデルを構築する方法の2通りのアプローチが考えられるが、今後は、この2通りアプローチを並行して行うことにより、地層処分全般（処分場構成、地質環境、現象、解析コードの入出力データ）を対象としたデータモデルの構築が可能となる。

(2) 統合データベースの要求機能

統合データベースの基礎となるデータモデルは、これまで述べてきたように、大規模かつ複雑なデータの分析に優れたオブジェクト指向の概念に基づき構築することが適当である。よって、統合データベースの開発に際しては、如何に、このデータモデルを、確実かつ効率的に計算機上に実現できるかが重要なポイントになる。一般にデータベースの構築は、設計段階のデータモデルを、計算機への実装の観点から改良を加えることにより行う。そして、このデータモデルの改良が少ないほど、すなわち、設計と製作のギャップが少ないほど、確実かつ効率的に実装が可能となる。

以上の点を踏まえると、統合データベースへのデータモデル実装の観点からの要求機能は、「設計段階のオブジェクト指向の概念に基づいたデータモデルを、なるべく少ない改良で計算機へ実装可能のこと」といえる。

一方、統合データベースの運用の観点から要求機能を考えると、数値地層処分システムは、長

期に亘り運用されること、および研究開発の成果等、貴重な情報が集約されることを考慮すると、

- 大量のデータを安定して管理すること
- システムの保守性に優れること
- データベースの改良が容易であること

等、システムの運用に係わる事項が重要になる。

表 5.2-1 热解析入力データ項目 (ABAQUS)

表 5.2-2 空洞解析入力データ項目 (ABAQUS)

データ項目	内容	入力カード名
節点データ	節点番号 節点座標 (第1座標値～第3座標値) ・デカルト座標系 ・円筒座標系 ・球座標系	*NODE
要素データ	要素番号 ソリッド要素の構成節点 第1節点～第8節点 第1節点～第4節点 (支保をシェルでモデル化した場合)	*ELEMENT
節点集合	節点集合名称	*NSET
要素集合	要素集合名称	*ELSET
材料データ	岩盤	材料名称 ヤング率 ポアソン比 モールクーロンパラメータ 質量密度
	支保工	*MOHR COULUMB *DENSITY
		材料名称 ヤング率 ポアソン比 モールクーロンパラメータ 質量密度
		同上
時間変化データ	時間、値の組の時間変化データ (応力解放率) 例) *AMPLITUDE, NAME = RELAX 0.0,1.0,1.0,1.0,2.0,0.35,3.0,0.35	*AMPLITUDE
ステップデータ	ステップの開始 ステップの終了	*STEP *END STEP
初期条件	要素番号 OR 要素集合 第1の鉛直方向有効応力初期値 上記初期応力を作用させる鉛直座標 第2の鉛直方向有効応力初期値 上記初期応力を作用させる鉛直座標 側圧係数	*INITIAL CONDITION
荷重条件 (節点)	節点番号 OR 節点集合 自由度 荷重値	*CLOAD
荷重条件 (要素)	要素番号 OR 要素集合名 荷重タイプ 例) 重力, 静水圧など 重力ベクトル成分 スケールファクター 静水圧	*DLOAD
境界条件	節点番号 OR 節点集合 拘束自由度 拘束値	*BOUNDARY

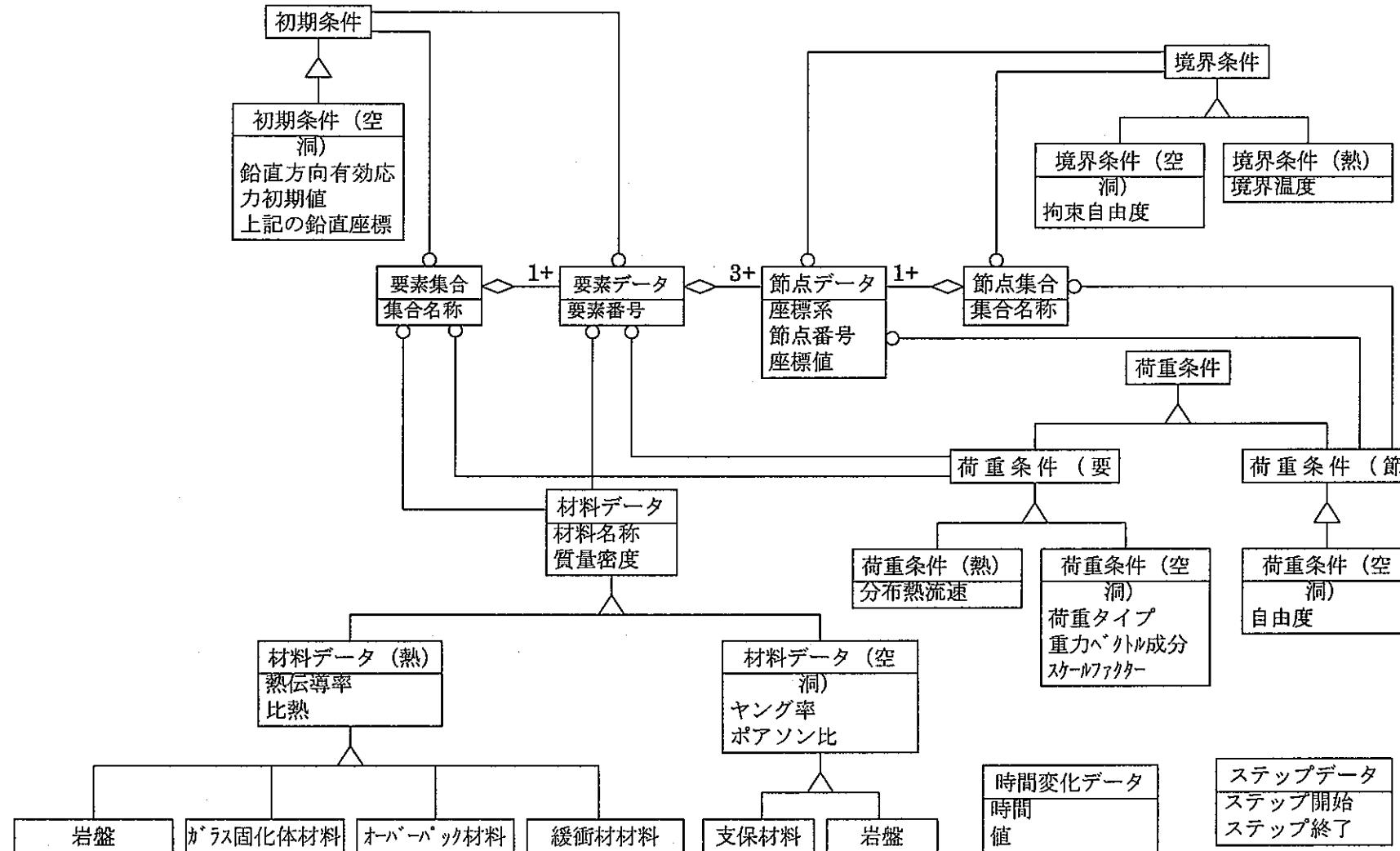


図 5.2-1 热解析／空洞安定性解析のデータモデル

6. おわりに

本研究では、数値地層処分システムの第1フェーズとして、西暦2002年度末に運用開始を目指すシステム開発の方向性を定め、かつシステム実現の見通しを得ることを目的として、中核のソフトウェア要素となる統合解析プラットホーム、処分技術への適用を対象とした解析コード並びにデータベースに関する検討を実施した。

以下に各項目に関する結論をまとめた。

(1)全体計画策定

平成10年度の概念検討段階で実施したシステム運用形態や活用に関する検討を踏まえ、西暦2002年度末に第1フェーズのシステムの運用開始を目指すとのマイルストーンのもとで、今後の開発計画の見直しを行った。

運用形態に関しては、本システムの活用者として、規制者（国）、申請者（実施主体／電気事業者）ならびに研究開発団体（サイクル機構など）を想定し、主に第1フェーズシステムを用いた運用形態、活用方法を整理した。

次に、その議論に基づき、数値地層処分システムの要求機能と基本構成（ソフトウェア、ハードウェア構成）をまとめた。

さらに、これらの構成要素の開発に必要な資源、開発項目を摘出し、開発計画を示した。開発計画は、西暦2002年度までの第1フェーズの開発計画ならびに、それ以降も含めた長期開発計画に分けて記載したが、長期開発計画に関しては、平成10年度の検討結果から大きな変更はない。

(2)統合解析プラットホームに関する検討

統合解析プラットホームは、数値地層処分システムで取り扱う多種多様な解析コードとデータを取り扱うための汎用的なソフトウェア環境である。今年度は、昨年度に検討した統合解析プラットホームの要求機能をベースに、今年度実施したプロトタイピングでの経験も踏まえ、統合解析プラットホームの基本設計を実施した。

基本設計では、1) 統合解析プラットホームでの基本的な表現要素となる解析ネットワークの表現の定義とネットワーク表現のコンポーネントであるアイテムに関する設計、2) 実行制御に関する設計を実施した。

ここでは、既開発済みの解析支援システム（CAPASA）における基本思想を受け継ぎながらも、より複雑な解析制御（複数コードを用いた接続解析や連成解析）や解析コード間あるいは解析コードとデータベース間の柔軟なデータ受け渡しの実現をねらいとし、新たな解析ネットワーク表現を提案し、その実現方法を検討した。

ここでの設計の一部に関しては、プロトタイピングを通じて、その実現性を確認することができた。

(3)解析手法に関する検討

処分場設計を対象とし、第2次取りまとめにおいて使用された解析コードに関する整理を行った。これらのコードは第1フェーズの運用開始時点までに本システムに取り込む候補となる。

処分場設計における統合解析プラットホームを用いた解析の典型例として、処分場の空洞安定性と熱的安定性に着目した設計最適化問題を対象とし、プロトタイピングも含めた検討を実施した。プロトタイピングに際しては、統合解析プラットホームで必要となる解析ネットワーク表現やユーティリティ・オブジェクトの機能、実行制御方式などの設計の参考とするため、実現方式こそ異なるものの、統合解析プラットホーム上での実行のフィジビリティを確認することを念頭に実施した。プロトタイピングの結果、今回の最適化問題に対して、統合解析プラットホームの基本設計で定めた手法が、十分に実用的であることを確認できた。

(4)統合データベースに関する検討

数値地層処分システムにおける統合データベースの基本思想は、地質環境、性能評価、処分場設計に利用されるデータを統合的（特に、整合性の観点が重要である）に管理することである。このような観点から、データモデルの概念検討と、データベース管理システムに対する要求機能を整理した。

今年度の検討により、第1フェーズシステムで必要となる解析統合プラットホームに対する開発目標とその技術的見通しを得ることができたことになる。今後は、解析統合プラットホームの製作設計をすすめるとともに、解析プラットホームの仕様にあわせて、必要な解析コードの開発やシステムへの取り込みを行うことにより、第1フェーズで必要となる実用的なシステムの実現が可能となる。

参考文献

- Raymond H.Myers, Douglas C.Montgomery "Response Surface Methodology Process and Product Using Designed Experiments", JOHN WILEY & SONS INC, 1995
- J.F.M.Barthelemy, R.T.Haftka, "Review Article Approximation concepts for optimum structural design a review", Structural Optimization 5, pp129-144, 1993
- 伊理正雄、今野浩ほか監訳「最適化ハンドブック」朝倉書店、1998
- J.Bennet, P.Fenyes, et al, "Issues in Industrial Multidisciplinary Optimization", American Institute of Aeronautics and Astronauts, 98-4727, 1998
- 本多眞、鈴木誠ほか、「基礎地盤面推定のための調査ボーリングの最適配置計画」土木学会論文集 NO.610／III-45, pp43-55, 1998.12
- Trujillo-Ventura, J. Hugh Ellis, "Multiobjective Air Pollution Monitoring Network Design", Atmospheric Environment Vol.25A, No.2, pp469-479, 1991
- 藤田、赤木、佐々木ほか「自動車駆動系の多目的最適化に関する研究 一トルクコンバータ形状の最適化一」日本機械学会論文集（C編）62巻594号、1992年2月
- 藤田、赤木、三木「リンク機構設計における多領域最適化システムの研究」日本機械学会論文集（C編）62巻579号、1994年11月
- （財）高度情報科学技術研究所「第一回 GeoFEM セミナー 一並列有限要素法の利用拡大に向けて一 セミナー資料」1999年7月26日
- Per B. Schnabel, John Lysmer, H.Bolton Seed "SHAKE : A Computer Program for Earthquake Response Analysis of Horizontally Layers Sites", A report on research sponsored by the National Science Foundation, Report No. EERC72-12, December 1972
- 茨木俊秀、福島雅夫「FORTRAN77 最適化プログラミング」岩波コンピュータサイエンス、岩波書店、1991
- Kengo Nakajima & Hiroshi Okuda(RIST): Parallel Iterative Solvers with Localized ILU Preconditioning for Unstructured Grids on Workstation Clusters, IJCFD, pp.315-322(1999, Vol.12)
- James Lumbaugh, et al., OBJECT-ORIENTED MODELING AND DESIGN, Prentice Hall

付録－1

エキスパートシステムの基礎知識

1. エキスパートシステムの基礎知識

1.1 基本的構成

エキスパートシステムの基本構成を図 1.1-1 に示す。

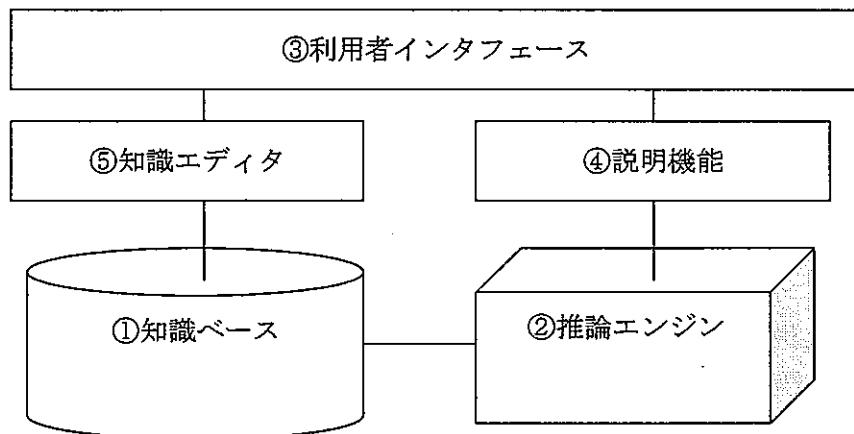


図 1.1-1 エキスパートシステム構成

各構成要素の概要を下記に示す。

① 知識ベース

専門家の知識を定められた知識表現によって表現したもの。（知識表現に関しては「2. 知識表現」で述べる）

② 推論エンジン

外部情報を解釈し、必要な知識を知識ベースから取り出し、推論を行う。（推論については「3. 推論」で述べる）

③ 利用者インターフェース

エキスパートシステムを利用するためのユーザインターフェースで、使いやすさの面から、グラフィックや自然言語が利用される。

④ 説明機能

結論に至る推論の過程を示す機能。エキスパートシステムが提示した結論の妥当性を利用者が確認するために設ける。

⑤ 知識エディタ

知識を知識ベースに入力したり、修正することを支援する機能。既存の知識との矛盾などのチェックも行う。

2. 知識表現

エキスパートシステムの特徴として、専門家の経験的知識を直接理解しやすい表現で記述可能である。ここでは下記に示す主な表現方法について述べる。

- ①プロダクションルール
- ②意味ネットワーク
- ③フレーム
- ④論理

以下にこの4つの表現について、述べる。

2.1 プロダクションルール

2.1.1 概要

ある情報により、どんな情報を得られるかを表現する。基本形式は

「If 前提 Then 結論」

となる。前提（前件部または条件部と呼ぶ）には前提条件となる情報を、結論（後件部または結論部と呼ぶ）には新たな情報または行動を記述する。プロダクションルールは、If-Then ルールあるいは単にルールと呼ばれ、本報告では以下ルールと述べる。

下記にルールの例を示す。

- (例 1) if 温度が高い then 圧力が高い
- (例 2) if 圧力が高い then 沸点が高い
- (例 3) if 水温が 90°C 以上 then ヒータのスイッチを off にする

(例 1) と (例 2) では結論に新たな情報を、(例 3) は行動を記述している。また、(例 1) により導き出された情報が、(例 2) の前提になり、(例 2) の結論を導き出すというように連鎖する。このような連鎖については、「3. 推論」で述べる。

2.1.2 特徴

<利点>

- ・表現がわかりやすい。
- ・個々のルールが独立性が高いため、修正・追加が可能（試行錯誤がしやすい）
- ・用な知識があまり明確化されていないような問題領域に有効。

<欠点>

- ・ルールが多いとルール間の連鎖も多く、全体の把握が難しい。（不具合の原因が分かりづらい）
- ・対象が大規模な場合、総合処理が多くなり、計算時間が多くのくなる。

2.2 意味ネットワーク

2.2.1 概要

問題領域内に含まれる個体、概念、状態等をオブジェクトとして表現し、またオブジェクト間を関連付けることによって知識を表現する。意味ネットワークにおいて、個体、オブジェクトをノード、オブジェクト間の関係のことをアーケと呼ぶ。（例1）に意味ネットワークの例を示す。

（例1）

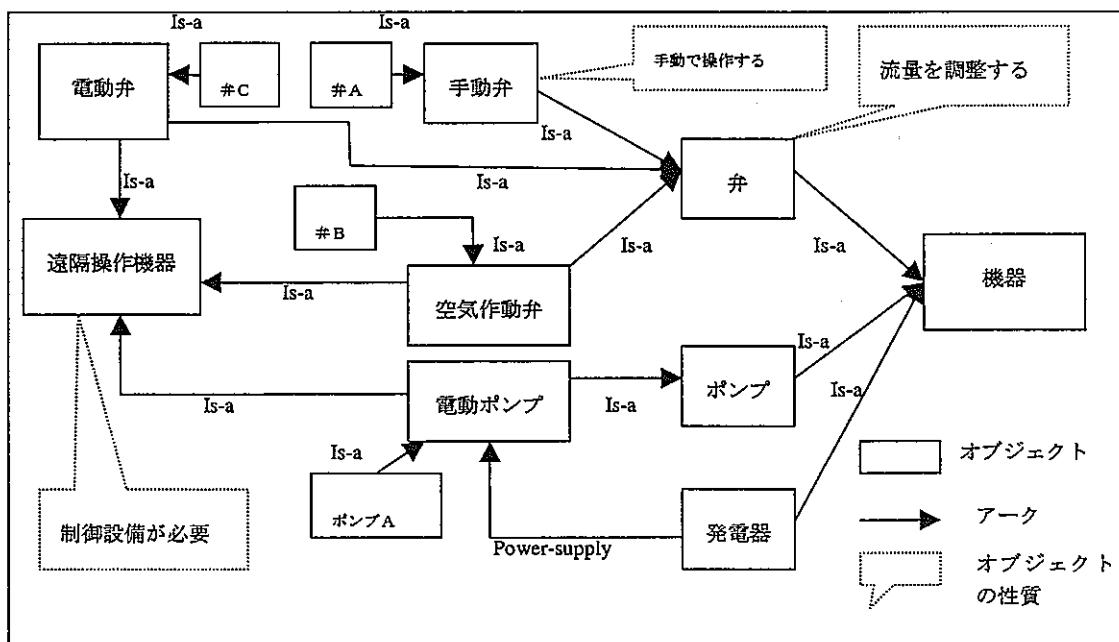


図 2.2.1-1 意味ネットワーク例

(1)性質の継承

「弁A is-a 手動弁」は英語表現の「弁A is a 手動弁」に由来するものであるが、この「is-a」アーケは「手動弁」が「弁A」の上位概念、「弁」が「手動弁」の上位概念であることを示す。基本的には上位概念のもつ性質は下位概念に継承される。（例1）でいうと、「弁A」は「手動で操作」し、「流量を調整する」ということになる。

上位概念はかならずしも1つとは限らず、「多重継承」する場合がある。（例1）においては、「空気作動弁」は「弁」「機器」のほか、「遠隔操作可能機器」を継承するため、「流量を調整」し、「制御設備が必要」である。

(2)クラスとインスタンス

（例1）において、「弁A」「ポンプA」は問題領域において唯一存在する個体である

が、「手動弁」「ポンプ」は「弁A」「ポンプA」を含む一般的なオブジェクトである。これらを区別するために、「弁A」「ポンプA」をインスタンス、「手動弁」「ポンプ」をクラスと一般的には呼ぶ。

(3)意味ネットワークによる推論

意味ネットワークを利用した推論は、ネットワークの構造を部分参照することにより実現する。例えば、(例1)において、「弁Aは手動で操作する?」の質問に対して、意味ネットワークの継承を照合すると「手動弁」は「手動で操作する」ことから、弁Aは手動で操作することがわかる。

2.2.2 特徴

(1)利点

- ・直感性に優れ、知識を理解しやすく、表現し易い。
- ・追加、変更、削除が勘弁に行える。
- ・あるオブジェクトの知識を引き出し易い。

(2)欠点

- ・因果関係を示すことができないため、ルールで表現することになる。
- ・機能の異なる記述が同一ネットワークに存在するため、利用の際に処理が複雑になる恐れがある。

2.3 フレーム

2.3.1 概要

事物に対する1つの枠組みで、基本構造は意味ネットワークと同様である。

人間が新しい場面に遭遇した場合、過去の記憶からフレームと呼ばれる典型的枠組みを選択する。フレームはスロットの集合で構成される。スロットはフレームが表す事物に関する特徴や、関連する事物との関係を表している。スロットにはデフォルト値を定義する仕組みがあり、スロット値を明確に定義できない場合は、この値を使用する。また、スロットにはその属性や条件を記述可能で、これを記述したものをファセットという。

特殊なスロットとしてISAスロットがある。これは意味ネットワークのis-aアーケと同じで、継承状態を示し、上位フレームの性質は下位フレームに継承される。

フレームの例を下記に示す。

(例 1)

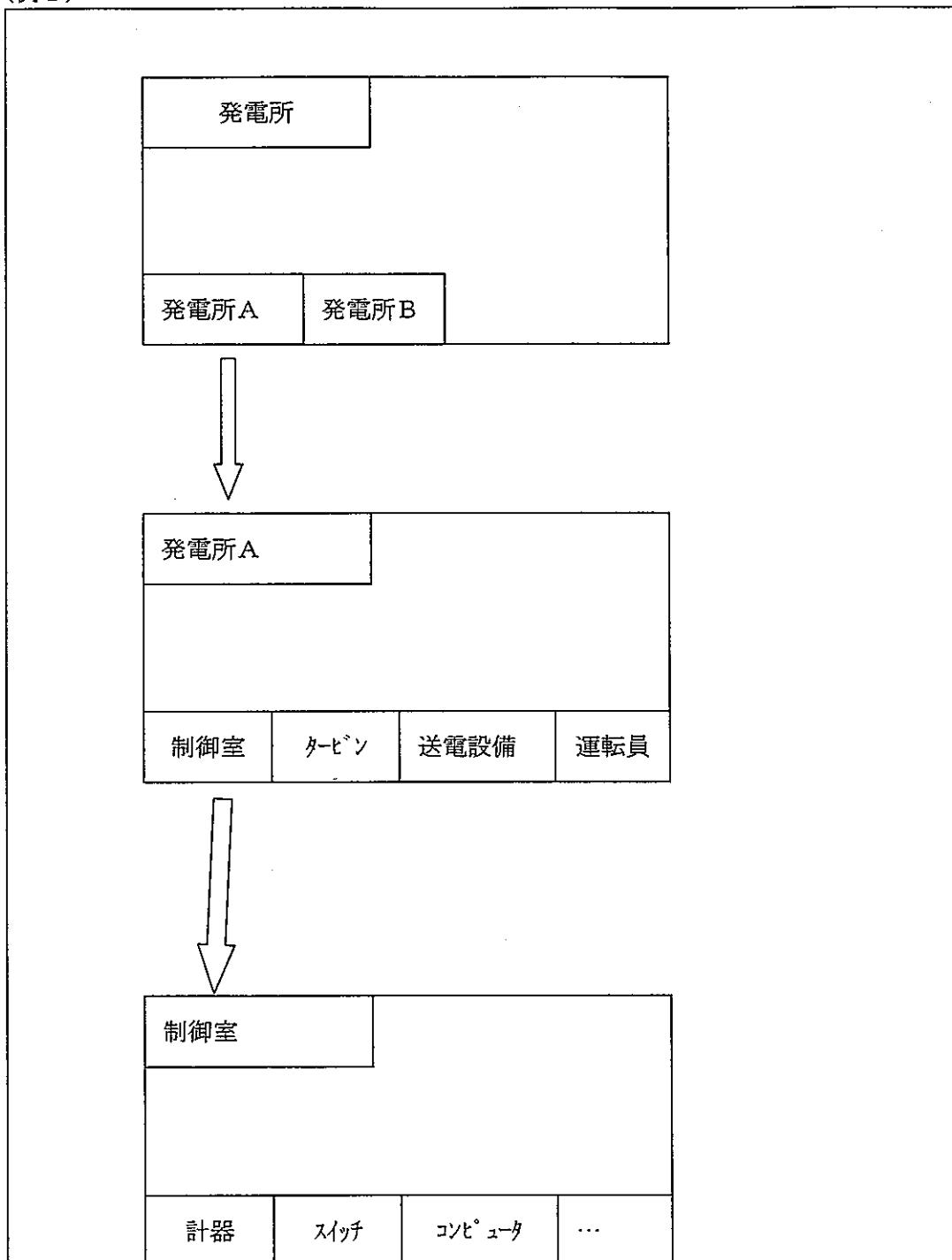


図 3.2-1 フレームの例

意味ネットワークと同様であるが、スロットには付加手続きを記述することが可能なた

め、推論機能も実現できる。

2.3.2 特徴

(1)利点

- ・人間の記憶や認識のしくみをモデル化しやすい。
- ・宣言的知識^{*1}と手続き的知識^{*2}を混在させて表現可能なため、複雑な構造を持つ対象に関する知識や経験的な知識と同じ枠組を用いて取り扱うことが可能。

(2)欠点

- ・宣言的知識と手続き的知識を混在させて表現した場合、知識の独立性が低く、追加、変更、削除が容易でない。

※1※2 物の事柄の存在や関係を、それが利用される状況から離れて明言的に与える知識を「宣言的知識」、データの解釈手続きの形で与えられる知識を「手続き的知識」という。

2.4 論理

知識を記号の式として数学的に表現するものが、論理による知識表現である。

2.4.1 概要

知識表現を行うための主な論理には、命題論理、述語論理がある。以下にそれぞれについて述べる。

(1)命題論理

基本命題^{*1}を下記の記号により組み合わせて表現する命題

$\sim P$	Pではない
$P \wedge Q$	PでありかつQである
$P \vee Q$	PであるかQである
$P \rightarrow Q$	PならばQである
$P \Leftrightarrow Q$	PのときかつそのときのみQである

P, Qは基本命題

※1 これ以上分解のできない1つの文をいう。例えば、「温度が上昇する」「故障する」など。

(例1) 「弁Cは電動弁でありかつ遠隔操作機器である」を表現する場合、「弁Cは電動弁である \wedge 弁Cは遠隔操作機器である」となる。

(2)述語論理

個体の概念を明示的に扱い、個体の性質を述語記号によって表す論理。知識の表現として、述語記号、変数、限量記号を命題論理に追加して表現力を向上したものである。述語記号と変数の表現例を(例2)に、限量記号の表現例を(例3)(例4)に示す。

(例2) 「弁Aは手動弁である」を述語論理で表現する場合、「弁A」という個体を表す

定数記号とMANUAL_VALVEという述語記号を用いて
MANUAL_VALVE(弁A)と表現する。

(例3) 「全ての手動弁は弁である」を述語論理で表現する場合、限量子記号（全称限量子）「 \forall 」を用いて、 $\forall x \text{MANUAL_VALVE}(x) \rightarrow \text{VALVE}(x)$ と表現する。

(例4) 「ある弁は手動弁である」を述語論理で表現する場合、限量子記号（存在限量子）「 \exists 」を用いて、 $\exists x \text{VALVE}(x) \rightarrow \text{MANUAL_VALVE}(x)$ と表現する。

3. 推論

3. 1 推論の種類

推論の種類は「演繹的推論」「機能的推論」「発見的推論」の3種類がある。下記にそれぞれについて述べる。

① 演繹的推論

事実とルールから結論を推論する。最も基本的な推論。

② 機能的推論

事実と結論からルールを推論する。

③ 発見的推論（推定）

ルールと結論から事実を推定する。

（例1）演繹的推論

事実 弁Aは手動弁である。

ルール If Xが手動弁 Then 手動で操作する。

↓

結論 弁Aは手動で操作する。

（例2）機能的推論

事実1 弁Bは遠隔操作機器である。

結論1 弁Bは制御設備が必要である。

事実2 弁Cは遠隔操作機器である。

結論2 弁Cは制御設備が必要。

↓

ルール If Xが遠隔操作機器 Then Xは制御設備が必要。

（例3）発見的推論

ルール If Xが弁 Then Xは流量を調整する。

結論 弁Aは流量を調整する。

↓

事実 弁Aは弁である。

3.2 推論の連鎖

「2.1 プロダクションルール」でも触れたが、推論は連鎖していく。その連鎖のさせ方（推論戦略）には「前向き推論」「後ろ向き推論」の2種類存在し、問題の性質によって使い分ける。以下にこの2つの推論についてプロダクション・ルールで表現された知識を前提として述べる。

3.2.1 前向き推論

事実から求めたい結論を導き出す場合に用いる。

既に証明されている事実から始まり、その事実が前提に記述されているルールの結論を導きだし、それを新たな事実として、それが前提となるルールの結論を導き出し、というように、求めたい結論に達するまで行う。

このように求めたい結論を目指して推論させることを「目的指向の推論」という。一方、求める結論を定めずに、可能な限りルールを連鎖させてできる限り多くの結論を求めることを「データ指向の推論」と言う。

(例 1) 前向き推論（目的指向）で、下記のルールと事実がある場合、プラントにどのような影響を与えるかを求める場合、図 3.2.1-1 のような推論の流れとなり、「安全設備の作動」することが求まる。

ルール

- ルール 1 If 発電器Cの故障 Then 制御用設備Cの故障
- ルール 2 if 制御設備Cの故障 Then 弁Cの誤閉
- ルール 3 if 弁Cが閉止 Then 系内圧力が高
- ルール 4 if 弁Cが閉止 Then 異常検知
- ルール 5 if 異常検知 Then 安全設備の起動

事実

発電器Cの故障

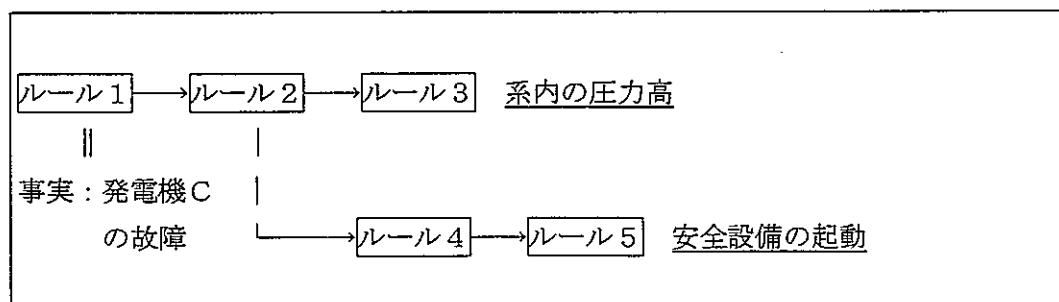


図 3.2.1-1 前向き推論の流れ

(例 2) 前向き推論（データ指向）で、(例 1) と同様のルールと事実がある時に、できる限り多くの結論を求める場合、図 3.2-1 のような推論の流れとなり、「制御用設備Cの故障」「弁Cの誤閉」「系内圧力が高」「異常検知」「安全設備の起動」ことが求まる。

3.2.2 後ろ向き推論

仮説をたて、それが正しいかどうかを確かめる場合に用いる。

証明したい仮説から始まり、その仮説が結論に記述されているルールを探し、そのルールの前提が事実であるかどうか確かめる。事実かどうか分からぬ場合は、さらにそのルールの前提を仮説として、それが結論に記述されているルールをさがしていく。このようにして、たどり着いた全てのルールの前提が事実である場合、この仮説は正しいということになる。また、たどり着いたルールの前提が事実であるかどうかわからない場合には、ユーザに判断を問う仕組みにすることもある。

(例 3) 後ろ向き推論で、(例 1) のルールと事実がある場合、「安全設備の起動」という仮説が正しいかどうかを確かめる。

その結果、図 3.2.2-1 のような推論の流れとなり、この仮説は正しいことがわかる。

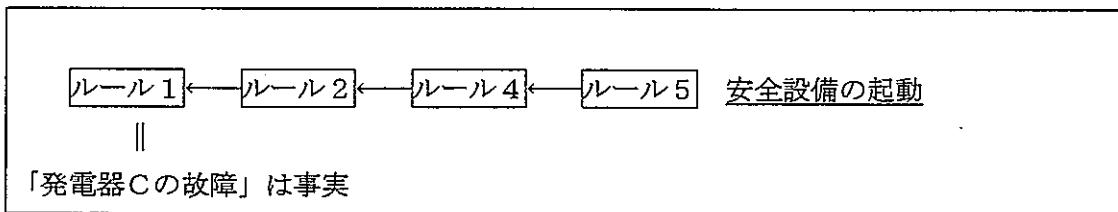


図 3.2.2-1 後ろ向き推論の流れ

4 不確実な推論

人間の経験的知識は、あいまいな状態のものが多い。では、このような知識は役に立たないかどういうと、人間の判断は、このような多くの知識からなされおり、これらの知識から有効な答えを導き出している。

ここでは、このような知識から結論を導き出す代表的な手法を紹介する。

①確信度付き推論

各ルールの前提が真の場合の結論を信じる度合いを「確信度」として表す。この確信度は推論が連鎖するときにも伝搬され、最終的には求める結論とその確信度を求める。

②ベイズ規則に基づく確率的推論

確率論的な観点から不確実な推論を実現するのに用いる。これはある事象のもとでの事象の条件付き確率として表現し、最終的には求める結論とその確率値を求める。

③ファジィ推論

ファジィ理論を用いて、人間の主観に基づく定義など、定義自身があいまいさを含むものを扱う推論である。推論結果はファジィ集合として表されるか、それを基に定量的な値に変換（非ファジィ化）して表される。

付録－2

処分場設計解析コード/モデルに関する検討

－ 設計解析コードの現状調査 －

表1 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性
(人工バリアシステムの地震応答解析コード)

解析コード	人工バリアシステムの地震応答解析コード（有限要素法）			
機能 (含、解析種別)	<ul style="list-style-type: none"> • 土水2相系動的有効応力解析 (時刻歴応答解析、周波数応答解析) • 実固有値解析 • 初期応力解析 			
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS	<input type="checkbox"/> PC	<input checked="" type="checkbox"/> 大型計算機	<input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可	<input type="checkbox"/> 利用不可		
ライブラリ	<input type="checkbox"/> 有	<input checked="" type="checkbox"/> 無		
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77	<input type="checkbox"/> Fortran90	<input checked="" type="checkbox"/> C, C++ (GUI部のみC言語で開発)	
	<input type="checkbox"/> basic	<input type="checkbox"/> その他 ()		
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input checked="" type="checkbox"/> GUI			
	コマンドプロンプトからの入力項目		<input type="checkbox"/> 有	<input checked="" type="checkbox"/> 無
	ソルバーと GUI の形態		<input type="checkbox"/> 一体	<input checked="" type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	① 主入力ファイル ② 主出力ファイル ③ ポスト処理ファイル ④ リスタートファイル ⑤ 初期応力ファイル			
入力項目	① 節点データ（座標データ） ② 材料データ ③ 要素データ ④ 拘束条件 ⑤ 荷重条件 ⑥ 初期条件 ⑦ 出力指示			
出力項目	① 入力ファイルエコーバック ② 節点変位 ③ 節点速度 ④ 節点加速度 ⑤ 間隙水圧（節点値、要素値） ⑥ 要素応力 ⑦ 要素ひずみ			

表2 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (ORIGEN2)

解析コード	ORIGEN2
機能 (含、解析種別)	<ul style="list-style-type: none"> • 核種崩壊生成計算
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS <input type="checkbox"/> PC <input type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可 <input type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input checked="" type="checkbox"/> 有 <input type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input type="checkbox"/> その他 ()
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input type="checkbox"/> GUI コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 ソルバーと GUI の形態 <input type="checkbox"/> 一体 <input type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	① 主入力ファイル ② 主出力ファイル
入力項目	①初期燃料組成および構造材組成 ②燃焼条件（燃焼度、比出力、燃焼サイクル、濃縮度） ③再処理条件（冷却期間、元素の除去率） ④固化条件（固化するまでの貯蔵期間） ⑤処分条件（中間貯蔵期間） ⑥核定数ライブラリ <ul style="list-style-type: none"> • FP核種の核分裂収率 • スペクトル平均中性子断面積 • 核種崩壊定数 • 放射化生成断面積 • 分岐比、崩壊エネルギー
出力項目	①FP核種、アクチニド核種、放射化核種生成量 ②放射能量 ③崩壊熱 ④α放射能量 ⑤即発核分裂に中性子生成量 ⑥γ線生成量 ⑦毒性指數

表3 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (MCNP)

解析コード	MCNP4a
機能 (含、解析種別)	• 放射線輸送計算
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS <input checked="" type="checkbox"/> PC <input checked="" type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可 <input type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input checked="" type="checkbox"/> 有 <input type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input type="checkbox"/> その他 ()
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input type="checkbox"/> GUI コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 ソルバーと GUI の形態 <input type="checkbox"/> 一体 <input checked="" type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①入力ファイル ②出力ファイル ③ヒストリーファイル ④テーブルデータファイル
入力項目	①幾何形状 ②線源形状および線源データ ③統計データ
出力項目	①入力データエコーバック ②エラー情報 (含、ワーニング) ③各セルの粒子の発生状況 ④透過情報 ⑤消滅情報 ⑥統計データ ⑦FOM (Figure of Merit)

表4 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (ANISN)

解析コード	ANISN
機能 (含、解析種別)	・遮蔽解析（定常状態のボルツマン輸送方程式を解いて放射線の角度線束分布を求める。）
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS <input checked="" type="checkbox"/> PC <input type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他（ ）
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可 <input type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input checked="" type="checkbox"/> 有 <input type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input type="checkbox"/> その他（ ）
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input type="checkbox"/> GUI コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 ソルバーと GUI の形態 <input type="checkbox"/> 一体 <input type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①主入力ファイル ②核定数ライブラリファイル ③主出力ファイル ④線束出力ファイル
入力項目	①一次元座標データ（平板、円柱、球） ②核定数（エネルギー群） ③物質元素組成データ（原子数密度） ④角度分点（離散角度ベクトル） ⑤エネルギー群構造 ⑥線源強度分布（エネルギー群、座標データ毎） ⑦初期条件 ⑧計算収束判定値 ⑨差分近似選定 ⑩出力指示
出力項目	①入力ファイルエコーバック ②線束データ（座標データ、エネルギー群） ③領域の收支表（放射線粒子バランス） ④収束計算状況

表5 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (ABAQUS)

解析コード	ABAQUS			
機能 (含、解析種別)	<ul style="list-style-type: none"> ・腐食膨張解析 ・熱解析 ・空洞解析（自重解析、掘削解析） 			
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS	<input type="checkbox"/> PC	<input type="checkbox"/> 大型計算機	<input type="checkbox"/> その他（　　）
ソースコード	<input type="checkbox"/> 利用可	<input checked="" type="checkbox"/> 利用不可		
ライブラリ	<input type="checkbox"/> 有	<input checked="" type="checkbox"/> 無		
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77	<input type="checkbox"/> Fortran90	<input type="checkbox"/> C, C++	
	<input type="checkbox"/> basic	<input type="checkbox"/> その他（　　）		
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト		<input checked="" type="checkbox"/> GUI	
	コマンドプロンプトからの入力項目		<input type="checkbox"/> 有	<input checked="" type="checkbox"/> 無
	ソルバーと GUI の形態		<input type="checkbox"/> 一体	<input checked="" type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①主入力ファイル (*.inp) ②主出力ファイル (*.fil) ③リストアートファイル			
入力項目	①節点データ ②要素データ ③材料物性（ヤング率、ポアソン比、密度） ④発熱履歴データ ⑤荷重条件データ（応力、強制変位など） ⑥初期条件データ（温度、応力など）			
出力項目	①変位、温度 ②応力、ひずみ ③熱流束			

表 6 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (SHAKE)

解析コード	SHAKE (k-SHAKEx for Windows Ver1.0)
機能 (含、解析種別)	成層地盤一次元地震応答解析
利用環境	<input type="checkbox"/> EWS <input checked="" type="checkbox"/> PC <input type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input type="checkbox"/> 利用可 <input checked="" type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input checked="" type="checkbox"/> その他 (不明) ()
実行方法	<input type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input checked="" type="checkbox"/> GUI <input type="checkbox"/> コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> ソルバーと GUI の形態 <input checked="" type="checkbox"/> 一体 <input type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	全て GUI を介した入力指定、出力表示。ファイル形式の入出力データは原則不要。ただし、地震波データ（加速度時刻歴データ）を固有のフォーマットに従った別ファイルにてインポートすることが可能。
入力項目	①一次元地盤モデルの地質の数 ②各地質の深度、層分割数 ③解析条件（線形解析／等価線形解析） ④振動数上限 ⑤繰返し回数最大値、許容誤差（等価線形解析の場合のみ） ⑥有効ひずみと最大ひずみの比（等価線形解析の場合のみ） ⑦地盤物性（せん断剛性、単位体積重量、せん断波速度、減衰） ⑧地盤のひずみ依存特性データ、入力地震動
出力項目	①時刻歴データ（加速度、速度、変位、相対変位） ②応答スペクトル（加速度、速度、変位） ③加速度伝達関数 ④せん断応力時刻歴データ ⑤せん断ひずみ時刻歴データ

表7 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (FINAS)

解析コード	FINAS
機能 (含、解析種別)	・非定常熱伝導解析
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS <input type="checkbox"/> PC <input type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可 <input type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input type="checkbox"/> その他 ()
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input type="checkbox"/> GUI コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 ソルバーと GUI の形態 <input type="checkbox"/> 一体 <input type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①入力ファイル ②出力ファイル ③ポスト処理用出力ファイル ④リスタートファイル
入力項目	①節点データ ②要素データ ③材料物性 (ヤング率、ポアソン比、密度) ④発熱履歴データ ⑤境界条件データ ⑥初期条件データ (温度)
出力項目	①温度 ②熱流束

表 8 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (DACSAR)

解析コード	DACSAR
機能 (含、解析種別)	間隙水で飽和した地盤を対象とする粘弾性有限要素法による非定常有効応力解析
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS <input checked="" type="checkbox"/> PC <input checked="" type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可 <input type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input type="checkbox"/> その他 ()
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input type="checkbox"/> GUI コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 ソルバーと GUI の形態 <input type="checkbox"/> 一体 <input checked="" type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①主入力ファイル (ASCII 形式) ②主出力ファイル (ASCII 形式)
入力項目	①節点座標データ ②要素データ ③変位拘束条件 ④水理境界条件 ⑤節点荷重条件 ⑥要素荷重 ⑦非定常の計算ステップコントロールデータ
出力項目	①非定常変位分布 ②有効応力分布 ③間隙水圧分布 ④三次元浸透流速分布

表9 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (NASTRAN)

解析コード	NASTRAN			
機能 (含、解析種別)	<ul style="list-style-type: none"> ● 実固有値解析 ● 初期応力解析（自重解析） 			
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS	<input type="checkbox"/> PC	<input type="checkbox"/> 大型計算機	<input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input type="checkbox"/> 利用可	<input checked="" type="checkbox"/> 利用不可		
ライブラリ	<input type="checkbox"/> 有	<input checked="" type="checkbox"/> 無		
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77	<input type="checkbox"/> Fortran90	<input type="checkbox"/> C, C++	
	<input type="checkbox"/> basic	<input type="checkbox"/> その他 ()		
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト		<input type="checkbox"/> GUI	
	コマンドプロンプトからの入力項目		<input type="checkbox"/> 有	<input checked="" type="checkbox"/> 無
	ソルバーと GUI の形態		<input type="checkbox"/> 一体	<input checked="" type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①入力ファイル ②出力ファイル			
入力項目	①節点データ ②要素データ ③材料物性（ヤング率、ポアソン比、密度） ④荷重条件データ（地圧応力） ⑤出力指示データ			
出力項目	①節点変位 ②要素応力 ③要素ひずみ			

表 10 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性 (TOUGH2)

解析コード	TOUGH2
機能 (含、解析種別)	2相(地下水、ガス) 2成分(水、空気など)の既製の組み合せに対する組成変化を考慮した差分法熱・浸透流解析。
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS <input type="checkbox"/> PC <input checked="" type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他()
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可 <input type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input checked="" type="checkbox"/> 有 <input type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input type="checkbox"/> その他()
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input type="checkbox"/> GUI コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 ソルバーと GUI の形態 <input type="checkbox"/> 一体 <input checked="" type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①主入力ファイル(ASCII形式) ②主出力ファイル(ASCII形式)
入力項目	①解析領域内部の幾何学的グリッド構成データ ②境界グリッドの構成データ ③熱的境界条件(温度、フラックス) ④水理境界条件(圧力、フラックス) ⑤初期組成分布 ⑥初期温度分布 ⑦初期圧力分布
出力項目	①非定常温度分布 ②非定常圧力分布 ③各相での飽和度 ④各組成成分の濃度

表 11 設計解析コード／モデルの概要と数値地層処分システムへの適用性
(熱－水－応力連成解析コード THAMES)

解析コード	THAMES
機能 (含、解析種別)	・熱－水－応力連成解析
利用環境	<input checked="" type="checkbox"/> EWS <input type="checkbox"/> PC <input type="checkbox"/> 大型計算機 <input type="checkbox"/> その他 ()
ソースコード	<input checked="" type="checkbox"/> 利用可 <input type="checkbox"/> 利用不可
ライブラリ	<input type="checkbox"/> 有 <input checked="" type="checkbox"/> 無
プログラム言語	<input checked="" type="checkbox"/> Fortran77 <input type="checkbox"/> Fortran90 <input type="checkbox"/> C, C++ <input type="checkbox"/> basic <input type="checkbox"/> その他 ()
実行方法	<input checked="" type="checkbox"/> コマンドプロンプト <input type="checkbox"/> GUI コマンドプロンプトからの入力項目 <input type="checkbox"/> 有 <input type="checkbox"/> 無 ソルバーと GUI の形態 <input type="checkbox"/> 一体 <input type="checkbox"/> 分離
入出力ファイル	①入力ファイル ②出力ファイル
入力項目	①節点データ ②要素データ ③材料物性値 ④境界条件 ⑤初期条件 (水頭、応力、温度)
出力項目	①温度履歴 ②圧力水頭 ③含水比 ④間隙率 (変形による有効間隙率の変化) ⑤水圧による岩盤の変形 ⑥熱膨張による間隙の変形

付録一 3

制約条件付き最適化問題の一解法

(逐次二次計画法)

数理的手法による最適化問題の解法に関する一般事項を整理する。今、最適化問題の一般形を以下のとおり記述する。

$$\text{Minimize} \quad ; \quad f(\mathbf{x}) \quad (\text{式 1a})$$

$$\text{Subject To} \quad ; \quad \mathbf{x} \in S \quad (\text{式 1b})$$

ここで、 \mathbf{X} は設計変数ベクトル、 $f(\mathbf{x})$ は目的関数、 S は制約条件を満足する解の集合（実行可能領域）である。数理的アプローチによる最適化問題の解法は、最適解のもつべき一般的な性質を明らかにし、これを満足する解を試行錯誤的に見つけることである。そのためには、目的関数 $f(\mathbf{x})$ の勾配 ∇f と勾配をもう一度微分したヘッセ行列 $\nabla^2 f$ を用いて、解空間を構成する $f(\mathbf{x})$ の幾何学的性質を調べる必要がある。ヘッセ行列は関数 f の幾何学的な性質について重要な情報を含むものであり、以下の正方行列で表される。

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad (\text{式 2})$$

以下に、最適解の満足すべき最適性条件（必要十分条件）について整理する。

(1) 制約無し問題に対する最適性条件

点 \mathbf{x}^* を制約条件のない最適化問題の局所最適解とすると、この点では以下の停留条件を満足する。

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (\text{式 3})$$

関数 f が凸関数の場合は、上式を満足する任意の停留点 \mathbf{x}^* は最適解となる必要十分条件になる。しかしながら、多峰性の関数や鞍点を含む関数では、明かに上式を最適解が満足すべき必要十分条件として捉えることはできない。（式 3）式を最適性の一次の必要条件という（一次の微係数を含んでいるため）。同様にして、局所最適解 \mathbf{x}^* におけるヘッセ行列の性質を調べてみる。関数 f は、局所最適解 \mathbf{x}^* の近傍で以下のように展開することができる。

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) \approx f(\mathbf{x}^*) + \alpha \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + \frac{\alpha^2}{2} \mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + (\mathbf{O}^3) \quad (\text{式 4})$$

右辺第二項は、(式2)式に示した一次の最適性条件よりゼロとなり、三次以上の高次項は微小項として無視することができる。点 \mathbf{x}^* が局所最適解であるためには、十分小さい係数 $\alpha > 0$ に対して次式が成り立たなければならない。

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) \geq f(\mathbf{x}^*) \quad (\text{式 } 5)$$

従って、(式4)式の右辺第三項に含まれるヘッセ行列は半正定行列でなければなく、

$$\mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \geq 0 \quad (\text{式 } 6)$$

を満足する任意のベクトル $\mathbf{d} \neq 0$ が存在することになる。これを最適性の二次の必要条件という。

最後に、最適性の十分条件について考える。(式4)式において、任意のベクトル $\mathbf{d} \neq 0$ に対して、 $\alpha > 0$ が十分小さいとき、

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) > f(\mathbf{x}^*) \quad (\text{式 } 7)$$

が成り立つためには、ヘッセ行列が正定行列であることが必要である。すなわち、

$$\mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} > 0 \quad (\text{式 } 8)$$

これを最適性の二次の十分条件という。

(2) 制約付き問題に対する最適性条件

制約条件を考慮する場合の最適化問題を改めて以下のように定める。

$$\text{Minimize} ; \quad f(\mathbf{x}) \quad (\text{式 } 9\text{a})$$

$$\text{Subject} ; \quad C_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (\text{式 } 9\text{b})$$

$$C_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m) \quad (\text{式 } 9\text{c})$$

目的関数および制約条件は、いずれも二階微分可能な連続関数とする。解空間の中で、(式9b)式で表される等式制約条件および(式9c)式で表される不等式制約条件を満足する領域を実行可能(feasibility)領域といい、制約付き最適化問題では、一般に局所最適解が実行可能領域の境界上に存在することが多く、その点で $f(\mathbf{x})$ の勾配がゼロになるとは限らない。

制約無し問題の場合と同様にして、最適性の一次の必要条件を定める。点 \mathbf{x}^* が局所最適解であり、最適解における有効制約が一次独立であると仮定すれば、次式を満足するベクトル \mathbf{u}^* が存在する。有効制約とは、等式が成立している制約条件を意味する。

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i * \nabla C_i(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (\text{式 } 10)$$

$$c_i(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (\text{式 11})$$

$$c_i(\mathbf{x}^{(k)}) \leq 0, \quad u_i^* \geq 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m) \quad (\text{式 12})$$

$$c_i(\mathbf{x}^{(k)}) < 0, \quad u_i^* = 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m) \quad (\text{式 13})$$

この式を（カルーシュ・）キューン・タッカ条件（Karush-Kuhn-Tucker）といい、一次の必要条件として扱われる。上式のベクトル \mathbf{u}^* は、キューン・タッカ条件における制約条件の重みを表すものであり、ラグランジュ乗数と呼ばれる。

今、次式で表されるラグランジュ関数 $L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ を定義する。

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \equiv f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m u_i C_i(\mathbf{x}) \quad (\text{式 14})$$

このとき、ベクトル \mathbf{x} に関するヘッセ行列は以下のようになる。

$$\nabla_x^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \triangleq \nabla^2 f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m u_i \nabla^2 C_i(\mathbf{x}) \quad (\text{式 15})$$

局所最適解 \mathbf{x}^* において有効制約の勾配ベクトルは一次独立と仮定し、キューン・タッカ条件を満たすラグランジュ乗数を \mathbf{u}^* とする。更に \mathbf{x}^* における有効制約の集合を

$$I(\mathbf{x}^*) = \{ i \mid c_i(\mathbf{x}^*) = 0 \} \quad (\text{式 16})$$

として、全ての有効制約の勾配ベクトルと直交するベクトルの集合を以下のように表す。

$$\mathbf{M}^* = \left\{ \mathbf{y} \in \mathbf{R}^n \mid \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{y} = 0 \ (i \in I(\mathbf{x}^*)) \right\} \quad (\text{式 17})$$

このときラグランジュ関数のヘッセ行列 $\nabla_x^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ に対して、次式の半正定条件が成り立つことが知られている（最適性の二次の必要条件）。

$$\mathbf{y} \in \mathbf{M}^* \Rightarrow \mathbf{y}^T \nabla_x^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \mathbf{y} \geq 0 \quad (\text{式 18})$$

逆に、キューン・タッカ条件を満たす $(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*)$ に対して次式の正定条件が成り立つとき、 \mathbf{x}^* は局所最適解となる（最適性の二次の十分条件）。

$$0 \neq \mathbf{y} \in \mathbf{M}^* \Rightarrow \mathbf{y}^T \nabla_x^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \mathbf{y} > 0 \quad (\text{式 19})$$

(3) 次二次計画法 (Successive Quadratic Programming method)

等式制約条件のみを含む最適化問題を以下のように定める。

$$\text{Minimize} ; \quad f(\mathbf{x}) \quad (\text{式 20a})$$

$$\text{Subject} ; \quad c_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (\text{式 20b})$$

キューン・タッカー条件式より、

$$\nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^l u_i \nabla c_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{式 21})$$

$$c_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (\text{式 22})$$

このとき、ラグランジュ関数 $L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ は次式で表される。

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^l u_i \nabla c_i(\mathbf{x}) \quad (\text{式 23})$$

ラグランジュ関数 $L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ の勾配ベクトルは、

$$\begin{aligned} \nabla L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= \begin{pmatrix} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ \nabla_{\mathbf{u}} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^l u_i \nabla^2 c_i(\mathbf{x}) \\ \mathbf{c}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{式 24})$$

等式制約条件のみを含む問題 (式 21) 式のキューン・タッカー条件は、変数 \mathbf{x}, \mathbf{u} に関する非線形連立方程式と見なすことができる。すなわち、

$$\nabla L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{式 25})$$

これにニュートン法を適用すると、第 k 反復で解くべき線形方程式は以下のようになる。

$$\nabla L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}) + \nabla^2 L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}) \begin{pmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{u} - \mathbf{u}^{(k)} \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{式 26})$$

ラグランジュ関数のヘッセ行列 $\nabla_x^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ は、(式 24) 式で表された勾配ベクトル ∇L をさらに微分することで得られる。

$$\nabla^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \nabla_x^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) & \nabla c(\mathbf{x}) \\ \nabla c(\mathbf{x})^T & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{式 27})$$

このとき、

$$\sum_{i=1}^{\ell} u_i \nabla c_i(\mathbf{x}) = u_1 \nabla c_1(\mathbf{x}) + u_2 \nabla c_2(\mathbf{x}) + \dots + u_\ell \nabla c_\ell(\mathbf{x}) = \nabla c(\mathbf{x}) \mathbf{u} \quad (\text{式 28})$$

に関係に注意すると、(式 26) 式に示したニュートン方程式は以下のように書き改めることができる。

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla_x^2 L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}) (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{式 29a})$$

$$c(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c(\mathbf{x}^{(k)})^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}) = 0 \quad (\text{式 29a})$$

局所最適解 \mathbf{x}^* に於いて、関数 $c_i(\mathbf{x}^*)$ ($i = 1, 2, \dots, l$) の勾配ベクトル $\nabla c_i(\mathbf{x}^*)$ ($i = 1, 2, \dots, l$) が一次独立であれば、キューン・タッカ一条件を満足するラグランジュ定数 \mathbf{u}^* が存在する。さらに $(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*)$ が最適性の二次の十分条件を満たすときには、ラグランジュ関数のヘッセ行列は $(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*)$ において正則になる。このとき、上記のニュートン法は解 $(\mathbf{x}^*, \mathbf{w}^*)$ の十分近くに出発点をとれば、その解に二次収束することが示される。

今、以下に示す二次計画問題を考える。

$$\text{Minimize} \quad ; \quad \nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^T \nabla_x^2 L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}) \mathbf{d} \quad (\text{式 30a})$$

$$\text{Subject to} \quad ; \quad c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (\text{式 30b})$$

ここで \mathbf{d} は大きさ $n \times 1$ のベクトルである。これにキューン・タッカ一条件を適用すると次式が得られる。

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla_x^2 L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}) \cdot \mathbf{d} + \nabla c(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (\text{式 31})$$

$$c(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c(\mathbf{x}^{(k)})^T \cdot \mathbf{d} = 0 \quad (\text{式 32})$$

$$\text{ここで、} \quad \mathbf{d} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)} \quad (\text{式 33})$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} \quad (\text{式 34})$$

すなわち、二次計画問題を解いてキューン・タッカ一条件を満足する (\mathbf{d}, \mathbf{v}) を求めるこ

とと、元の問題のキューン・タッカー条件に対するニュートン方程式を解くこととは等価である。

(4) 不等式制約条件をもつ最適化問題の一般化

点 $\mathbf{x}^{(k)}$ と $\mathbf{u}^{(k)}$ が与えられたとき、ラグランジュ関数のヘッセ行列

$$\nabla_x^2 L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)}) + \sum_{i=1}^m u_i^{(k)} \nabla^2 C_i(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (\text{式 35})$$

を含む、以下の二次計画問題を考える。

$$\text{Minimize} ; \quad \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^T + \frac{1}{2} \mathbf{d} \nabla_x^2 L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}) \mathbf{d} \quad (\text{式 36})$$

$$\text{Subject to} ; \quad c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l) \quad (\text{式 37})$$

$$c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d} \leq 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m) \quad (\text{式 38})$$

これより、最適解 $\mathbf{d}^{(k)}$ と対応するラグランジュ乗数 $\mathbf{v}^{(k)}$ を求め、以下に示す点列を生成する反復法を構成する。

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}^{(k)} \quad (\text{式 39})$$

$$\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{v}^{(k)} \quad (\text{式 40})$$

いま、 $(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*)$ をキューン・タッカー条件を満足する点とし、さらに最適性の二次の十分条件および以下に示す「狭義相補正」

$$c_i(\mathbf{x}^*) = 0 \Rightarrow v^* > 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m) \quad (\text{式 41})$$

が成り立つとすれば、(式 39) 式で示された反復法によって生成される点列 $(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)})$ は、出発点 $(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{u}^{(0)})$ を解 $(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*)$ の十分近くにとればその解に二次収束する。この各反復において二次計画問題を解くことにより、解に収束する点列を生成する方法を SQP 法という。この方法は、制約なし問題に対するニュートン法を制約付き問題に拡張したものであるため局所収束性に優れている。SQP 法の問題点としては、出発点の選択や目的関数の凸性があげられる。そこで、行列 $\nabla_x^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ を適当な正定値対称行列 $\mathbf{B}^{(k)}$ で置きかえた以下の二次計画問題を考える。

$$\text{Minimize} ; \quad \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^T \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{d} = \mathbf{d} \quad (\text{式 42})$$

$$\text{Subject to} ; \quad c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l)$$

$$c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d} \leq 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m)$$

この最適解とラグランジュ乗数の対を $(\mathbf{d}^{(k)}, \mathbf{v}^{(k)})$ とすれば、以下に示すキューン・タッカ一条件が成立する。

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) + \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{d}^{(k)} + \sum_{i=1}^m v_i^{(k)} C_i(\mathbf{x}^{(k)}) = 0 \quad (\text{式 43})$$

$$c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^{(k)} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l)$$

$$c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^{(k)} \leq 0 \quad v_i^{(k)} \geq 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m)$$

$$c_i(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla c_i(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^{(k)} < 0 \quad v_i^{(k)} = 0 \quad (i = l+1, l+2, \dots, m)$$

$\mathbf{d}^{(k)} = 0$ であれば上記は本来のキューン・タッカ一条件を満足するので、求めるべき解が得られたことになる。

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \mathbf{d}^{(k)} \quad (\text{式 44})$$

$$\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{v}^{(k)} \quad (\text{式 45})$$

$$\mathbf{S}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)} \quad (\text{式 46})$$

$$\mathbf{y}^{(k)} = \nabla L_x(\mathbf{x}^{(k+1)}, \mathbf{u}^{(k+1)}) - \nabla L_x(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k+1)}) \quad (\text{式 47})$$

$$\mathbf{B}^{(k+1)} = \mathbf{B}^{(k)} + \frac{1}{\beta^{(k)}} \mathbf{y}^{(k)} (\mathbf{y}^{(k)})^T - \frac{1}{\gamma^{(k)}} \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{S}^{(k)} (\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{B}^{(k)} \quad (\text{式 48})$$

$$\text{ここで } \beta^{(k)} = (\mathbf{y}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)} > 0 \quad (\text{式 49})$$

$$\gamma^{(k)} = (\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{S}^{(k)} \quad (\text{式 50})$$

$\beta^{(k)} > 0$ が必ずしも成り立たないケースでは、以下の近似式で置換える。

$$\mathbf{y}^{(k)} = \theta \mathbf{y}^{(k)} + (1-\theta) \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{S}^{(k)} \quad (\text{式 51})$$

$$\theta = \begin{cases} 1 & (\mathbf{y}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)} \geq 0.2 (\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{S}^{(k)} \\ \frac{0.8 (\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{S}^{(k)}}{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{S}^{(k)} - (\mathbf{y}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)}} & (\mathbf{y}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)} < 0.2 (\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{S}^{(k)} \end{cases} \quad (式 52)$$

$\mathbf{d}^{(k)} \neq 0$ のとき、以下に示すペナルティ関数を考える。

$$F_\rho(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \rho \left(\sum_{i=1}^{\ell} |C_i(\mathbf{x})| + \sum_{i=\ell+1}^m \max\{0, C_i(\mathbf{x})\} \right) \quad (式 53)$$

直線探索を行い次式を満足するステップ幅 $\alpha^{(k)}$ を求める。

$$F_\rho(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \mathbf{d}^{(k)}) \approx \min_{\alpha \geq 0} F_\rho(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)}) \quad (式 54)$$

$$\therefore \mathbf{x}^{(k+1)} \approx \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \mathbf{d}^{(k)} \quad (式 55)$$

パラメータ ρ は十分大きく、関数 F_ρ の降下方向を維持できる様、以下の条件を満たすものとする。

$$\rho > \max \left\{ |v_1^{(R)}|, \dots, |v_\ell^{(k)}|, v_{\ell+1}^{(k)}, \dots, v_m^{(k)} \right\} \quad (式 56)$$

ラグランジュ関数のヘッセ行列 $\nabla^2_x L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)})$ を $\mathbf{B}^{(k)}$ とおけば逐次二次計画法はニュートン法に帰着される。従って、局所的収束性に優れている。行列 \mathbf{B} としては、正定値性を保ちつつ、可能な限り $\nabla^2_x L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)})$ に近いものを選ぶことが望ましい。そこで、制約なし問題に対する準ニュートン法の考え方従って、上記の行列 \mathbf{B} を逐次更新する。

以下に、逐次二次計画法のアルゴリズムを要約する。

手順 1) 出発ベクトル $\mathbf{x}^{(0)}$ と正定値行列 $\mathbf{B}^{(0)}$ を選び $k=0$ とする。

手順 2) 二次計画問題を解いて $(\mathbf{d}^{(k)}, \mathbf{v}^{(k)})$ を求める。

$\mathbf{d}^{(k)} = 0$ ならば計算終了。 $\mathbf{d}^{(k)} \neq 0$ であれば次ステップへ

手順 3) 直線探索によりステップ中の $\alpha^{(k)} > 0$ を求め、 $k \leftarrow k+1$ とする。

$$\mathbf{x}^{(k+1)} := \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \mathbf{d}^{(k)}$$

$$\mathbf{u}^{(k+1)} := \mathbf{v}^{(k)}$$

$$\mathbf{B}^{(k+1)} := \text{推定式 (BFGS 法より)}$$

行列 $\mathbf{B}^{(k)}$ の正定値は保証されているので、ペナルティパラメータ ρ を十分大きくとることで、ペナルティ関数は単調減少し、 F_ρ の局所最小値に収束する。