

地層処分性能評価の 品質保証に関する研究（Ⅲ）

（核燃料サイクル開発機構 研究委託内容報告書）

—研究概要—

1999年2月

三菱重工業株式会社

本資料は、委託契約業務に基づいて作成されたものです。したがって、その利用は限られた範囲としており、その取扱には十分な注意を払ってください。この資料の全部または一部を複写・複製・転載あるいは引用する場合、特別の許可を必要としますので、下記にお問い合わせください。

〒319-1194 茨城県那珂郡東海村村松4番地33
核燃料サイクル開発機構 東海事業所
運営管理部 技術情報室

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:

Technical Information Section,
Administration Division, Tokai Works.
Japan Nuclear Cycle Development Institute
4-33 Muramatsu, Naka-gun, Ibaraki 319-1194,
Japan

地層処分システム性能評価の品質保証に関する研究(Ⅲ)

房枝茂樹*¹、柳澤一郎*²、桂井清道*³、上田憲明*¹
武石雅之*¹、井田俊雄*¹、今村尚子*¹

要旨

第二次取りまとめにおける地層処分システムの性能評価では、ニアフィールド性能の定量化を大きな目標としており、ここでは、評価モデルの妥当性および性能評価用データの信頼性と品質保証が技術的課題として重要視されている。この課題を達成するためには、データ、モデルおよび解析コードという個々の品質を保証するとともに、解析作業やデータ取得作業についても十分な信頼性を持たせ、それらの品質を総合して評価結果の信頼性を保証していくことが重要である。

本研究では、性能評価に係わる品質情報を総合的に管理し活用できる計算機環境を整備し、第二次取りまとめ報告書における解析結果の信頼性を示すための総合的な品質保証システムの構築を目的として以下の研究を実施した。

(1) 品質保証フレームワークに関する検討

MESHNOTE の信頼性確保を目的として、室内試験データや原位置データに基づく確証解析の実施ならびに計画を実施した。また、実務に適用すべく品質保証要領書の改訂を実施した。

- 鉄含有ベントナイト中における拡散試験データに基づく確証解析を行い、MESHNOTE が妥当であることを確認し、知識ベースについて整理した。
- 解析報告書の管理に関する事項を品質保証要領書に追加した。

(2) 品質保証システムの構築

解析結果の信頼性の向上および品質保証プログラムの効率的な運用を目的として、解析管理システム「CAPASA」を基盤とした品質保証システムに係わる以下の拡張を実施した。

- 人工バリア幾何形状、ガラス溶解に係わるデータおよび被ばく線量換算係数を管理するための核種移行解析用データベースを構築した。また、これらデータを、CAPASA で利用可能とするためのインタフェースプログラムを構築した。
- 亀裂媒体中の核種移行解析コード TIGER および地球化学コード PHREEQC を、CAPASA に搭載した。また、人工バリア中の核種移行解析コード MESHNOTE の改良版を対象として、核種移行解析用データベースとのインタフェースプログラムを構築した。

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。

機構担当部課室： 東海事業所 環境保全・研究開発センター 処分研究部 システム解析グループ

- * 1 三菱重工業株式会社 原子カプラント技術部 開発技術課
- * 2 三菱重工業株式会社 原子カプラント技術部 新型炉・燃料サイクル技術課
- * 3 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

The Study on the Quality Assurance of Performance Assessment
for the Disposal System

Shigeki Fusaeda*¹, Ichiro Yanagisawa*², Kiyomichi Katsurai*³, Noriaki Ueda*¹
Masayuki Takeishi*¹, Toshio Ida*¹, Naoko Imamura*¹

Abstract

The purpose of performance assessment of the geological disposal system in the second progress report is to quantitatively evaluate the performance in the near-field. For this purpose, validation of performance models and quality assurance of data used in the performance assessment are important technical subjects. To achieve the subjects, the quality of the procedure of analysis work and data acquisition work must be assured in addition to the quality assurance of data, models and analysis codes. In addition, to assure results of the performance assessment by integrating these qualities is an important matter.

The following studies have been performed in order to improve the computer environment for controlling the quality information relating to the performance assessment, and to develop the integrated quality assurance system which can give reliability of the results of the performance assessment in the second progress report.

(1) The study of quality assurance framework.

In order to assure reliability of MESHNOTE3, we have carried out validation analysis based on experimental data and insite data. And we have revised the quality assurance manual in order to be applicable to preparing documents.

- We have carried out validation analysis/planning based on the experimental data which is acquired from "Measurement of Apparent Diffusion Coefficient of ⁹⁹Tc in Compacted Bentonite with Fe powder", and confirmed validity of MESHNOTE3.
- We have added a postscript on the management of analysis documents to the quality assurance manual.

(2) The development of the quality assurance computer system

In order to improve reliability of the analysis results and to efficiently use the quality assurance program, the quality assurance computer system on the basis of analysis management system CAPASA has been improved as follows.

- Database for radionuclide transport calculations that can control geometry of engineered barriers, data relating to glass dissolution and dose rate conversion factors has been developed.
- TIGER that calculates radionuclide transport in fissures and geochemical calculation code PHREEQC have been incorporated into the CAPASA. Also, interface programs to the database for the advanced version of MESHNOTE, which calculates radionuclide transport in an engineered barrier, has been created.

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

JNC Liaison : Repository System Analysis Group, Waste Isolation Research Division,
Waste Management and Fuel Cycle Research Center, Tokai Works

*1 Products Development Section, Nuclear Plant Engineering Department

*2 Advanced Nuclear Plant & Nuclear Fuel Cycle Systems Engineering Section, Nuclear Plant Engineering Department

*3 Fuel Cycle Engineering Section, Advanced Reactor & Nuclear Fuel Cycle Engineering Department

目次

1. はじめに	-----	1
2. 品質保証フレームワークに関する検討	-----	2
2.1 確証計算の実施と知識ベース化	-----	2
2.1.1 はじめに	-----	2
2.1.2 テストケースと確証情報に関する詳細検討	-----	2
2.1.3 確証計算の実施	-----	3
2.1.4 知識ベースの作成とシステム化の検討	-----	4
2.2 品質保証要領書の改訂	-----	4
2.2.1 品質保証要領書の運用方法に関する説明	-----	4
2.2.2 品質保証要領書の使用状況調査・不具合の抽出	-----	4
2.2.3 品質保証要領書の改訂	-----	5
3. 品質保証システムの構築	-----	6
3.1 核種移行解析用データベースの拡張	-----	6
3.1.1 人工バリア幾何形状データセットの管理	-----	6
3.1.2 ガラス溶解データセットの管理	-----	7
3.1.3 被ばく線量換算係数データセットの管理	-----	8
3.2 新規解析コードの搭載	-----	10
3.2.1 亀裂媒体中核種移行解析コード TIGER の搭載	-----	10
3.2.2 地球化学コード PHREEQC の搭載	-----	13
3.2.3 人工バリア中核種移行解析コード MESHNOTE に関する機能拡張	-----	15
4. あとがき	-----	17

図目次

図 3.1.1-1 人工バリア幾何形状データセットのクラス構造	-----	7
図 3.1.2-1 ガラス溶解データセットのクラス構造	-----	8
図 3.1.3-1 被ばく線量換算係数データセットのクラス構造	-----	9
図 3.2.1-1 TIGER のクラス構造	-----	11
図 3.2.2-1 PHREEQC のクラス構造	-----	14

1. はじめに

第二次取りまとめにおける地層処分システムの性能評価では、ニアフィールド性能の定量化を目標の一つとしている。そこでは、ニアフィールド性能の評価モデルの妥当性およびニアフィールド性能評価データの信頼性と品質保証が重要となる。

このような課題を達成するためには、ニアフィールドにおける現象を抽出し、実験等を通じてその現象を理解するとともに、データの取得、現象のモデル化、ならびにそれに基づく解析コードの開発・改良を行い、現象を定量的に評価できるようにする必要がある。また、評価結果の信頼性や品質保証の観点では、データ、モデルおよび解析コードの個々の品質を保証するとともに、解析コードの運用やデータ取得に係わるプロセスについても十分な信頼性を持たせ、それらの品質を総合して評価結果の信頼性を保証していくことが重要である。

本研究では、地層処分システムの性能評価結果の信頼性を保証することを目的として、平成 8 年度から性能評価で用いる解析コードおよびデータを対象として、これらの品質を保証するための手順と品質に関する情報の管理・運用手法について検討を実施している。また、それらを具体的に性能評価に用いる解析コードやデータに適用するために、第二次取りまとめに反映できる品質保証プログラムを構築、整備している。さらに、このプログラムを評価作業の中で効率的かつ効果的に運用していくため、第二次取りまとめにおいて解析作業に使用している解析管理システム（以下、CAPASA システム）に反映することにより、品質保証プログラムと併せて、総合的な品質保証システムを開発している。

本年度は、これまでの成果を踏まえて、性能評価に係わる品質情報を総合的に管理し、活用できる計算機環境を整備し、第二次取りまとめ報告書における解析結果の信頼性を示すための総合的な品質保証システムを構築するために、以下の研究を実施する。

- (1) 人工バリア中の核種移行解析コード MESHNOTE の最新バージョンを対象として、確証計算の実施と知識ベース化に資する知見の整理とシステム化の検討を行う。
- (2) 平成 9 年度に作成した品質保証要領書について、第二次取りまとめに向けた解析作業の中で運用を行い、要領書の適用性を確認するとともに、汎用性の観点から改訂を行う。
- (3) 人工バリア幾何形状等の核種移行解析に用いるパラメータを対象として、データ構造および管理方法の検討を行う。また、この検討に基づき昨年度構築した核種移行解析用データベースの拡張を実施する。
- (4) 亀裂媒体中の核種移行解析コード TIGER および地球化学コード PHREEQC を対象として、データ構造、他解析コードとの接続方法等の検討を行う。また、この検討に基づき、これらコードを CAPASA に搭載する。

2. 品質保証フレームワークに関する検討

2. 1 確証計算の実施と知識ベース化

2. 1. 1 はじめに

人工バリア中の核種移行解析コード MESHNOTE3 を対象に確証計算を実施した。MESHNOTE3 は、昨年度に検証を行った MESHNOTE2 の後続バージョンであり、拡散係数を元素毎に指定できる点が異なっている。ここでは、MESHNOTE3 の確証資源（試験データ、ナチュラルアナログなど）に関する情報の整理・集約を行うとともに、具体的な確証ケースの検討および確証計算を実施した。確証計算の成果は昨年度より整備中の検証・確証報告書として改訂し、得られた知見を知識化情報として整理した。また、CAPASA 上で参照できる項目に関しては他の解析結果との比較が行えるようデータベースへの登録を行った。

2. 1. 2 テストケースと確証情報に関する詳細検討

(1) INTRAVAL

これまでに、テストケースの候補としてフェーズ1テストケース1 aおよびフェーズ2テストケース MOL を挙げている。本年度は、昨年度までに収集した文献に加えて、関連する他の文献収集を継続した。その結果、テストケース1 aに関しては新たに試験レポートのドラフト第2版（P.J.Bourke 他、1989）および最終版（P.J.Bourke 他、1990）を入手することができた。機構殿では、このドラフト第2版に記載の実データを用い、フィックの法則に基づく一次元拡散モデルの確証（解析解）を行った成果を INTRAVAL 事務局に提出している（H.Umeki 他、1991）。

これにより、テストケース1 aに関しては、上記の試験レポート最終版に基づき、実際の確証計算を行うことが可能となった。しかしながら、同テストケースは室内試験に基づく拡散モデルの確証のみに限定されたものであり、沈殿・再溶解や一次溶解反応モデル、溶解度、拡散係数などのパラメータの時間・空間変化機能などの MESHNOTE で取り扱うことのできる他のモデルの確証は不可能である。また、MESHNOTE で採用されている拡散モデルは、既に機構殿で実施済みのフィックの第2法則に基づくものであり、この一次元拡散モデルの実現象への適用性そのものは、概ね確認されていると捉えることができる。

(2) 室内試験

これまでに機構殿で実施された室内試験に関する情報収集・整理を行い、以下に示す3件の試験について MESHNOTE の確証問題としての利用性を検討した。

- ① 鉄粉含有ベントナイト中の ^{99}Tc , ^{237}Np の見かけの拡散係数の測定
- ② Pu 含有ガラス固化体-圧縮ベントナイト複合試験
- ③ 実ガラス固化体-圧縮ベントナイト複合試験

(3) ナチュラルアナログ

MESHNOTE 3 の核種崩壊・崩壊連鎖、沈殿・再溶解モデルに関する確証情報の収集を目的とし、主としてオクロ天然原子炉（西アフリカ、ガボン共和国）を取り上げ関係文献の収集と調査を行った。オクロ天然原子炉は複数のゾーンで核分裂反応が持続された形跡があり、発見された順に原子炉ゾーン No.1～No.16 と識別されている。原子炉ゾーン No.1～9 は地表付近に位置しており、原子炉ゾーン No.10～14 は地表面から数百メートルという深いところに位置している。深部の原子炉ゾーンは 1981 年以降になって確認されはじめ、風化などの 2 次的変成作用が少なく、核種移行に関する新しい知見が得られるものと期待されてきた（日高、1994 年）。

(4) 確証情報のまとめとテストケースの設定

以上の情報収集と調査結果を踏まえ、確証計算を行うテストケースを設定した。INTRAVAL については、テストケース 1 a の拡散モデルのみが確証対象となるため、同モデルの単独の確証を目的としたテストケースは設定しない方針とした。

機構殿で実施された室内試験に関しては、機構殿の試験担当者からの情報収集が比較的容易であることに加え、拡散モデルの確証と併せて他のモデル（拡散係数の空間変化、ガラス溶解機能）の確証が可能と考えられるため、これらを確認計算を行うテストケースとして設定することとした。ただし、上記の Pu 含有ガラス固化体を用いた複合試験は、実ガラス固化体に関する複合試験で代表できると考え、実ガラス固化体を用いた複合試験のみをテストケースとして採用することとした。

なお、MESHNOTE の崩壊連鎖、沈殿・溶解モデルの確証を意図したオクロ天然原子炉に関する情報利用については、上記のとおり複数のプロセスが複雑に介在することや利用可能な研究成果が限られていることから、現段階ではテストケースとして設定しないこととした。

2. 1. 3 確証計算の実施

上記の検討結果を踏まえ、機構殿で実施された室内試験情報より「鉄粉含有ベントナイト中の Tc-99 の拡散挙動」ならびに「実ガラス固化体-圧縮ベントナイト複合挙動」に関して、MESHNOTE 3 による確証計算を実施した。

本研究で行った確証のケーススタディは、既存の室内試験より得られた諸情報に基づいたものであり、昨年度までに検討した確証手法を実際のモデルを用いて具体化した一つの例示である。MESHNOTE3 で対象とする系と利用した試験系で概念モデルが異なる等、本来 MESHNOTE3 で想定する用途を越えたところで、多くの仮定を設けながら議論を進める必然性があった。その意味では、上で述べた確証計算をもって

MESHNOTE3 の核種移行解析モデルが確認されたものとは考えることはできない。しかしながら、コードの改良や運用が繰り返される研究開発段階にあるモデルの検証・確認をインターラクティブに進め、その信頼性を客観的な情報に基づきながら確認していく意味では、今後の確認に資する有用な知見を得ることができた。限られた情報に基づき、実現象への適用性についてどのレベルで議論ができるのか、あるいは逆に、議論が詳細化するためには他に何が必要か等の一課題を具体化できた点で有意な例示であった。

2. 1. 4 知識ベースの作成とシステム化の検討

確認計算を通じて得られた知見を整理し、今後、類似のテストケースを対象とした解析作業において、これらの知見を有効活用できる知識ベースとしての内容整理とシステム化の検討を行った。知識化情報の整理については、とくに室内試験系をモデル化する上での以下の点についてまとめ、それらに基づき CAPASA 内で処理すべき項目とシステム内で参照する項目等の知識化情報のシステム化を検討した。

- ・ MESHNOTE3 による一次元直交座標系の拡散シミュレーション
- ・ 閉鎖系の外側境界条件の取り扱い

室内試験系をモデル化する上でのこれらの方法は、類似する試験系のシミュレーションを行う際の知識化情報としてシステム上に展開することが可能である。しかし、このような利用は本来の MESHNOTE3 の意図した用途を越えた例外的なケースであり、今後この種の適用が行われることは少ないものと思われる。従って、これらの情報に基づき、利用者を支援する機能としてリジッドにシステム化することは得策ではない。ここで整理したモデル化手法の詳細は、検証・確認報告書等のドキュメントとして整理するにとどめ、今回の確認計算の結果を CAPASA の既存の機能（エイリアス機能など）を用いて容易に参照できることが望ましい。

2. 2 品質保証要領書の改訂

2. 2. 1 品質保証要領書の運用方法に関する説明

本研究では、機構殿において解析作業を担当している職員を対象として、平成 9 年度に作成した品質保証要領書の利用に関する説明を行った。また、品質保証要領書の利用性促進を目的として、機構殿が所有している「地層処分研究開発第二次取りまとめ作成のための技術情報管理システム（通称：WBS 管理システム）」に平成 9 年度版の品質保証要領書・概要版ならびに本文を登録しており、本社、東京事務所、東海事業所、東濃地科学センターのインターネットブラウザ環境下で閲覧出来る様にした。

2. 2. 2 品質保証要領書の使用状況調査・不具合の摘出

第二次取りまとめ解析作業の中で、品質保証要領書を運用した場合の状況について、

機構殿の解析担当者から意見を集約・整理した。ここで対象とした解析担当者は、第二次取りまとめの総論、分冊に係わる解析ならびに執筆の役割を持っており、平成 9 年度に作成済の品質保証要領書に基づく業務を数ヶ月間実施していた。ここで集約された情報を以下に示す。

- ① パーソナルコンピュータ環境下のエクセルファイルとワープロソフト間の情報の関連性
- ② ワープロソフトで作成されたドキュメントの保管管理

2. 2. 3 品質保証要領書の改訂

ドキュメント（解析結果に係わる報告書）の管理ならびに作成資料内部の数値データ管理を半自動的に管理するためには、現在 JNC が開発している「地層処分研究総合評価システム」の環境下で管理することを推奨する。本手法を採用することにより、下記のメリットが期待できる。

- ① 文書がシステム内に格納される（場所・紛失の問題が回避できる）
- ② 文書内の図と加工データの関連性が確保できる（追跡性確保）
- ③ 本システムを関連セクションで運用することにより、情報の共有化が図れる。
- ④ 早期の運用が可能となる（平成 11 年度上期からの運用が可能となる。）

検討結果は、品質保証要領書「8. 4 解析報告」に補足説明として追記した。

3. 品質保証システムの構築

3. 1 核種移行解析用データベースの拡張

昨年度は、核種移行解析コードにおいて必要となる拡散係数等を対象として、データベースを用いて管理するデータ項目および付属情報について検討を行った。また、この検討結果に基づき、データセットを格納するデータベースを構築し、CAPASA から利用可能とした。

本年度は、昨年度の検討に引き続き、以下のパラメータを対象として管理方法の検討を行い、核種移行解析用データベースの拡張を行う。

- 人工バリアの幾何形状
- ガラス固化体からの Si 溶解に係わるデータ
- 生物圏における被ばく線量換算係数

また、CAPASA 上で、上記データを、複数の性能評価モデルで利用するため、共用データ機能を基盤として、解析コード等との接続を行うインタフェースプログラムを構築する。

3. 1. 1 人工バリア幾何形状データセットの管理

人工バリアの幾何形状データは、MESHNOTE における利用を前提してデータ構造を検討する。MESHNOTE における人工バリア幾何形状は、入力データ中の PHYSICAL ブロックに設定される。よって、データベースを用いて管理するデータ項目は、以下とする。

- ① ガラス固化体の高さ (m)
- ② 緩衝材の内側半径および外側半径 (m)
- ③ リザーバーおよびミキシングセルの容積 (m³)
- ④ 緩衝材およびミキシングセルの空隙率

また、品質保証の観点から追跡性を確保するため、以下の項目も併せてデータベースを用いて管理する。

- ⑤ 名称 データセットの名称を管理する。
- ⑥ 作成日 データ作成日を管理する。
- ⑦ 作成者 データ作成者の名称 (所属、名前) を管理する。
- ⑧ 追跡情報 データ設定の根拠等を記載した文書の管理番号等を管理する。
- ⑨ コメント データ使用の条件等の注釈を管理する。

図 3.1.1-1 に上記データを管理する人工バリア幾何形状データセットのクラス構造を示す。なお、この人工バリア幾何形状データセットは、CAPASA 上の共用データ機能を用いて MESHNOTE の入力データ中の PHYSICAL ブロックに接続することが可能である。

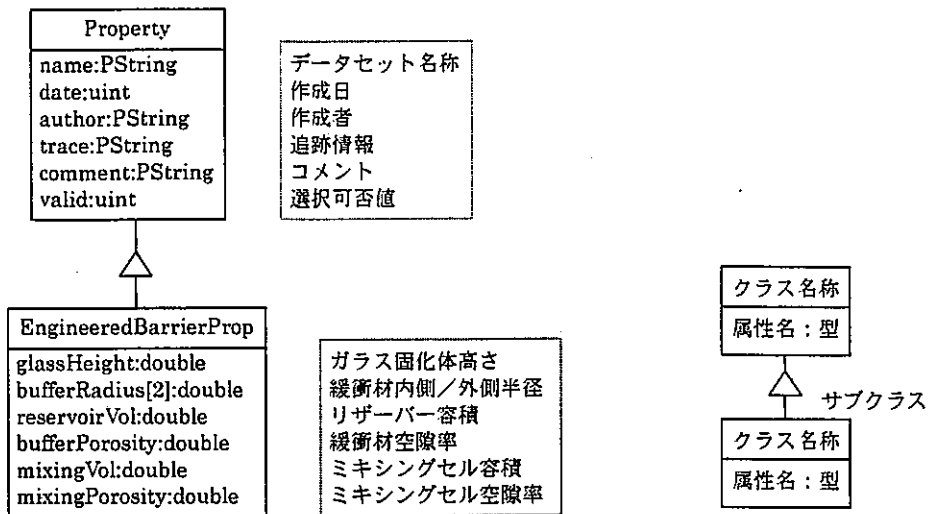


図 3.1.1-1 人工バリア幾何形状データセットのクラス構造

3. 1. 2 ガラス溶解データセットの管理

ガラス固化体からのガラス溶解に関するデータセットは、MESHNOTE のバージョン2とバージョン3における利用を前提とする。以下に、データベースを用いて管理するデータ項目を示す。

- ① ガラスの容積 (m^3)、表面積 (m^2)、密度 ($m^3/k g$)
- ② 初期および残存ガラス溶解速度 ($g/m^2/年$)
- ③ 次元
- ④ ケイ素の緩衝材およびミキシングセル中の吸着係数 α 、 β
- ⑤ ケイ素の溶解度 (mol/m^3)
- ⑥ ケイ素の初期インベントリ (mol)

また、上記に加えて品質保証の観点から、名称、作成日、作成者等の項目を併せてデータベースを用いて管理する。図 3.1.2-1 に、上記データを管理するガラス溶解データセットのクラス構造を示す。

ガラス溶解データセットは、人工バリア幾何形状データセットと同様に、データ接続プログラムにより、MESHNOTE の入力データ中の GLASS ブロックに挿入することが可能である。

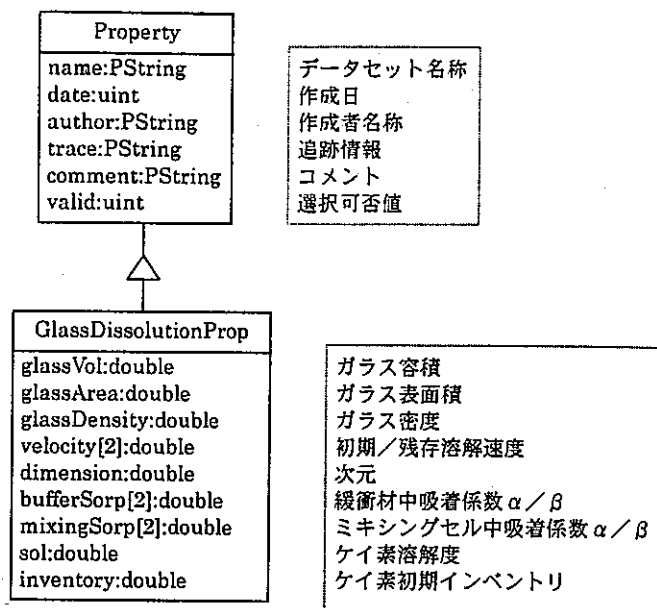


図 3.1.2-1 ガラス溶解データセットのクラス構造

3. 1. 3 被ばく線量換算係数データセットの管理

生物圏評価におけるデータセットの管理は、第2次取りまとめにおける生物圏の被ばく評価方法を考慮して、線量換算係数を、地質環境や地形パターンに応じてデータベースを用いて管理することにより行う。以下に、データベースを用いて管理するデータ項目を示す。

- ① 流入域（河川等の表層水、海洋、深井戸など）
- ② 地形パターン（山地、丘陵、平野など）
- ③ 被ばくグループ（農作業従事者、淡水漁業従事者、海水作業従事者など）
- ④ 換算係数

本データセットは、他のデータセットと同様に、名称、作成日、作成者等の項目もデータベースを用いて管理する。図 3.1.3-3 に、上記データを管理する被ばく線量換算係数データセットのクラス構造を示す。

本データセットを用いた生物圏評価では、データ接続プログラムおよび生物圏評価オブジェクトと核種移行解析コード用の PLAN オブジェクトを用いて、被ばくグループ毎または全被ばくグループに対する被ばく線量を評価することが可能である。

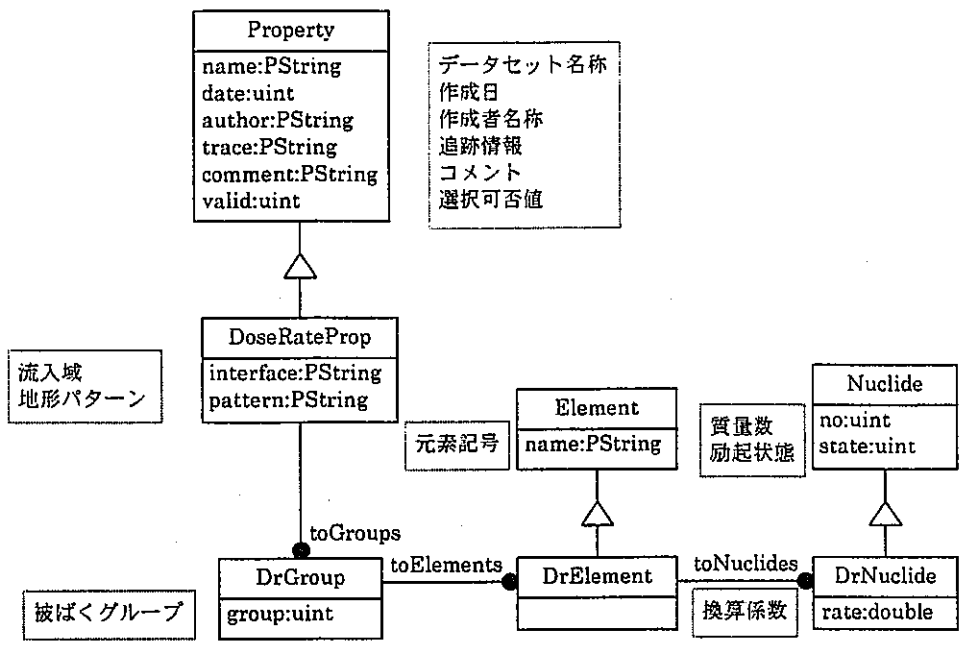


図 3.1.3-1 被ばく線量換算係数データセットのクラス構造

3. 2 新規解析コードの搭載

以下の解析コードを CAPASA に新規に搭載するため、データ構造の分析およびデータベースや各種インタフェースプログラムの構築を行う。

- 人工バリア周辺母岩の亀裂媒体中の放射性核種の移行計算を行う TIGER
- 緩衝材中の空隙水組成の評価を行う地球化学コード PHREEQC

また、人工バリア中の核種移行解析コード MESHNOTE の改良版における新規機能に対応するため、他コード等とのデータ接続を行うインタフェースプログラムの構築を行う。

3. 2. 1 亀裂媒体中核種移行解析コード TIGER の搭載

(1) データ構造の分析

TIGER は、時間依存性を伴って地球化学的に変化する人工バリアおよび周辺母岩の亀裂媒体中の放射性核種の移行計算を行う。入力データは、幾何形状、地球化学や水理条件等のデータを設定する主入力ファイルおよび地球化学条件等を設定する複数の補足的な入力ファイル（補足入力ファイル）から構成される。出力データは、主入力ファイルに設定されたファイルに、亀裂中の濃度やフラックス等の解析結果が出力される。また、入力データ中に設定された解析条件や解析経過が、ログファイルに出力される。

(2) データベースの構築

入出力データは、これまで CAPASA に搭載した他の解析コードと同様に、オブジェクト指向技術におけるクラス構造で管理する。以下に、クラス構造で管理するデータ項目を示す。また、図 3.2.1-1 にクラス構造を示す。

- ① 亀裂、ジャンクション、およびゾーン（人工バリア中のエリア）における核種のフラックス
- ② 亀裂、ジャンクション、およびゾーンにおける核種濃度
- ③ 亀裂およびゾーンにおける地球化学的変化強度（Geochemical Anomaly Strength）
- ④ マトリックス拡散を考慮した場合の亀裂におけるマトリックス中の核種量、亀裂内中の核種量およびマトリックスへの核種フラックス

TIGER のクラス設計に際しては、MESHNOTE 等の他の解析コードのデータ管理用に構築した既存クラスを再利用すること、ならびにデータの検索効率や他の解析コード等との接続計算を考慮する。

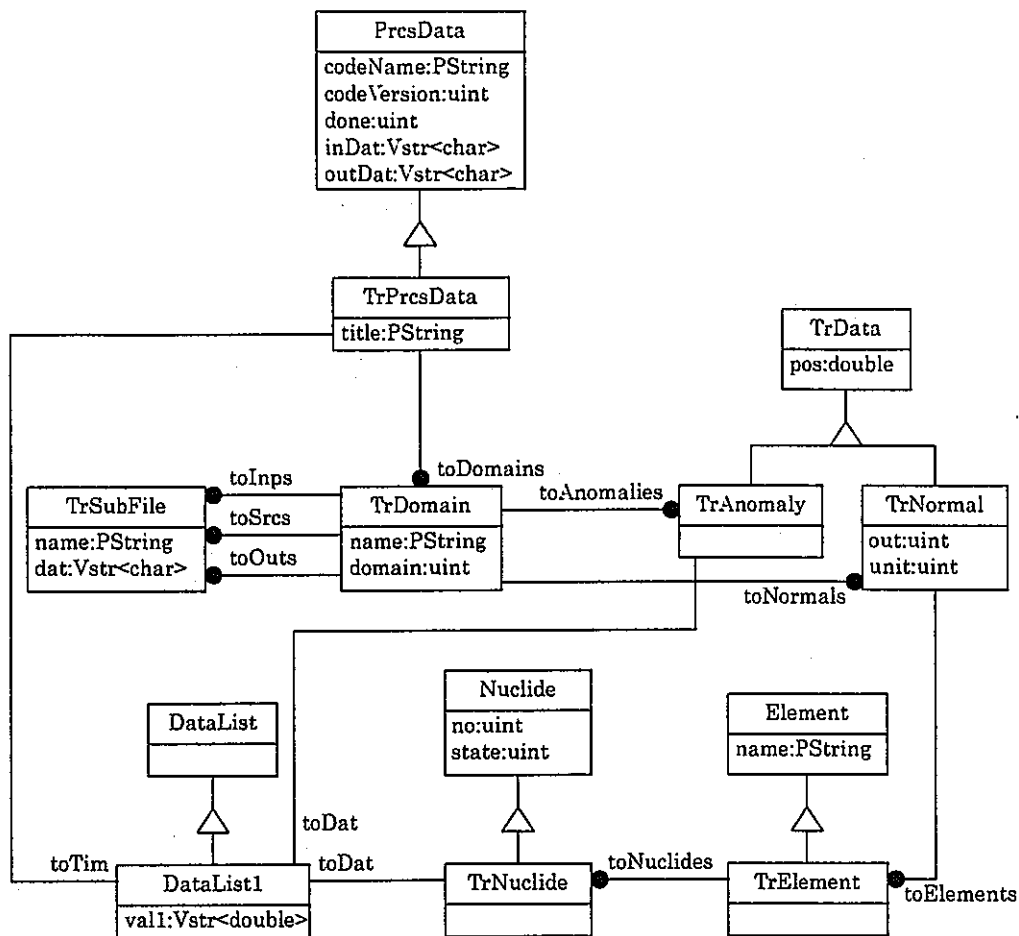


図 3.2.1-1 TIGER のクラス構造

(3) インタフェースプログラムの開発

PLAN 実行に伴い、解析コードの入出力データを、図 3.2.1-1 に示したクラス構造に格納するためのインタフェースプログラムを開発した。本プログラムは、他の解析コードと同様に、解析コード実行前にシステムにより自動的に起動され、入力データのデータベースへの格納等を行うプレ処理プログラムおよび解析コード実行終了後に起動され、出力データのデータベースへの格納等を行うポスト処理プログラムから構成される。

(4) データ転送機能の開発

既に CAPASA に搭載されている解析コードや核種移行解析用データベースとのデータ転送を行うため、データ接続方法の検討を行い、以下のインタフェースプロ

グラムを構築した。

① ORIGEN 2 との接続

ORIGEN2 を用いて解析されたガラス固化体中の核種のインベントリを、TIGER の主入力データ中の INVENTORY ブロックに接続する。

② PHREEQE との接続

PHREEQE を用いて計算された空隙水中の元素の溶解度を、TIGER の主入力データ中の SOLUBILITY ブロックに接続する。

③ MESHNOTE との接続

MESHNOTE を用いて解析された人工バリアからの核種の放出フラックスを、TIGER の主入力データ中の NUCLIDE-SOURCE ブロックに接続する。

④ MATRICS との接続

MATRICES を用いて解析された人工バリア周辺岩体からの核種の放出フラックスを、TIGER の主入力データ中の NUCLIDE-SOURCE ブロックに接続する。

⑤ TIGER との接続

データフロー上流側の TIGER のユーザが指定したエリアの核種のフラックスを、データフロー下流側の TIGER の主入力データ中の NUCLIDE-SOURCE ブロックに接続する。

⑥ 元素情報データセットとの接続

核種移行解析用データベース内の元素情報データセットの核種の半減期を、TIGER の主入力データ中の DECAY ブロックに接続する。

⑦ インベントリデータセットとの接続

核種移行解析用データベース内のインベントリデータセットの核種のインベントリを、TIGER の主入力データ中の INVENTORY ブロックに接続する。

⑧ 溶解度データセットとの接続

核種移行解析用データベース内の溶解度データセットの元素の溶解度を、TIGER の主入力データ中の SOLUBILITY ブロックに接続する。

⑨ 分配係数データセットとの接続

核種移行解析用データベース内の分配係数データセットの元素の分配係数を、TIGER の主入力データ中の SORPTION ブロックに接続する。

⑩ 拡散係数データセットとの接続

核種移行解析用データベース内の拡散係数データセットの元素の拡散係数を、TIGER の主入力データ中の EBS-PHYSICAL ブロック、ROCKTYPE-PHYSICAL ブロックおよび CHANNEL-PHYSICAL ブロックに接続する。

(5) TIGER 関連モジュールの開発

CAPASA への TIGER の新規搭載に伴い、既存の解析コードと同様に、入力データの作成および入出力データの表示等を行う以下のモジュールを開発した。

- ① 入力データ作成モジュール
解析に使用する TIGER コードのバージョンの選択および入力データ（主入力データ、補足入力ファイル）の作成を行う。
- ② 入力データ表示モジュール
既存解析コード用の入力データ表示モジュールと同様に、解析に使用された入力データをテキスト形式で表示する。
- ③ 出力データ表示モジュール
既存解析コード用の出力データ表示モジュールと同様に、出力データおよびログデータ（.dia ファイル）をテキスト形式で表示する。
- ④ トレンド表示モジュール
核種の濃度やフラックスのトレンドをグラフ表示する。
- ⑤ GA トレンド表示モジュール
地球化学的変位の強度をグラフ表示する。
- ⑥ データ編集モジュール
解析結果を、所定の形式でテキスト形式を表示するとともに、ファイルに出力する。

また、上記モジュールに加えて、TIGER に係わる解析コードやテンプレートデータ等のマスターデータの管理を行うため、解析コード管理モジュールおよびテンプレートデータ管理モジュールの改良を実施した。

3. 2. 2 地球化学コード PHREEQC の搭載

(1) データ構造の分析

PHREEQC は、PHREEQE が備える機能に加えて、吸着、イオン交換、物質移行等の機能が加えられており、様々な地球化学計算を行うことが可能である。しかしながら、第 2 次取りまとめの解析作業においては、本コードは、緩衝材中における空隙水組成の計算に利用されていることから、CAPASA への新規搭載に際しては、この計算での利用を前提として行う。

PHREEQC の入力データは、初期溶液の組成、反応条件等を設定する入力ファイルおよび熱力学 DB ファイルから構成される。出力データは、PHREEQC 起動時にユーザにより指定されたファイルに、反応前および反応後の溶液組成や鉱物種の飽和指数等が出力される。

(2) データベースの構築

以下に、PHREEQC に関するクラス構造で管理するデータ項目を示す。また、図 3.2.2-1 に、これらデータを管理するためのクラス構造を示す。

- 反応後の溶液の状態および組成
- 反応後の化学種の濃度および活量
- 反応後の鉱物種の飽和指数

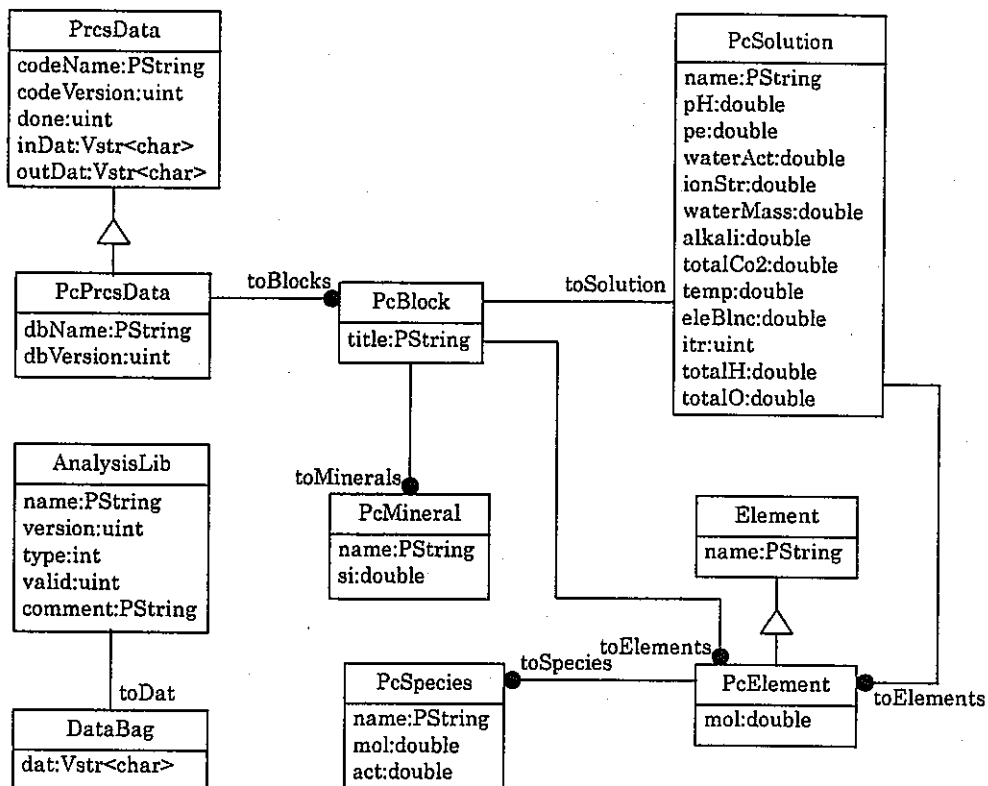


図 3.2.2-1 PHREEQC のクラス構造

(3) インタフェースプログラムの開発

TIGER と同様に、PLAN 実行に伴い、解析コードの入出力データを、図 3.2.2-1 に示したクラス構造に格納するためのプレ処理プログラムおよびポスト処理プログラムを開発した。

(4) PHREEQC 関連モジュールの開発

CAPASA への PHREEQC の搭載に伴い、以下のモジュールを開発した。

- ① 入力データ作成モジュール
解析に使用する PHREEQC コード、熱力学 DB のバージョンの選択および入力データの作成を行う。
- ② 入力データ表示モジュール
既存解析コード用の入力データ表示モジュールと同様に、解析に使用された入力データおよび熱力学 DB をテキスト形式で表示する。
- ③ 出力データ表示モジュール
既存解析コード用の出力データ表示モジュールと同様に、出力データをテキスト形式で表示する。
- ④ 結果表示モジュール
溶液組成や化学種の濃度等を、シミュレーション毎に表形式で表示する。
- ⑤ データ編集モジュール
解析結果を、所定の形式でテキスト形式を表示するとともに、ファイルに出力する。

また、PHREEQC に係わるマスターデータの管理を行うため、解析コード管理モジュール、テンプレートデータ管理モジュールおよび熱力学 DB 管理モジュールの改良を実施した。

3. 2. 3 人工バリア中核種移行解析コード MESHNOTE に関する機能拡張

人工バリア中の核種移行解析を行う MESHNOTE の改良版では、元素の溶解度、吸着係数および拡散係数の空間・時間依存によるパラメータ変化機能があらたに追加された。

CAPASA では、MESHNOTE の改良版における新規機能へ対応するため、共用データ機能において利用されるデータストア等からのデータ転送を行う以下のデータ接続プログラムの改良を実施する。

(1) 溶解度データストアとのデータ接続プログラム

本データ接続プログラムは、核種移行解析用データベース内の溶解度データセットを、MESHNOTE の入力ファイル中のユーザ指定領域（緩衝材内側等）、指定タイムスイッチに接続する。

(2) 分配係数とのデータ接続プログラム

本データ接続プログラムは、核種移行解析用データベース内の分配係数データセ

ットを、MESHNOTE の入力ファイル中のユーザ指定領域、指定タイムスイッチにおける線形吸着係数として接続する。

(3) 拡散係数とのデータ接続プログラム

本データ接続プログラムは、核種移行解析用データベース内の拡散係数データセットを、MESHNOTE の入力ファイル中のユーザ指定領域、指定タイムスイッチに接続する。

(4) PHREEQE とのデータ接続プログラム

本データ接続プログラムは、PHREEQE により計算された緩衝材中の空隙水に対する元素の溶解度を、MESHNOTE の入力ファイル中のユーザ指定領域、指定タイムスイッチに接続する。

4. あとがき

本研究では、平成 8 年度から性能評価で用いる解析コードおよびデータを対象として、これらの品質を保証するための手順と品質に関する情報の管理・運用手法について検討を行い、第二次取りまとめに反映できる品質保証プログラムの構築・整備を進めてきた。また、このプログラムを、第二次取りまとめにおける解析作業の中で、効率的に運用していくため、解析管理システムに反映することにより、品質保証プログラムと併せて、総合的な品質保証システムの開発を進めてきた。

本年度は、昨年度までの成果を踏まえて、品質保証プログラムおよび解析管理システムの充実を図ることにより、第二次取りまとめ報告書における解析結果の信頼性を示すための総合的な品質保証システムを構築した。以下に、本年度の成果の概要を示す。

(1) 品質保証フレームワークに関する検討

(a) 確証計算の実施と知識ベース化

人工バリア中の核種移行解析コード MESHNOTE 3 を対象に、機構殿で実施された室内試験情報や公開データを用いた確証計算/確証計画を行った。確証計算の結果は、昨年度より整備中の検証・確証報告書として新たにまとめた。さらに、本確証を通じて得られた知見を、解析管理システム環境下において解析者が参照したり、警告などを受けられる様にすべく整理した。

(b) 品質保証要領書の改訂

性能評価に従事している解析者や報告書作成者を対象として、品質保証活動に係わる情報を入手し、下記の項目に関する改善策を品質保証要領書（「8. 4 解析報告」）に追記した。

- ドキュメントの保管
- 作成資料内部の数値データ管理

(2) 品質保証システムの構築

(a) 核種移行解析用データベースの拡張

性能評価に使用される以下のパラメータを対象として、データ構造や管理方法の検討を行い、データベースを構築した。

- 人工バリアの幾何形状
- ガラス固化体からのガラス溶解に係わるデータ
- 生物圏における被ばく線量換算係数

また、これらデータを性能評価モデルで利用可能とするため、インタフェースプログラムを構築した。

(3) 品質保証システムの構築

(b)核種移行解析用データベースの拡張

性能評価に使用される以下のパラメータを対象として、データ構造や管理方法の検討を行い、データベースを構築した。

- 人工バリアの幾何形状
- ガラス固化体からのガラス溶解に係わるデータ
- 生物圏における被ばく線量換算係数

また、これらデータを性能評価モデルで利用可能とするため、インタフェースプログラムを構築した。

(c)新規解析コードの搭載

核種移行解析コード TIGER および地球化学コード PHREEQC を CAPASA に搭載するため、データ構造の分析、ならびにデータベースや各種インタフェースプログラムを構築した。また、核種移行解析コード MESHNOTE の改良版に対応するため、他コード等とのデータ接続を行うインタフェースプログラムを構築した。

TABLE OF CONTENTS

1. Introduction	1
2. Study of Quality Assurance Framework	3
2.1 Validation Study and Knowledgebase	3
2.1.1 Introduction	3
2.1.2 Detailed Discussion of the Validation Test Cases and Information	3
2.1.3 Validation Calculation	4
2.1.4 Knowledge base and Systemization	5
2.2 Revised Quality Assurance Manual	5
2.2.1 Explanation of Operational Method of Quality Assurance Manual	6
2.2.2 Extraction for Improved Items of Quality Assurance Manual	6
2.2.3 Revised Quality Assurance Manual	6
3. Development of Quality Assurance Computer System	8
3.1 Improvement of Database for Radionuclide Transport Calculations	8
3.1.1 Management of Dataset for Geometry of the Engineered Barrier	8
3.1.2 Management of Dataset for Glass Dissolution	9
3.1.3 Management of Dataset for Dose Rate Conversion Factor	10
3.2 Incorporation of Analysis Codes	12
3.2.1 Incorporation of TIGER	12
3.2.2 Incorporation of PHREEQC	15
3.2.3 Improvement of Functions for MESHNOTE	17
4. Summary	18

LIST OF FIGURES

Fig 3.1.1-1 Class structure of Engineered barrier geometry dataset	9
Fig 3.1.2-1 Class structure of glass dissolution dataset	10
Fig 3.1.3-1 Class structure of dose rate conversion factor dataset	11
Fig 3.2.1-1 Class structure of TIGER	13
Fig 3.2.2-1 Class structure of PHREEQC	16

1. Introduction

One of purposes in the performance assessment of the geological disposal system in the second progress report is to quantitatively evaluate the performance in the near field. For the purpose, validation of performance assessment models in the near field and the quality assurance of data used in the performance assessment are important subjects.

To archive the subjects, it is necessary to select phenomena in the near field and to clear the behavior of the phenomena through experiments and so on. In addition, it is necessary to analyze the phenomena quantitatively by acquiring data, modeling the phenomena, and developing analysis codes based on the acquired data and modeling.

In the view point of reliability and quality assurance of calculation results, it is important to assure the reliability of process related to operation of analysis codes and data acquisition in addition to the quality assurance of data, models and analysis codes. In addition, to assure the reliability of the results by integrating the quality of the process is also important matter.

In this study, in order to assure the reliability of results of the performance assessment in the geological disposal system, methods for managing and operating information related to procedures and qualities to assure the quality of analysis codes and data used in the performance assessment have been studied since FY96. And quality assurance programs, which can reflect into work for the second progress, report, has been created and maintained. In addition, to use the program efficiently in the performance assessment work, an integrated quality assurance system has been developed by reflecting the program into the analysis management system CAPASA being used in the work for the second progress report.

In this fiscal year, based on previous results, the following studies have been carried out in order to improve the computer environment for controlling quality information related to the performance assessment and to develop the integrated quality assurance system which can give the reliability of calculation results in the second progress report.

- (1) Concerning the newest version of MESHNOTE, which calculates radionuclide transport in the engineered barrier, calculations for validation and survey of information for the knowledge base and the knowledge base system shall be studied.
- (2) Applicability of the quality assurance program created in FY98 shall be confirmed by practically using in analysis work for the second progress report. And according to the practical use, the quality assurance program is improved in the viewpoint of generalization.

- (3) Concerning parameters used in radionuclide transport calculations such as geometry of the engineered barrier, data structure and the method of data management shall be studied. And based on the study, improvement of the database for radionuclide transport calculations shall be performed.
- (4) Concerning TIGER that calculates radionuclide transport in the fissure media and geochemical code PHREEQC, data structure and data interfaces to another analysis codes shall be studied. And based on the study, these analysis codes shall be incorporated into the CAPASA.

2. Study of Quality Assurance Framework

2.1 Validation study and knowledgebase

2.1.1 Introduction

We have conducted some validation calculations for MESHNOTE3 that simulates radionuclide transport in the engineered barrier. MESHNOTE3 is the post-released version of MESHNOTE2. It can make it possible to specify various diffusion coefficients for each radioactive element. We have summarized the validation information for MESHNOTE3 such as actually measured data from laboratory experiment and natural analogue studies. And we have used the CAPASA system as the calculation platform for MESHNOTE3 validation. The validation result is summarized as the Verification and Validation Report continued to compile from last year. The Validation results have been recorded on CAPASA database. So we can check on visually the difference between this validation results and other calculation result.

2.1.2 Detailed discussion of the validation test cases and information

(1) INTRAVAL

We had put up the test case 1a from INTRAVAL Phase 1 and the MOL study from Phase 2 as validation case studies for MESHNOTE3. This year, we have continued the additional literature survey associated with these test cases. As result, we have obtained the second draft report (P.J.Bourke.etc, 1989) and final published report (P.J.Bourke.etc, 1990) on test case 1a of Phase 1. Detailed experimental information and measured raw data of test case 1a were described in these reports. JNC INTRAVAL project team was participant to this test case 1a (H.Umeki et al, 1991). Based on the second draft report mentioned above, JNC project team turn in validation results obtained through analytical technique of 1 dimensional advection-diffusion model to the INTRAVAL Executive Office.

Through this literature review, we can set up the concrete validation test case for MESHNOTE3. However, this test case is intended to validate only the diffusion model of MESHNOTE3. So it is impossible to validate other various models realizing by MESHNOTE3 such as the participation, resolution and glass dissolution model. And we can consider that a diffusion model based upon Fickian law has already validated and applicability to actual phenomena was accepted from the standpoints of the scientific basis.

(2) Laboratory Experiment

We have surveyed the following laboratory experiments information that had already conducted by JNC.

- Measurement of Apparent Diffusion Coefficient of ^{99}Tc in Compacted Bentonite
- Migration Behavior of Pu Released from Pu-doped Glass in Compacted Bentonite.
- Migration Behavior of Cesium Released from Fully Radioactive Waste Glass in Compacted Sodium Bentonite.

(3) Natural Analogue

In order to validate the radionuclide decay and multi-decay chain model, participation/dissolution model of MESHNOTE3, we have surveyed about mainly Oklo natural reactor (West Africa, Gabon). Oklo natural reactor is made up of several reactor zones (RZ) numbered RZ1~16. RZ1~9 are located at almost near the ground surface and RZ10~14 and 16 are located several hundred meters below from the ground surface. These RZ10~14 and 16 has been researched since 1981 and expected that there sre many knowledge for radionuclide transport (Hidaka,1994).

(4) Summary of validation information and difinition of test case

Based on the result of literature survey mentioned above, we have selected the test case for validation calculation of MEHSNOTE3. As for INTRAVAL test case 1a, we did not select as the validation case because it is useful to validate for only diffusion model.

The laboratory experiments conducted by JNC are useful for not only the validation of diffusion model but also the validation of the other transport process such as spatial different of diffusion coefficient in buffer material and glass dissolution-diffuison coupling model. So we have selected MESHNOTE3 validation test cases from these experiment test cases.

Finally, we consider that it is difficult to use the literature information associated with Oklo natural reactor aimed to validate the decay cahin, precipitation and disolution model of MESHNOTE3. So we did not select these information as validation test case.

2.1.3 Validation Caluclation

We have conducted some validation studies using existing data form two laboratory experiments as bellow.

- Measurement of Apparent Diffusion Coefficient of ⁹⁹Tc in Compacted Bentonite
- Migration Behavior of Cs-137 Released from Fully Radioactive Waste Glass in Compacted Sodium Bentonite.

These case studies are based on the existing data from laboratory experiments and one of the example case applied the validation procedures described in the quality assurance manual to the actual performance assessment model. Unfortunately, the conceptual models of MESHNOTE3 and experimental system are not identical completely, so we had to establish the various assumptions on the modelling of experimental systems. Therefore, we can not consider through this work that the radionuclide transport model through the compacted bentonite using in MESHNOTE3 is completely validated. However, from the viewpoint carrying on the interactive verification and validation for the model confidence building in the development phase, we have got some helpful knowledge for the future work of validation study. Validation studies in this work are useful examples to recognize what we have to do using limited information such as existing experimental data.

2.1.4 Knowledge base and Systemization

We have summarized some knowledge obtained from validation studies mentioned above and discussed about the strategy for systemization as the knowledge base that is able to refer in future analysis work for the simultaneous system. As for validation knowledge, we have especially summarized the following item on modelling of the laboratory experiment systems.

- Simulation of the diffusion process in one dimensional rectangular cartesian coordinates system using MESHNOTE3.
- Treatment of outside boundary condition for the closed system such as laboratory experiment system.

Based on this information, we have discussed the systemization items that should directly process or only refer on the CAPASA system. It is possible to extract these modelling methods to the CAPASA system as the user helpful information when we have to construct the model for simultaneous system in the future work. But these usage of MESHNOTE3 are above of the intend original use and uncommon case. So we consider that it is not good strategy to systemize rigidly these knowledge on the CAPASA system. Therefore the detailed information mentioned above were only summarized on the document such as the verification and validation report.

2.2 Revised quality assurance manual

2.2.1 Explanation of operational method of quality assurance manual

We have explained on operational method of quality assurance manual to JNC staff in this year. In order to enhance usability of quality assurance manual, We have registered and installed quality assurance manual in the " Technical information management system for the second progress report (we called WBS management system) " which is developed by JNC in FY 1997. It is possible to read information of quality assurance manual (main document and abstract), and to read/modify WBS which is prepared by JNC, under PC with WWW in the head quarters, Tokyo office, Tokai works and Tono Geoscience Center.

2.2.2 Extraction for improve items of quality assurance manual

We have integrated and arranged improve items on status of quality assurance activity from information of JNC staff. Analyst and team leader has a role of preparation for the second progress report and the second progress sub-report. And they have carried out analysis and preparation documents, using quality assurance manual for several months in this year. Integrated informations are as follows;

- 1)Relation to information of Excel fail which is used for scientific figure and information of figure in word processor under PC environment.
- 2)Management for storage of analysis documents by using word processor.

2.2.3 Revised quality assurance manual

We recommend that "total evaluation system for geological isolation research " which is developing by JNC, has a function of semi-automatic management for documentation of analysis and numerical reduced data in document's figure. We will expect follows item, when JNC will adapt this management system for work of PA analysis and design analysis.

- (1)Documents will be stored in this system
- (2)It is possible to assure on relation to document's figure and reduced data, which is transferred from calculation data.
- (3)It is possible to obtain concurrent information on the information of geological isolation research, when JNC staff will use this system.
- (4)It is possible to apply soon (This system will install on April or May in this year.).

We have added a postscript document management and numerical management

in document to "8.4 Analysis report" which is including quality assurance manual.

3. Development of Quality Assurance Computer System

3.1 Improvement of Database for Radionuclide Transport Calculations

In the last year, concerning parameters such as diffusion co-efficients used in the radionuclide transport codes, data items and auxiliary information that shall be controlled by databases was studied. In addition, based on the study, a database controlling the dataset was developed and the CAPASA was improved to use the dataset.

In this year, concerning the following parameters, method of data management has been studied and the database for radionuclide transport calculations has been improved.

- geometry of the engineered barrier
- data related to glass dissolution from the vitrified waste
- dose rate conversion factors in the biosphere

3.1.1 Management of Dataset for Geometry of the Engineered Barrier

The data structure of the geometry of the engineered barrier has been studied in consideration of the use in the MESHNOTE. The geometry of the engineered barrier is defined in PHYSICAL block of an input data. In accordance with the format of the PHYSICAL block, data items controlled by the database are as follows.

- the height of the vitrified waste
- the inner and outer radius of the buffer
- the volume of the reservoir and mixing cell
- the porosity of the buffer and mixing cell

In addition, the following items shall be controlled by the database to keep traceability in the viewpoint of the quality assurance.

- name the name of the dataset
- date the date when the dataset was created
- creator the name of the person who creates the dataset
- traceability info. the identifier of the document described information about traceability
- comment comment describing the prerequisite of the data use

Fig 3.1.1-1 shows the class structure of the engineered barrier geometry dataset managing the above data. The engineered barrier geometry dataset can be connected to the PHYSICAL block of the MESHNOTE input by the common data function of the CAPASA.

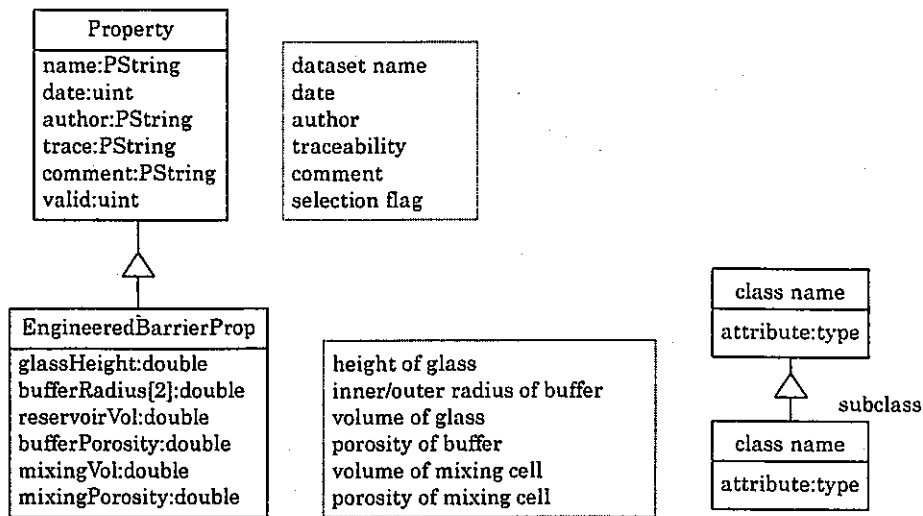


Fig 3.1.1-1 Class structure of Engineered barrier geometry dataset

3.1.2 Management of Dataset for Glass Dissolution

The structure of dataset for glass dissolution from a vitrified waste has been studied in consideration of the use in MESHNOTE version2 and version 3. Data items stored in the database are as follows.

- the volume, surface area and density of the glass
- the initial and rest glass dissolution velocity
- the dimension
- sorption coefficients of Si in the buffer and the mixing cell
- the solubility of Si
- the initial inventory of Si

In addition, the name of the dataset, the date when the dataset was created and so on shall be controlled by the database in the viewpoint of the quality assurance. Fig 3.1.2-1 shows the class structure of the glass dissolution dataset that can control the above data.

The glass dissolution dataset can be connected to the GLASS block of the MESHNOTE input by data interface programs in a similar way of the engineered barrier geometry dataset.

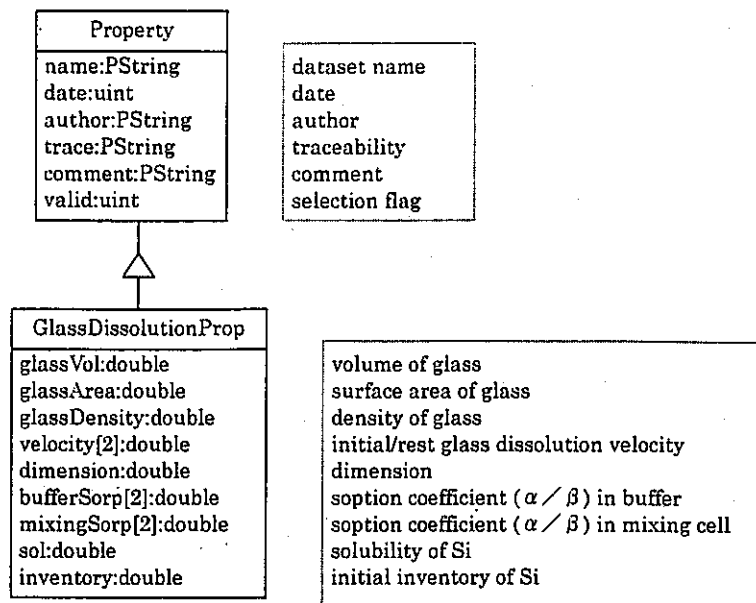


Fig 3.1.2-1 Class structure of glass dissolution dataset

3.1.3 Management of Dataset for Dose Rate Conversion Factor

Dataset for dose rate conversion factors are managed by controlling dose rate conversion factors according to the geological conditions and the landform patterns in consideration to the way of biosphere analysis in the second progress report. Data items stored in the database are as follows.

- in-flow areas (surface water in a river and so on)
- landform patterns (mountain and so on)
- groups (agricultural worker and so on)
- conversion factors

Concerning this dataset, the name of the dataset, the date when the dataset was created and so on shall be controlled same as the other dataset. Fig 3.1.3-3 shows the class structure of the dose rate conversion factor dataset.

Performance assessor can evaluate dose rates of the each group and all of the groups by the data interface program, the biosphere object, and the radionuclide transport analysis code object with respect to the evaluation of contaminants in the biosphere by using this dataset.

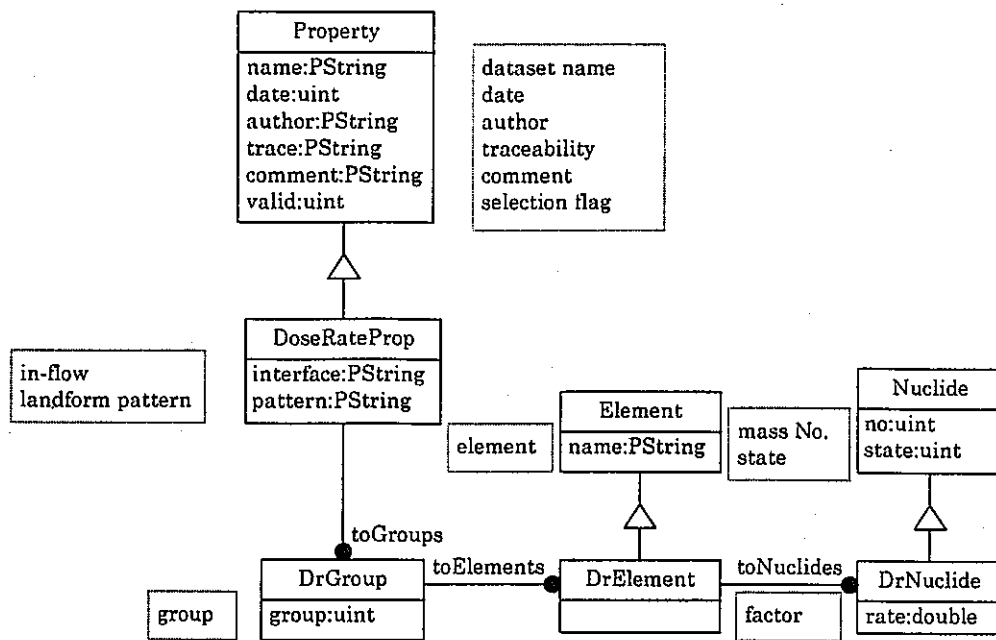


Fig 3.1.3-1 Class structure of dose rate conversion factor dataset

3.2 Incorporation of Analysis Codes

In order to incorporate the following analysis codes into the CAPASA, survey of data structure and development of databases and interfaces programs have been carried out.

- TIGER, which calculates radionuclide transport in fissures of host rocks around the engineered barrier
- geochemical code PHREEQC, which calculates the composition of pore water in the buffer

In addition, for new functions of the advance version of MESHNOTE that calculates radionuclide transport in the engineered barrier, interface programs for data connection to another code have been developed.

3.2.1 Incorporation of TIGER

(1) Survey of data structure

TIGER calculates radionuclide transport in the fissure media of the host rock and the engineered barrier with geochemical anomaly. Input data consists of a primary input file, which defines geometry, and geochemical and hydraulic conditions, and auxiliary input files, which defines geochemical conditions. Output data describes concentrations and fluxes in fissures. Also, analysis conditions and logs of execution are written into a log file.

(2) Development of database

Input data and output data are controlled by the class structure in object oriented technology similar to other analysis codes which were incorporated into the CAPASA. Data items controlled in the form of the class structure are as follows. And Fig 3.2.1-1 shows the class structure.

- flux of radionuclides in fissures, junctions and zones (areas in the engineered barrier)
- concentration of radionuclides in fissures, junctions and zones
- geochemical anomaly strength in fissures and zones
- mass in matrixes, mass in fissures and flux to matrixes when taking place of matrix diffusion

The followings are considered when classes of the TIGER are designed.

- reuse the existing classes for controlling data of other analysis codes like MESHNOTE
- data accessibility and coupling analysis to other analysis codes

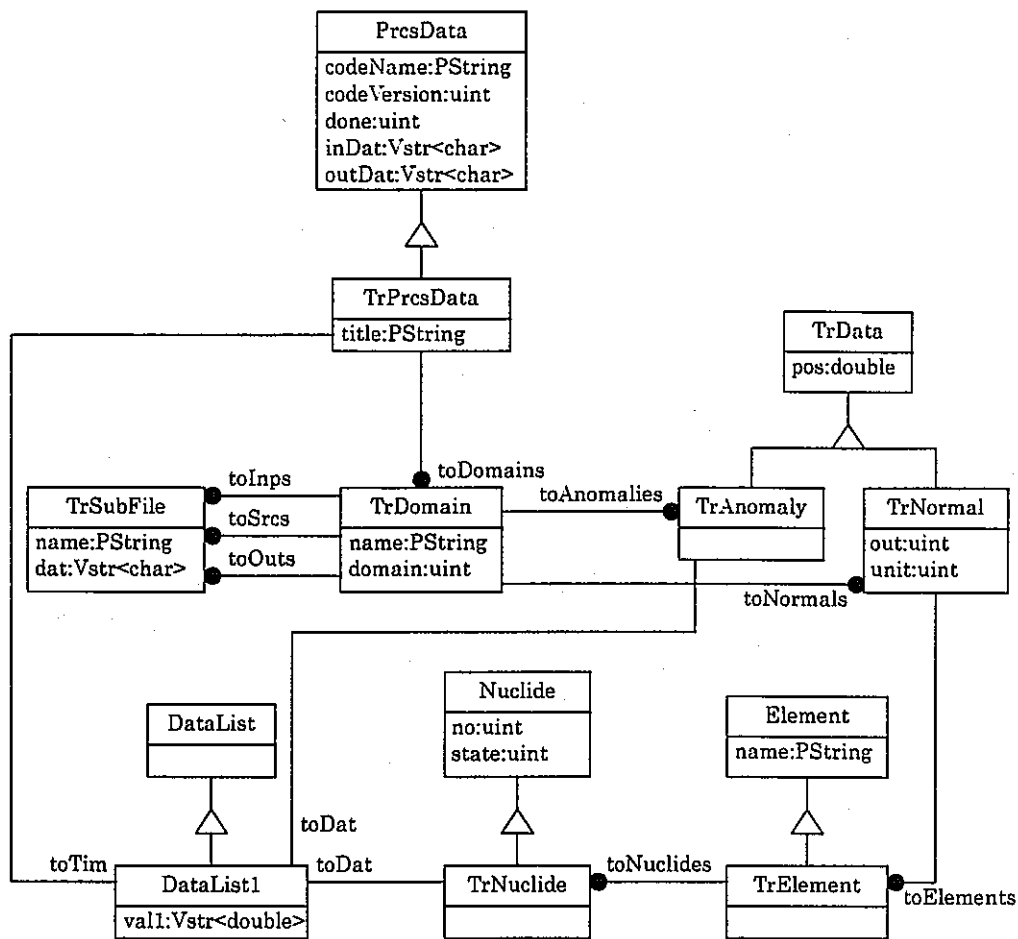


Fig 3.2.1-1 Class structure of TIGER

(3) Development of interface programs

Interface programs have been developed which stores input and output into the class structure described in Fig 3.2.1-1. The programs consist of a pre-processing program, which is invoked before execution of a analysis code and stores input into the database, and a post-processing program, which is invoked after execution of the analysis code and stores output into the database.

(4) Development of data interface function

For data connection to analysis codes and the database for nuclide transport calculations, method of the data connection has been studied and the following

interface programs have been created.

① data connection to ORIGEN2

This program can connect inventories of radionuclides in a vitrified waste calculated by ORIGEN2 to INVENTORY block of the TIGER primary input.

② data connection to PHREEQE

This program can connect solubilities of elements in the pore water calculated by PHREEQE to SOLUBILITY block of the TIGER primary input.

③ data connection to MESHNOTE

This program can connect fluxes of radionuclides from an engineered barrier calculated by MESHNOTE to NUCLIDE-SOURCE block of the TIGER primary input.

④ data connection to MATRICS

This program can connect fluxes of radionuclides from a host rock around the engineered barrier calculated by MATRICS to NUCLIDE-SOURCE block of the TIGER primary input.

⑤ data connection to TIGER

This program can connect fluxes of radionuclides from an area specified by the user calculated by TIGER to NUCLIDE-SOURCE block of the TIGER primary input.

⑥ data connection to Element dataset

This program can connect half-lives of radionuclides in the Element dataset to DECAY block of the TIGER primary input.

⑦ data connection to Inventory dataset

This program can connect inventories of radionuclides in the Inventory dataset to INVENTORY block of the TIGER primary input.

⑧ data connection to Solubility dataset

This program can connect solubilities of elements in the Solubility dataset to SOLUBILITY block of the TIGER primary input.

⑨ data connection to Distribution coefficient dataset

This program can connect distribution coefficients of elements in the Distribution dataset to SORPTION block of the TIGER primary input.

⑩ data connection to Diffusion coefficient dataset

This program can connect diffusion coefficients of elements in the Diffusion dataset to EBS-PHYSICAL block, ROCKTYPE-PHYSICAL block and CHANNEL-PHYSICAL block of the TIGER primary input.

(5) Development of modules for TIGER

The following modules have been developed similar to other analysis codes incorporated into the CAPASA.

- ① Input creation module
- ② Input view module
- ③ Output view module
- ④ Trend module
- ⑤ GA trend module
- ⑥ Data edit module

In addition, Analysis code management module and Template data management module have been improved in order to control analysis codes and template data relating to the TIGER.

3.2.2 Incorporation of PHREEQC

(1) Survey of data structure

PHREEQC can perform a wide variety of geochemical calculations such as sorption, ion-association and transport in addition to the calculations that PHREEQE can perform. But, the PHREEQC is being used for calculating the composition of pore water in the buffer. Therefore, as incorporating the PHREEQC into the CAPASA, the use of such a calculation is considered.

Input of PHREEQC consists of an input file describing the composition of the initial solution, reaction conditions and so on, and a thermodynamic database file. Output is specified by users prior to invocation of PHREEQC and describes the composition of the solution and saturation indices of minerals before and after reaction.

(2) Development of database

Data items controlled in the form of the class structure are as follows. And Fig 3.2.2-1 shows the class structure.

- condition and composition of the solution after reaction
- concentration and activity of the species after reaction
- saturation index of the minerals after reaction

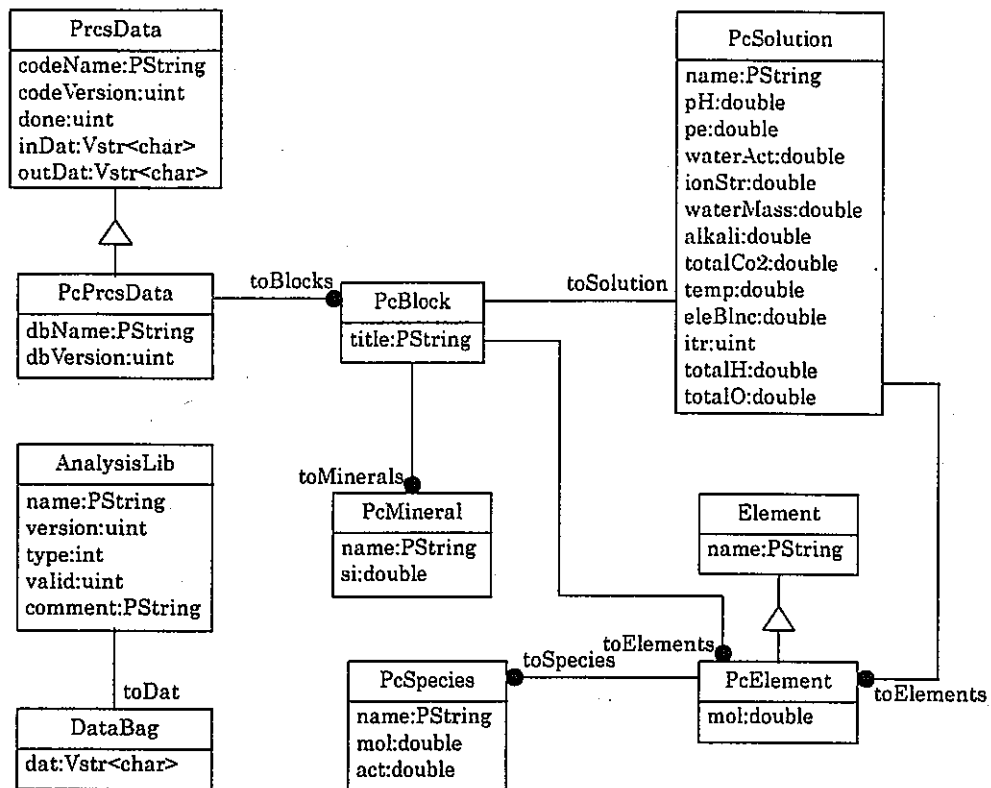


Fig 3.2.2-1 Class structure of PHREEQC

(3) Development of interface programs

A pre-processing program and a post-processing program which store input and output into the class structure described in Fig 3.2.2-1 have been developed similar to the TIGER.

(4) Development of modules for TIGER

The following modules have been developed similar to other analysis codes incorporated into the CAPASA.

- ① Input creation module
- ② Input view module
- ③ Output view module
- ④ Result view module
- ⑤ Data edit module

In addition, Analysis code management module, Template data management module and Thermodynamic DB module have been improved in order to control master data relating to the PHREEQC.

3.2.3 Improvement of Functions for MESHNOTE

The advance version of MESHNOTE, which calculate radionuclide transport in the engineered barrier, has been developed to manage the time-dependence and the space-dependence of the solubility, sorption coefficient and diffusion coefficient. Therefore, interface programs, which are used in the common data function, have been improved for the new functions of the new MESHNOTE.

① Interface program for Solubility datastore

This program can connect solubility datasets in the database for radionuclide transport calculations to the area and time switch of MESHNOTE input specified by users.

② Interface program for Distribution datastore

This program can connect distribution coefficient datasets in the database for radionuclide transport calculations to the area and time switch of MESHNOTE input specified by users as linear sorption coefficients.

③ Interface program for Diffusion datastore

This program can connect diffusion coefficient datasets in the database for radionuclide transport calculations to the area and time switch of MESHNOTE input specified by users.

④ Interface program for PHREEQE

This program can connect solubilities of elements in the pore water calculated by PHREEQE to the area and time switch of MESHNOTE input specified by users.

4. Summary

In this study, methods of management and operation of information relating to the quality and procedures to assure the quality of analysis codes and data used in the performance assessment have been studied since FY96. Also, the quality assurance program that can be reflected to the second progress report has been created and maintained. In addition, to use the program efficiently in the performance assessment work of the second progress report, an integrated quality assurance system has been developed by reflecting the program into the analysis management system CAPASA.

In this fiscal year, based on the previous results, the integrated quality assurance system, which can give the reliability of calculation results in the second progress report, has been created by improving the quality assurance program and the analysis management system. Results in this fiscal year are as follows.

(1) Study of Quality Assurance Framework

(a) Validation study and knowledge base

Based on the laboratory experiments conducted by JNC and some public data, we have performed some validation calculations and planning for MESHNOTE3 that simulates radionuclide transport in the engineered barrier. The validation result is summarized as the Verification and Validation Report continued to compile from last year. The Validation results have been recorded on CAPASA database. So we can refer visually the difference between this validation results and other calculation result. And also we can get some warning messages from the CAPASA.

(b) Revised quality assurance manual

We have gathered information associated with quality assurance activities from JNC performance analysts. And also several revision items as following were added to the quality assurance manual (See "8.4 Analysis report")

- document management
- numerical management in document

(2) Development of Quality Assurance Computer System

(a) Improvement of database for radionuclide transport calculations

The data structure and data management methods of the following parameters used in the performance assessment have been studied and databases have been created.

- geometry of the engineered barrier
- data relating to glass dissolution from the vitrified waste

- dose rate conversion factors in the biosphere

In addition, interface programs that can allow to use these data in performance assessment models have been developed.

(b) Incorporation of analysis codes

In order to incorporate radionuclide transport code TIGER and geochemical code PHREEQC into the CAPASA, the survey of data structure and the development of databases and interface programs have been carried out. In addition, interface programs for data connection to other codes have been created for the advanced version of MESHNOTE.