

JNC TJ1420 98-032

深地層の研究における地質環境モデルの構築の
ための数学・統計学的手法に関する調査

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)

1998年12月

三菱商事株式会社

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。

〒319-1194 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

Inquires about copyright and reproduction should be addressed to :

Technical Cooperation Section,

Technology Management Division,

4-49 Muramatsu, Naka-gun, Ibaraki 319-1194, JAPAN

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

1998

深地層の研究における地質環境モデルの構築の
ための数学・統計学的手法に関する調査

吉添 誠* 高瀬博康**

要旨

深地層の研究施設における研究計画で実施される深地層の地質環境モデルの構築のための数学・統計学的手法に関する調査を行った。

具体的には以下の2つの項目を中心に記述している。

(1) 定量的地質環境モデルの構築

(2) 地質環境モデルの構築のために必要な情報及びデータ取得戦略

「(1) 定量的地質環境モデルの構築」では、先ず、各地質環境特性に対応する時間/空間スケールと解像度をまとめた上で、地質環境モデルを構成するサブモデルの区分を行った。次に各サブモデルの位置づけ、目的及び内容(概要)を規定した上で、それぞれの課題を抽出するとともにそれらを継続的に更新していくことを軸とした研究展開方法を示した。この際、各サブモデルの中で使用されるさらに下位のモデルの種類とそれらを構築する手段として必要となる数学的手法や統計学的手法について調査を実施し、その例示を行った。さらに、サブモデルを統合する流れと各々に属する課題の相関設定を実施した。

次に「(2) 地質環境モデルの構築のために必要な情報及びデータ取得戦略」においては、(1)に必要となる各分野において必要な情報項目、その取得方法についてのまとめを行うとともに、実際の調査手法の事例を調査し、情報取得の際のそれに含まれる不確実性の低減方法や最適化等の例示を行った。

本報告書は、三菱商事(株)が核燃料サイクル開発機構の委託により実施した業務に関するものである。

機構担当部課室：立地推進部

* 三菱商事株式会社 石炭・原子燃料事業部

** QuantiSci Ltd.

Survey on mathematical and statistical approaches for modeling of
deep geological environment

Makoto Yoshizoe* and Hiroyasu Takase**

Abstract

Literature survey on mathematical and statistical approaches for modeling of deep geological environment was conducted, focusing on;

- (1) development of quantitative models for deep geological environment,
- (2) strategy in obtaining data and information required for geological modeling.

With regard to (1), time and spatial scale associated with each property of geological environment are identified first together with the required level of (spatial) resolution. Then, corresponding sub-models are defined. Furthermore, a strategy is formulated, which encourages to develop a set of sub-models and to continue revising them as the investigation progresses. Objectives and scope of the sub-models are also clarified at this stage. For each sub-model, key mathematical and/or statistical techniques are explained with examples, and issues for further R&D are enlisted.

As for (2), data and information required for the strategy described above are identified. Moreover, methodology to acquire them is summarized together with examples of application, in particular, to optimizing geological investigations to minimize uncertainty.

This work was performed by Mitsubishi Corporation under contract with Japan Nuclear Cycle Development Institute.

JNC Liaison: Site Planning Division

* Coal & Nuclear Fuel Dept., Mitsubishi Corporation

** QuantiSci Ltd.

深地層の研究における地質環境モデルの構築のための
数学・統計学的手法に関する調査

目次

はじめに

第1章 定量的地質環境モデルの構築	1
1.1 地質環境モデルの継続的な更新を軸としたアプローチのねらい	1
1.2 地質環境モデル構築の方法論	3
1.2.1 対象とする地質環境特性	3
(1) 性能評価研究に関連する地質環境特性	3
(2) 処分施設の設計／施工技術等の研究開発に関連する地質環境特性	4
1.2.2 地質環境モデル構築の方針	4
(1) 時間／空間スケールと解像度	4
(2) 地質環境モデル構築の手段	6
(3) 段階的な構築の手順	7
(4) 複数の地質環境モデルの相互比較	9
1.3 地質環境モデル構築に関する課題	9
1.3.1 地質環境モデルの区分	9
1.3.2 地質構造モデル	10
(1) 目的及び概要	10
(2) 三次元地質環境モデリングソフトウェアによる地質構造モデリング について	11
(3) 課題	12
1.3.3 岩体特性モデル	16
(1) 目的及び概要	16
(2) 自己相関構造モデルを用いた当該特性値空間分布の統計的推定 について	17
(3) 堆積及び consolidation 過程の応力／水理／化学強連成モデル	19
(4) 課題	21
1.3.4 地下水水理モデル	23
(1) 目的及び概要	23
(2) 塩水に起因した密度勾配に影響された地下水流動解析手法について	24
(3) 課題	27
1.3.5 地下水化学モデル	27

(1) 目的及び概要	27
(2) 主成分分析による地下水化学の記述的モデリングについて	28
(3) 反応性溶質移動モデルについて	30
(4) 課題	34
1.3.6 掘削影響モデル	34
(1) 目的及び概要	34
(2) 多成分の非定常流動解析について	35
(3) 掘削に伴う擾乱についての加速試験の必要性について	36
(4) 課題	39
1.3.7 トレース物質移行モデル	39
(1) 目的及び概要	39
(2) 課題	40
1.4 まとめ及び地質環境モデルに関する情報全体の体系的管理	40
付録 1 (1-1 ~ 1-22)	44
第 2 章 地質環境モデル構築のために必要な情報及びデータ取得戦略	66
2.1 地質環境モデル構築のために必要な情報	66
2.1.1 取得すべきデータの種類	66
2.1.2 空間的不均質性と不確実性、そして地質環境調査の終点	69
2.2 データ取得戦略	74
2.2.1 空間分布推定に含まれる不確実性の定量的評価	74
(1) 目的	74
(2) 空間分布推定の差異を計る metric について	74
(3) 地質統計的 Boot strapping について	75
(4) 課題	76
2.2.2 測定地点空間配置の最適化	78
(1) 目的	78
(2) Log spiral について	78
(3) 課題	81
2.2.3 多属性データセットによる同時コンディショニング	81
(1) 目的	81
(2) Genetic algorithm を用いた最適化手法について	81
(3) 課題	82
2.3 予察解析による試験設計の最適化	83
付録 2 (2-1 ~ 2-5)	84

おわりに

参考文献

用語集

表目次

表 1.1	対象とする地質環境特性	4
表 1.2	各地質環境特性に対応する時間／空間スケールと解像度	5
表 1.3	現在の地質環境特性を「知る」ための手段とその特徴	7
表 1.4	地質環境モデルの区分	10
表 2.1	地質環境モデル構築のために必要な情報及び関連するデータの種類	67
表 2.2	堆積岩内の空間的不均質性の種類、起源及び対応する観察あるいは測定方法のまとめ	70
表 2.3	試錐孔データに対して地質統計的 boot strapping を行った例	77

図目次

図 1.1	EarthVision によって作成した地質構造モデルの例 1	13
図 1.2	EarthVision によって作成した地質構造モデルの例 2	14
図 1.3	EarthVision によって作成した英国 Sellafield サイトの 地下研究施設 (Rock Characterisation Facility) のモデル	15
図 1.4	prototype MACRO-AFFINITY-3D により作成した三次元 統計学的自己アファインフラクタルモデルの例	20
図 1.5	Dewers-Ortoleva モデルによる砂岩の化学的 compaction	22
図 1.6	Dewers-Ortoleva モデルによる砂岩 stylolitization の シミュレーション結果の例	22
図 1.7	Sharpfront モデルによる塩淡境界位置の解析結果と実測値 との比較例	25
図 1.8	二次元の単純な矩形領域における均一透水係数場中の Multi-Gridding 法による密度流解析結果の例	26
図 1.9	スウェーデン Aspö サイトの地下水化学データの主成分分析結果	29
図 1.10	石灰岩の溶解フロントにおける粘性指状体形成に関する Multi-gridding による強連成解析の例	32
図 1.11	Generalised Travelling Coordinate による autocatalytic system の解析例	33
図 1.12	ARASE による解析結果例	37
図 1.13	スウェーデン Stripa サイトにおける原位置熱的影響試験において Foca 粘土の変質の結果生じたと考えられる Clay stone の観察例	38
図 1.14	地質環境モデル構築の例	42
図 1.15	地質環境モデル構築に関する課題間の相関	43
図 2.1	データ点数と空間分布推定結果の不確実性との関係	71
図 2.2	性能評価上求められるデータ点数の導出	72
図 2.3	Log spiral に従う試錐孔配置の例	79
図 2.4	ブラインドサンプリングの結果並びに他の試錐孔配置 (定形格子, 及びランダム) との比較	80

はじめに

深地層の研究施設は、わが国における深地層の学術的研究に寄与できる開かれた研究の場として整備され、広く内外から研究者の参画を得て総合的に研究が進められていくとともに、地層処分研究開発の基盤としても活用される。このような施設は国内で初めてのものであり、世界的にもその数は少ない。したがって、真に国際的、先進的な試験研究の場として位置づけていくには、その技術的な計画の策定の際に、世界の深地層に関する研究開発の動向をみつつ、技術的課題の解決に向けた最先端の手法を取り込むなどの視点が必要である。

本報告は、堆積岩を対象とした深地層の研究施設における研究計画で実施される深地層の地質環境モデルの構築のために、地質構造、水理、地球化学といった各情報を有機的に結びつけるための試験研究の展開方法と、それに必要な要素技術としての最先端の数学・統計学的な手法について、諸外国における原位置試験や地下研究施設計画の先行事例などをもとに調査し、とりまとめを行ったものである。

第1章 定量的地質環境モデルの構築

1.1 地質環境モデルの継続的な更新を軸としたアプローチのねらい

深地層の研究施設における研究開発プログラムは、多種多様な学問あるいは産業分野からの参加と協力なしには考えられない典型的な multi-disciplinary なプロジェクトである。そして、多くの場合、研究対象となる地質環境や自然現象は、これらの学問あるいは技術の平面における「境界」を反映して縦割りに分断されることが普通である。また、モデル化の対象となる空間的な領域が広範囲に及ぶことから、調査あるいは解析の都合によって複数の部分領域に分割されることが多い。これらの事項は、全体の試験計画が、実際には、空間的にもあるいは必要な学問・技術の点でも部分的なグループに細分化されて実施されていくことにつながる。

他方、時間スケールに目を転ずれば、地表からアプローチする調査研究段階から地下施設建設時の調査研究、そして地下施設における調査研究という一連の手順全体としての研究開発プログラムは数十年という長きにわたるものとなる。また、地質構造、水理、地球化学、物質移動といった各研究領域の成果が、統一的な知識の体系として問われる様な研究開発上のイベント（例えば非放射性元素のトレーサ試験の実施）までも既に 10・20 年を要することが普通である。この間、細分化された各研究・作業グループが如何にして共通の目的意識と現状認識を保ち得るかは、プロジェクトマネジメント上の中核的な課題である。加えて、将来の処分地（あるいは候補地）の選定プロセスにおける地質環境を地層処分の観点から合理的に調べるための方法論及びこれに関連する技術的なインベントリを用意することも重要な課題となる。この観点から言えば、将来のある時点で振り返った時に、プロジェクトの全体が各グループの判断に委ねられたローカルな試行錯誤の集積であってはならない。

上述したプロジェクトマネジメント上の問題に加えて、近年、研究自体のアプローチとしても、対象の一方的な細分化と詳細化の流れには弊害があることが指摘される機会が多い。良く言われている通り、「自然現象は、国境や学派を知らない」のであって、ある現象の特定の空間スケールでの特定のアスペクトを切り取って研究対象とするいわゆる分析的 (analytical) なアプローチは、あるがままの現象を総合的に理解するチャンスを減じてしまう危険性がある。それぞれの学問分野において培われた現象理解をつき合わせ、整合性を確かめることは、限られた検証機会の中で最良のものの一つであるし、また、二つ以

上の学問領域にあえてまたがってモデル化や解析を行うことにより個別の取り組みに於いては抽出されなかった重要課題を新たに認識するという synergy を生むことにもつながる。

地質環境モデルの継続的な更新を軸としたアプローチは、研究対象をより細かくそして詳しくしていくという分析的な視点、そして、作業内容を分割していくというプロジェクトの進め方の欠点を補うためのものであり、その主眼とするところは以下の通りである。

1. 地質環境の理解という比較的つかみどころのないものに代わって、地質環境という場の特性及びそこで生ずる現象を定量的に記述する地質環境モデルという numerical reality を目に見える成果物として位置付けることにより、プロジェクト全体の目標を具体的かつわかりやすいものとする。
2. 地質環境モデルの構築に当たっては、複数の学問分野（例えば地球化学と水理）に対応したデータ、解釈、及び数学モデルによる解析結果とが必然的に比較されることとなる。そこで、これを検証機会として位置付け、現象の複数の側面を同時に説明できるような新たな仮説の設定及びこれを調べるための具体的な研究課題の明確化を促す。
3. 不完全な情報によって構築された当該時点での地質環境モデルにおいて、何が欠けているか、あるいはどの領域のどのデータにもっとも大きな不確実性が存在しているかを調べることにより、modeller と experimentalist との間の対話を促進して、個別分野において行うさらなる調査内容の具体化を支援する。また、これらの調査項目間の優先順位を計画全体の視野から議論する機会を提供する。
4. 地表からアプローチする調査研究段階、地下施設建設時の調査研究および地下施設における調査研究というそれぞれの段階を実施するのに先立って、各時点で最新の地質環境モデル上で当該試験、調査を再現し、種々の数学的モデルによる数値実験を行って条件、仕様、形状等について想定される代替案を比較する。また、この結果に基づき当該試験・調査の設計を支援する。
5. 各時点で最新の地質環境モデルに基づき、次のステップの研究計画が何をねらいとしており、どの様な成果が期待されるのかを具体的かつ視覚的に示す。また、これをプロジェクト内での認識の徹底、プロジェクト外での理解の促進に役立てる。
6. 各時点でのデータ、仮説や数学的モデルそして対応する地質環境モデルをセットとして記録しておくことにより、「地質環境を地層処分の観点から

合理的に調べる試み」としての深地層の研究施設における研究計画の全貌が時間軸に従って整理されることとなる。この記録、特に入出力の対応関係を分析することにより、将来の処分地における調査・試験の方法論の作成に資する。

1.2 地質環境モデル構築の方法論

1.2.1 対象とする地質環境特性

深地層の研究施設における研究計画の目的の一つは、地層処分の長期的安全性に関する性能評価研究及び処分施設の設計／施工技術等の研究開発の基盤となるという観点から、地質環境を合理的に調べるための方法論及びこれに関連する技術的なインベントリを用意することである。

(1) 性能評価研究に関連する地質環境特性

地層処分の長期的安全性に関する性能評価研究は、地下深部に定置される放射性廃棄物中の放射性物質が直接あるいは地下水等を介して間接的に地表に回帰する可能性を想定し、これに伴うリスクの大きさを定量化するものである。本節では、このうち、地下水を介した放射性物質の移動（地下水シナリオ）に焦点をあてることとする。

地下水シナリオにおいて、放射性物質の移動しやすさを規定するものは以下の三つの因子である。

1. 地下水中での核種の化学形態
2. 地下水の流動速度
3. 可動な形態の放射性物質に accessible な空隙

ここで、1.は放射性物質が化学反応等によって液相と固相のそれぞれにどのように配分され、さらにどのような化学形態（陽イオン、陰イオン、錯体、コロイド、吸着種、及び沈澱）に分かれるかということである。この第一の因子に関連する地質環境特性は、地下水の化学的特性と岩体の鉱物学的特性である。また、2.は可動な化学形態をとる放射性物質が地下水自体の動きに伴って移流する機構に対応しており、この因子を定量化するにあたっては、地質環境特性として各スケールでの地下水流動状況を知ることが必要となる。最後に、3.につ

いては、岩体中の微細な空隙構造が該当する地質環境特性となる。

(2) 処分施設の設計／施工技術等の研究開発に関連する地質環境特性

処分施設の設計／施工技術等の研究開発は、坑道の掘削、保守、閉鎖を合理的に行うための技術と、施設建設による地質環境の擾乱を予測しこれを低減する技術を開発するものである。前者に関しては、岩盤の強度特性を知ることが必要であり、後者については想定される擾乱の種類に応じてそれぞれ表 1.1 に示す様な地質環境特性を知ることが求められる。

表 1.1 対象とする地質環境特性

性能評価研究の項目	関連する地質環境特性
放射性物質の化学形態の推定	地下水化学 pH 酸化還元電位 主要イオン濃度 有機物及び微生物濃度 鉍物組成
地下水による放射性物質の移流の評価	地下水流速、透水係数の種々の空間スケールでの分布
可動な形態の放射性物質に accessible な空隙の特定	岩体中の微視的空隙構造

設計／施工技術等の研究開発項目	関連する地質環境特性
坑道の掘削、保守、閉鎖技術開発	岩盤強度
施設建設による擾乱の評価及び低減 力学的擾乱 熱的擾乱 水理学的擾乱 化学的擾乱	岩盤強度 (弾塑性特性) 岩盤熱特性 (熱伝導率、比熱) 多成分流体の透過特性 地下水化学及び鉍物組成

1.2.2 地質環境モデル構築の方針

(1) 時間／空間スケールと解像度

性能評価研究及び設計／施工技術等の研究開発のためには、1.2.1に列挙したそれぞれの地質環境特性が、対象となる時間あるいは空間的領域の全体において稠密に定量化されることが必要となる。この際に求められる時間／空間的スケールと、不均質な特性の空間分布の記述における解像度は、それぞれの地質環境特性データの用途に応じて異なることとなる。表 1.2 に、各地質環境特性ごとの要求をまとめる。

表 1.2 各地質環境特性に対応する時間／空間スケールと解像度

	時間スケール	空間スケール	空間的解像度
地下水化学	性能評価期間全体	施設調査領域	水質の異なる水塊のサイズ以下
鉱物組成及び空隙構造	性能評価期間全体	施設調査領域	鉱物粒子サイズ程度
施設建設による化学的擾乱	坑道閉鎖後数百年程度まで	坑道周辺	坑道サイズ以下
地下水流動	性能評価期間全体	広域調査領域	高透水性部位（砂層、亀裂、等）のサイズ以下
施設建設による水理的擾乱	坑道閉鎖後数百年程度まで	施設調査領域	坑道サイズ以下
岩盤力学及熱的擾乱	坑道閉鎖後数百年程度まで	坑道周辺	坑道サイズ以下

それぞれ必要な解像度を保ちつつ、所定のスケールを網羅する様な地質環境モデルを構築するためには、本計画の様な現位置試験のみならず、ナチュラルアナログ研究やシナリオ分析による専門家の意見集約等、地層処分研究開発全体からの情報供給が必要となる。特に、時間スケールに関して言えば、ナチュラルアナログやシナリオ分析の果たす役割が大きいことから、本計画では主として現時点での地質環境に関して、上表の空間スケールと解像度とを如何にして両立させるかに最大の力点を置くこととする。ただし、paleohydrology に代表される様に、現在測定することが可能な地質環境特性の中には、現時点という瞬間値にとどまらず、過去極めて長期に及ぶ当該現象の「履歴」を記録しているものも含まれるが、ここでは、1.3 に述べるいずれの地質環境モデルに関しても、複数の時間断面におけるモデル（スナップショットと呼ばれる）を時系列

的に配置することによって地質環境の変遷を表現する手法が存在すること、そして、ナチュラルアナログや paleohydrology さらにはシナリオ分析の結果をこのような時系列的地質環境モデルに集約していく研究も端緒についていることを述べるにとどめる。

(2) 地質環境モデル構築の手段

表 1.2 から明らかな通り地質環境特性を定量化する必要がある時間的なスケールはいずれも地層処分研究プロジェクトの期間をはるかに上回るものであり、測定及び観察といった直接的な手段によって時間軸を網羅することは不可能である。また、多くの項目について、現実的な範囲（経費、及び母岩への影響の観点から）内で所定の空間スケールを所定の解像度で埋めることは極めて困難である。このことは、地質環境モデルの構築にあたって、限られた実測データに基づき、解析によって未測定の地質環境特性を知ることが不可欠であることを意味する。

このような解析に用いられる数学的モデルは以下の二種類に大別される。

記述的モデル（場のモデル）

実測データセットから、各地質環境特性の自己相関構造及び複数の特性間の相関を抽出し、これに基づき、（多くの場合統計的に）地質環境特性分布を空間的に内外挿するもの。

演繹的モデル（プロセスモデル）

物理／化学的な法則に基づき、各現象のふるまいや状態を理論的に表現するもの。あるパラメータについての実測データに基づき他のパラメータを算出する、あるいは、初期データに基づき現象の将来の状態を予測する。

直接的な測定を含め、現在の地質環境特性を「知る」ための手段とこれらの特徴を表 1.3 にまとめる。

同表に示した各手段は、上のもの程直接的（経験的）であり、下のもの程間接的（理論的）である。このため、不確実性要因は下にいく程累積する傾向がある反面、出力の情報量（空間的な稠密性と網羅性、あるいは対象とする地質環境特性の種類）については下のもの程豊かである。このことは、一つの地質環境特性を知るために、複数の手段を組み合わせることの有効性を示唆してい

る。

表 1.3 現在の地質環境特性を「知る」ための手段とその特徴

	入力	出力	不確実性の要因
実測	-	離散的なデータセット	測定誤差
記述的モデル	実測データセット	実測されている地質環境特性の空間的に稠密な推定値	(場の) 数学モデルの誤差 実測点数の不足
演繹的モデル	プロセスモデルの入力パラメータに関する記述的モデル	他の地質環境特性についての推定値	(プロセスの) 数学モデルの誤差

より具体的には、直接的かつ経験的な情報を間接的かつ理論的なモデルに入力して行くことにより地質環境について我々が知り得る情報量を増大させる「推定」の方向性と、間接的かつ理論的な推定の結果をこれとは独立に得られた直接的かつ経験的な情報と比較することにより情報の質を確認する「検証」の方向性を計画の中で適宜組み合わせることが必要である。

(3) 段階的な構築の手順

深地層の研究施設における研究計画は、

1. 地表からアプローチする調査研究段階
2. 地下施設建設時の調査研究段階
3. 地下施設における調査研究段階

という3段階に分かれ、全体として対象とする空間的スケールを絞り込みつつ、同時に稠密性を増していくという流れに沿って行われる。また、試験/調査対象へのアクセスがより直接的となることから、測定可能項目の種類及び質も段階的に向上することが期待される。

地質環境モデル構築では、以上の3つの段階を踏むことは勿論、それぞれの

段階を、データ点数の増加に応じてさらに複数のステージに区分することが必要である。各ステージでは、当該時点で得られている全ての実測データに対して記述的モデル（場のモデル）及び演繹的モデル（プロセスモデル）を適用することにより、求められる空間スケールを所定の解像度で埋めた稠密な地質環境モデルを作成する。この地質環境モデルは、出発点となった実測データセットの不完全性、そして上記の内外挿や予測に用いられた場のモデルとプロセスモデルの誤差に起因する不確実性をもつこととなるが、この不確実性の種類と大きさとは、ステージを重ねデータ点数が増すにつれて変遷（望むらくは減少）することとなる。この観点から言えば、各ステージにおいて、それぞれの地質環境モデルに含まれている不確実性の大きさを定量的に評価することは必須である。また、あるステージで地質環境モデルが構築され、そこに含まれる不確実性が定量化された時点で、不確実性を低減し地質環境モデルの信頼性を向上するために次のステージで何をすべきか、を常に考える必要がある。明らかにこの問いに対する答えは一通りではなく、自由度が含まれている。そして、地質環境モデル構築の効率性は、この、複数あり得る次ステージの調査・試験計画の候補から最適なものを選定できるか否かにかかっている。この目的のためには、候補となる計画のそれぞれについて、前出の場のモデル及びプロセスモデルを用いた数値実験を事前に行い、定量的な比較を行うことが重要である。この点については、第2章において詳述するものとする。

上述した3つの段階は、試験あるいは調査という行為事態が本来の深部地下環境に与える擾乱という観点から見れば不可逆なものである。そこで、一つの段階から次の段階に移行する前に、当該段階でなすべきことはなされているという確認を得ることが望ましい。この目的のためには、当該段階におけるそれぞれのステージで得られた地質環境モデルに含まれる不確実性を定量化し、これを先行するステージの結果と比較することによって、各段階で得るべき知見が収束しているか、あるいは新たなデータを加えるごとに振動する様な不安定なものであるかを判断することができる。そして、この判断こそが、次の段階に移行することの必然性を示す基準となる（より詳しくは第2章参照）。

ステージ間の移行の場合と同じく、次段階の調査／試験を開始する際にも、前段階の地質環境モデルに基づき数値実験を十分に行い内容を最適化しておくことが必要である。また、この事前解析によって、次段階の調査／試験において期待される成果が具体的に示されることになる。さらに、実際に次段階の調査／試験が開始されると、事前解析とは独立な実測データセットが供給されることとなり、上述した意味での検証の機会が生じることとなる。この検証にお

いて、事前解析と新たな実測値とが整合的であれば、解析に用いられた場やプロセスについての数学的モデルの信頼性が向上することにつながり、また、不整合性が見られる場合には、数学的モデルの見直しや、前段階における調査／試験方法の改善についての議論を促進することとなる。さらに、前段階の研究内容（解析、調査、試験）に明らかな改善方法が見当たらない場合には、当該地質環境特性を的確に知るためには次の段階にまで進む必然性があるという知識を将来の処分地における調査／研究のために残すこととなる。

次段階の調査・試験を実施する際には、それに先立ち、関連する情報が関係者の間で全て周知徹底され、認識が共有化されていることが必要である。このためには、検討過程で用いられた全てのデータ、モデル及び手法群、そして成果である地質環境モデルを、体系的に記録し、プロジェクト内外から適切に（情報改ざんの危険性を避けつつ、かつ効率的に）最新の情報にアクセスすることを可能とする様な情報管理を行うことが必要である。

(4) 複数の地質環境モデルの相互比較

一つの地質環境特性についての実測値から、プロセスモデルを用いて他の地質環境特性を推定することが可能である。そして、多くの場合、この地質環境特性も限られた点数においては実測することが可能である。そこで、各段階において、当該プロセスモデルの入力パラメータについての実測データセットと出力についての実測データセットの両者を同時にコンディショニングに用いた推定を行うことによって、より効率的に不確実性を低減することが可能となる（第2章参照）。また、十分に不確実性が低減された後に、プロセスモデルによる推定値と実測値とを比較することは、(3)に述べたものとは別の新たな検証機会を提供することとなる。ただしここでも、(3)の場合と同様に、検証に先立って不確実性が十分に低減されていることが必要である。大きな不確実性が残されている時点でのモデルの比較は、将来の研究について得るところが少なく、徒に手法についての信頼感を低下させるのみの結果に終わることが多い。

1.3 地質環境モデル構築に関する課題

1.3.1 地質環境モデルの区分

本計画において構築する地質環境モデルの主たる用途は、1.2に述べた種々の

地質環境特性の調査あるいは推定結果を集約することである。また、これらの地質環境特性を理解する上で共通の基盤となる地質構造モデルの構築も並行して行われる必要がある。さらに、深地層試験計画には、性能評価研究や処分技術開発において用いられている数学的モデルの妥当性を確認する試験も含まれることから、これらの試験に対応する各種の情報を集約するモデルも検討の対象となる（表 1.4）。

表 1.4 地質環境モデルの区分

位置付け	該当する地質環境モデル
各地質環境特性を理解する上で共通の基盤となるもの	地質構造モデル
地質環境特性の調査結果を集約するもの	岩体特性モデル 地下水水理モデル 地下水化学モデル
数学的モデルの妥当性を確認するための試験に関するもの	掘削影響モデル トレース物質移行モデル

1.3.2 地質構造モデル

(1) 目的及び概要

地質構造モデルは、広域調査領域及び施設調査領域のそれぞれにおいて、

1. 地形
2. 断層あるいは破碎帯といった主要な不連続構造
3. 層序
4. 褶曲構造

を、当該三次元領域を複数の曲面で分割することによって表現するものである。

地質構造モデルにおいて表現される複数の構造単位は、それぞれ異なる生成過程や履歴を有するものであるために、後述する岩体特性モデルにおける諸特性の空間的分布は地質構造モデルとの関連を有するものと考えられる。しかしながら、調査対象とする諸特性の自己相関構造と、地質学的な層区分とは必ずしも完全に整合的ではないため、ある特性値の空間分布を表現するために地質

学的な層をさらに分割する必要がある場合や、逆に、複数の地質学的な層が、ある特性値については同等である場合が存在する。この意味から、地質構造モデルは、諸特性を記述する他の地質環境モデル群とは区別し、これらの共通の基盤として位置付けるべきである。

施設調査領域の地質構造モデルには、

1. 試錐孔
2. 各種坑道等の地下施設

を含めるものとする。これらの人工構造物と各段階における最新の地質構造モデルとの相対的な位置関係を把握することにより、次段階における試錐孔配置や施設設計を適切に行うことが可能となる。

(2) 三次元地質環境モデリングソフトウェアによる地質構造モデリングについて

三次元地質環境モデリングソフトウェアは、地質環境特性データから出発して三次元のモデル構築にいたる各段階での情報を一元的に保存／管理し、これらを視覚化する一連のソフトウェアプログラム群である。

現在市販されている三次元地質環境モデリングソフトウェアには、いずれも地質環境モデリングを支援する種々のデータマニピュレーション及び画像化機能が付与されている。しかしながら、これらがモデリング自体を自動化するエキスパートシステムとしての機能を有するものではないことに留意する必要がある。従って、地質環境データから地質環境モデルへの変換は、

1. 専門家の判断
2. 場のモデルを用いた空間的内外挿
3. プロセスモデルを用いた非測定項目の推定

のいずれかの手段によって行われる必要がある。

三次元地質環境モデリングソフトウェアは、地質構造単位間の境界を面として表現することにより、地質構造モデルを構築し視覚化するものである。

地質構造モデルは、原則的にはある時間断面における地質構造の表現であるが、過去の地質構造変化についての各種の情報や専門家の判断に基づき複数のモデルを時系列的に作成することにより、サイトの地質学的な変遷過程をシミュレートすることができる。また、逆に、この作業を通じて種々の情報を三次元空間と時間軸に従って整理することにより、それぞれの情報や専門家の理解を確かめることができる。

三次元地質環境モデリングソフトウェアの一つである EarthVision[1] によって作成された地質構造モデルの例を図 1.1 と 1.2 に、地下施設モデルの例 (Sellafield サイト) [2] を図 1.3 に示す。

(3) 課題

地質構造モデルに関連する課題としては、

1. 地質構造及び人工構造物（試錐孔、坑道）の三次元的数値モデル作成
2. 複数の地質構造モデル（スナップショット）の時系列的配列による過去の地質学的変遷の表現

が挙げられる。既に述べた様に、地質環境モデルの構築にあたっては、専門家の判断、場のモデルを用いた空間的内外挿及びプロセスモデルを用いた非測定項目の推定を組み合わせることが必要である。この方法論は、将来の処分地での地質環境特性調査等にむけての深地層試験計画の主要な成果の一つになるものと考えられる。この意味からは、三次元地質環境モデリングソフトウェアの機能を活用して、モデル構築における情報やデータの流れ及びその根拠を記録しておくことが重要である。また、地質構造モデルについては、同一のデータセットを出発点としても研究者の判断に応じて結果がかなり異なる可能性があることから、複数の独立したグループによるモデリング結果の相互比較や、他の情報（例えば後述する堆積、consolidation 過程についての演繹的モデリングの結果）との比較による検証及び概念モデル不確実性の明示を行うことが必要である。

各課題の内容及び対応する技術的インベントリーについては章末の付録を参照のこと。

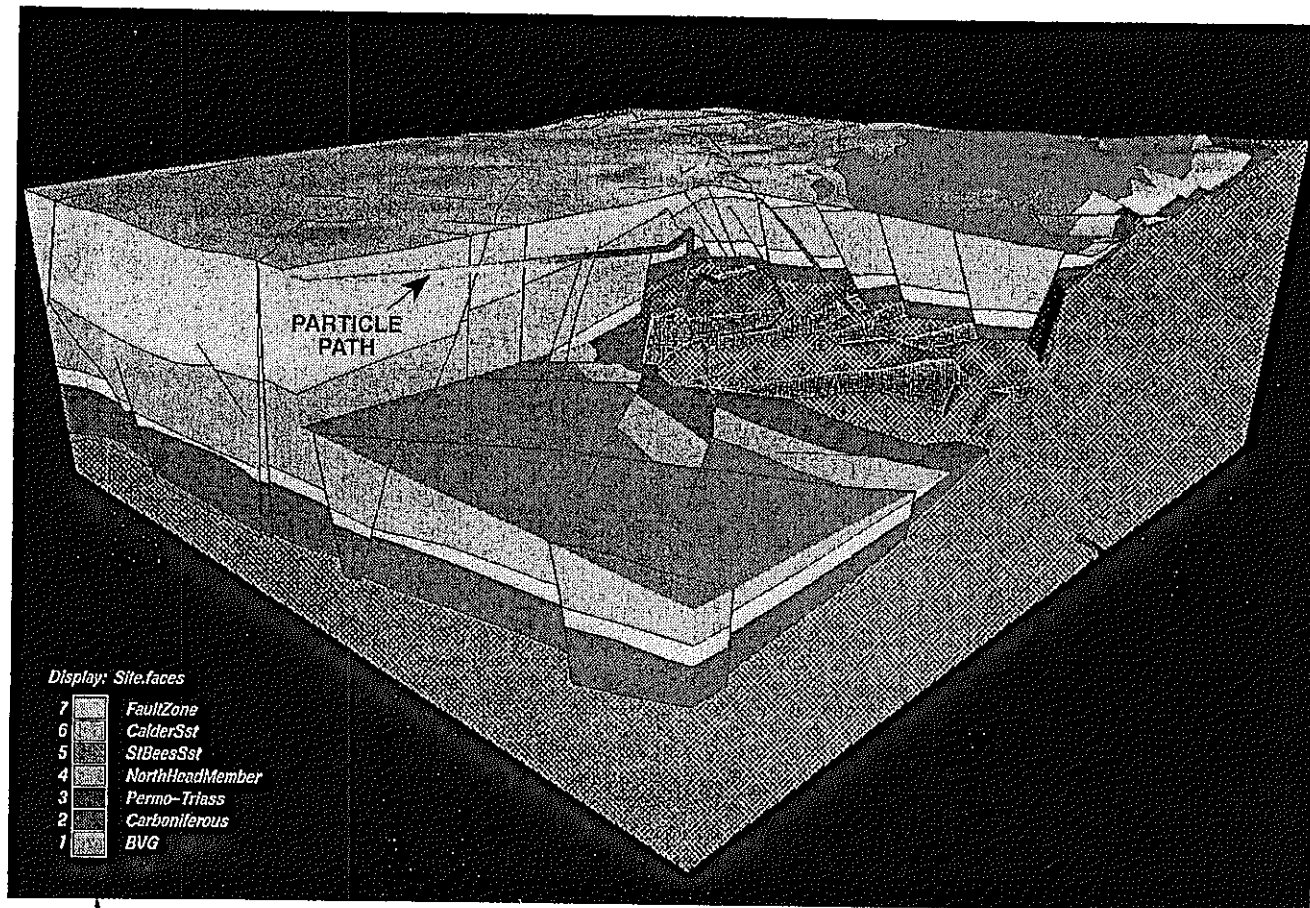


図 1.1 EarthVision によって作成した地質構造モデル例 1

モデルは 6 種類の層と 129 個の Fault blocks から成る。また、地下水流動解析の結果得られた流跡線が示されており、線に沿った色の変化は時刻に対応している。

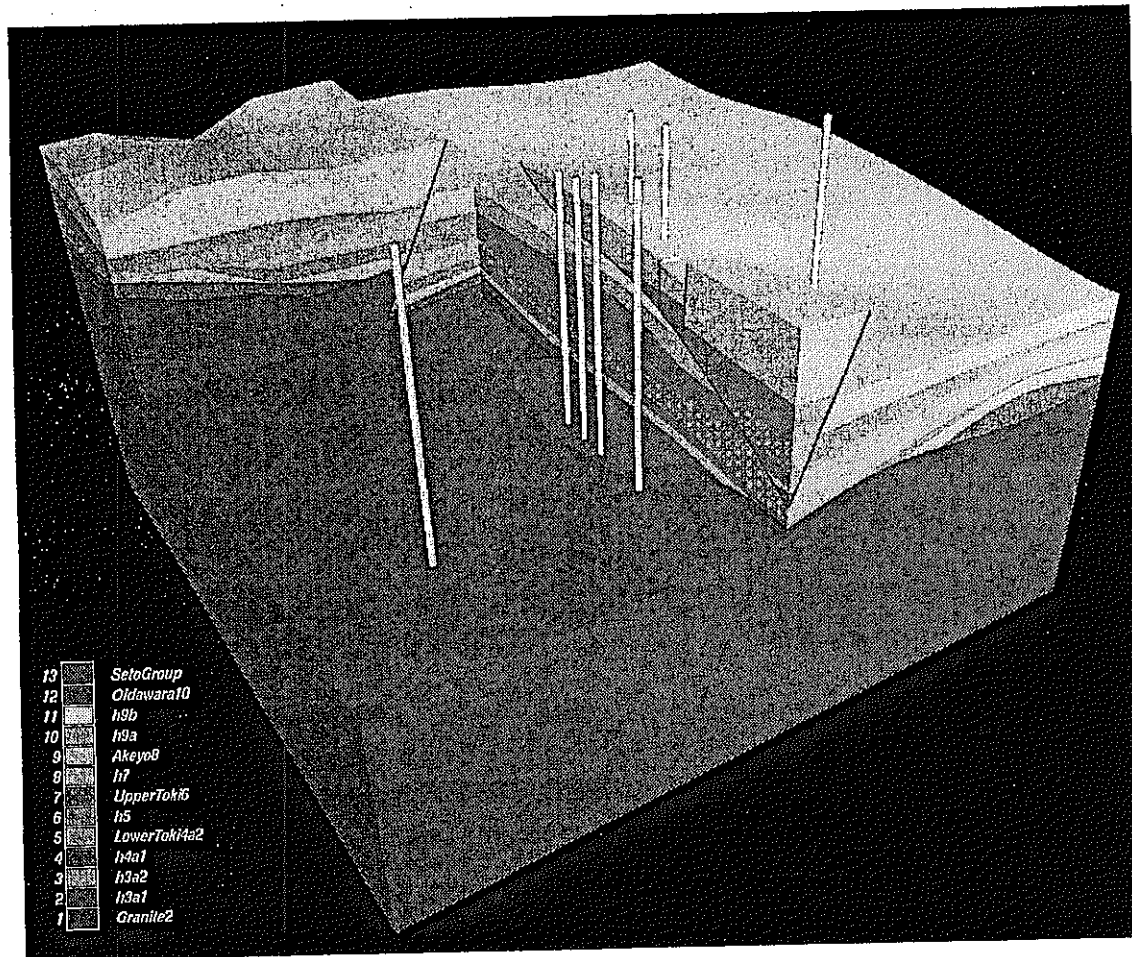


図 1.2 EarthVision によって作成した地質構造モデル例 2

モデルは 13 種類の層と断層から成る。また、鉛直の円筒群は同サイトに掘削されている試錐孔を表す。

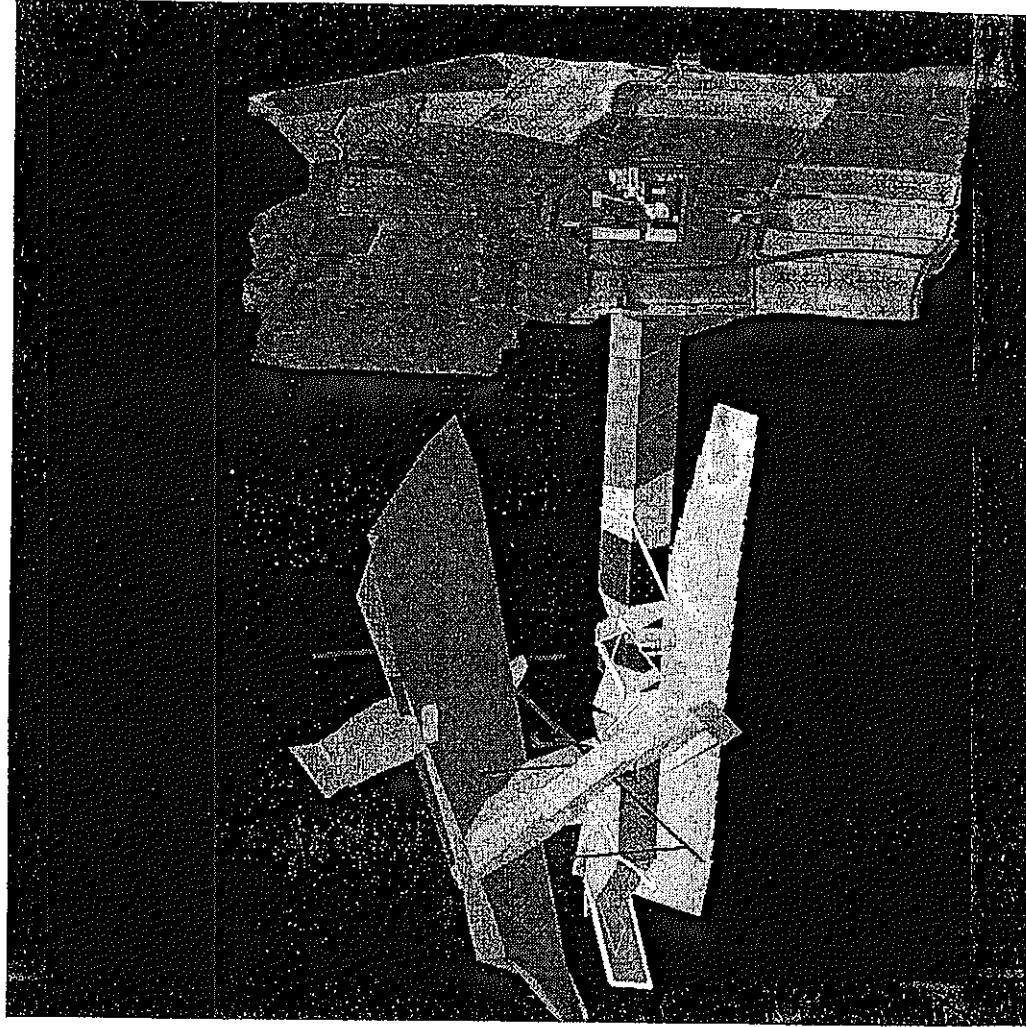


図 1.3 EarthVision によって作成した英国 Sellafield サイトの地下研究施設 (Rock Characterisation Facility) のモデル

1.3.3 岩体特性モデル

(1) 目的及び概要

岩体特性モデルは、

1. 鉱物組成及び空隙率
2. 透水係数
3. 主要な地下水移行経路の微視的空隙構造
4. 岩盤強度
5. 岩盤熱特性
6. 地下水以外の流体（ガス、石油、等）の透過特性

といった固相側の地質環境特性を集約するものである。これらの特性値に対する地質環境モデルを作成する上では、まず第一に、これらの中で顕著な空間的ばらつきを有するものを同定することが必要である。既往の研究例では、上記のうち少なくとも透水係数については、その空間的なばらつきが顕著なものとなることが予想される。既に述べた様に、モデル化の対象となる空間的スケールは大きく、かつ、空間的分布の表現に求められる解像度は小さいことから、これらの顕著な空間的ばらつきを有する特性についての地質環境モデルの構築にあたっては、離散的なデータセットに対して数学的モデルを用いることにより稠密な分布を推定することが必要である。この様な推定の方法としては、以下の三種類のものが重要である。

1. 離散的実測データセットに基づく自己相関構造の抽出（記述的モデルの作成）及びこの自己相関構造モデルを用いた当該特性値空間分布の統計的推定
2. 複数の地質環境特性間の相関に関する記述的モデルの作成
3. 岩体の物理化学的変遷についての演繹的モデル（プロセスモデル）の作成及びこのモデルを用いた現在の特性値分布の再現

上記のうち 1.及び 2.の方法は、上に挙げた特性値のうち微視的空隙構造以外の全てのものに対して直接的に適用可能である。そこで、比較的測定が容易であり、従ってデータ数が多い特性値に対して自己相関構造モデルの作成と空間分布の統計的推定を行い、これを軸として、特性値間の相関モデルを用いつつ他の比較的データ点数の少ない特性値の空間分布を推定していくことが合理的

である。

微視的空隙構造は、岩体の種類や履歴に応じて種々に異なるものであり、物質移行に対する遅延機構には幅がある。このため、微視的空隙構造の空間的な変動を適切に記述するためには、まず、この遅延効果を考慮した空隙構造の概念モデル化を行い、さらにこれに対応して定量的な尺度を見出すことが必要である。この様な準備段階のモデル化を行い、適切な定量的尺度を明らかにした後、対応するパラメータ値が空間的ばらつきを有するものであるか否かを判断することが必要であり、この結果に応じて上記と同様の自己相関構造のモデル化と空間分布の統計的推定あるいは他の特性値との相関に基づく推定を行う必要がある。

最後に、岩体特性を演繹的に推定する方法として、堆積及びその後の consolidation 過程についての応力/水理/化学の強連成モデルを用いた解析が挙げられる。この解析では、堆積過程自体の時間的 fluctuation とその後の consolidation 時の応力/水理/化学間の非線形なカップリングという空間的不均質性の二つの主要な要因を定量的に表現することが試みられる。

(2) 自己相関構造モデルを用いた当該特性値空間分布の統計的推定について

自己相関構造についての地質統計的なモデルは、ある距離を隔てた二つの地点における特性値がどの程度類似したものであるか（相関を有するか）を、セミバリオグラムという統計量によって記述するものである[3]。

地質統計的な自己相関構造モデルの一つである統計的自己アファインフラクタルモデル[1]は、以下の式により定義されるセミバリオグラム γ

$$\gamma(h) = \langle (\Psi(x+h) - \Psi(x))^2 \rangle$$

但し Ψ : ある物性値

h : 二つの地点間の距離

$\langle \rangle$: h のある区間に属する全ての地点間で平均を採る操作

を

$$\gamma = \begin{cases} ah^p, & 0 < h \leq H \\ S, & h > H \end{cases}$$

として表現するものである。ここで、 p は Hurst 係数と呼ばれフラクタル次元 ($= N - 2p$ 、 N は空間の次元) と対応づけられる。また、 H, S はそれぞれフラクタルシル (しきい値) 及び領域全体での当該物性値の統計的分散である。

統計的自己アファインフラクタルモデルは、隣接した二点が大きく異なる数値を示すという意味で rough な自己相関パターンを含み、かつ、フラクタル次元というパラメータによって rough さの程度が定量化されるという点で、一般性が高いものと考えられる。実際、これまでに多くの例によって統計的自己アファインフラクタルモデルが岩体の連続的な物性値の自己相関パターンを表現することが確かめられている。

統計的自己アファインフラクタルモデルの適用対象は、連続的な物性値に限られているが、このことは対象となる地質環境がいわゆる水理学的な連続媒体であることを意味するものではない。例えば、亀裂状媒体における平均透水量係数や亀裂の頻度といったパラメータは連続的に定義された物性値であり、これらに対して統計的自己アファインフラクタルモデルを適用することは可能である。

ソフトウェアとしては、スペクトル法による二次元モデルとして

- MACRO-AFFINITY

が、また、Midpoint-displacement 法による三次元モデルとして

- prototype MACRO-AFFINITY-3D

が開発されている[1]。いずれも相関長をベクトル表現する手法による異方的なフラクタル場の作成機能を有する。また、二次元の MACRO-AFFINITY では、これに加えて

- 定常飽和地下水流動解析
- パーティクルトラッキングによる物質移動解析
- 透水係数と吸着特性 (分配係数) の相関を考慮した realization の作成

機能を有している。

prototype MACRO-AFFINITY-3D により作成した三次元統計的自己アフィンフラクタルモデルの例を図 1.4 に示す。

自己相関構造の地質統計的モデリングの主要な研究開発課題は

- ・異方的な自己相関構造の推定・作成
- ・複数物性値間の相関の表現

である。これらについての数学的な手法はいずれも適用可能な段階となっている。従って、今後の研究開発に於いては、実際のデータ取得における制約条件、特に、

- ・水平方向と鉛直方向でのデータ密度の格差
- ・複数項目間（透水係数と分配係数等）のデータ密度の格差

を考慮したより具体的な検討を行い、実用性の高い手法として確立していくことが求められる。

(3) 堆積及び consolidation 過程の応力／水理／化学強連成モデル

堆積岩において、bedding plane に対して垂直な方向に見られる岩体特性（空隙率、粒子サイズ、透水係数、等）の周期的な変動は、古典的には堆積環境の時系列的な変動を反映したものであると考えられてきたが、1970 年代以降の Prigogine[4]や Ortoleva[5] 等の平衡から離れた非線形ダイナミカルシステムの理論により、consolidation 過程の応力／水理／化学強連成の結果生じる地球化学的自己組織化（均質な場から、自律的にある空間的なパターンが出現すること）の寄与が大きいことが次第に明らかになりつつある。特に、Ortoleva 等による数値シミュレーションにより、完全に均一に堆積した未固結岩がその後の consolidation の過程において不均質性を提示していく状況が定量的に再現されたことにより、この様な非線形数学モデルによる堆積岩系の時間的変遷はいわゆる数理地質学（Mathematical geology）の中心的な課題の一つとなっている。

この様な非線形モデルの例である Dewers-Ortoleva モデル[5]は、

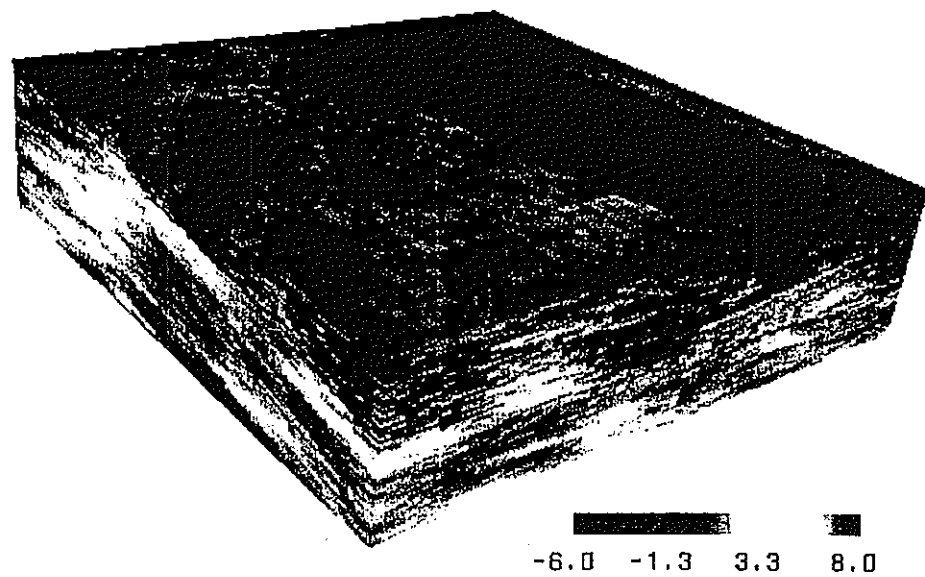


図 1.4 prototype MACRO-AFFINITY-3D により作成した三次元統計的自己アファインフラクタルモデルの例

既試錘孔データによってコンディショニングした堆積岩部分の不均質透水軽水分布の推定値。5つの主要な堆積層毎に異邦方的なフラクタル分布を作成

1. 鉱物の速度論的溶解／沈澱
2. 反応性溶質の移動
3. 構成粒子の機械的圧密
4. 堆積岩マトリクスの巨視的な弾塑性変形

に関する方程式を全て連立して数値解法するものであり、このモデルを用いて過去の長期にわたる堆積及び consolidation 過程をシミュレートすることによって、岩体特性空間分布に見られるバンド状の周期的変動及び stylolite の様な特異面の生成過程を再現することが可能となった。均質に堆積した砂岩層の岩体特性が、化学的 compaction (stress solution 過程とも呼ばれる) により次第に空間的な不均質性を呈していく状況についての Dewers-Ortoleva モデルによるシミュレーション結果を図 1.5 に、また、stylolitization による特異面の生成過程についてのシミュレーション結果を図 1.6 に示す。

このような演繹的かつ理論的なアプローチは、前出の経験的かつ記述的な地質統計的アプローチと相互補完的なものとして位置付けられるものであり、これら二つのアプローチを相互に比較しつつ進めて行くことにより、当該地質環境の現在そして時間的変遷の総合的な理解の改善が期待できる。

(4) 課題

岩体特性モデルに関する課題としては、

1. 既存データのレビューによる顕著な空間的ばらつきを有する特性値の特定
2. 空間的ばらつきの大きい特性値についての地質統計的自己相関構造モデルの作成及び稠密な空間分布の推定
3. 物質移行に寄与する微視的空隙構造のモデル化及び対応する定量的パラメータ空間分布の推定
4. 複数の岩体特性間の相関に関する統計的モデルの作成及び複数特性の空間分布の推定
5. 堆積及び consolidation 過程の応力／水理／化学強連成モデル作成及びこのモデルを用いた現在の岩体特性分布の再現

が挙げられる。これらの課題の内容及び対応する技術的インベントリーについては章末の付録を参照のこと。

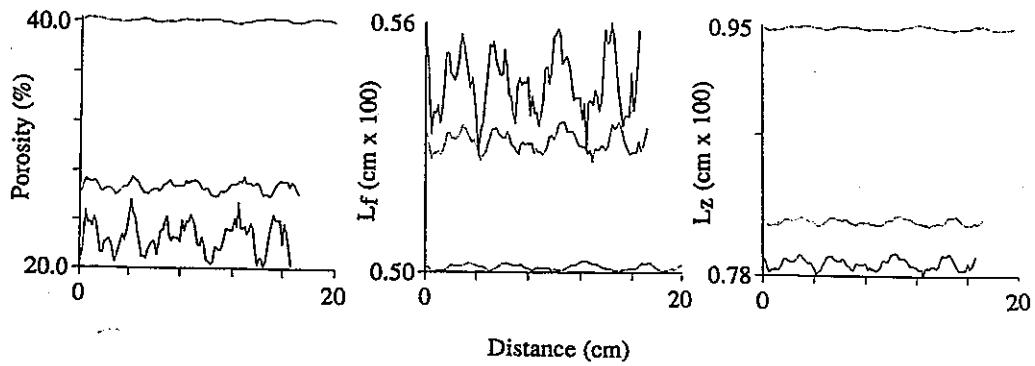


図 1.5 Dewers-Ortoleva モデルによる砂岩の化学的 compaction のシミュレーション結果の例

左から順に空隙率、粒子半径、及び鉛直方向の粒子幅。一点鎖線は堆積後 0 年、点線は 4000 万年、実線は 8000 万年時点に対応する。

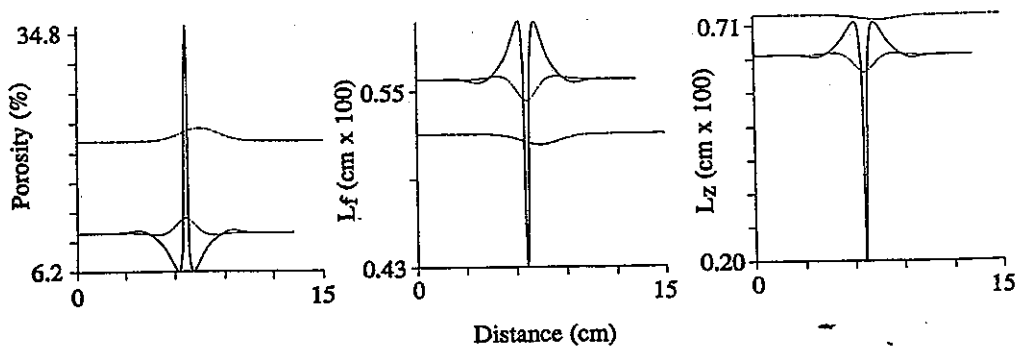


図 1.6 Dewers-Ortoleva モデルによる砂岩 stylolitization のシミュレーション結果の例

左から順に空隙率、粒子半径、及び鉛直方向の粒子幅。一点鎖線は堆積後 0 年、点線は 8650 万年、実線は 1 億 8700 万年時点に対応する。

1.3.4 地下水水理モデル

(1) 目的及び概要

地下水水理モデルは、

1. 間隙水圧
2. 地下水流速

の空間的分布を表現するものである。ここでは、特に、要求される空間的スケールと解像度との間のギャップが大きいため、広域調査領域、施設調査領域、坑道周辺領域という三段階のスケールを組み合わせた表現が必要である。さらに、塩水が存在する地域では、深部地下水はおそらくは堆積時に地層中に取り込まれたと考えられる塩水起源の空隙水を有することから、

3. 地下水中塩分濃度
4. 地下水年代

の情報も併せて記述されることが必要である。

地下水水理モデル構築にあたっては、透水係数及び空隙率の空間的分布についての岩体特性モデル、及び、別途測定される水理境界条件に関するデータ（涵養量、解析境界における間隙水圧分布や地下水流速、等）に基づき、飽和／不飽和地下水流動モデルによって解析領域内各位置での流動特性値を算出する必要がある。この解析のためには、やはり離散的な実測データセットとして与えられる涵養量、間隙水圧分布や地下水流速、等について空間的な内外挿を行い連続的な境界条件を設定することが必要である。

解析にあたっては、地質統計的な手法を用いるため、地下水流動特性空間分布の解析結果については多数の *realizations* が作成されることとなる。そして、これら *realizations* 間のばらつきを包含したいいわゆる *ensemble* における期待値や標準偏差が最終的な出力となる。ここで、各段階あるいはステージにおける地下水水理モデルの不確実性（*ensemble* の標準偏差）を最小化するために、解析結果である間隙水圧や地下水流速さらには地下水中塩分濃度や年代についての実測データセットをコンディショニングに用いることにより、これらの情報と不整合な *realizations* をスクリーニングしていくことが重要である。

(2) 塩水に起因した密度勾配に影響された地下水流動解析手法について

塩水と淡水とが共存する系についての地下水流動解析モデルは、1970年代における Dagan 等の先駆的な研究以来、活発な研究の対象となっており、これまでに多数の数学的なモデルが作成されている。これらのモデルは、塩淡境界の取り扱いによって、

1. Sharp front モデル (Two-fluid アプローチ)
2. 非線形分散モデル (One-dynamical-fluid アプローチ)

に大別される。前者は、塩水と淡水とを immiscible な流体として取り扱うものであり、計算効率が高いが塩淡境界の詳細な挙動を解析することは困難である。一方、後者は地下水流動と塩分の移動とを重力項を介して強連成する手法であり、塩淡境界をより現実的な、厚さをもった遷移層として記述することが可能である。後者の短所は、計算労力が大きなものとなる点であり、この点を克服するために Moving grid 法や Multi-gridding 法といったより高度な数値解法と組み合わせられることが必要となる。これらの数値解法のうち前者は二次元以上での使用において煩雑な手順を必要とするという欠点を有する。Sharp front モデルによる塩淡境界位置の解析結果と実測との比較例を図 1.7 に、Multi-gridding 法を用いた非線形分散モデルによる塩分濃度プロファイルの時間的変化のシミュレーション例を図 1.8 に示す。

実際の地質環境への上記モデルの適用性は、明らかにスケールに依存するものとなる。塩淡境界の「厚さ」が解析対象領域全体の大きさから見て無視し得ない様なスケール（施設調査領域以下）では、遷移領域の挙動を詳細に調べるために非線形分散モデルがより適当であると考えられ、塩淡境界の「厚さ」が問題とならない程度に大きな体系（広域調査領域）においては、より計算効率の高い Sharp front モデルの使用が正当化できるものと考えられる。米国の Montrey 地域の塩淡境界の位置が、1 万年以上前の地形変化に影響されて未だ過渡状態にある例からも明らかな通り、長期的な地形変化を考慮した動的な解析を行う必要が生じる場合も想定される。この様な状況では、Sharp front モデルを用いて広域の地形変化を考慮したモデリングを行うことが必要となる。

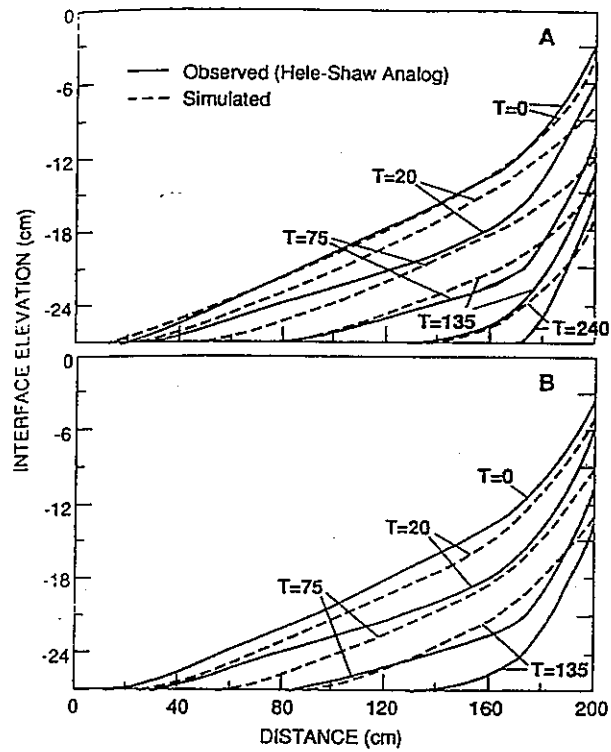


図 1.7 Sharp front モデルによる塩淡水境界位置の解析結果と実測値との比較例
(Hele-Shaw セルを用いた室内模擬試験)

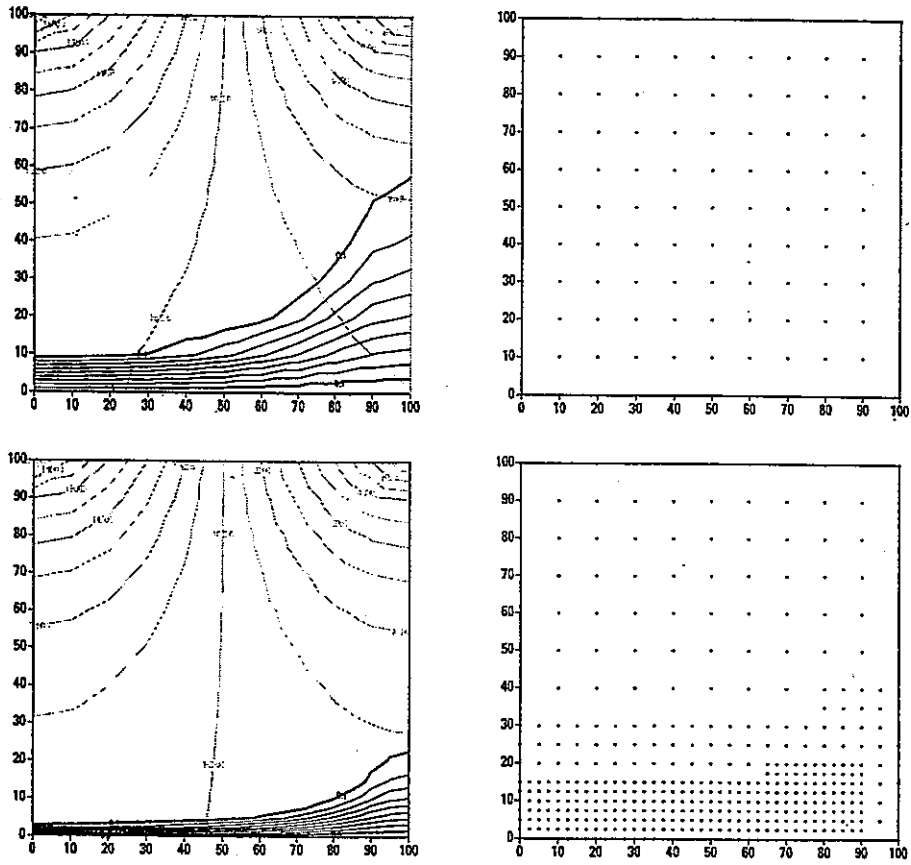


図 1.8 二次元の単純な矩形領域における均一透水係数場中 Multi - Gridding 法における密度流解析結果の例
 左図は地下水頭及び塩分濃度について解析結果、右図は Multi-Gridding における格子位置を示す。

(3) 課題

地下水水理モデルに関する課題としては、

1. 涵養量、間隙水圧や地下水流速分布実測データセットに基づく水理境界条件の設定
2. 密度勾配を考慮した飽和／不飽和地下水流動解析（広域調査領域）
3. 密度勾配を考慮した飽和／不飽和地下水流動解析（施設調査領域）
4. 間隙水圧、地下水流速、塩分濃度及び年代についての実測データセットによる地質統計的 realizations のコンディショニング

が挙げられる。これらの課題の内容及び対応する技術的インベントリーについては章末の付録を参照のこと。

1.3.5 地下水化学モデル

(1) 目的及び概要

地下水化学モデルは、性能評価研究の観点から主要な地下水特性である

1. pH
2. 酸化還元電位
3. 主要イオン濃度
4. 微生物及び有機物濃度

の空間的な分布を表現するものである。地下水化学モデルの構築にあたっては、記述的なモデルを用いたアプローチと演繹的なモデルを用いたアプローチの両者が適用可能である。

記述的なアプローチでは、地下水特性についての離散的な実測値データセットに対して統計的多変量解析（主成分分析）を行い、地下水化学の主要な変動軸を同定することによって起源の異なる複数の水塊の存在とこれらの位置関係を記述することが行われる。他方、演繹的なアプローチでは、地下水水理モデルによって表現される地下水流速分布と、岩体特性モデルによって表現される鉱物組成分布とに基づき、反応性溶質移動モデルを用いた解析を行うことにより地下水化学特性の空間分布を推定する。この様な解析は、化学反応の結果生

じる固相側（鉱物組成）の変化が無視し得る程度に小さいと仮定する弱連成解析と、鉱物組成の変化とその地下水流動へのフィードバックを考慮する強連成解析に大別される。

地下水特性についての記述的なモデルは、異なる水塊間の混合についての情報を提示するものであり、この結果と地下水水理モデルとの比較を行うことにより双方の検証を行うことが可能である。また、強連成解析の結果は、飽和／不飽和地下水流動解析における透水係数及び空隙率が時間依存しないという仮定の妥当性を判断する根拠として重要であるとともに、岩体特性モデルの最終的な課題である堆積及び consolidation 過程の応力／水理／化学強連成モデル作成への重要な手がかりとなるものである。

(2) 主成分分析による地下水化学の記述的モデリングについて

主成分分析 (Principal Component Analysis) は、ばらつきを有する多属性のデータから互いに直交する主要な変動成分を抽出する手法であり、多変量データについての統計的解析手法として広く用いられている。この手法の化学的データの分析 (Chemometrics) への適用は、1980年代に Kvalheim 等によって始められたものであり、その後、いくつかのサイトにおいて地下水化学データの分析に用いられている（例えば[6]）。

主成分分析による地下水化学データの記述的モデリングは、

1. 地下水化学データセットに対する主成分分析による主変動成分の同定
2. 主成分を新たな座標軸としたデータセットの整理
3. 2.に基づく異種水塊 (End member) の同定
4. 異種水塊間の混合過程及び関連する反応の解釈

というステップを経ることにより、当該サイトの地下水化学の概況を記述するものである。主成分分析の手法を用いることの利点は、多属性であるために複雑となりがちな地下水化学データセットに対して、調査対象とするサイトの状況に最も適した「整理の軸」を定義することにより、古典的な Piper plot 等では得られない様な見通しを与えることである。スウェーデン Aspo サイトの地下水化学データの主成分座標でのスキヤッタプロット、ならびに特定された End members を図 1.9 に示す[7]。

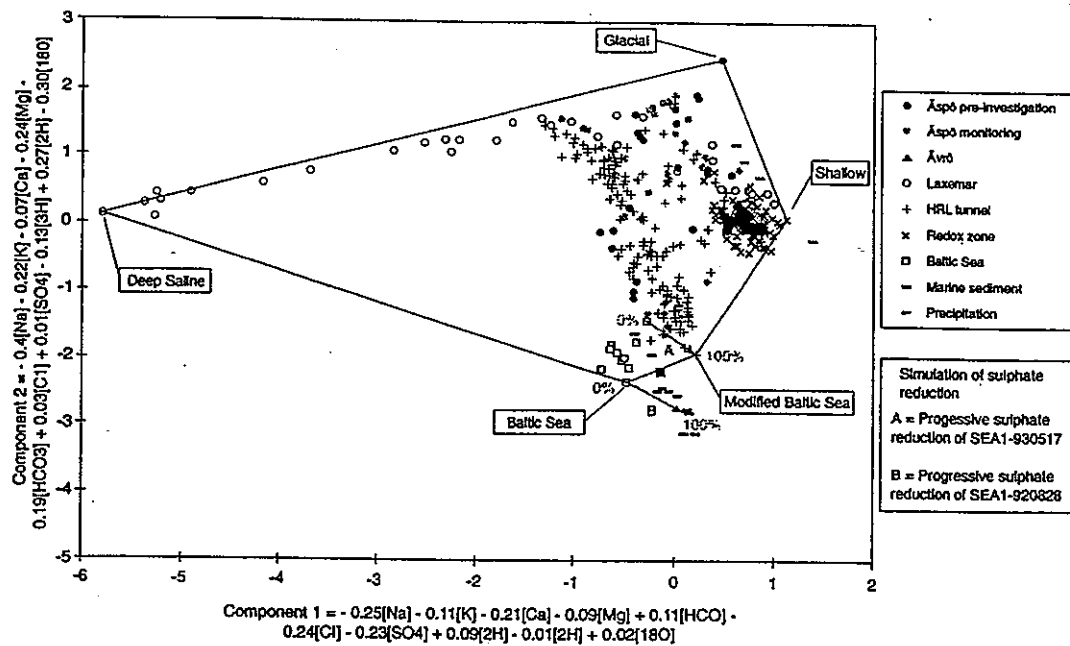


図 1.9 スウェーデン Aspö サイトの地下水化学データの主成分分析結果
 実測値の主成分座標上でのスカッタープロット及び特定された End members

(3) 反応性溶質移動モデルについて

地下水／岩石反応を記述するモデルは、

1. 閉鎖系モデル
2. 開放系モデル

の二つに区分される。前者は、（ピーカーの中の様に）閉じた空間の中で物質移動の寄与を無視して化学平衡を達成させるという単純化に対応し、後者は、分散移流方程式として表現される物質移動と化学反応とを連立して解析するものである。前者はある地点での岩石－地下水反応の詳細を解釈する上では有効であるが、水理学的な理解と整合的に、循環地下水の化学的特性が形成される過程とその変化をモデル化する上では、後者のアプローチが必須である。

開放系モデルは、

1. 局所瞬時平衡モデル
2. 速度論的モデル

の二つにさらに分かれる。前者は、化学反応が物質移動に比して十分に速く進むために各位置で化学平衡が達成されつつ物質の移動が生じるというものであり、計算効率の面で長所がある。後者は、一部の遅い反応を速度論的に考慮することによって非平衡状態を表現することができる。酸化還元反応を含む多くの岩石－地下水反応には緩やかな地下水流動と比較可能な程度に遅いものが含まれ、結果として、地下水組成が非平衡状態を呈することはしばしば見られる。この点を正確に解析するためには、速度論的モデルの適用が必要である。

上記の二つの開放系モデルは、それぞれ、水理的なプロセス群とのカップリングのあり方によっても分類される。

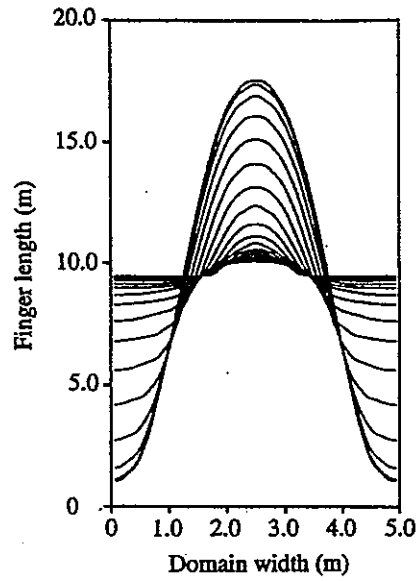
1. 弱連成モデル
2. 強連成モデル

このうち前者は、岩石－地下水反応が進展して造岩鉱物の一部が溶出したりあるいは二次鉱物が沈澱しても、透水係数等の岩石の水理学的特性は変化しないという仮定に対応している。他方、後者は、岩石－地下水反応に伴う空隙率

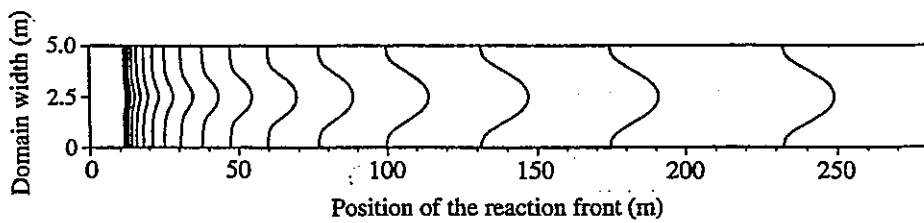
及び鉱物組成の関数として透水係数等を変化させ、さらに地下水流速場を随時更新するというものである。強連成モデルの解は、いわゆる Turing instability と呼ばれる不安定性を生じ、例えば均質な透水係数分布から出発しても時間の経過とともに不均質性が自然発生し、また、鉱物の溶解フロントは完全にフラットなものから粘性指状体 (fingering) と呼ばれるパターンを発達させることが知られている。この様な不安定な挙動に追従して精度良く解法することは数値解析的に極めて大きな負荷を生じることが知られている。

初期には均質な石灰岩中の地下水流動と石灰岩の溶解による透水係数のカップリングといった比較的単純な強連成問題については既に解析例 (図 1.10) があり、ここでは前出の Multi-gridding が有効に機能している。しかしながら、より複雑な問題については、更なる手法の改良が必要と考えられる。一つの可能性は、Multi-gridding 法を Generalised Travelling Coordinate と呼ばれる移動座標系[8]と組み合わせることである。この手法は、多くの地球化学問題におけるフロントが、ある速度で伝播していくことに注目して Travelling Coordinate と呼ばれるフロントの移動速度と一致した移動座標系を設定するものである。特に古典的な Travelling Coordinate では、十分に時間が経過した後のフロント伝播速度についての解析的な表現に基づき固定した移動座標を用いるが、Generalised Travelling Coordinate では、初期から解の形状に基づき数値的にフロントの移動速度を計算することが可能であり、このため、数値解析上は、広い解析領域の中に小さな moving window を設け、この窓の中に常にフロントを置きながら計算を行うことが可能となる。この手法では、解析対象領域が常に必要最小限のコンパクトなものに保たれることから、Multi-gridding と組み合わせることによってより効率の高い数値解析手法を構成することが可能と考えられる。図 1.11 に autocatalytic system と呼ばれる 2 成分系の問題について Generalised Travelling Coordinate を用いて行った解析の例[8]を示す。

地球化学—水理間の強弱連成の選択は、深地層試験のタイムスケールの中で、(坑道掘削等を発端として) 岩体の透水係数や空隙構造等を有意に変化させる様な地球化学的反応が生じるか否かに依っている。

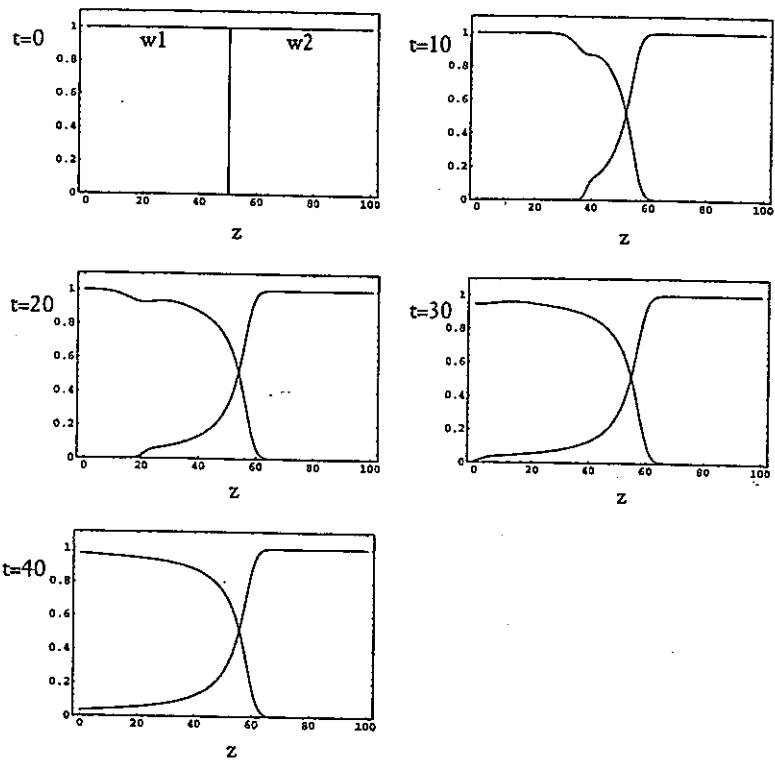


Growth of a lone finger from a small initial perturbation as viewed in a travelling coordinate system. The contours are plotted at times $10^{i/4}s$ ($i = 9, \dots, 31$).

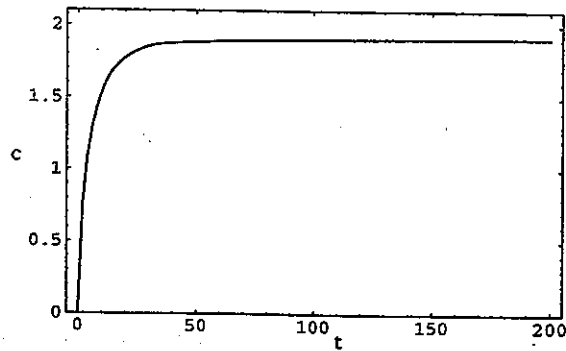


Growth of the finger in Fig. 3 as viewed in a fixed coordinate system. The contours are plotted at times $10^{i/4}s$ ($i = 12, \dots, 27$).

図 1.10 石灰岩の溶解フロントにおける粘性指状体形成に関する Multi-Gridding による強連成解析の例



Approach to a travelling wave solution obtained by numerical analysis using a "moving window": Auto-catalytic system ($\epsilon=0.1, p_1=1, p_2=2$)



Wave speed, $c(t)$, calculated for the auto-catalytic system ($\epsilon=0.1, p_1=1, p_2=2$) by using the wave speed functional

図 1.11 Generalised Travelling Coordinate による Autocatalytic System の解析例

上の4つの図はそれぞれ異なる時刻における moving window 中のフロント近傍での二つの化学種の濃度分布を、また、下の図は時間の関数としてのフロント伝播速度を示す。

(4) 課題

地下水化学モデルに関連する課題としては、

1. 地下水化学特性実測データに対する主成分分析による記述的モデルの作成及びこれを用いた異種水塊及びその混合状況の解釈
2. 反応性溶質移行に関する弱連成モデルの作成及び適用
3. 反応性溶質移行に関する強連成モデルの作成及び適用

が挙げられる。これらの課題の内容及び対応する技術的インベントリーについては章末の付録を参照のこと。

1.3.6 掘削影響モデル

(1) 目的及び概要

掘削影響モデルは、岩体特性モデル、地下水水理モデル及び地下水化学モデルによって記述される現在の地質環境特性に対して、坑道掘削等によりどのようなそしてどの程度の

1. 応力的擾乱
2. 水理学的擾乱
3. 化学的擾乱
4. 熱的擾乱

が生じるかを表現するものである。本モデルに関しては、坑道掘削以前に予測を行い、その結果を掘削中あるいはそれ以降の調査／試験結果と比較することにより検証を行うことが可能である。

上記の各種の擾乱のうち、掘削に伴って最も顕著に生じると考えられるのは応力及び水理学的な擾乱である。これは、掘削に伴って間隙水圧が解放されることにより、間隙水は坑道中に湧水として流入し、この結果岩盤空隙率に変化が生じて坑道周辺で圧密現象が起こる一方、特にアクセス坑道近傍における地下水位の低下が生じるというものである。この現象は、応力的過程と水理学的過程との間のカップリングが重要な役割を持ち得るものである。そこで、解析上もこれらの非線形な連成を考慮し得る数学的モデルを用いることが必要であ

り、岩体特性モデル及び地下水水理モデルによる掘削以前の岩盤強度及び地下水流速分布を初期条件として、堆積岩の弾塑性変形挙動と地下水／石油／メタンガスから成る多成分系の流動とを連立して表現することが重要である。

掘削に伴う化学的な擾乱としては、空気の侵入による地下水さらには鉱物の酸化還元状態の変化、坑道支保等のコンクリート材料と地下水との反応によるいわゆる hyper-alkaline plume の生成と進展、ならびに圧力解放に伴う溶存成分の気化による地下水特性の変化が考えられる。これらの変化に対しても、必要に応じて、弱連成及び強連成の二つの数学的モデルによる解析を行うものとする。

最後に、熱的擾乱に関しては、掘削後の坑道に発熱体を定置した試験を実施することが必要である。この試験の解析にあたっては、前出の多成分系流動解析モデルに水分飽和度及び依存した熱伝導と熱対流の効果を加えた連成モデルを用いることが必要と考えられる。また、この試験体系において生ずる温度勾配がもたらす高温領域での造岩鉱物の溶解、溶存成分の低温側への拡散と低温領域での二次鉱物の沈澱という鉱物学的な変化についての非等温系反応性溶質移行解析も併せて実施することが必要である。

(2) 多成分の非定常流動解析について

石油、及び天然ガスの存在は、移動可能な流体が複数になることを意味する。この様な多相流の解析手法としては、ダルシー-2 相流モデル及び多相間の相転移を考慮したモデルがある。このうち前者は、ガスと液体（水及び石油）が混合及び相転移することなく移動することを前提としたものであるのに対して、後者では、掘削による圧力開放といった擾乱によって石油成分の一部が気化することや、あるいは温度変化によってガス成分が液化する等の変化を含めて以下の5成分系の移動と（圧力及び温度変化に伴う）相転移を解析する。

- live oil（揮発性成分が過飽和であり気泡を生じている石油）
- dead oil（揮発性成分が不飽和な状態にある石油）
- dry gas（ガスの分圧が不飽和で液化した石油粒子を含まない天然ガス）
- wet gas（ガスの分圧が過飽和で液化した石油粒子を含む天然ガス）
- 水

多相非定常流動解析モデルのひとつである ECLIPSE は、三次元の多相間の相

転移を考慮したモデルに基づく reservoir シミュレーション用のソフトウェアプログラムであり、石油あるいは天然ガスの収率を正確に予測することを目的とした reservoir シミュレーションでは標準となりつつある。

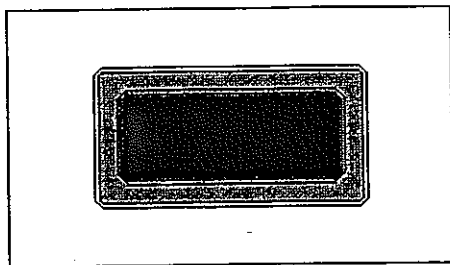
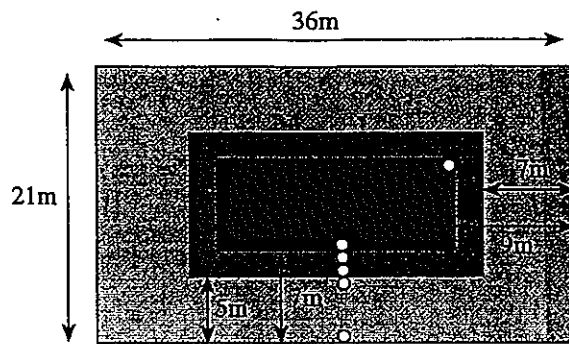
ECLIPSE (300) においては PVT データファイルと呼ばれるモジュールに於いて上記 5 成分系の平衡状態が圧力-温度（あるいは濃度）-体積の関数として記述される。そして、この平衡成分系に対応する代数方程式は、多成分系での各成分の透水係数表現を介して多相流の分散・移流方程式と連立して数値的に解法される。

施設の建設あるいは操業においては、掘削による圧力開放や温度変化に伴って地下深部に於ける 5 成分系の平衡が乱される可能性があり、この場合には新たなガス発生等の危険性が想定される。そこで、建設及び操業時の安全性を確保する上でも、多相流の挙動を把握することが必要と考えられる。

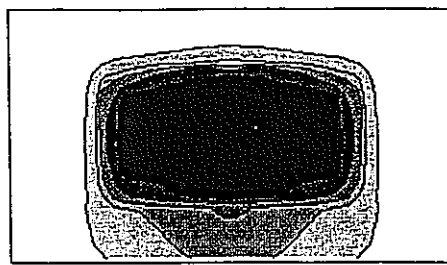
(3) 掘削に伴う擾乱についての加速試験の必要性について

坑道支保等のコンクリート系材料との反応により地下水の pH は 12 以上にまで上昇し、この結果として造岩鉱物の一部が溶解する一方ゼオライト等の二次鉱物の沈澱が生ずる。地下施設の建設の後、空間的には、未だ造岩鉱物が残り pH をバッファーしている下流側と、造岩鉱物が枯渇してコンクリート反応に支配された高い pH を示す上流側とがフロントと呼ばれる反応の活発に進んでいる遷移層を挟んで存在するという構造を呈する。また、このフロントは時間とともに伝播していくこととなる。図 1.12 は、多次元の数値論的（弱連成）反応性溶質移動モデル ARASE を用いてシミュレートされたフロントの形成と伝播の例である。現位置においてこのような現象を観察するためには、コンクリートの比表面積を増したサンプル（粉碎された試料等）を用いる等、加速試験を行うことが必要と考えられる。

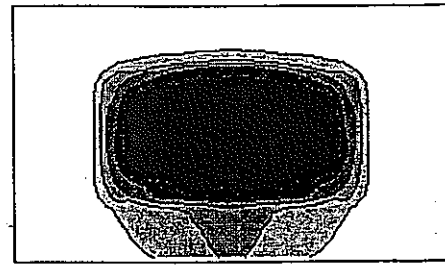
他方、発熱体を用いた既往の試験において観察された鉱物的変化の例としては、図 1.13 に示す Clay stone が挙げられる。これは、4 年間の発熱試験の終了後発熱体の直近で観察されたものであるが、温度勾配を考慮した反応性溶質移動解析の結果、試験終了時の急激な冷却に起因するものであり、実際の処分場条件でも生じるとは考えにくいことが示唆されている。この例は、加速試験が現象を定性的にも異なったものとしてしまう例であり、十分な予察解析に基づく適切な加速の必要性を示すものである。



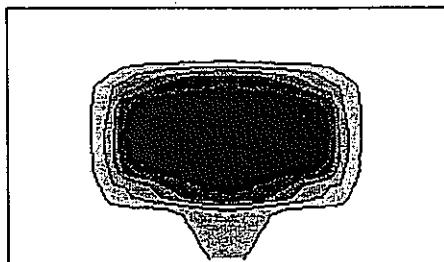
0 years



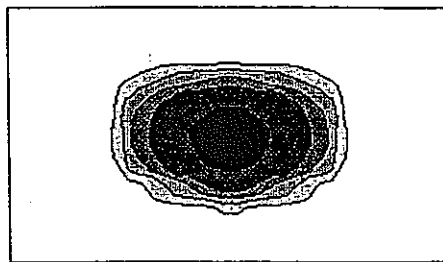
1000 years



10000 years



100000 years



300000 years

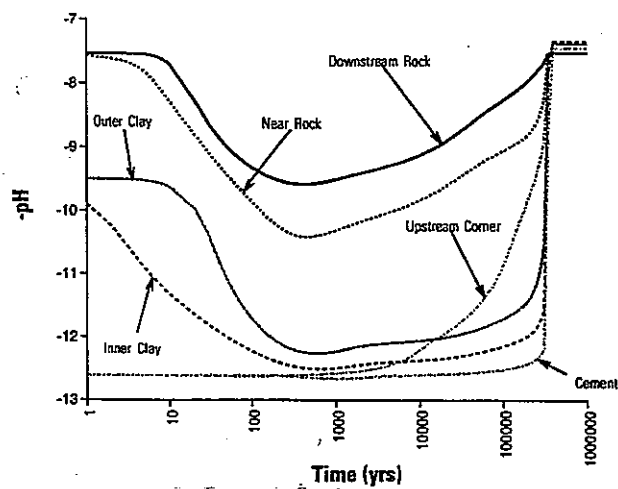


図 1.12 ARASE による解析結果の例

コンクリート構造物及びベントナイト緩衝材を有する処分場近傍での高アルカリブルームの形成と消失

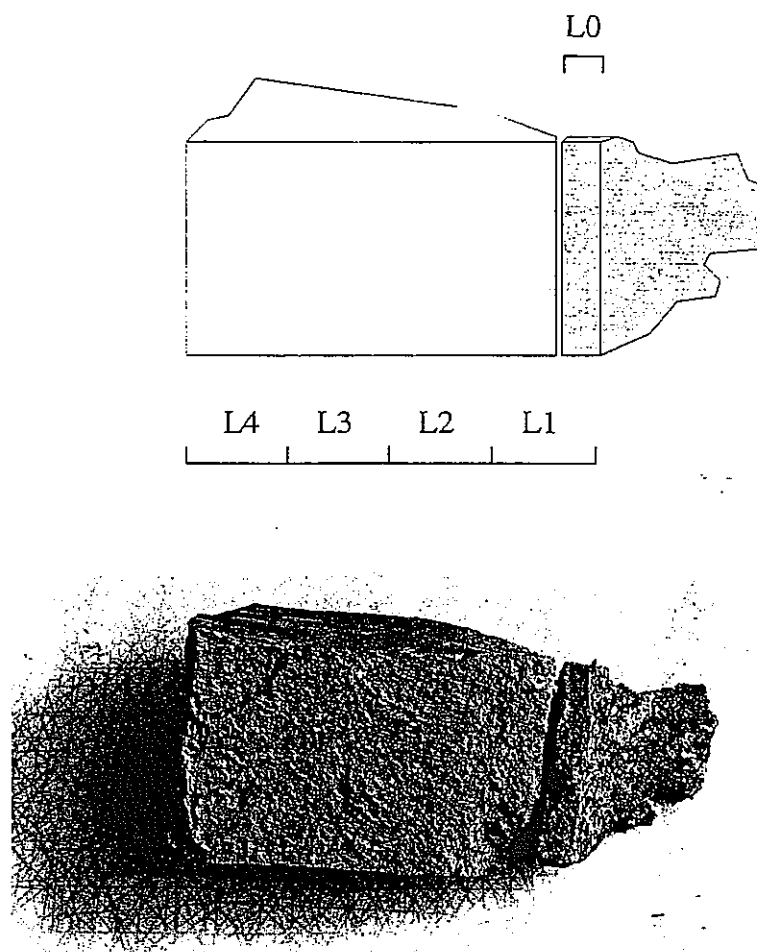


図 1.13 スウェーデン Stripa サイトにおける原位置熱的影響試験において Foca 粘土の変質の結果生じたと考えられる Clay stone の観察例
 図中の右端が発熱体と接していた部分。明瞭な変質が認められる部分の大きさは 1cm 程度。

(4) 課題

掘削影響モデルに関する課題としては

1. 岩体弾塑性変形と多成分流体移動の非線形連成モデリング及び実測値との比較による検証
2. 坑道周辺の酸化還元状態変化に関する反応性溶質移動モデリング及び実測値との比較による検証
3. コンクリート/地下水反応による hyper-alkaline plume 生成/進展のモデリング及び実測値との比較による検証
4. 圧力解放に伴う溶存成分の気化と地下水特性変化のモデリング及び実測値との比較による検証
5. 熱的影響試験における多成分系流動問題と連成した熱伝導/熱対流モデリング
6. 温度勾配が存在する状況で反応性溶質移行モデルを用いた低温側/高温側それぞれの鉱物組成変化の解析及び試験結果との比較

が挙げられる。これらの課題の内容及び対応する技術的インベントリーについては章末の付録を参照のこと。

1.3.7 トレース物質移行モデル

(1) 目的及び概要

トレース物質移行モデルは、坑道を用いて行う保存性及び吸着性のトレーサ試験において

1. 液相及び固相中トレーサ濃度プロファイルの時間的变化

を表現するものである。この目的のために、前出の地質構造モデルにおける地質構造と坑道及び試験機器レイアウト、遅延効果に関連する鉱物組成や微視的空隙構造等の岩体特性モデル、地下水水理や地下水化学、さらには坑道掘削影響モデルの全てを集約した上で、各トレーサの移行に関する移流分散モデルを作成し適用することが必要である。過去のトレーサ試験においては、微視的空隙構造に影響された分散挙動の Fick 型モデルからのずれ、非線形吸着の効果、速度論的吸脱着等の原因により予測解析が実際の測定値（例えば、dipole 試験に

おける集水地点での破過曲線)とは整合的にならない事例が多い。そこで、トレーサ試験の解析にあたっては、あらかじめ一種類の移行モデルに限定することなく、上述した種々の効果をオプションとして備えたいいわゆる mother model を作成しておき、解析の自由度を向上することが必要である。この様な準備をあらかじめ十分に行っておくことにより、いずれにせよ反復的なものとなるであろうトレーサ移行解析は、modeller の ad hoc なアイディアに依存するのではなく、トレーサ移行に関連する種々の現象についての様々なモデル化オプションについての体系的なスクリーニングの過程として位置付けることが可能と成る。また、予察解析の段階で、複数のモデル化オプションを用いて幅のある解析結果を導出しておき、各オプション間の差異が顕在化するという意味で最適なトレーサ試験設計を行うことも重要である。

(2) 課題

トレーサ物質移行モデルに関連する課題としては、

1. トレーサ量の物質移行に関する種々の現象についての多様なモデル化オプションを包含した mother model の作成
2. mother model を用いた複数のモデル化オプションによる予察解析及びこの結果に基づくトレーサ試験最適化の支援及び試験結果との比較によるモデル化オプションのスクリーニング

が挙げられる。これらの課題の内容及び対応する技術的インベントリーについては章末の付録を参照のこと。

1.4 まとめ及び地質環境モデルに関する情報全体の体系的管理

以上の各地質環境モデル構築作業の流れを図 1.14 に、また、各課題のレベルにおける情報の授受の関係を図 1.15 にまとめる。

既に述べた様に、深地層の研究施設における研究計画は、異なる組織で働く、多分野における多くの個人が参加するものであり、これらの個人が

- ・データ
- ・ドキュメント
- ・数学モデル (場のモデル及びプロセスモデル)

・地質環境モデル

といった全ての項目について常に最新の知識及び情報を共有することが効率的な進行のための必須条件となる。また、特に本計画では、地質環境モデルの更新が反復的に実施されるものであることから、適切なバージョン管理による情報の更新、及び整理されたアクセス権の徹底は不必要な混乱を避ける上で不可欠の機能であると考えられる。

このような機能を現実のものとするためには、

1. イントラ・インターネットベースのインタラクティブな知識・情報アーカイブによる情報管理システムの構築と適用

が必要である。この機能は、深地層の研究施設における研究計画を国際的な研究者の交流の場として活用する上でも必須のものであると考えられる。

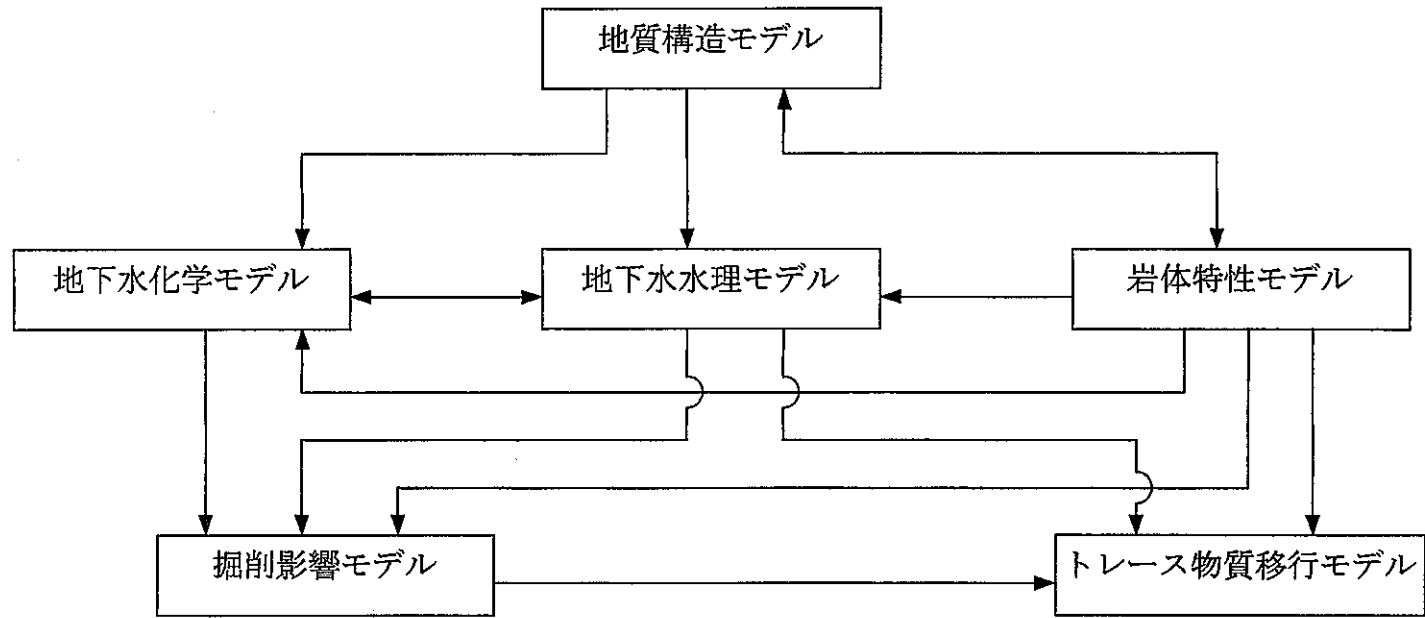


図 1.14 地質環境モデル構築の流れ

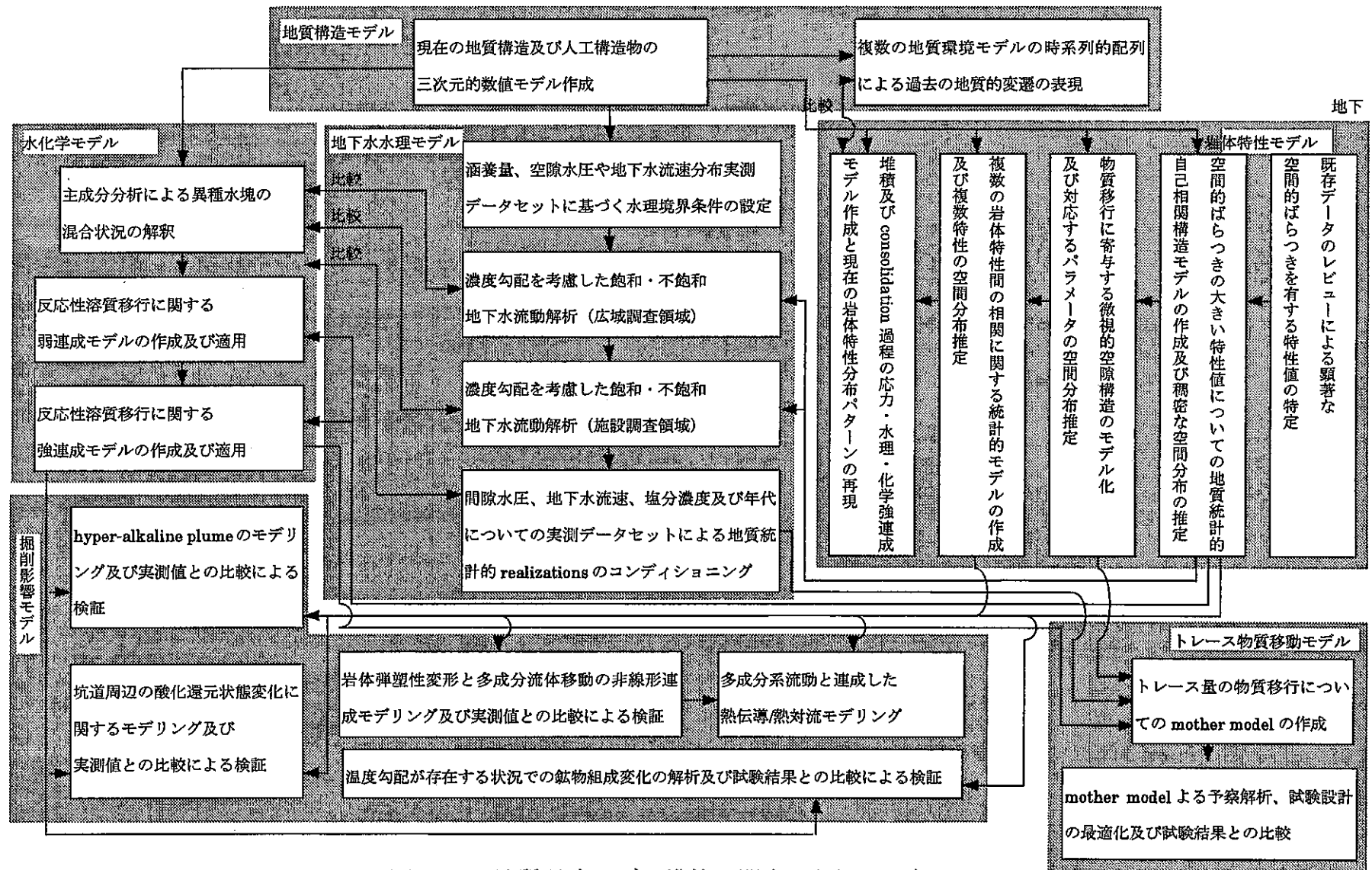


図 1.15 地質環境モデル構築に関する課題間の相関

付録 1-1 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (1)

タイトル	地質構造及び人工構造物（試錐孔、坑道）の三次元的数値モデル作成
目的及び概要	<p>広域調査領域及び施設調査領域のそれぞれにおいて、</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 断層あるいは破砕帯といった主要な不連続構造 2. 層序 3. 褶曲構造 <p>を、三次元モデルとして定量的に表現する。また、施設調査領域モデルには坑道及び試錐孔等の人工構造物を含める。</p>
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 汎用三次元地質モデリングパッケージ (EarthVision) 2. 資源開発及び鉱山設計用モデリングパッケージ (Vulcan) 3. 石油探査／掘削用モデリングパッケージ (Stratamodel, IRAP, GOCAD)
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 各種モデリングパッケージの相互比較及び選出 2. 各段階及びステージにおける最新の地質構造データの入力 3. 複数の専門家グループによるデータの解釈及び独立な地質構造モデル作成 4. 複数の代替的モデルの比較 5. 試錐孔配置及び坑道レイアウトのモデル化 6. 5.の地質構造モデルへの読み込み 7. 代替的モデル間の差異を顕在化させ比較を行うための次段階の調査／試験計画の最適化 <p>注) 2.以降の各ステップは、プロジェクトの進展に伴って反復的に行う。</p>
参考文献	<p>Jones, T A, <i>Extensions to three dimensions; Introduction to the section on 3D geologic block modeling</i>, Computer Modelling of Geologic Surfaces and Volumes, AAPG Computer Applications in Geology, 1, 175-182 (1992)</p> <p>White, M J, et.al., <i>GEOMASS (Version 1.0) PNC Training Course Tono Geosciences Senter</i>, QuantiSci Report MC-5041A-17 (1998)</p>

付録 1-2 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (2)

タイトル	複数の地質構造モデル (スナップショット) の時系列的配列による過去の地質学的変遷の表現
目的及び概要	<p>広域調査領域及び施設調査領域において、過去の複数の時点における</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 断層あるいは破碎帯といった主要な不連続構造 2. 層序 3. 褶曲構造 <p>を再現することにより地質学的変遷を表現する。</p>
適用可能な要素技術	三次元地質モデリングパッケージ
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 褶曲、断層運動、隆起／沈降、侵食／堆積、についての直接及び間接的な情報の収集 2. 過去の地質変動に関する作業仮説の作成 3. 各作業仮説に基づく広域調査領域及び施設調査領域での地質構造モデルスナップショットの時系列的配列の作成 4. 各作業仮説における時間的挙動の整合性の確認 5. 各仮説間の比較を行うための次段階以降の調査／試験計画の最適化 6. 堆積及び consolidation についてのモデリング結果 (付録 1-7 参照) との比較
参考文献	<p>Jones, T A, <i>Extensions to three dimensions; Introduction to the section on 3D geologic block modeling</i>, Computer Modelling of Geologic Surfaces and Volumes, AAPG Computer Applications in Geology, 1, 175-182 (1992)</p>

付録 1-3 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (3)

タイトル	既存データのレビューによる顕著な空間的ばらつきを有する特性値の特定
目的及び概要	<p>岩体特性（鉱物組成、空隙率、透水係数、微視的空隙構造、岩盤強度、及び岩盤熱特性、地下水以外の流体の透過特性）のうち、モデル化の観点から空間的な不均質性を考慮する必要のあるものを特定する。この際、測定方法によっては既に空間的平均化が不可避のものもあり（例、パッカーテストによる透水係数値測定）、これらについては異なるスケールでの測定（例、コアサンプルについての透水試験）の必要性を明確化する。</p>
適用可能な要素技術	<p>空間的ばらつきの程度は、実測データセットに対して一般的な統計的操作を行い標準偏差等を求めることによって行われる。ただし、計画初期の段階では、データ点数の不足のためにばらつきを過小評価する可能性がある。このような初期の不確実性の定量化には、地質統計的 boot strapping（第2章参照）が適用可能である。</p>
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 各特性値の測定方法に附随した解像度の明確化及び性能評価あるいは設計／施工技術開発上求められる解像度との比較 2. より微細な解像度を持つ試験の必要性の明確化 3. 必要な解像度における実測データのばらつきの統計的解析 4. Boot strapping 解析
参考文献	<p>動力炉核燃料開発事業団、貯蔵工学センターに関する調査のとりまとめ、PNC TN1420 98-003 (1998)</p>

付録 1-4 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (4)

タイトル	空間的ばらつきの大きい特性値についての地質統計的自己相関構造モデルの作成及び稠密な空間分布の推定
目的及び概要	前出の課題において特定される空間的ばらつきの大きい岩体特性（透水係数、等）について、実測データセットに基づきその自己相関構造を表現するセミバリオグラムを推定する。また、各段階あるいはステージで推定されるセミバリオグラムの諸パラメータに対して、地質統計的 boot strapping 解析を実施することにより、データ点数の不足に起因する不確実性の大きさを評価する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 統計的自己アファインフラクタルモデル 2. Sequential Gaussian モデル 3. セミバリオグラムについてのより古典的なテンプレート 4. Wavelet 変換等による統計的層区分
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 地質構造モデルに基づく決定論的層区分および Wavelet 変換等による統計的領域区分の導出と相互比較 2. 1.で区分された各領域における実測データセットに対する上記各モデルのフィッティング及び対応するパラメータ値の推定 3. フィッティング残差を尺度とした各モデルの適合性の比較 4. 地質統計的 Boot strapping によるパラメータ推定値の不確実性評価 5. 各モデル及び対応するパラメータセットを用いた当該特性値空間分布の稠密な推定（複数の realizations の作成） 6. 決定論的及び統計的領域分割のそれぞれに対する各モデルによる推定結果の比較及び Boot strapping の結果を考慮した不確実性の評価 <p>注) この一連の作業は、新たなデータの取得に伴って反復的に行う。</p>
参考文献	Impey M D and Grindrod P, <i>Application of fractal geometry to geological site characterization</i> , Proc. British Computer Society Conference "Applications of Fractals and Chaos", London (1992)

付録 1-5 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (5)

タイトル	物質移行に寄与する微視的空隙構造のモデル化及び対応する定量的パラメータ空間分布の推定
目的及び概要	堆積岩中の物質移行に対する遅延機構及び対応する微視的空隙構造を概念モデル化し、このモデルの主要なパラメータを site specific な地質環境特性として新たに定義する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 室内放射性トレーサ試験 2. 偏光顕微鏡等による鉱物組成、空隙構造の推定 3. オートラジオグラフ、EPMA、SEM 等による物質移動経路の推定
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 堆積岩のコアサンプルを用いた室内放射性トレーサ試験の実施 2. 偏光顕微鏡等による鉱物組成、空隙構造の推定 3. オートラジオグラフ、EPMA、SEM 等による物質移動経路の特定 4. 物質移動に寄与する微視的空隙構造の概念モデル化 5. 4.のモデルに基づく数学的定式化 6. 室内放射性トレーサ試験結果に対する数学モデルの適用
参考文献	動燃事業団、地層処分研究開発の現状 (平成 8 年度)、PNC TN1410 96-071 (1996)

付録 1-6 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (6)

タイトル	複数の岩体特性間の相関に関する統計的モデルの作成及び複数特性の空間分布の推定
目的及び概要	複数の岩体特性値間の相関の有無及び種類を明確化することによって、岩体特性の包括的な理解を向上するとともに、比較的測定の容易な特性値の空間分布に関する情報をより測定の困難な特性値の分布推定に用いる。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 統計的相関分析 2. Genetic algorithm による異種特性分布推定値の最適化 (5.参照) 3. 堆積、consolidation に関する演繹的モデリング (付録 1-7 参照)
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 複数特性値間の相関に関する統計的解析 2. 複数特性値の実測データセットによってコンディショニングされた岩体特性ベクトル値空間分布の地質統計的推定 3. 堆積、consolidation に関する演繹的モデリングとの比較及び相互検証
参考文献	Takase H, et. al., <i>New Horizons in Performance Assessment, Preliminary Discussion of the MACRO II Programme, 3.3 Effects of Heterogeneous Flow and Mineralogy on Sorptive Solute Transport</i> , QuantiSci Report ID5013A-1 Version 2 (1996)

付録 1-7 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (7)

タイトル	堆積及び consolidation 過程の応力/水理/化学強連成モデル作成及びこのモデルを用いた現在の岩体特性分布の再現
目的及び概要	<p>鉱物の速度論的溶解/沈澱、反応性溶質の移動、構成粒子の機械的圧密及び堆積岩マトリックスの巨視的な弾塑性変形をカップリングした非線形応力/水理/化学強連成モデルにより過去の長期にわたる堆積及び consolidation 過程をシミュレートすることによって、岩体特性空間分布に見られるバンド状の周期的変動及び stylolite の様な特異面の生成過程を再現する。また、この結果を現在の地質構造及び岩体特性についての地質統計的モデルと比較し相互の検証に資する。</p>
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. Dewers - Ortoleva モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 堆積及び consolidation 過程についての知見の収集 2. 1の結果に基づく Dewers - Ortoleva モデル中の各プロセスモデルの見直し 3. 変更された Dewers - Ortoleva モデルによる堆積岩の過去の長期的変遷のシミュレーション 4. シミュレーション結果と地質構造モデルとの定性的比較 5. シミュレーション結果に対する地質統計的手法の適用による自己相関構造及び複数の特性間の相関状況の整理 6. 5の結果と実測データの地質統計的特徴の比較
参考文献	<p>Dewer T, and Ortoleva P, <i>Non-Linear Dynamics in Chemically Compacting Porous Media, Modelling and Analysis of Diffusive and Advective Processes in Geosciences</i>, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), (1992)</p>

付録 1-8 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (8)

タイトル	涵養量、間隙水圧や地下水流速データセットに基づく水理境界条件の設定
目的及び概要	涵養量、間隙水圧や地下水流速の実測データセットに基づき、広域調査領域及び施設調査領域における地下水流動解析のための境界条件を設定する。
適用可能な要素技術	1. 表層水理の水収支に基づく地下水浸透量の推定手法
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 地質構造モデルに含まれる地形情報等に基づく広域調査領域での側方及び下方境界面の選定 2. 広域調査領域での表層水理の水収支計算に基づく上部境界条件(地下水浸透量)の設定
参考文献	動燃事業団、地層処分研究開発の現状(平成元年度)、PNC TN1410 91-009 (1991)

付録 1-9 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (9)

タイトル	密度勾配を考慮した飽和／不飽和地下水流動解析（広域調査領域）
目的及び概要	広域の地下水流動に関して、地形、塩淡水境界の存在、巨視的な堆積構造といった大規模な空間的特徴に支配された現在の地下水流動の概況を再現するとともに、この結果を用いて施設調査領域での解析への境界条件の設定を行う。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 塩淡水境界を sharp interface と仮定した非定常飽和不飽和地下水流動モデル (Two-fluid approach) 2. 塩分の移流分散に伴う地下水流動への非線形な影響を考慮した非定常飽和不飽和地下水流動モデル (One-dynamical-fluid approach) 3. 2.に対する安定な数値解を得るための Adaptive gridding
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 岩体特性モデルに基づく広域調査領域での透水係数空間分布の推定 2. Two-fluid approach を用いた現地形、涵養量、堆積構造に対応する地下水流動定常解の算出 3. One-dynamical-fluid approach による塩淡水境界（遷移領域）の解析及びこの結果を用いた sharp interface 近似の妥当性の評価 4. 過去の地形変化を境界条件の時間依存性として取り入れた代替的な評価の実施及び 1.との比較による準定常仮説の検証 5. 多数の realizations についての解析及びこれらの ensemble に対する統計的分析 6. Boot strapping による不確実性評価 7. 施設調査領域の解析のための境界条件設定
参考文献	<p>Essaid H I, Multilayered Sharp Interface Model of Coupled Freshwater and Saltwater Flow in Coastal Systems: Model Development and Application, Water Resources and Research, Vol.26, No.7, pp1431-1454, (1990)</p> <p>Taigbenu A E, et.al., Boundary integral solution to seawater intrusion into coastal aquifers, Water Resources and Research, Vol.20, No.8, pp1150-1158, (1984)</p>

付録 1-10 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (10)

タイトル	密度勾配を考慮した飽和／不飽和地下水流動解析 (施設調査領域)
目的及び概要	施設調査領域の地下水流動に関して、透水係数の空間的不均質性、塩水／淡水遷移領域での密度勾配に焦点をあてた、現在の地下水流動の詳細を再現する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 塩分の移流分散に伴う地下水流動への非線形な影響を考慮した非定常飽和不飽和地下水流動モデル (One-dynamical-fluid approach) 2. 2.に対する安定な数値解を得るための Adaptive gridding
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 岩体特性モデルに基づく施設調査領域での透水係数空間分布の推定 2. One-dynamical-fluid approach による地下水流動解析 3. 多数の realizations の作成及びこれらの ensemble についての統計的分析 4. Boot strapping による不確実性評価
参考文献	Taigbenu A E, et.al., Boundary integral solution to seawater intrusion into coastal aquifers, Water Resources and Research, Vol.20, No.8, pp1150-1158, (1984)

付録 1-11 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (11)

タイトル	間隙水圧、地下水流速、塩分濃度及び年代についての実測データセットによる地質統計的 realizations のコンディショニング
目的及び概要	広域調査領域及び施設調査領域のそれぞれについて、統計的に算出された地下水流動について多数の realizations の重み付けされた線形和を考え、これらの中で間隙水圧、地下水流速、塩分濃度や地下水年代といった多角的な実測データの全体を整合的に説明し得るという意味で最適なものを抽出する。
適用可能な要素技術	1. Genetic algorithm による最適化手法 (5.参照)
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 広域調査領域及び施設調査領域における間隙水圧、地下水流速、塩分濃度や地下水年代といった多角的な実測データの収集と整理 2. 多変量の最適化のための目的関数の設計 3. Genetic algorithm による realizations 間の最適な重み係数 の探査 4. Boot strapping による不確実性評価
参考文献	Taigbenu A E, et.al., Boundary integral solution to seawater intrusion into coastal aquifers, Water Resources and Research, Vol.20, No.8, pp1150-1158, (1984)

付録 1-12 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (12)

タイトル	地下水化学特性実測データに対する主成分分析による記述的モデルの作成及びこれを用いた異種水塊及びその混合状況の解釈
目的及び概要	広域調査領域及び施設調査領域に分布した試錐孔における地下水化学特性実測データから異種水塊を識別し、これらの相対的位置関係を推定する。
適用可能な要素技術	1. 主成分分析 (Principal Component Analysis) による多成分化学データ内のパターン認識手法
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 広域調査領域及び施設調査領域に分布した地下水化学特性についての実測データの収集と整理 2. 主成分分析の実施 3. 抽出された主成分に基づく実測データセットの再整理 4. End members (異種水塊) の特定及びこれらの相対的位置と混合状況の解釈 5. 地下水流動解析結果及び鉱物組成分布との比較による相互検証
参考文献	<p>Wold S, et.al., Multivariate analysis in chemistry, Chemometrics -Mathematical and Statistics in Chemistry, pp 17-95, (1984)</p> <p>Laaksoharju M, Sulphate reduction in the Aspo HRL tunnel, SKB Technical Report 95-25, (1995)</p>

付録 1-13 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (13)

タイトル	反応性溶質移行に関する弱連成モデルの作成及び適用
目的及び概要	主成分分析によって経験的に導出された異種水塊の存在とこれらの混合状況を、別途計算された地下水流動場における反応性溶質移行のプロセスモデルによって理論的に説明する。
適用可能な要素技術	1. 反応性溶質移行に関する弱連成モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 主成分分析によって同定された個々の水塊についての化学反応系のモデリング 2. 各反応の反応速度に応じた速度論的モデルと瞬時平衡モデルの区分 3. 溶質の分散過程（異種水塊間の混合過程）のモデリング 4. カラム試験の解析 5. 広域調査領域及び施設調査領域における地下水流動場中の反応性溶質移行モデリング 6. 実測された地下水化学データセット及び主成分分析結果との比較
参考文献	Grindrod P, and Takase H, Reactive chemical transport within engineered barriers, J. Hydrology, Vol.21 (1996)

付録 1-14 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (14)

タイトル	反応性溶質移行に関する強連成モデルの作成及び適用
目的及び概要	化学反応の結果生じる鉱物学的変化が地下水流動及び溶質移行に及ぼす影響及びこのフィードバック機構によって生じる非線形な化学的変遷の定量化
適用可能な要素技術	1. 反応性溶質移行に関する強連成モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 弱連成モデルの解析によって同定された主要な鉱物学的変化の整理 2. 上記の鉱物学的変化に伴う空隙率、透水係数、及び実効拡散係数変化のモデリング 3. カラム試験の解析 4. 鉱物学的変化が顕著な部分領域への強連成モデルの適用 5. 弱連成モデルによる解析結果との比較 6. 堆積及び consolidation についての応力/水理/化学反応連成モデルによる解析結果との比較
参考文献	Chen W, and Ortoleva P, Development of Complex Reaction Front Morphologies Through Nonlinear Fluid-Rock Interaction: Modeling, Asymptotic and Numerical Studies, Modeling and Analysis of Diffusive and Advective Processes in Geosciences, pp52-71 (1992)

付録 1-15 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (15)

タイトル	岩体弾塑性変形と多成分流体移動の非線形連成モデリング及び実測値との比較による検証
目的及び概要	<p>坑道掘削による岩盤応力及び間隙水圧の解放に伴って生じる</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 岩盤変形 2. 間隙水（石油）移動 3. 溶存成分気化 <p>をモデル化することにより、応力及び水理的擾乱の大きさとその時間的推移を評価する。</p>
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 圧密／変形する多孔質媒体中の多成分流体移動モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 定常応力解析による掘削以前の初期応力分布の推定 2. 地下水流動解析に基づく初期間隙水圧分布の推定 3. 圧密／変形する多孔質媒体中の多成分流体移動モデルを用いた、坑道掘削時の岩盤変形、流体成分転移及び流動の予測 4. 掘削時の実測データセットとの比較による検証 5. （必要に応じて）数学モデルの改良及び再解析 6. 坑道埋め戻し後の応力／水理学的挙動の予測解析
参考文献	<p>Lewis R W, and Srefler B A, The Finite Element Method in the Deformation and Consolidation of Porous Media, John Wiley & Sons, (1987)</p>

付録 1-16 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (16)

タイトル	坑道周辺の酸化還元状態変化に関する反応性溶質移動モデリング及び実測値との比較による検証
目的及び概要	坑道掘削後の空気の侵入に伴う <ol style="list-style-type: none"> 1. 地下水酸化 2. 鉱物酸化 をモデル化することにより、酸化還元状態についての化学的擾乱の大きさとその時間的推移を評価する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 反応性溶質移動に関する弱連成モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 反応性溶質移動解析等による初期地下水組成の推定 2. 岩体特性モデルによる初期鉱物組成の推定 3. 反応性溶質移動に関する弱連成モデルを用いた空気侵入時の地下水／鉱物酸化の解析 4. 掘削後の実測データセットとの比較による検証 5. (必要に応じて) 数学モデルの改良及び再解析 6. 坑道埋め戻し後の酸化剤の消費／散逸及び地下水や鉱物の還元状態への回帰挙動の予測解析
参考文献	Grindrod P, and Takase H, Reactive chemical transport within engineered barriers, J. Hydrology, Vol.21 (1996)

付録 1-17 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (17)

タイトル	コンクリート/地下水反応による hyper-alkaline plume 生成/進展のモデリング及び実測値との比較による検証
目的及び概要	<p>坑道支保等のコンクリート系材料と地下水の反応に伴う hyper-alkaline plume 生成、及びこれと堆積岩との反応による造岩鉱物の溶解</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 地下水酸化 2. 鉱物酸化 <p>をモデル化することにより、化学的擾乱の大きさとその時間的推移を評価する。</p>
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 反応性溶質移動に関する強連成モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 反応性溶質移動解析等による初期地下水組成の推定 2. 岩体特性モデルによる初期鉱物組成の推定 3. 反応性溶質移動に関する強連成モデルを用いたコンクリート空隙水の移動及び岩体との化学的相互作用の解析 4. 掘削後の実測データセットとの比較による検証 5. (必要に応じて) 数学モデルの改良及び再解析 6. 坑道埋め戻し後のさらなる変遷の予測
参考文献	Grindrod P, and Takase H, Reactive chemical transport within engineered barriers, J. Hydrology, Vol.21 (1996)

付録 1-18 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (18)

タイトル	熱的影響試験における多成分系流動問題と連成した熱伝導／熱対流モデリング
目的及び概要	<p>坑道内に発熱体が置かれた場合の</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 多成分流体（ガス、石油、地下水）の挙動 2. 流体移動に影響された熱移動（水分飽和度に依存した伝導、対流）をモデル化することにより熱的擾乱の大きさとその時間的推移を定量化する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 熱／多相流連成解析モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 岩体弾塑性変形と多成分流体移動の非線形連成モデリングによる坑道掘削後の多成分流体挙動の推定 2. 熱／多相流連成解析モデルによる温度上昇及び多成分流体挙動の解析 3. 発熱終了後の温度分布及び流体移動の解析 4. 試験結果との比較による検証 5. （必要に応じて）数学モデルの改良及び再解析
参考文献	<p>Lewis R W, and Screfler B A, The Finite Element Method in the Deformation and Consolidation of Porous Media, John Wiley & Sons, (1987)</p>

付録 1-19 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (19)

タイトル	温度勾配が存在する状況で反応性溶質移行モデルを用いた低温側/高温側それぞれの鉱物組成変化の解析及び試験結果との比較
目的及び概要	坑道内に発熱体が置かれた場合に形成される温度勾配によって生じる、高温側での造岩鉱物の溶解と低温側での二次鉱物の沈澱という鉱物組成の空間的なトレンドをモデル化することにより、熱的現象に起因した化学的擾乱の大きさとその時間的推移を定量化する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 反応性溶質移動解析モデル 2. 不飽和領域での溶質移流拡散モデル
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 熱/多相流連成解析モデルにより算出される温度及水分飽和度プロファイルの時間的変遷を考慮した反応性溶質移動解析による造岩鉱物溶解と二次鉱物沈澱のシミュレーション 2. 試験結果との比較による検証 3. (必要に応じて) 数学モデルの改良及び再解析
参考文献	Pusch R, et. al., <i>Hydrothermal field test with french candidate clay embedding steel heater in the Stripa mine</i> , SKB Technical Report 93-02, (1992)

付録 1-20 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (20)

タイトル	トレース量の物質移行に関する種々の現象についての多様なモデル化オプションを包含した mother model の作成
目的及び概要	これまでのほとんどのトレーサ試験結果において見られた、理想化された移行挙動からのずれ（微視的空隙構造に影響された分散挙動の Fick 型モデルからのずれ、非線形吸着の効果、速度論的吸脱着、等）を想定し、試験に先立ってあらかじめこれらに対応したモデル化オプションを包含した mother model を作成する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 速い移行形態変化についての mass partition モデル 2. 遅い移行形態変化についての速度論的モデル 3. チャンネルネットワークモデル（微小空隙構造に適用）
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 微視的空隙構造を考慮した物質移行モデル（付録 1-5）への種々のモデル化オプションの付加による mother model の作成
参考文献	Takase H, et.al, On EBS Modelling for Performance Assessment: Using Shadow Models to Identify Robust System Responses, Scientific Basis for Nuclear Waste Management XXI, pp847-856

付録 1-21 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (21)

タイトル	mother model による予察解析、試験設計の最適化及び試験結果との比較
目的及び概要	mother model に含まれる種々のモデル化オプション及びそれぞれに対応したパラメータ値の変動に対応して様々な代替的解析を行い、これらの解析間の差異が顕在化するという意味で最適な試験設計を明らかにする。また、試験の結果に基づき、モデル化オプションについてのスクリーニングを行い、より蓋然性の高いモデルを明確化する。
適用可能な要素技術	
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. コアサンプルを用いた室内トレーサ試験結果に基づく、モデル化オプションについての第一次スクリーニング 2. 残されたモデル化オプションを用いた複数の代替的解析の実施 3. モデル化オプション間の差異を顕在化する様な試験設計の最適化 4. 試験結果との比較 5. 比較に基づくモデル化オプションのスクリーニング 6. 蓋然性の高い site specific なトレーサ物質移行モデルの作成
参考文献	

付録 1-22 地質環境モデル構築に関する課題及び技術的インベントリー (22)

タイトル	イントラ・インターネットベースのインタラクティブな知識・情報アーカイブによる情報管理システムの構築と適用
目的及び概要	<p>地質環境モデルの反復的な更新に対応して、</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. データ 2. ドキュメント 3. 数学モデル (場のモデル及びプロセスモデル) 4. 地質環境モデル <p>を全て一元的に記録、管理することにより、計画に参加する全ての個人が適切かつ合理的にアクセスすることを可能とする。</p>
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. イントラ・インターネットベースのインタラクティブな知識・情報アーカイブ (例、Business Collaborator)
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. ソフトウェアの比較、選定 2. 本計画で取り扱う情報の質と量に適したプロトコルの設計 3. 運用
参考文献	QuantiSci limited, Business Collaborator, 1998

第2章 地質環境モデル構築のために必要な情報及びデータ取得戦略

2.1 地質環境モデル構築のために必要な情報

2.1.1 取得すべきデータの種類

第1章に述べた種々の地質環境特性モデルは、表1.1にまとめた各種の情報を集約するものである。これらの情報の中には、直接測定可能なもの及び他の測定可能な特性値から推定する必要があるものも含まれる。また、直接測定可能なものについても、対象となる空間スケールの全体を所定の解像度で埋めるような調査は極めて困難である場合が多いため、種々の測定手段と推定とを適切に組み合わせて多重のデータ取得を行い、これらの全体を活用して信頼すべき情報の取得を行う必要がある。この様な意味から、それぞれの情報の推定のために有効となり得るデータと測定方法の例を表2.1にまとめる。

表 2.1 地質環境モデル構築のために必要な情報及び関連するデータの種類

	必要な情報	関連するデータ	測定方法
地質構造モデル	地形	地形デジタルデータ	既存データの利用
	堆積構造及び褶曲	stratigraphic あるいは lithological な境界面の位置	試錐孔中の物理検層 弾性波探査 地表踏査
	断層、破碎帯	不連続面位置	試錐孔中の物理検層 弾性波探査 地表踏査
岩体特性モデル	鉱物組成	鉱物組成	コアサンプルの化学分析
	微視的空隙構造	空隙率 物質移行経路の texture	コアサンプルの観察、 分析
	透水係数	透水係数 透水係数 indicator	コアサンプル透水試験 パッカテスト 弾性波速度測定 密度測定 岩盤強度測定 電気比抵抗測定 γ線強度測定
	岩盤強度	圧縮強度 引っ張り強度 せん断強度 クリープ特性 現位置応力条件	コアサンプルを用いた 測定 ストレスゲージ等による 現位置測定

表 2.1 地質環境モデル構築のために必要な情報及び関連するデータの種類
(続き)

岩体特性モデル	熱的特性	比熱 熱伝導率 (飽和時) 熱伝導率 (不飽和時)	コアサンプルを用いた測定
地下水水理モデル	地下水流速	地下水流速	試錐孔内測定 (TVO flow meter、Tracer dilution method、等)
	間隙水圧	間隙水圧	試錐孔内測定 (間隙水圧計)
	地下水年代	天然同位体比	オフサイトでの地下水サンプルの分析
	塩分濃度	塩分濃度	地下水サンプルの分析
地下水化学モデル	pH	pH	試錐孔内測定 (Chemmac system、等) 湧水モニタリング
	酸化還元状態	Eh あるいは pE	試錐孔内測定 (Chemmac system、等) 湧水モニタリング
	主要イオン濃度	Na, K, Ca, Mg, HCO ₃ Cl, SO ₄ , Si O ₂ , Fe 濃度	野外実験室での地下水サンプルの化学分析
	有機物濃度	TOC	オフサイトの実験室での地下水サンプルの化学分析
	ガス成分	メタン、二酸化炭素分圧	オフサイトの実験室での地下水サンプルの化学分析

2.1.2 空間的不均質性と不確実性、そして地質環境調査の終点

前節の表にまとめた各種のデータは、それぞれ固有の誤差要因を有しており、測定方法や試験方法を個別具体的に検討することにより品質管理を行うことが肝要である。

他方、地質環境特性の空間的不均質性に起因して各種のデータも不均質性を示し、これに対して実測データは限られた数の離散的データセットであるために、我々の理解には不確実性が含まれざるを得ないこととなる。この点は、程度の差こそあれ、全ての地質環境特性に共通の問題であるため、6.の個別具体的な取得計画に先立って検討を加えておくこととする。

表 2.2 は、Kolter と Gorelick による、粒子サイズから堆積盆サイズまでの幅広いスケールにおける堆積岩の空間的不均質性の種類、起源、そして観察あるいは測定の方法のまとめである。同表から明らかな通り、調査対象領域の全域にわたって粒子レベルの調査を行うことは不可能であり、岩体特性データの取得にあたっては、空間スケールと解像度とを両立させる様な調査計画を立てることが肝要であることを示唆している。

微小スケールの特徴を全て調べることができないという状況は、第 1 章に述べた地質統計的な手法が不可欠であることを意味している。他方、大規模スケールでの不均質性の特徴及びその生成過程は決定論的に理解可能なものであり、これらの大きな枠組みを無視して一つの統計的モデルを全領域に適用することも正当化できない。つまり、岩体特性のモデル化にあたっては、表 2.2 のスケールレンジの左側を決定論的な地質構造として表現し、右側を地質統計的な自己相関モデルで表現することが必要である。また、同表右端に位置する末端スケールの不均質性が、地質環境モデル構築の観点から本当に必要なものであるかは先験的に明らかではない。これらのことは、調査自体を通じて、

1. 透水係数値等のモデル化対象となる地質環境特性に対応した不均質性の「すそ切りレベル」
2. 決定論的地質構造表現と地質統計的自己相関構造表現との境界スケール

を明らかにしていく必要があることを意味している。また、調査開始段階では、1.のすそ切りレベルが明らかではないために、求められる解像度が各特性値の測定に対応した「台」(support、測定自体に内在する空間的平均化のスケール、

表 2.2 堆積岩内の空間的不均質性の種類、起源及び対応する観察
あるいは測定方法のまとめ

Scale Name:	Basin	Depositional Environments	Channels	Stratigraphic Features	Flow Regime Features	Pores
Approximate Length Scale (Log meters)						
Geologic Features	Basin geometry, stratal geometries, structural features, lithofacies discontinuities, regional facies trends	Multiple facies, facies relations, morphologic features	Channel geometry, bedding type and extent, lithology, fossil content	Abundance of sedimentary structures, stratification type, upward fining/ or coarsening	Primary sedimentary structures: ripples, cross-bedding, parting lineation, lamination, soft sediment deformation	Grain size, shape, sorting, packing, orientation, composition, cements, interstitial clays
Heterogeneity Affected By	Faults (sealing) folding, External controls (tectonic, sea level, climatic history), thickness trends, unconformities	Fractures (open or tight), Intra-basinal controls (on fluid dynamics and depositional mechanics)	Frequency of shale beds, sand and shale body geometries, sediment load composition	Bed boundaries, minor channels, bars, dunes	Uneven diagenetic processes, sediment transport mechanisms, bioturbation	Provenance, diagenesis, sediment transport mechanisms
Observation/ Measurement Techniques	Maps, seismic profiles, cross-sections	Maps, cross-sections, lithologic and geophysical logs, seismic profiles	Outcrop, cross-well tomography, lithologic and geophysical logs	Outcrop, lithologic and geophysical logs	Core plug, hand sample, outcrop	Thin section, hand lens, individual clast, aggregate analysis
Averaging Volume of Hydraulic Measurements	Shallow crustal properties	Regional (long term pumping or tracer tests)	Local (short term pumping or tracer tests)	Near-well (non-pumping tests-height of screened interval)	Core plug (permeameter)	Several pores (mini-permeameter)

例えばパッカテストにおける集水体積、等) を下回ることのないよう、種々の異なるスケールの測定方法を併用することが重要である。この意味においては、表 2.1 の同一項目に関する複数の測定方法の使用はむしろ積極的に進められるべきものである。

地質統計的モデルの立場から言えば、どのレベルまでの地質構造を決定論的に考慮するかは概念的なオプションのひとつであるということが出来る。決定論と地質統計との境界スケールに対応して、対象領域の区別の仕方を種々に変えてそれぞれ空間的内外挿を行い比較を行うことによって、site specific な最適境界スケールを見出すことが可能と考えられる。この目的のためには、第1章の付録で触れたマルチフラクタルやWavelet 変換の使用が有効と考えられる。

さて、調査が進展し、ある特性値についてのデータ点数が徐々に増していくと、地質統計的な手法で作成される当該特性値空間分布の推定結果に含まれる不確実性（多数の統計的 realizations 間の標準偏差等で定量化される。詳細は 2.2.1 参照）は、理想的には図 2.1 の様にふるまうものと考えられる。

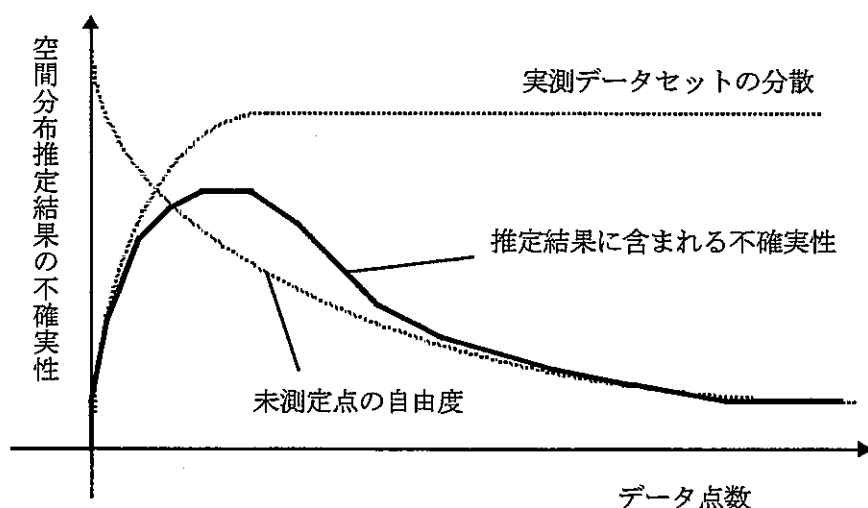


図 2.1 データ点数と空間分布推定結果の不確実性との関係

実測データセット自体の有するばらつき（分散）は、点数が少ない段階では過小評価される傾向があり（極端な場合、データ数1であれば分散は0である）、データ数の増加に伴い増大して漸近的に母集団の真値に近づくこととなる。他方、データ数の増大に伴い未測定箇所が減少するため、実測地点の全てにおいてコンディショニングを行うとすれば、空間分布の推定に残された自由度は

徐々に減少していくこととなる。そして、推定結果に含まれる不確実性は、これら競合する二つの傾向を併せたものとして、定性的には図中の実線のごとくふるまうものと予想される。つまり、調査初期においては「無知」のために過小評価されていた不確実性が増大し、あるところでピークを迎えた後、調査の進展に伴う情報価値の増大に伴って収束していく。

地質環境の調査の終着点に関する議論では、上図の様な概念モデルを基盤とすることが有益である。これは、空間的不均質性についての我々の理解の不確実性が同図の様にふるまう場合、少なくとも概念的には、図 2.2 に示す様な手順で必要なデータ点数を定めることが可能と考えられるためである。

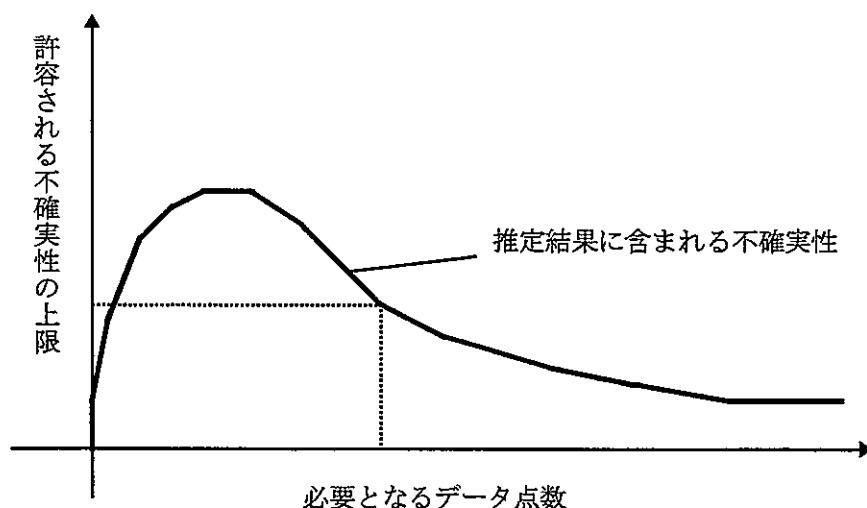


図 2.2 性能評価上求められるデータ点数の導出

しかしながら、この様な方向での検討はまさに端緒についたばかりであり、実際のサイト特性調査において上図に見られる様に不確実性が減少し始める変曲点にいたるまで調査が継続された事例がないばかりか、不確実性の定量的な尺度そのものが未確立な現状である。

この様な現状を考えれば、深地層の研究施設における研究計画においては、「地質環境をどこまで調べれば良いのか？」という、ある意味での究極の問いに対して答えを見い出すべく基礎からの理論的検討と実践とを並行して進めていくことが最重要課題の一つであると考えられる。そして、この検討の成果は、将来の処分地における地質環境調査への最大の技術的貢献になるものと期待される。

上の議論を現実のものとしていく上では、以下の次の諸事項に留意する必要がある。

1. 図 2.1 あるいは 2.2 の右側における不確実性の減少は確約されたものではなく、層区分が不適切で統計的傾向の異なる二つの領域を一括している場合、データ点数が増大しても不確実性が減少しない場合や、減少の程度が著しく遅い場合が生じ得る。
2. 不適切な自己相関モデルを選択した場合にも、不確実性が有効に減少しない可能性が高い。
3. 不確実性の減少速度は、解析の目標にも依存する。過去の経験に照らせば、天然バリア中核種移行を規定する「地下水の最短移行時間」の様な統計的により高いモーメントに対応した量の推定に含まれる不確実性の減少は、人工バリア中核種移行の外側境界条件となる「ある空間的スケールでの地下水フラックスの平均値」の推定の様な低次のモーメントに含まれる不確実性に比べてずっと緩慢なものと考えられる。
4. 前出の図において横軸をデータ点数としているが、これはある種の単純化であり、実効的な意味でのデータ点数は、その空間的配置にも依存している。つまり、同じ点数において同じ方法で測定を行ったとしても、空間分布推定という目的に対応する情報価値は「どこを調べたか」によって大きく異なる。
5. ある地点における調査結果が単一の特性値のみの場合と、複数の特性値を測定した多属性のものである場合とでは、やはり情報価値が異なり、複数の特性値について多重にコンディショニングを行うことがより速やかな不確実性の減少につながる可能性がある。

上記の 1.及び 2.に対する対策としては、既に述べた様に、種々の層区分の可能性を幅広くオプションとして考慮し、また、地質統計的モデルについてもいくつかのモデリングオプションを用意することによって、間違ったオプションの選択により不確実性の低減が期待できない様な袋小路に閉塞してしまうことを避ける必要がある。また、3.に関して言えば、定量的な保証可能性という観点から人工バリア性能と天然バリア性能に適切な役割分担を行い図 2.2 に示した性能評価上要求される不確実性の上限が実現不可能な程低くならないことを保証する必要がある。

本計画におけるデータ取得戦略を考える上で重要な留意点は 4.及び 5.であり、

対策として、

1. 空間分布の推定値に含まれる不確実性の定量的評価方法の確立
2. 調査地点配置の最適化
3. 多属性データについての同時コンディショニングによる情報価値の拡大

を積極的に推し進めるものとする。それぞれの対策の内容については、2.2 に詳述することとする。

2.2 データ取得戦略

2.2.1 空間分布推定に含まれる不確実性の定量的評価

(1) 目的

地質環境特性調査におけるデータ点数と地質環境モデルに含まれる不確実性との関係を定量化するために、不確実性の評価方法を確立する。

(2) 空間分布推定の差異を計る metric について

地質環境特性の空間分布は多くの情報を含んだ「関数」であり、これらの関数間の差異を定量化するためには適切な metric が定義される必要がある。このような metric は多数存在し、地層処分研究開発の目的に適った適切なものを選ぶことが重要となる。

不確実性評価のための第一段階はこの metric を選定することであり、最も自然な metric は、当該地質環境において放射性核種移行解析を実施した場合の地表への核種の放出率である。性能評価の究極的な目標に照らせば、地質環境特性空間分布についての二つの推定結果がどれほど異なって「見え」様とも、結果として各時点で地表に到達する核種放出率が同じであれば、これら二つの推定の優劣を比較することは、大きな意味は持たない。前節に述べた「地質環境調査の終点」の観点から言えば、このような性能評価にスペシフィックな metric を用いることにより、地質環境の every minute detail を知る必要がないことを明確かつ定量的に示すことが可能となる。

上記の metric は、特定の処分システムの性能評価においては最も適切なもの

であるが、処分場や人工バリアの仕様あるいは廃棄物中の放射性物質のインベントリーにも依存するため、これらの仕様が確定されていない段階で行う研究開発の一部である深地層の研究施設における研究計画においてはそのまま適用可能ではない。そこで、

1. 単純化された仮想的な処分システムを考え、これに対してある標準化された核種移行解析を行い地表への核種放出率を算出することによって一つの metric を定める。
2. 核種放出率を規定する地質環境特性パラメータをブレイクダウンし、例えば、地下深部のある領域における平均地下水流量と平均的地下水組成（人工バリアの境界条件としての地質環境特性）、及び同領域を始点とした流跡線の中で最短の地下水移行時間と同流跡線に沿っての平均的な吸着特性（天然バリアとしての地質環境特性）といった複数の中間的な性能尺度を設定し、metric とする。

といった方策を考える必要がある。

(3) 地質統計的 Boot strapping について

さて、上記の意味での metric を定めた後、次に考えるべきことはこの metric を尺度として各段階での地質環境モデルに含まれる不確実性を定量化する具体的な方法である。

場のモデルとして前出の地質統計的なモデルを用いる場合、結果として得られる空間分布の推定には以下の二種類の不確実性が介在する。

1. 地質統計モデルパラメータ（標準偏差、相関長、フラクタル次元等セミバリオグラムを記述するパラメータ群）の推定値に含まれる不確実性
2. 一つの地質統計モデル（バリオグラム）を用いて作成される多数の統計的 realizations 間のばらつき

上記の内、2. については、多数の realizations を作成し、選定された metric についての ensemble 平均あるいは標準偏差を算出するという通常の統計的な解析によって定量化を行うことが可能である。これに対して、1. の定量化は先端的な研究課題となっている。これは、一つのデータセットに対して最良のパラメータフィットが一通りに決まってしまう、かつ、真のパラメータ値は原則的

に知り得ないという基本的な問題と結びついている。

地質統計的 Boot strapping[9]は、当該時点での最良のデータセットから重複を許して再サンプリングすることにより、データセットの統計的な realizations を構成し、これらを、「もし仮に同様の調査を多数回実施していたとしたら得られたであろう結果」と見なす。そして、これらの多数の realizations についてそれぞれバリオグラムのフィッティングを行い、結果として得られるパラメータ推定値がどの程度のばらつきを有するかを調べることによって現時点のモデルに含まれる不確実性を定量化する手法である。

試錐孔データに対して地質統計的 boot strapping を行った例を表 2.3 に示す。

(4) 課題

空間分布推定に含まれる不確実性の定量的評価に関しては、

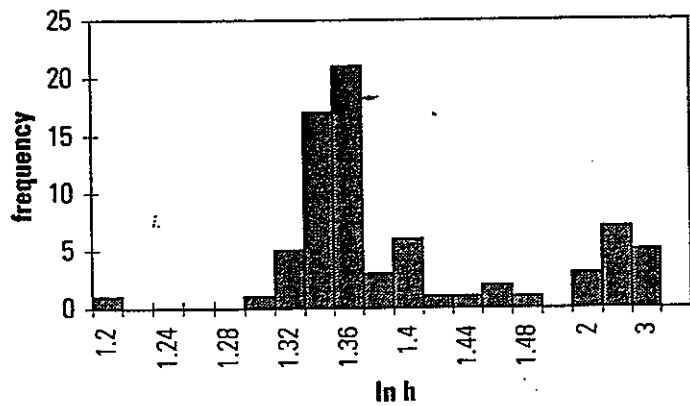
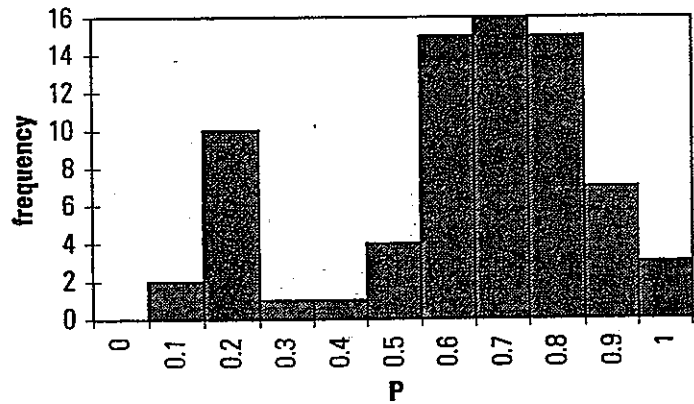
1. 空間分布推定の差異に関する metric の選定
2. 地質統計的 Boot strapping による不確実性評価

が課題となる。これらについては、章末の付録を参照のこと。

表 2.3 試錐孔データに対して地質統計的 boot strapping を行った例

Zone	Parameter	Borehole Subset					
		Subset 1		Subset 2		Subset 3	
		Mean	Std Dev	Mean	Std Dev	Mean	Std Dev
1	p	0.672	0.094	0.618	0.074	0.622	0.090
	h_{hi}	114	17.6	114	17.8	110	27.8
	σ	1.26	0.081	1.21	0.079	1.28	0.072
5	p	no fit		0.142	0.237	0.352	0.403
	h_{hi}	no fit		156	94.2	62	47.2
	σ	no fit		0.542	0.032	0.586	0.004
7	p	1.00	10^{-5}	0.58	0.238	0.37	no fit
	h_{hi}	26.8	2.38	70.5	129.4	19.6	no fit
	σ	0.551	0.050	0.61	0.04	0.64	no fit

Zone 1 における Boot strapping の結果は良く収束しており、Subset 1 に含まれる9本の試錐孔データでバリオグラムに含まれる各パラメータの推定を十分行えることを示唆している。他方、Zone 7の結果再サンプリングの realizations 間のばらつきが大きく、信頼すべきパラメータセットが得られていない。これは、Zone 7 が地質統計的には異種の部分領域に分かれているためと考えられる。右の、Boot strapping においてフィットされた Hurst 係数 p 及び相関長 $\ln h$ のヒストグラムが bimodal であることは、この仮説を裏付けるものと考えられる。



2.2.2 測定地点空間配置の最適化

(1) 目的

所定の点数で実施する調査の、空間分布推定に資する情報価値を最大とする様に、調査地点の空間的配置を最適化する。

(2) Log spiral について

調査地点の空間的配置を最適化するためには、場のモデルを用いた数値実験として、不均質地質特性分布についての統計的な realizations からのブラインドサンプリングを行うことが必要となる。この方法では、当該時点における物性値分布の最良推定に対応したバリオグラムを用いて、不均質地質環境分布の複数の realizations を作成する。そして、一旦、作成されたこれらの分布をブラインドとして、既存試錐孔及び候補となる新規試錐孔配置計画毎に当該地点での数値のみをサンプリングして疑似データセットを作成する。さらに、これらの疑似データセットについてフィッティングを行いセミバリオグラムのパラメータを推定することによって、各配置計画毎にセミバリオグラムが予想されることとなり、これらの比較から最適な配置計画を選定することが可能となる。

セミバリオグラムを作成する上では、幅広い範囲において試錐孔間の離間距離が分布する様な配置の方が情報効率が高い。この意味からは、通常計画される定間隔の正方格子配置は必ずしも適切ではなく、離間距離を分散化する様な配置を考慮することが必要となる。

Log spiral は、堆積層等の平面的な領域に対して主として水平方向の二次元的な離間距離を分散化して配置するために考案されたものであり、ここでは、ある原点から螺旋上に遠ざかる曲線を描き、試錐孔は、この曲線上の一定中心角間隔の位置に配置される。Log spiral に従う試錐孔配置の例、及び、これに対して行ったブラインドサンプリングの結果並びに他の試錐孔配置（定形格子、及びランダム）との比較を図 2.3 及び 2.4 に示す。

現在の Log spiral は、平面的な領域を想定して、ここでの離間距離分布を最適化するものであるが、同様のアイデアは他の形状の領域へ拡張することが可能である。そこで、次の研究課題としては、この様な意味で一般化された Log spiral の幾何的な配置を考案することが考えられる。

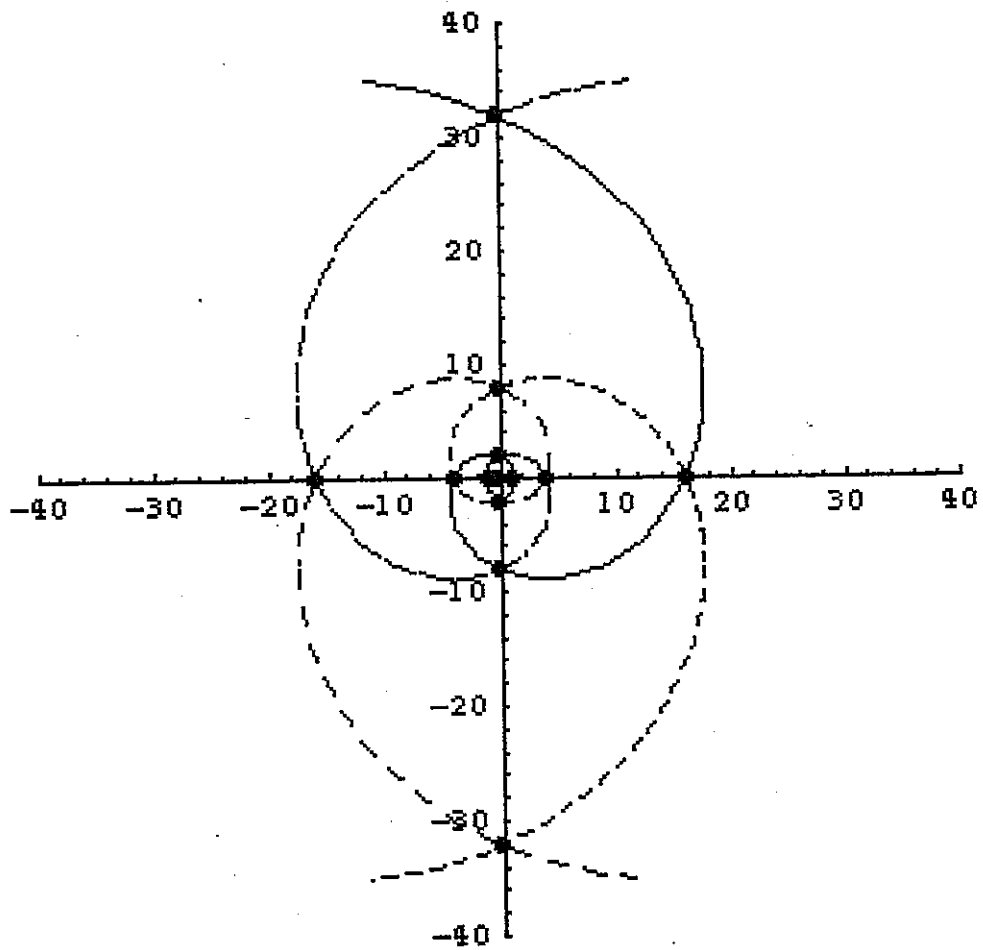
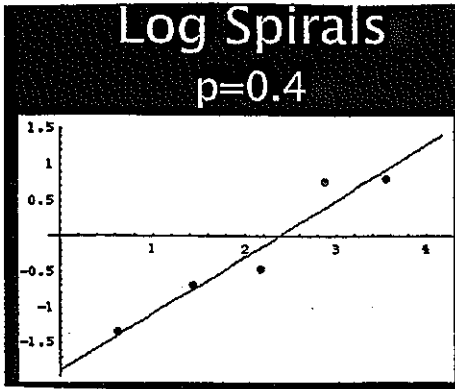
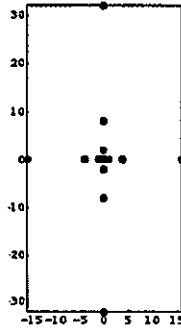


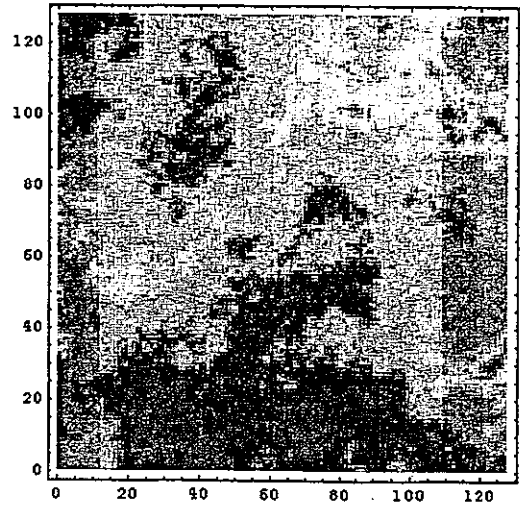
図 2.3 Log spiral に従う試錐孔配置の例



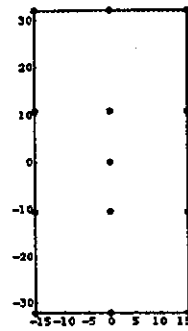
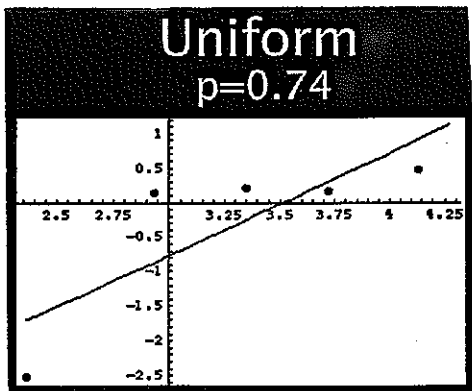
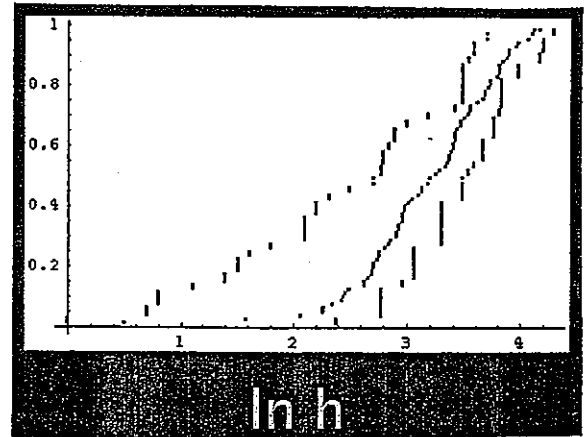
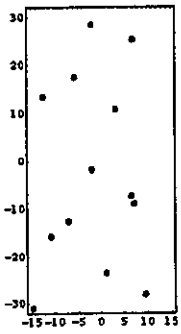
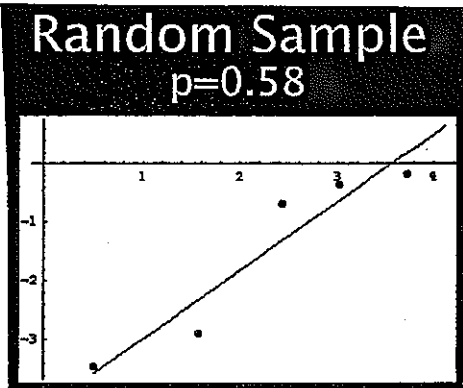
バリオグラムの fitting 結果



試錐孔配置



ブラインドサンプリングの対象とする
透水係数場の realization ($p=0.42$)



各試錐孔配置毎のサンプリング結果が示す
離間距離の（累積）頻度分布。左から順番に
Log spiral、Random、そして定形の格子と並
んでおり、Log spiralにより離間距離の組み
合わせが幅広い範囲で一様に得られること
を示している。

図 2.4 ブラインドサンプリングの結果並びに他の試錐孔配置（定形格子、及び
ランダム）との比較

実際の調査においては、Log spiral を構成する各試錐孔は全て同時に掘削されるのではなく、時間的な順序が存在する。そこで、Log spiral に含まれる自由度である螺旋の大きさ（一周毎にどれだけ原点から遠ざかるか）を、反復的な手段で決定できる可能性がある。より具体的に言えば、まず、相関長が未知の段階で専門家の判断や類似例の経験に基づき初期の螺旋を作り、この螺旋上で何点かに試錐孔を配置する。次に、これらの試錐孔で得られるデータに基づき推定される相関長が、この時点での最小離間距離よりも小さければ、初期の螺旋の内側に新たな試錐孔を追加していき、逆であれば、初期の螺旋を外側に延長していく。この方法を採用することにより、各サイトによって異なる不均質性のスケール（＝相関長）に応じた配置の最適化を行うことが可能となる。

(3) 課題

測定地点空間配置の最適化については、

1. 三次元化、地質構造の反映等の Log spiral の手法の拡張
2. 拡張された Log spiral を用いた調査の各段階での試錐孔配置の最適化

が課題となる。

2.2.3 多属性データセットによる同時コンディショニング

(1) 目的

多属性データセットを同時にコンディショニングに用いることにより、空間分布推定に残される実効的な自由度を速やかに減少させ、地質環境モデルに含まれる不確実性を効率的に低下させる方法を確認する。

(2) Genetic algorithm を用いた最適化手法について

水理と地球化学の様な複数の特性についてのデータを同時にコンディショニングに用いる際に重要な点は、それぞれの推定において地質統計的モデルが用いられているために、多数の realizations（それぞれが数十万から数百万要素のデータを含む）が存在するという点である。従って、これらの特性を同時に表現するような最適化においてはそれぞれが数十・数百の大きさである realization 群間の比較を行うことが必要となる。Genetic algorithm は、この例の

様な超大規模データを用いた最適化の手法として開発されたものである[10]。

Genetic algorithm の特徴は、通常最適化手法と異なり複数の候補 (generation と呼ばれる) を並行して持ち、これらを漸次「より良いもの」としていくことにより最適解を得るということである。また、generation を経る毎に候補の特性を改良していく際のアルゴリズムが、進化論における適者生存のルールに基づくために genetic という形容詞が与えられている。

Genetic algorithm では、最適化対象は任意のデータの配列であり (string と呼ばれる)、また、最適化の目的関数に対応して各 string に得点が与えられる。基本的な手順は以下の通りである。

1. ランダムサンプリングにより、所定の数の strings を作成する (第一 generation)
2. 各 string の得点を算出する。
3. 得点に比例した確率に従い (高得点のものほど高確率で) 第一 generation の中の各 string を再サンプリングする (適者生存)。
4. 再サンプリングされた string の全てを、二つずつの組みに分ける (結婚)。
5. 各組の二つの strings をある統計的に定まる位置で切断してつなぎ合わせる (出産)。
6. 5.の結果得られる新たな string を第二 generation として1)以下のステップを繰り返す。

但し、1・5の手順だけでは局所的な最適解にとらわれてしまう可能性があるため、これを避けるために、ある低い確率で「突然変異」 (つまり、あるランダムに選ばれる string のデータ配列の一部が突然乱されること) が生じる様にしておく。

Genetic algorithm は幅広い種類の大規模データにおける最適化問題で robust に高効率で最適解を見出すことが知られている。

(3) 課題

多属性データセットによる同時コンディショニングについては、

1. 地層処分研究開発に適した Genetic algorithm の具体化

2. Genetic algorithm による間隙水圧、地下水流速、塩分濃度及び年代についての の実測データセットによる地質統計的 realizations のコンディショニング

が課題となる。1.については、章末の付録を、2.については付録 1-11 を参照のこと。

2.3 予察解析による試験設計の最適化

2.2 に述べたデータ取得戦略は、地質環境特性モデルに入力情報を供給することに主眼を置いたものであるが、本計画で取り扱う情報の中には、第 1 章に述べた通り、

1. 掘削影響
2. トレース物質の移行

に関して性能評価研究あるいは設計／施工技術開発で用いる数学的モデルの検証に資する試験結果が含まれる。これらの試験によって得られる結果の情報価値を高めるためには、

1. 比較対象とする各数学モデル及びモデル化オプションを明確にし、それぞれを用いた代替的事前解析を行う。
2. 試験の方法や条件を種々に変えて、それぞれのケースで代替的事前解析間の比較を行うことにより、個々の仮説間の差異が最も顕在化する様な試験設計を明らかにする。

という手順をへることにより、仮説検証の効率を向上させることが必要である。

また、試験計画に立案においては、各現象を縦割りに分割する分析的な視点にとどまることなく、複数の学問分野が敢えて交錯する様な複合的あるいは学際的な試験項目を取り入れていくことが有効であると考えられる。このことにより、上記 1.のモデル化オプションの選択の幅が飛躍的に増大するものと考えられる。

付録 2-1 データ取得戦略に関する課題及び技術的インベントリー (1)

タイトル	空間分布推定の差異に関する metric の選定
目的及び概要	関数として与えられる地質環境特性空間分布に関する推定結果間の差異の大きさを計る metric を選定する。ここで選定された metric は、後続する不確実性解析に用いられることとなる。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. 単純化された仮想的処分システムについての核種移行解析によって算出される核種放出率を用いた単一の metric 2. ある領域における平均地下水流量と平均的地下水組成(人工バリアの境界条件としての地質環境特性)、及び同領域を始点とした流跡線の中で最短の地下水移行時間と同流跡線に沿っての平均的な吸着特性(天然バリアとしての地質環境特性)といった複数の中間的な性能尺度による metric
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 候補となる metric それぞれの技術的及び非技術的特徴の明確化と比較 2. 模擬的な不均質データセットに対する候補 metric の使用 3. 1.及び2.に基づく metric の選定
参考文献	

付録 2-2 データ取得戦略に関する課題及び技術的インベントリー (2)

タイトル	地質統計的 Boot strapping による不確実性評価
目的及び概要	地質統計的 Boot strapping によって、特に調査の初期段階におけるデータ点数の不足によるセミバリオグラムパラメータ推定値の不確実性を定量化する。また、どうパラメータを種々に変化させつつ多数の統計的 realizations を作成、比較することにより、自己相関構造モデル自体の不確実性と、コンディショニング点数の不足（自由度の残存）による不確実性を併せた全体的な不確実性の大きさを定量化する。
適用可能な要素技術	1. 地質統計的 Boot strapping
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 既存の実測データセットの例に対する Boot strapping の試用 2. 1.の結果に基づく方法論の具体化 3. 各段階及び各ステージでの最新のデータセットを用いて作成した地質環境モデルの不確実性の評価 4. 次段階あるいは次ステージでの試錐孔配置の最適化（付録 2-3 参照）への適用
参考文献	Clark K J, et. al., Heterogeneous Property Modelling; Uncertainty Studies and Application to Tono Mine Region, QuantiSci Report, MC-5082B-5, (1998)

付録 2-3 データ取得戦略に関する課題及び技術的インベントリー (3)

タイトル	三次元化、地質構造の反映等の Log spiral の手法の拡張
目的及び概要	平面上の単一の地質構造に限られている現在の Log spiral の手法を拡張し、三次元的堆積構造に適用可能なものとする。
適用可能な要素技術	1. Log spiral
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 現実の堆積構造を考慮した三次元対象領域形状及び鉛直以外の試錐孔や坑道形状（スパイラル等）の整理 2. 1.の形状において調査地点離間距離の分布が対数スケールで一様となる様な三次元的配置の明確化 3. マルチフラクタル等、現実の堆積構造を反映した三次元不均質性の模擬データに対する 2.の手法の適用、改良
参考文献	Clark K J, et. al., Heterogeneous Property Modelling; Uncertainty Studies and Application to Tono Mine Region, QuantiSci Report, MC-5082B-5, (1998)

付録 2-4 データ取得戦略に関する課題及び技術的インベントリー (4)

タイトル	拡張された Log spiral を用いた調査の各段階での試錐孔配置の最適化
目的及び概要	拡張された Log spiral に基づき調査の各段階での試錐孔配置の最適化を行う。なお、最適化の尺度としては、Boot strapping によって算出される不確実性を用いる。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. Log spiral 2. 地質統計的 Boot strapping
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 各段階あるいはステージでの試錐孔配置の最適化への適用
参考文献	Clark K J, et. al., Heterogeneous Property Modelling; Uncertainty Studies and Application to Tono Mine Region, QuantiSci Report, MC-5082B-5, (1998)

付録 2-5 データ取得戦略に関する課題及び技術的インベントリー (5)

タイトル	地層処分研究開発に適した Genetic algorithm の具体化
目的及び概要	空間分布推定間の差異に関する metric を参考として、地層処分手域における適用より具体的には水理と地下水化学の同時シミュレーションに適切な目的関数（各 realization の善し悪しを得点として表現するもの）を設定するとともに、これに基づき、具体的な最適化の algorithm を作成する。
適用可能な要素技術	<ol style="list-style-type: none"> 1. Genetic algorithm 2. 空間分布推定間の差異に関する metric (付録 2-1)
具体的な研究展開の例	<ol style="list-style-type: none"> 1. 目的関数の選定 2. algorithm の具体化 3. 地下水水理／年代分布同時シミュレーションあるいは地下水水理／塩分濃度分布同時シミュレーション等の例題演習による妥当性の確認
参考文献	Clark K J, et. al., Heterogeneous Property Modelling; Uncertainty Studies and Application to Tono Mine Region, QuantiSci Report, MC-5082B-5, (1998)

おわりに

深地層の研究施設における研究計画は数十年の長期間にわたって行われるプログラムであるとともに、計画の進行状況によってその対象とする時間／空間スケール、取得すべき情報の種類も異なり、多岐にわたる。そのため、個別の分野での分析的なアプローチによって理解される断片的な結果を組み合わせても、最後に何が理解されたのかがわかりにくい。また、計画に参加している研究者自身にとっても、実施している各研究が全体の中でどのような意義、位置付けにあるのかを計画の進行の中で明確に認識することが困難となる。

本報告では、発散しがちなこのような研究プログラムを一つにまとめ「深地層の地質環境とは」という問いに対しての包括的な理解、すなわち各研究それぞれの時間的連続性、ある時間断面での他研究項目との有機的な連関、さらには、その連関の時間的連続性を保つ一つの方法論として、定量的な地質環境モデルの更新を軸とするアプローチを示すことを試みた。また、その基礎となる数学・統計学的手法の先行事例を調査し、それをカタログ的にまとめた。

今後は、さらにこれら各手法の適用限界や組み合わせを検討するとともに、地質環境モデルの更新にそれらを取り入れるためのインターフェースを整備したうえで、実際の研究計画に反映していくことが重要である。

参考文献

- [1] Clark, K., Takase H., Impey M., Humm, J., Maekawa K., and Yanagizawa K., A Natural analogue study of uranium migration in the Tono mine, Proceedings of Material Research Society Symposium on the Scientific Basis for Nuclear Waste Management XIX, 1997
- [2] United Kingdom Nirex Limited, An Assessment of the Post-closure Performance of a Deep Waste Repository at Sellafield: Nirex 97, S/97/012, 1997
- [3] Chilès, J.P., and P. Delfiner, Geostatistics; Modeling Spatial Uncertainty. John Wiley and Sons, New York, 1998
- [4] Nicolis, G. and I. Prigogine, Self-organization in Non-equilibrium systems, Wiley, 1977
- [5] Ortoleva, P.J., Geochemical Self-Organization, Oxford Monographs on Geology and Geophysics No.28, Oxford University Press, 1994
- [6] Littleboy, A.K., R.Metcalf and D.J. Noy, Coupled Modelling of Groundwater Flow and Hydrochemistry in the Sellafield Area, Proceedings of the Seventh Annual International Conference on High-Level Radioactive Waste Management, Las Vegas, 1996
- [7] Smellie, J. and M. Laaksoharju, The Aspo Hard Rock Laboratory: final evaluation of the hydrogeochemical pre-investigations in relation to existing geologic and hydraulic conditions, SKB Report 92-31, 1992
- [8] Takase H. and B.D.Sleeman, Generalized Travelling Coordinate for Systems of Reaction-Diffusion Equations, IMA Journal of Applied Mathematics Vol.64, 1-22, 1998
- [9] Solow, A.R. Bootstrapping correlated data. *Journal of the International Association for Mathematical Geology*, 17(7), 769-775, 1985
- [10] Goldberg, D.E. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning, Addison-Wesley, 1989

用語集

邦文索引

強連成

非線形カップリング（後述）の一種であり、相互に関連を有する二つ以上の現象が双方向に影響しあう状況を指す。例としては、地下水流によって運ばれる反応性の溶質が岩体中の鉱物学的特性を変化させるという水理学的現象から化学的現象への影響と、逆に、岩体中の鉱物学的特性の変化にともなって岩体の透水性が変化することにより地下水流が影響を受けるという化学的現象から水理学的現象への影響とが共存する場合が挙げられる。強連成の特徴は、フィードバックループが形成され得ることであり、このことは、初期には小さい入力あるいは何らかの定常（平衡）状態からのずれが指数関数的に増幅され得ることを意味する。このようなフィードバックループの存在は、比較的単純な空間的構造（例えば平面的な地球化学フロント）に不安定性が現れる可能性を示唆している（自己組織化の項も参照）。

コンディショニング

限られた数の離散的な実測データセットに対して地質統計学的手法を適用することにより、当該サイト中のある物理量の稠密な空間分布を内挿する際に、実測地点における数値を実測値に固定すること。統計的に作成される realizations（後述）毎に得られる空間分布は異なることとなるが、コンディショニングを行うことにより実測地点における数値は測定値を採ることが保証される。

自己相関構造

自己相関係数とは、単一の変数自体が、異なる位置あるいは時刻において示す数値間の相関係数のことを指す。そして、自己相関構造とは、この自己相関係数の時間あるいは空間スケールへの依存性のことである。自己相関構造は、セミバリオグラム（本文参照）によって定量的に表現される。

自己組織化

初期には、一様あるいはランダムな分布を示していた反応性の物質が、拡散あるいは移流により移動する際に、反応に起因する非線形カップリングと物質移動の競合作用によってフロント、パルス、波、等の多様な空間的パターンを生じること。この現象は、初期の一様分布が安定性を失い、他のより複雑な構

造が出現するものとも解釈できるため、この様なメカニズムの可能性を数学的に予見した A. Turing の名前をとって Turing instability (後述) とも呼ばれる。種々の生物に見られる多様な模様も、morphogen と呼ばれる反応性物質の拡散に関して生じる自己組織化の一種であると考えられている。

弱連成

非線形カップリングのうち、二つの現象間の影響機構が一つの方向に限られるもの。強連成の場合とは異なり、フィードバックループは形成されない。

主成分分析

与えられた多次元のデータセットにおいて、データ間の分散が最も大きな方向を見出す統計的な手法。Singular Value Decomposition (SVD)法等により、データ全体の分散への寄与が大きなものから順番に、互いに直交する変動軸を同定していくことが可能である。

スペクトル法

ある自己相関構造を有する当該物理量の空間分布を、フーリエ変換を用いて統計的に発生させる方法。空間分布そのものよりも、フーリエ変換後のスペクトル特性が自己相関構造と密接な関係を有していることから、統計的自己アファインフラクタルモデル等の特定の規則に従ってスペクトル特性を統計的に作成し、その後、これを逆フーリエ変換することにより空間分布を得る、という操作を行うこととなる。

台

ある関数 $f(x): R^n \rightarrow R^m$ が非零の値を採る様な R^n の部分集合 Ω を指す。 Ω はコンパクトな部分集合あるいは R^n 全体であり得る。本文中の文脈では、平均値を採る操作を

$$u \rightarrow \int_{R^n} f u dx, \quad f(x) = \begin{cases} \left(\int_{R^n} f dx \right)^{-1}, & x \in \Omega \\ 0, & x \notin \Omega \end{cases}$$

と表現した場合の Ω に対応する。

統計的自己アファインフラクタルモデル

コッホ曲線やシェルピンスキーカーペットに代表される決定論的なフラクタルが完全な自己相似性を示すのに対して、統計的自己アファインフラクタルで

は、統計的な特徴（ensemble 平均等）は自己相似性を示すものの個々の realization における分布は完全な自己相似性からある種のずれを有することとなる。統計的自己アファインフラクタルモデルは、ある範囲の離間距離においてセミバリオグラムがべき乗則（本文参照）を示すものとして表現される。

粘性指状体

平面的なフロントが安定性を失った後（Turing instability、自己組織化、参照）に生じる、選択的に速く進展する部分を持つような複雑な形状のフロント。粘性の低い流体がより粘性の高い流体中に注入される場合に生じる例が最初に観察されたことが名称の由来である。

非線形カップリング

数学的には、ある方程式系に含まれる複数の状態変数何らかの非線形性を有する項によって互いに関連づけられているものを指す。物理的には、二つ以上の現象が影響しあう様なシステムの挙動に対応している（強連成、及び弱連成を参照）。

非線形ダイナミカルシステム理論

一つあるいは複数の状態変数の時間的な変化を記述する方程式（系）の中に何らかの非線形性を有する項が含まれる様な問題を対象として、これらの問題に対する解がどのように変遷するかを数学的に調査する研究分野。線形問題とは異なり、解の全域的な存在や一意性といった基本的な諸特性が一般には保証されないため、有限時間内の解の発散（爆発）や複数の解の存在可能性も研究対象と成る。他方、非線形性は、線形理論では説明できない種々の自然現象（地球化学あるいは生物学的なフロントの形成とその伝播、カオスの発生、フラクタルの形成、等）を数学的に記述するための道具として捉えることもできる。

非線形分散モデル

塩分の移流及び分散によって生じる地下水の密度勾配が地下水流に及ぼす影響を考慮した、強連成の地下水流動—物質移動モデル。

フラクタル次元

統計的自己アファインフラクタルモデルにおけるセミバリオグラムのべき乗表現にあらわれる指数, p , (Hurst 係数、本文参照) に対して、フラクタル次元は、 $N-p+1$, (N は空間の (ユークリッド次元)) として表される。この式からも明らかな通り、フラクタル次元は空間自体の次元よりも大きな非整数値を採

る。フラクタル次元が高い程、隣接した二点間の数値が大きく異なる様な rough な自己相関構造が表現されることとなる。

フラクタルシル

統計的自己アファインフラクタルにおいて、セミバリオグラムがべき乗則に従う離間距離の上限のこと。

分散移流方程式

地下水の流れ自体による移動 (= 移流)、及び微視的な地下水流速のばらつきによる混合効果 (= 分散) を考慮した物質収支式の微分表現として得られる方程式。

マルチフラクタル

フラクタル次元に代表される様な統計的自己アファインフラクタルモデルの特性が対象とする領域の全体で一定ではなく、位置に応じて変化する様なフラクタルモデルの総称。

モーメント (統計的)

統計的変数 X について、その r 乗つまり X^r の期待値 $E(X^r)$ を r 次のモーメントと呼ぶ。例えば、1 次のモーメントは通常の意味での期待値であり、2 次のモーメントは分散である。正規分布の場合には 2 次までのモーメントにより分布の形状が決定されるが、核種移行の破過曲線の様に非対象性の強い分布の形状を規定するためにはより高次のモーメントが必要と成る。

地質統計的 boot strapping

ある統計的過程について比較的小数のデータのみが得られている場合に、この小数のデータに基づく推定にどの程度の不確実性が含まれているかを定量化する手法。具体的には、このデータセットから重複を許して再サンプリングすることにより、同じデータ数の疑似データセットを多数「複製」する。そして、これらの疑似データセットを、「もし仮に同様の調査を多数回実施していたとしたら得られていたであろう結果」と見なす。これらの多数の realizations に基づき、それぞれ元々のデータセットと同様の推定を行って結果のばらつきを調べ、ばらつきの大きさをもって不確実性の大きさを代表する。

欧文索引

boot strapping

地質学的 boot strapping 参照。

ensemble

単一の統計的モデルによって作成された多数の realizations から成る集合。

fingering

粘性指状体参照。

genetic algorithm

genetic algorithm は、大規模データに対する最適化の手法として開発されたものである。

genetic algorithm の特徴は、通常最適化手法と異なり複数の候補 (generation と呼ばれる) を並行して持ち、これらを漸次「より良いもの」としていくことにより最適解を得るということである。また、generation を経る毎に候補の特性を改良していく際のアルゴリズムが、進化論における適者生存のルールに基づくために genetic という形容詞が与えられている。

genetic algorithm では、最適化対象は任意のデータの配列であり (string と呼ばれる)、また、最適化の目的関数に対応して各 string に得点を与えられる。基本的な手順は以下の通りである。

1. ランダムサンプリングにより、所定の数の strings を作成する (第一 generation)
2. 各 string の得点を算出する。
3. 得点に比例した確率に従い (高得点のものほど高確率で) 第一 generation の中の各 string を再サンプリングする (適者生存)。
4. 再サンプリングされた string の全てを、二つずつの組みに分ける (結婚)。
5. 各組の二つの strings をある統計的に定まる位置で切断してつなぎ合わせる (出産)。
6. 5.の結果得られる新たな string を第二 generation として 1)以下のステップを繰り返す。

但し、1.~5.の手順だけでは局所的な最適解にとらわれてしまう可能性がある
ので、これを避けるために、ある低い確率で「突然変異」（つまり、あるラン
ダムに選ばれる string のデータ配列の一部が突然乱されること）が生じる様に
しておく。

genetic algorithm は幅広い種類の大規模データにおける最適化問題で robust
に高効率で最適解を見出すことが知られている。

hyper-alkaline plume

コンクリートと地下水の反応において、初期には K_2O や Na_2O の溶出により
地下水の pH が 13 程度にまで上がり (early fluid と呼ばれる)、ついでポート
ランドの溶解度に規定されて 12.5 程度の pH が比較的長期にわたって維持
されることとなる。このように高い pH は自然環境においては極めて稀である
ために、hyper-alkaline という形容詞が用いられることとなる。

metric

ある関数空間から実数への写像のうち、正值性、対称性、及び三角不等式を
満足するもの。ユークリッド空間における距離の一般化として、関数同志がど
れ程離れているかを測る尺度となる。本文中で挙げられている metric は正值性
を満足しない（各種移行特性が同一の空間分布は常に同一であるとは限らな
い）ことから、厳密には、性能評価上の意味が等しいものは同一視するという
ルールのもとに括られた空間分布のクラス（数学的には同値類と呼ばれる）の
集合に対する metric として捉える必要がある。

Midpoint-displacement

ある比較的粗なグリッドにおけるノード上の数値に基づき、統計的自己アフ
ァインフラクタルに整合的な規則に従ってノード間の中間点における数値を指
定するという操作を繰り返すことによって、順次より小さなスケールの特徴
を繰り返り込んでいくというフラクタル空間分布の作成手法。スペクトル法による
統計的自己アファインフラクタルモデルの作成が、三次元では非効率的となる
ことから、有力な代替案と考えられる。

Moving grid

地球化学における反応性溶質の伝播や、生物学（特に形態生成学や population
dynamics）の分野で研究対象と成る空間的パターンの伝播においては、狭い反
応領域が二つの異なる（フロント）あるいは同じ（パルス）平衡状態に挟まれ

て存在するという空間的構造が出現しこれが伝播するという共通の特徴を有している。この様な体系においては、反応領域部分の計算精度を向上させることが鍵となる一方、平衡が達成されている領域では計算労力をできるだけ省くことが計算効率の確保のために必須である。Moving grid 法は、あらかじめ反応領域にあたる部分の離散化メッシュのみを小さくしておき、この非定型のグリッド構造をフロントやパルスの伝播速度に合わせて移動させることによりこの目標を達成するものである。

Multi-gridding

Moving grid の対象と同様のフロントやパルスの伝播を解析する際に、一定間隔のグリッドから出発して、変数プロファイルの空間的勾配が大きい部分を察知してこの部分により細かいグリッドを繰り込んでいく手法。結果的に、プロファイルが平坦な平衡部分においては粗いグリッドが保たれ、勾配の大きい反応領域においては必要な程度にまでグリッドが細分化されることとなり、反応領域での計算精度と問題全体としての計算効率が両立されることとなる。

realizations

ある統計的なモデルに従って作成された一つの出力。同一の統計モデルによって作成された個々の realization はそれぞれ異なるものとなる。

Turing instability

反応-拡散問題における自己組織化（前出）を指す。コンピュータの発明者の一人である A. Turing が予見したためにこの名前を冠せられることが多い。Turing の研究以前は、拡散過程はむしろある構造を平坦化し消失させてしまういわば trivialization のメカニズムであると考えられていたために、彼の成果は多くの学問分野の研究者から注目された。彼の主張は、線形と非線形の拡散問題の間にある劇的な差異を示すものと言うこともできる。

wavelet transform (wavelet 変換)

フーリエ級数の様に、

- 1) 異なるメンバー間の内積が 0 となり、
- 2) それぞれのメンバーの大きさが 1 に揃えられている様な関数列で、
- 3) ある関数空間（この場合にはヒルベルト空間）に所属する任意の関数をいくつかのメンバーの線形和として表現できる、

という条件を満足する関数列をこの関数空間の正規直交規定という。フーリエ級数は、無限に大きい台（前出）を持つ正規直交規定の例であるのに対して、wavelet は、コンパクトな台を持つ正規直交規定の総称である（実際、wavelet という名称は、「大きな波」であるフーリエ級数に対して、「小さな波」を意味している）。フーリエ級数に対するフーリエ変換と全く同じ意味において wavelet 変換が定義される。無限に大きな台を持つフーリエ級数を用いたスペクトル法では、全域的に一つのフラクタル特性しか与えることができないのに対してコンパクトな台を持つ wavelet においては、局所的に種々に異なるフラクタル特性を定義する、つまりマルチフラクタルを定義することが可能である。