

探索型性能評価ツールの統合・最適化

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)

1999年3月

日揮株式会社

1999年3月

探索型性能評価ツールの統合／最適化

小山田潔*、池田孝夫*

要旨

シャドウモデルの手法を用いた探索型システム性能評価の方法論は、環境シミュレーションによるシナリオ作成法の一つであるといえる。そして、探索型システム性能評価では、こうしたシミュレーション法の特徴を最大限に活かすために、シャドウモデルという概念を用いる。シャドウモデルは、通常の物理的なモデルとは異なり、ある現象についての特定の概念化や数式化のための特殊な仮定に対応するものではない。代わりに、シャドウモデルでは、幅広い可能性のうち未だ否定されていないすべての選択肢を網羅することを目標とする。また、シャドウモデルはこの様な幅広い選択肢の集合に基軸を導入することにより、膨大な数になりがちな選択肢群をパラメータ化して体系的に管理、活用することを可能とする。これらの措置により、性能評価に通常含まれる種々のタイプの不確実性（シナリオ不確実性、概念モデル不確実性、数学モデル不確実性及びパラメータ不確実性）を一つの共通的な不確実性解析及び感度解析のフレームワークのもとで取り扱うことが可能となる。

本研究は、これまで個別に開発されてきたために手法及びソフトウェアが必ずしも整合的ではない人工バリア内並びにニアフィールド母岩領域の探索型性能評価ツールを見直し、統一的な方法論とソフトウェアに統合することを目標として実施したものである。

具体的な実施内容は以下の通りである。

1. 人工バリア内並びにニアフィールド母岩領域における個別の探索型性能評価ツールの統合、最適化
2. 統合、最適化された探索型性能評価ツールの検証
3. 統合、最適化された探索型性能評価ツールのインストール及び動作確認

本報告書は、日揮株式会社が核燃料サイクル開発機構との契約により実施した業務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

*日揮株式会社 第2事業本部 第4プロジェクト事業部 プロジェクトマネジメント部

MARCH, 1999

Integration of Software for Scenario Exploration

Kiyoshi Oyamada*, Takao Ikeda*

Abstract

The scenario exploration methodology using shadow models is a variation of the environmental simulation method. Key aspect of the scenario exploration is the use of shadow models which are not corresponding to any specific assumptions on physical processes and, instead, abstract their general features relevant to the effects on nuclide transport in a general manner so that benefit of using simulation approach can be maximized. In developing the shadow models, all the modelling options that have not yet been denied by the experts are kept and parametrized in a very general framework. This, in turn, enables one to treat various types of the uncertainty in performance assessment, i.e., scenario uncertainty, conceptual model uncertainty, mathematical model uncertainty and parameter uncertainty, in a common framework of uncertainty / sensitivity analysis.

Objective of the current study is to review / modify the tools which have been developed separately and, thence, not fully consistent from one to the other and to integrate them into a unified methodology and software. Tasks for this are;

1. modification / integration of tools for scenario exploration of nuclide transport in the EBS and the near-field host rock,
2. verification of the software modified and integrated,
3. installation of the software at JNC.

This work was performed by JGC Corporation under contract with Japan Nuclear Cycle Development Agency.

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

*Project Management Department, JGC Corporation

目次

| | |
|---|----|
| 1. 探索型性能評価ツール統合/最適化の方向性..... | 1 |
| 1.1 これまでに得られた知見..... | 1 |
| 1.2 人工バリア内の移流による核種移行に関する予察解析..... | 3 |
| 1.3 地球化学異常内での平均拡散係数及び平均移流速度の変更..... | 13 |
| 1.4 統合化の方針..... | 18 |
| 2. 人工バリア及びニアフィールド母岩領域における核種移行シャドウモデル..... | 19 |
| 2.1 概念モデル..... | 19 |
| 2.2 支配方程式..... | 23 |
| 2.2.1 人工バリア..... | 23 |
| 2.2.2 天然バリア..... | 32 |
| 2.3 ソフトウェア構成及び数値解法..... | 39 |
| 3. 探索型性能評価ツール..... | 42 |
| 3.1 STRIDER..... | 42 |
| 3.2 STEPPER..... | 49 |
| 3.3 Shadow TIGER..... | 56 |
| 4. テストケース..... | 57 |
| 4.1 解析条件..... | 57 |
| 4.2 解析結果..... | 59 |
| 参考文献..... | 82 |

付録 1 STRIDER 入力ファイルの例

付録 2 STEPPER 入力ファイルの例

1. 探索型性能評価ツール統合/最適化の方向性

本章では、人工バリア及び天然バリアそれぞれにおける核種移行シャドウモデルの開発経緯とこれらを用いた統計的あるいは決定論的解析の成果、並びに新たに実施した予察解析結果を踏まえ、

- これまでのシャドウモデルの諸機能のうち冗長であり、従って簡略化すべき部分
- これまでの諸機能のうち改良あるいは詳細化を必要とする部分

を明らかにする。また、以上の点に留意しつつ、本研究における統合/最適化の方針を示すものとする。

1.1 これまでに得られた知見

人工バリア及び天然バリア中核種移行シャドウモデルについてこれまでに得られた知見は、[1]及び[2]に詳述されている。これらの中で、本研究におけるソフトウェア統合の見地から重要な知見は次表にまとめる通りである。

表 1.1.1 探索型性能評価ツール統合/最適化に関してこれまでに得られた知見

| | |
|-----------------------------|---|
| <p>冗長な機能の 単純化に関するもの</p> | <p>(1)既開発の人工バリアシャドウモデルでは、人工バリアを上流側及び下流側に分割してそれぞれをモデル化していたが、バイパス流等を考慮しても両者からの核種放出率は常にほぼ同等である。分割モデルに関連するパラメータ数の増加と数値解析上の負荷の増加を考えれば、この部分は冗長であり、今後の統合化では単純化を行うべき。</p> <p>(2)既開発の人工バリアモデルでは、ガラス固化体浸出率の時間的变化やオーバーバック開口面積の時間的増加を考えていたが、これらはいずれの場合にも感度が小さく、今後、単純化を行うべき。</p> <p>(3)既開発の天然バリア中核種移行シャドウモデルでは、複数のチャンネルを考慮可能であるが、複数チャンネルに固有の特徴は検出されず、むしろ感度構造が複雑なものになるというデメリットだけが顕在化した。</p> |
| <p>機能の改良の必要性 に関するもの</p> | <p>(1)既開発の人工バリアモデルでは、人工バリア内の移流による核種移行の大きな感度が想定されたため、このプロセスを二重空隙モデルで表現していた。このため、パラメータ数及び計算負荷も大きかったが、本現象についての有意な感度は見られていない。この点については、統合化に先だって予察解析を行い、原因を明らかにした上で方針を決定する必要がある。(1.2 参照)</p> <p>(2)既開発の人工バリアモデル及び天然バリアモデルでは、核種の平均拡散係数及び平均移流速度は、全濃度との間の両対数プロットにおいて区分的に線形なモデル(折れ線)によって表現されており、これらは、地球化学異常が生じている位置と時間では右に一定距離シフトすることが仮定されている。しかし、この方法では、部分的に地球化学異常が核種遅延機能を促進する場合があります、この点についての改良が必要である。(1.3 参照)</p> <p>(3)人工バリア内での地球化学異常の伝播は、時間—空間平面における二つの楕円として表現されているが、その後開発された天然バリアシャドウモデルでは一般的な異常物質を考え、その反応拡散を解法するモデルを用いている。専門家とのインターフェイスをとることの容易さを考えれば、統合化にあたって、人工バリアのモデルも天然バリアと同様のものとするのが望ましい。</p> |

1.2 人工バリア内の移流による核種移行に関する予察解析

前節において述べた様に、人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いたこれまでの解析では、予想と異なり、人工バリア中の移流による核種移行の影響は必ずしも大きくないという感度解析結果が得られている。そこで、ここでは、人工バリア内、特に緩衝材中に亀裂が生じて移流による核種移行が生起した状況を考え、この場合の核種移行フラックスと拡散によるフラックスとを定常時の解析解を用いて比較し、また、この比較結果を踏まえて本研究における改良の方向性を示すこととする。

(1) 人工バリア中の移流による核種移行フラックスの定常解

下図に示す様な区分的に均一な透水量係数分布を持つ同心円構造の多孔質媒体によって人工バリアを表現することとする。なお、以下では、坑道の軸方向単位長さの区間を考えることとする。

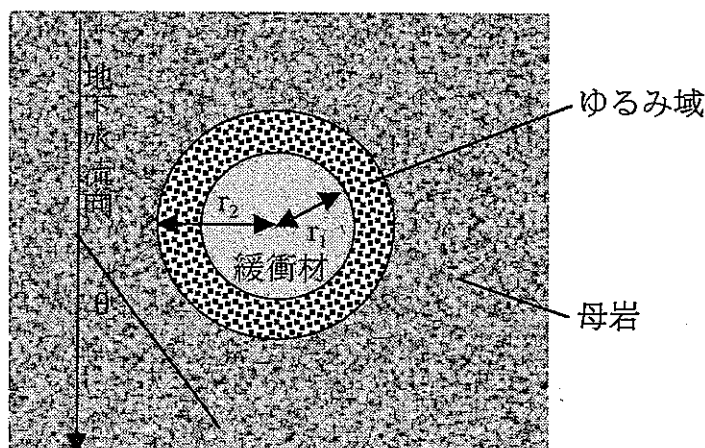


図 1.2.1 同心円構造の多孔質媒体によるニアフィールドの表現

上図における各領域中の非圧縮性流体の定常流れについての支配方程式は、次の通りである。

$$\nabla \cdot (k_i \nabla P_i) = 0 \quad (1.1)$$

但し、

k : 透水係数

P : 水頭

であり、 i は各領域に対応した添え字である（緩衝材は 1、ゆるみ域は 2、母岩は 3）。

式(1.1) は、以下の境界条件とともに解くことができ、

$$\begin{aligned} P_3 &\rightarrow -hr\cos\theta, \quad r(>r_3) \rightarrow \infty \\ P_1(r_1, \theta) &= P_2(r_1, \theta), \\ k_1 \underline{n} \cdot \nabla P_1 &= k_2 \underline{n} \cdot \nabla P_2, \quad (r=r_1) \\ P_2(r_2, \theta) &= P_3(r_2, \theta), \\ k_2 \underline{n} \cdot \nabla P_2 &= k_3 \underline{n} \cdot \nabla P_3, \quad (r=r_2) \\ P_i(0, \theta) &= 0, \quad P_i(r, 0) = 0, \quad i=1,2,3, \quad r>0 \end{aligned} \tag{1.2}$$

（但し、 h は平均動水勾配、 \underline{n} は法線ベクトルである。）

各領域での水頭分布は次式で与えられる。

$$P_i = -(A_i r + B_i r^{-1}) \cos\theta, \quad r_{i-1} \leq r \leq r_i \tag{1.3}$$

但し、

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{4hk_2 k_3 r_2^2}{(k_1 k_3 + k_2^2)(r_2^2 - r_1^2) + k_2(k_1 + k_3)(r_1^2 + r_2^2)}, \\ B_1 &= 0, \\ A_2 &= \frac{2h(k_1 + k_2)k_3 r_2^2}{(k_1 k_3 + k_2^2)(r_2^2 - r_1^2) + k_2(k_1 + k_3)(r_1^2 + r_2^2)}, \end{aligned}$$

$$B_2 = \frac{-2h(k_1 - k_2)k_3 r_1^2 r_2^2}{(k_1 k_3 + k_2^2)(r_2^2 - r_1^2) + k_2(k_1 + k_3)(r_1^2 + r_2^2)},$$

$$A_3 = h,$$

$$B_3 = \frac{hr_2^2 \{ (k_1 k_3 - k_2^2)(r_2^2 - r_1^2) + k_2(k_3 - k_1)(r_1^2 + r_2^2) \}}{(k_1 k_3 + k_2^2)(r_2^2 - r_1^2) + k_2(k_1 + k_3)(r_1^2 + r_2^2)}.$$

最後に、移流による核種移行フラックス J_{adv} は、式(1.3)の水頭分布に対応した流束分布 $q(r, \theta)$ に基づき、

$$J_{adv} = c^* \int_{-r_0}^{r_0} q(r, \pi/2) dr, \quad (1.4)$$

として算出される（但し、 c^* は核種の溶解度）。

(2) 拡散による核種移行フラックスの定常解

他方、緩衝材中に亀裂が存在しない場合の拡散による核種移行についての支配方程式は、軸対称性、及びゆるみ域での完全混合を仮定した場合、次の通りとなる。

$$R_f \frac{\partial c}{\partial t} = D_e \Delta c,$$

$$c(r_0, t) = c^*,$$

$$Qc(r_1, t) = -2\pi r_1 D_e \left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{r=r_1} \quad (1.5)$$

但し、

D_e : 実効拡散係数

c : 核種濃度

Q : ゆるみ域中地下水流量。

式(1.5)の定常解は、

$$c(r) = c^* \frac{2\pi D_e - Q \ln\left(\frac{r}{r_1}\right)}{2\pi D_e - Q \ln\left(\frac{r_0}{r_1}\right)}, \quad r_0 \leq r \leq r_1 \quad (1.6)$$

であり、拡散による核種移行フラックス J_{diff} は、

$$J_{diff} = \frac{2\pi c^* D_e Q}{2\pi D_e - Q \ln\left(\frac{r_0}{r_1}\right)} \quad (1.7)$$

となる。

(3) 解析結果

表 1.2.1 に示すゆるみ域透水係数、母岩透水係数、及び動水勾配の組み合わせについて、それぞれ人工バリア中の亀裂頻度と開口幅とを広範に変動させて

- ゆるみ域中地下水流量
- 廃棄体部分を通過する地下水流量
- 人工バリア亀裂中地下水流速
- 移流による核種フラックスと拡散による核種フラックスとの比

を算出した。なお、[3]を参考として、人工バリア中亀裂の透水量係数 T は、開口幅 b との間に以下の関係を有するものと仮定した。

$$b = 2\sqrt{T} \quad (1.8)$$

結果を表 1.2.2 及び図 1.2.2~1.2. に示す。

表 1.2.1 解析ケース

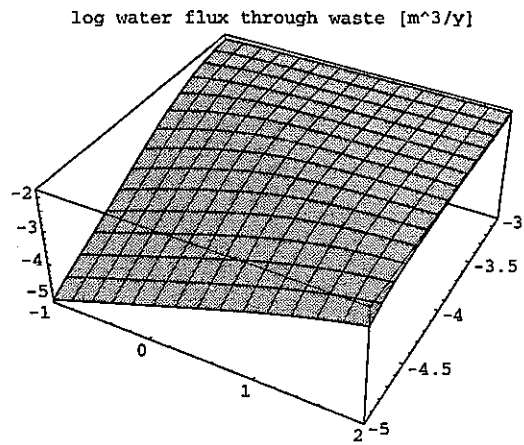
| | ゆるみ域透水係数 [m/s] | 母岩透水係数 [m/s] | 動水勾配 [-] |
|-------|-------------------|-----------------|----------|
| ケース 1 | 1 e-8 | 1 e-9 | 0.01 |
| ケース 2 | 1 e-7 | 1 e-8 | 0.01 |
| ケース 3 | 1 e-6 | 1 e-7 | 0.01 |
| ケース 4 | 1 e-8 | 1 e-9 | 0.1 |
| ケース 5 | 1 e-6 | 1 e-7 | 1 |

表 1.2.2 ゆるみ域中流量算出結果*

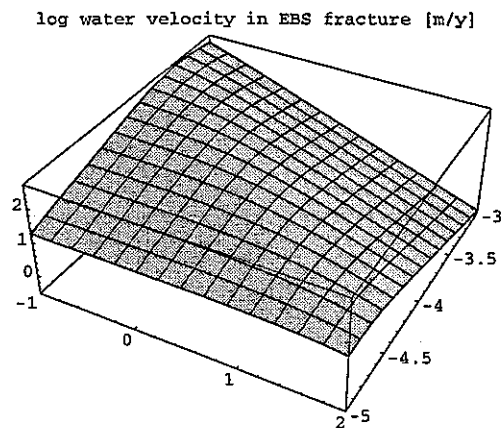
| | ゆるみ域中流量[m3/yr] (単位坑道長当たり) |
|-------|------------------------------|
| ケース 1 | 1.6 e-3 |
| ケース 2 | 1.6 e-2 |
| ケース 3 | 1.6 e-1 |
| ケース 4 | 1.6 e-2 |
| ケース 5 | 1.6 e 1 |

*人工バリア中は不透水性であると仮定して算出した値。

廃棄体通過流量 (対数)



人工バリア内亀裂中地下水流速 (対数)



移流及び拡散による核種フラックスの比 (対数)

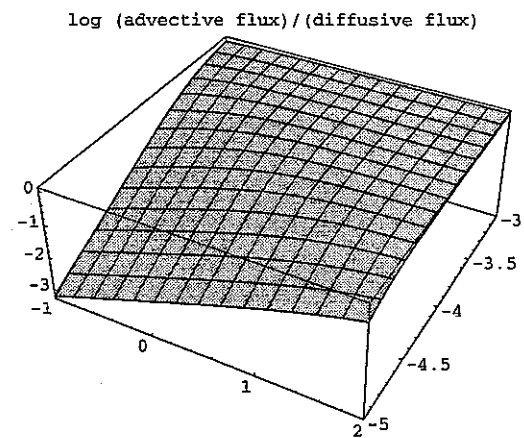
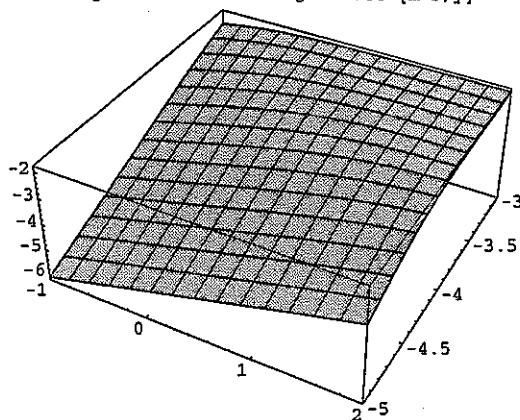


図 1.2.2 予察解析結果 (ケース 1)

(各グラフの底辺右及び左側の軸はそれぞれ人工バリア内亀裂開口幅[m] (対数)
及び亀裂頻度[1/m] (対数))

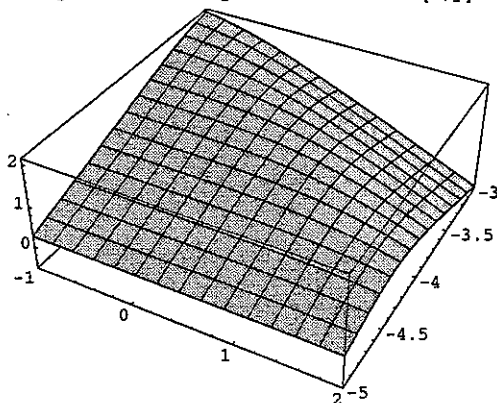
廃棄体通過流量 (対数)

log water flux through waste [m^3/y]



人工バリア内亀裂中地下水流速 (対数)

log water velocity in EBS fracture [m/y]



移流及び拡散による核種フラックスの比 (対数)

log (advective flux)/(diffusive flux)

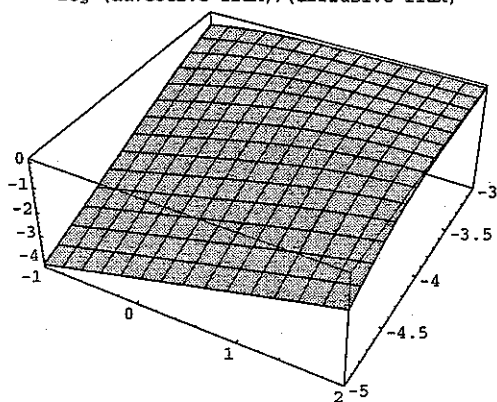
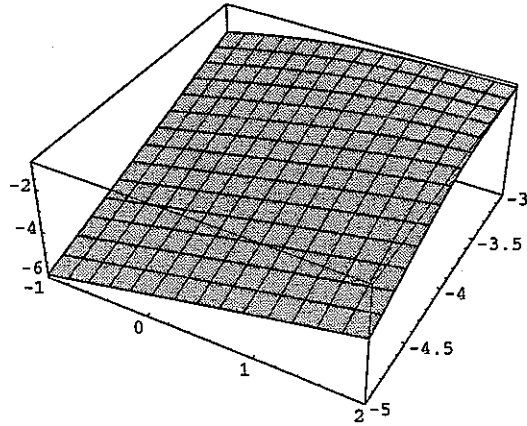


図 1.2.3 予察解析結果 (ケース 2)

(各グラフの底辺右及び左側の軸はそれぞれ人工バリア内亀裂開口幅[m] (対数) 及び亀裂頻度[1/m] (対数))

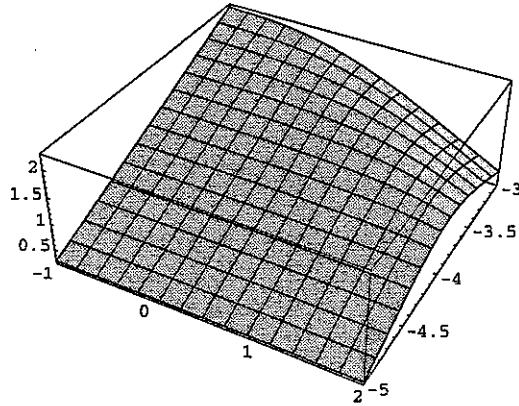
廃棄体通過流量 (対数)

log water flux through waste [m^3/y]



人工バリア内亀裂中地下水流速 (対数)

log water velocity in EBS fracture [m/y]



移流及び拡散による核種フラックスの比 (対数)

log (advective flux)/(diffusive flux)

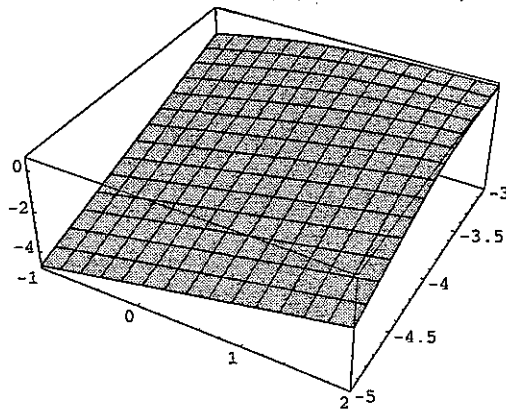


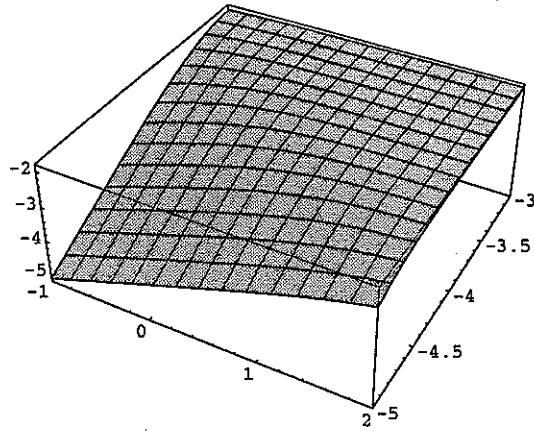
図 1.2.4 予察解析結果 (ケース 3)

(各グラフの底辺右及び左側の軸はそれぞれ人工バリア内亀裂開口幅[m] (対数)

及び亀裂頻度[1/m] (対数))

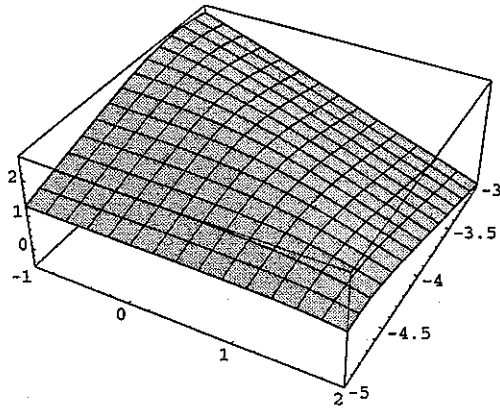
廃棄体通過流量 (対数)

log water flux through waste [m^3/y]



人工バリア内亀裂中地下水流速 (対数)

log water velocity in EBS fracture [m/y]



移流及び拡散による核種フラックスの比 (対数)

log (advective flux)/(diffusive flux)

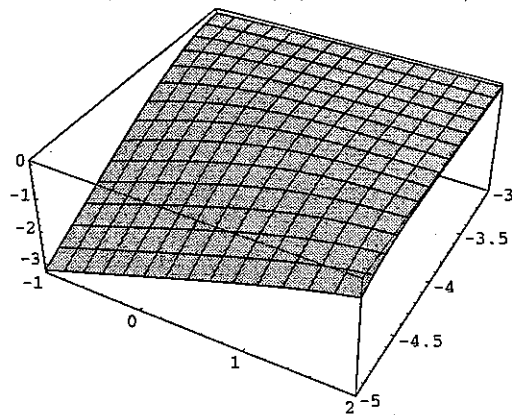


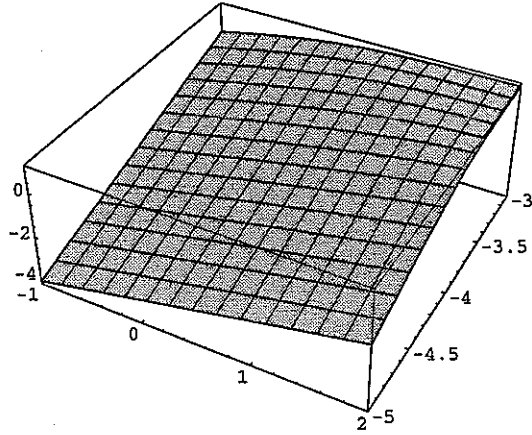
図 1.2.5 予察解析結果 (ケース 4)

(各グラフの底辺右及び左側の軸はそれぞれ人工バリア内亀裂開口幅[m] (対数)

及び亀裂頻度[1/m] (対数))

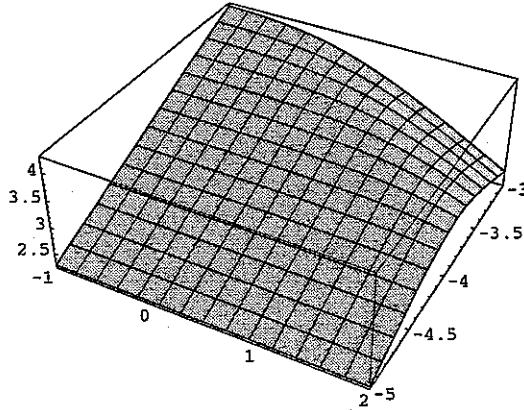
廃棄体通過流量 (対数)

log water flux through waste [m³/y]



人工バリア内亀裂中地下水流速 (対数)

log water velocity in EBS fracture [m/y]



移流及び拡散による核種フラックスの比 (対数)

log (advective flux)/(diffusive flux)

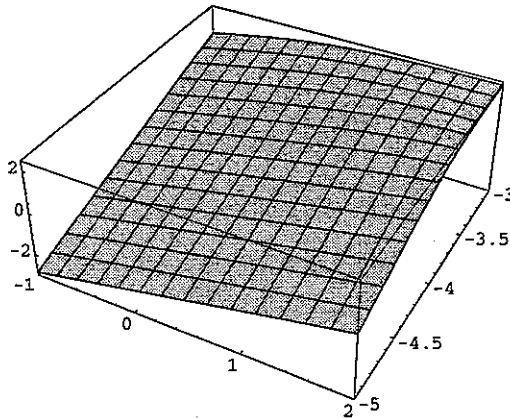


図 1.2.6 予察解析結果 (ケース 5)

(各グラフの底辺右及び左側の軸はそれぞれ人工バリア内亀裂開口幅[m] (対数)

及び亀裂頻度[1/m] (対数))

解析結果から明らかな通り、ゆるみ域及び母岩中透水係数がそれぞれ 1 e-6 及び 1 e-7 m/s という高い数値と動水勾配 1 という過酷な水理条件が組み合わされ、なおかつ、1 mm 程度の開口幅を持つ亀裂が坑道方向 1 m 当たりに数十本存在するという条件が成立する場合を除いては、人工バリア中の移流による核種フラックスは拡散フラックスよりも有意に大きくなることはない。この結果は、事前の予想と異なり、過去の人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いた解析で対応するパラメータ群の感度が顕在化しなかった事実を説明するものとなっている。

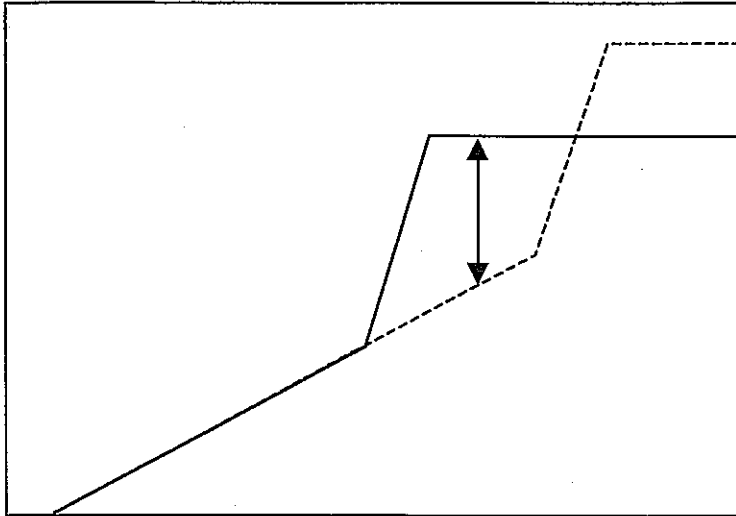
しかしながら、シャドウモデルが、否定されていない条件の組み合わせを幅広くカバーするものであることを考えれば、人工バリア中の移流効果を見捨てることは正当化できない。そこで、上記の様な人工バリア中の移流効果が卓越する例においては、亀裂頻度が十分に大きいものであることから、人工バリア中を水理学的に等価な多孔質媒体として表現し、緩衝材中の透水係数をパラメータとして拡散支配の場から移流支配の場までを幅広く連続的にカバーし得る様なモデル化を行うものとする。

なお、上記のパラメータサーベいの範囲には含まれていないが、数ミリメートル以上の開口幅を持つ大きな亀裂が低頻度で発生するという、粘土である緩衝材の膨潤性からは極めて考えにくい状況に対応するために、緩衝材中の亀裂を二重空隙モデルで表現した代替的なツールも用意するものとする。

1.3 地球化学異常内での平均拡散係数及び平均移流速度の変更

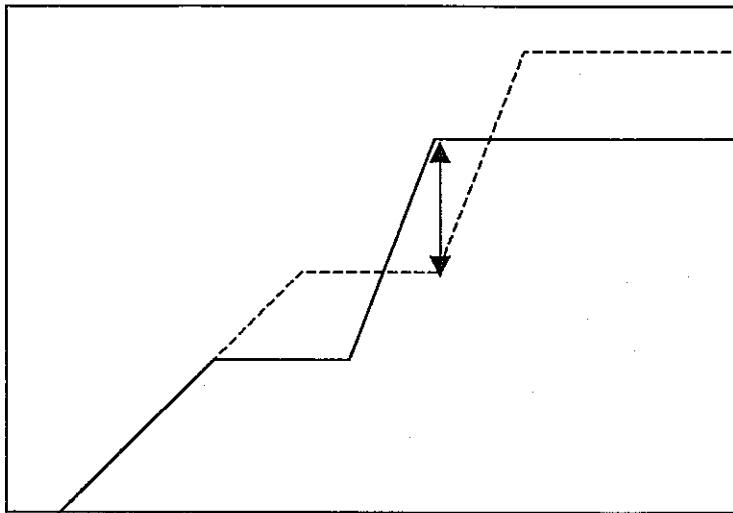
これまでに開発した人工バリア及び天然バリア中核種移行シャドウモデルでは、核種の平均拡散係数及び平均移流速度は、全濃度との間の面対数プロットにおいて区分的に線形なモデル（折れ線）によって表現されており、これらは、地球化学異常が生じている位置と時間では右に一定距離シフトすることが仮定されている。しかし、この方法では、部分的に地球化学異常が核種遅延機能を促進する可能性があることが明らかとなった。例を図 1.3.1 に模式的に示す。

規格化された平均拡散係数



核種総濃度 (対数)

規格化された平均移流速度



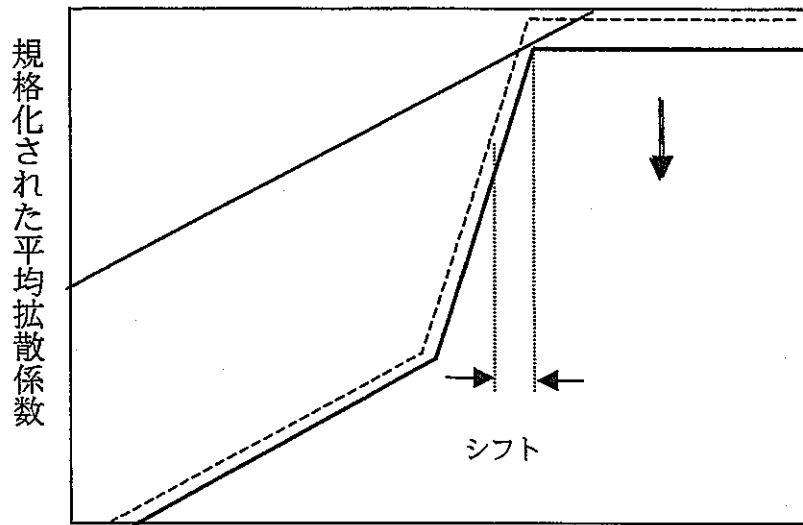
核種総濃度 (対数)

—— 平常時
----- 地球化学異常

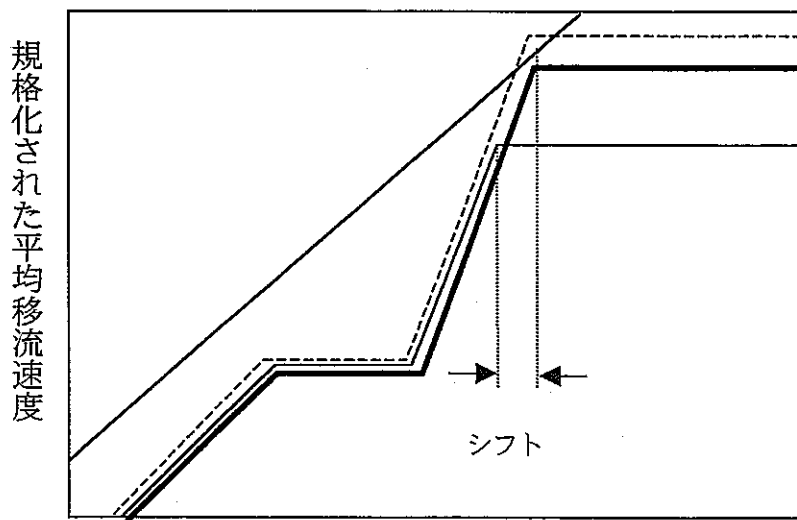
図 1.3.1 地球化学異常において核種の遅延が促進される例

上図に示した様な、地球化学異常における遅延効果の促進は、統計的に発生するものであり、また、図からも明らかな通り総濃度のある一部の区間において発生するものである。従って、対応する入力パラメータ（地球化学異常中のシフト）の感度は極めて複雑なものとなり、このことがこれまでの解析において同パラメータに関する感度が顕在化しなかった理由と考えられる。そこで、本研究においては、最終節点位置のみを右にシフトするという改良を施すことにより、地球化学異常内で核種が動きにくい状態とはならないことを保証するものとする。この変更に伴い、前出の例は次頁の様に書き換えられる。

なお、図に示したものの以外にも、上記の条件を満足するシフトの方法が考えられる。これらのうち、過度に複雑にならないものとして、「地球化学異常中ではあるしきい濃度（平常時の最終節点濃度よりも高く設定される）以下で核種の全量が可動となり、しきい濃度以上では全量が不動となる」というものが考えられる。この例を図 1.3.3 に示す。



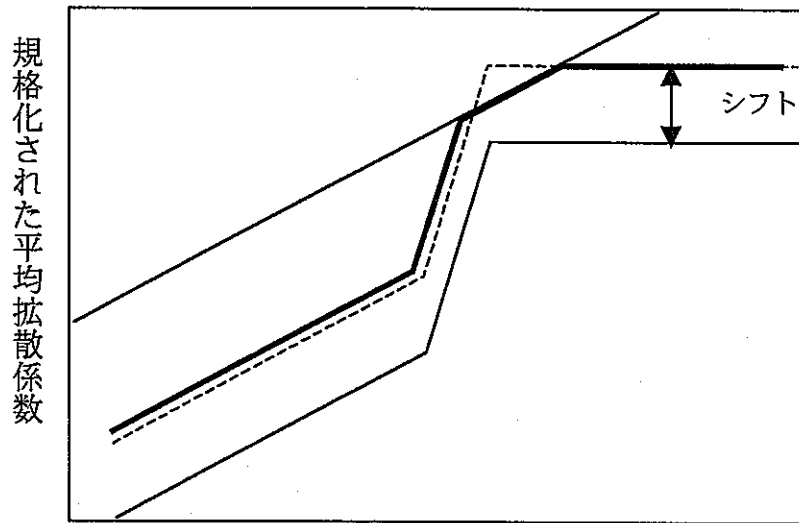
核種総濃度 (対数)



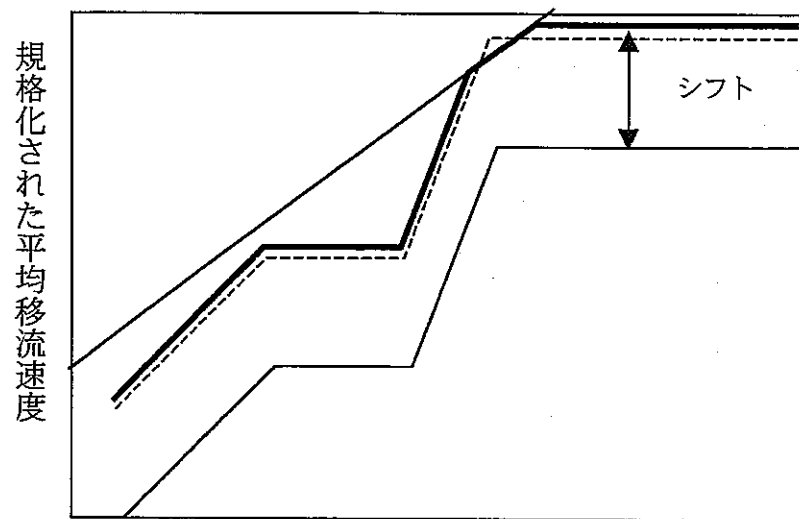
核種総濃度 (対数)

- 平常時
- - - 地球化学異常
- 地球化学異常 (補正後)

図 1.3.2 改良後の地球化学異常中シフト



核種総濃度 (対数)



核種総濃度 (対数)

- 平常時
- - - 地球化学異常
- 地球化学異常 (補正後)

図 1.3.2 地球化学異常中シフトの代替案

1.4 統合化の方針

前節までの検討を踏まえ、統合化の方針を以下にまとめる。

- (1) 人工バリアの上流側及び下流側をそれぞれ陽にモデル化することは行わない。
- (2) ガラス浸出速度の時間依存性及びオーバーバック開口面積の時間的増加はモデル化しない。(それぞれ、時間的に一定な浸出速度、及び瞬時全面開口を仮定し、それぞれ統計的にサンプリングする。)
- (3) 人工バリア中の亀裂発生に伴う核種の移流は、緩衝材を水理学的に等価な多孔質媒体として表現したモデルを用いることによって表現する。但し、人工バリア中に数ミリメートル以上の開口幅を持つ大亀裂が発生する極めて希な状況にも対応可能とするために、人工バリア中の亀裂と健全部とを二重空隙モデルで表現した代替モデルの開発も行う。
- (4) 天然バリア中のチャンネルネットワークは単一のもので代表することとする。但し、ソフトウェア上は、将来複数のチャンネルをモデル化する際の拡張に支障がないものとしておく。
- (5) 人工バリア中の地球化学異常の伝播も、天然バリアの場合と同じく、一般化された地球化学異常物質の反応—移流・拡散問題をシミュレートすることにより表現するものとする。
- (6) 地球化学異常時の平均拡散係数及び平均移流速度のシフトについては、図 1.3.2 に示す改良後のモデルを用いる。

2. 人工バリア及びニアフィールド母岩領域における核種移行シャドウモデル

2.1 概念モデル

(1) 人工バリアを連続体として扱う場合

人工バリアを連続体として扱う場合の全体システム構成を図 2.1.1 に示す。人工バリアにおいては、分子拡散と移流方向とが比較的整合的な（少なくとも反転していない）下流側の半分をモデル化することとする。そして、最終的な解析結果は出力を 2 倍することによって求められる。なお、この近似による誤差は最大 100%程度（移流支配であり、かつ溶解度限界の場合）と考えられる。

核種移行及びこれに関連するプロセスとしては、以下のものを考慮する。

1. 液相での分種化、吸着、あるいはコロイド生成などの（核種移行に比して）速い反応による核種の質量配分（瞬時平衡）
2. 溶解／沈澱、鉱物化、結晶化等の遅い反応による核種質量の速度論的配分
3. 核種の様々な化学形態における拡散性の相違
4. 人工バリア内の間隙の形成とその再充填、及び核種の様々な化学形態に対応して異なる流速を持つ移流現象
5. 時間依存の地下水流が人工バリア内及びニアフィールド母岩中の核種移行に及ぼす影響
6. 人工バリア内及びニアフィールド母岩中の地球化学的変化（pH、Eh、温度等の変動）がもたらす核種の質量配分への影響

(2) 人工バリアを二重空隙モデルによって扱う場合

人工バリアをニアフィールドの場合と同じく二重空隙としてモデル化する場合には、通常の状態に於いては、緩衝材中チャンネル内の地下水流速を 0 とし、

1. マトリクス拡散係数を十分に大きくすることにより、マトリクス内とチャンネル中の核種濃度とを実質的に同一とする

2. チャンネル内の分子拡散係数を調節することにより、チャンネル内の拡散フラックスを、単一の多孔質媒体モデルと等価とする
3. 緩衝材の全体を複数のレグによって表現し、各レグのマトリクス拡散深さが固化体中心からの距離に比例する様に設定することにより、人工バリアを円筒一次元座標によって表現することとする。

という措置をとる。

また、解析の途上において、緩衝材中に亀裂が生じることを想定した場合、その時点において、二重空隙モデルによる等価単一多孔質媒体表現である 1.及び 2.を通常二重空隙モデルに切り替える（マトリクス拡散係数及びチャンネル内の分子拡散係数を物理的に適切な数値へ変化させ、チャンネル内に非零の地下水流速（及び対応する分散係数）を与える。

以上の表現における全体システムの構成を概念的に図 2.1.2 に示す。

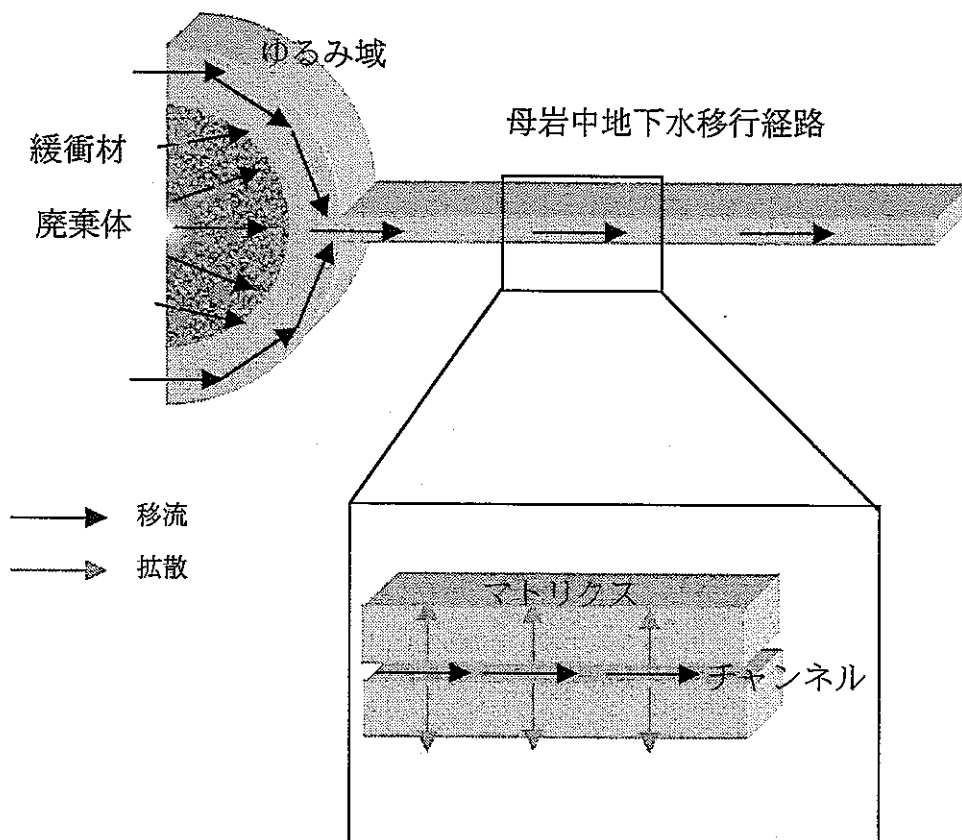


図 2.1.1 人工バリアを連続体として扱う場合の全体システム構成

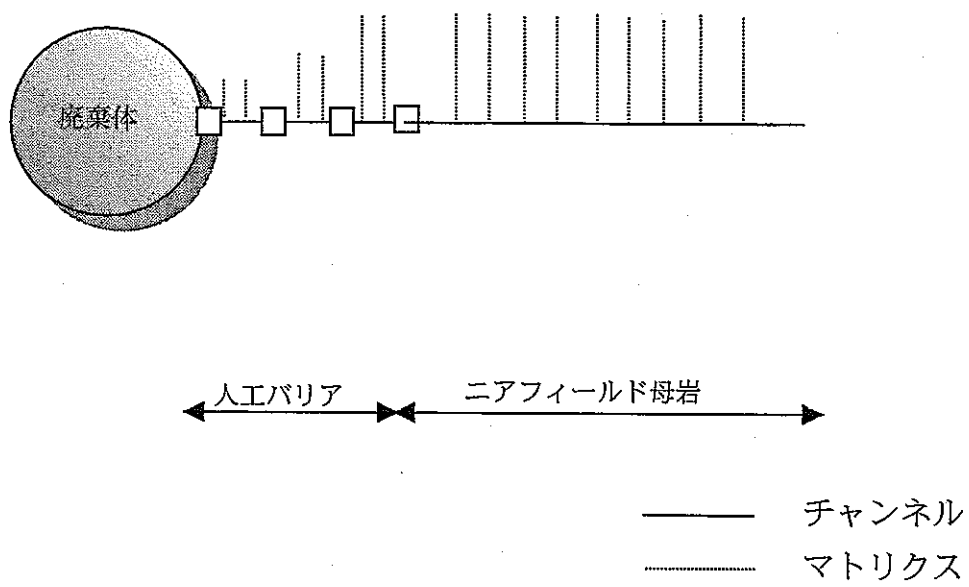


図 2.1.2 人工バリアを二重空隙モデルとして扱った場合の全体システム構成の模式図

2.2 支配方程式

2.2.1 人工バリア

(1)幾何形状

ここでは、人工バリアを連続体として表現する場合の立式について述べる。なお、人工バリアを二重空隙モデルとして表現する場合の方程式系は、次節の内容と基本的に同じである。

人工バリアの幾何形状は、表 2.2.1.1 に示すパラメータ群によって表現される。

表 2.2.1.1 人工バリアの幾何形状に関するパラメータ

| | | | |
|---------------|------------|--------|----------------------|
| 廃棄体半径 | r_w | 時間的に一定 | [m] |
| 緩衝材半径 | r_b | 時間的に一定 | [m] |
| ゆるみ域半径 | r_e | 時間的に一定 | [m] |
| 廃棄体一体当たりの坑道長さ | L_w | 時間的に一定 | [m] |
| 廃棄体空隙率 | θ_w | 時間的に一定 | [-] |
| 緩衝材空隙率 | θ_b | 時間的に一定 | [-] |
| ゆるみ域空隙率 | θ_e | 時間的に一定 | [-] |
| 廃棄体密度 | ρ_w | 時間的に一定 | [kgm ⁻³] |
| 緩衝材密度 | ρ_b | 時間的に一定 | [kgm ⁻³] |
| ゆるみ域密度 | ρ_e | 時間的に一定 | [kgm ⁻³] |

なお、緩衝材中の各セルの断面積は一次元円筒座標系に従い定め、ゆるみ域中の断面積は、地下水流れに直交する矩形領域を考える。

(2)水理

系内の地下水流動は、定常かつ飽和であり、

1. 緩衝材が健全である期間はゆるみ域より内側の人工バリア内は静水状態と仮定し、亀裂が生じた後には、指定した透水係数と動水勾配によって定まる流速が緩衝材中で生じるものとする。この時、拡散場と同一の体系で解析を行

う制約上、地下水流向は外向き放射状であり、地下水流速は空間的に一様と仮定する。また、人工バリア中の地下水流量はゆるみ域中のそれを上回らないものとする。

- 核種の物質収支を保証するためには、ゆるみ域中の地下水流量は、下流側に位置するチャンネル中の流量以下であることが必要である。簡単のため、これらの二つは常に等しいものと仮定する。

表 2.2.1.2 水理に関するパラメータ

| | | | |
|------------|-------|------|-------|
| 人工バリア内動水勾配 | P_b | 時間依存 | [-] |
| 緩衝材透水係数 | k_b | 時間依存 | [m/s] |
| ダルシー流速 | V_b | 時間依存 | [m/s] |
| 空隙内流速 | v | 時間依存 | [m/s] |

なお、人工バリア中の移流に関して以下の仮定を用いる。

- 緩衝材を内側と外側の二つの領域に分割し、外側領域（厚さ可変）では指定された時刻から一定期間透水係数が所定の非零の値となる。
- 内側領域の厚さが一定値以下となった場合、亀裂存在時の外側領域と同一の地下水流速が内側でも生じる。
- 廃棄体中の地下水流速は、常に緩衝材内側領域と同一である。

これらの仮定に基づき設定される人工バリア中の流れを、図 2.2.1.1 に模式的に示す。

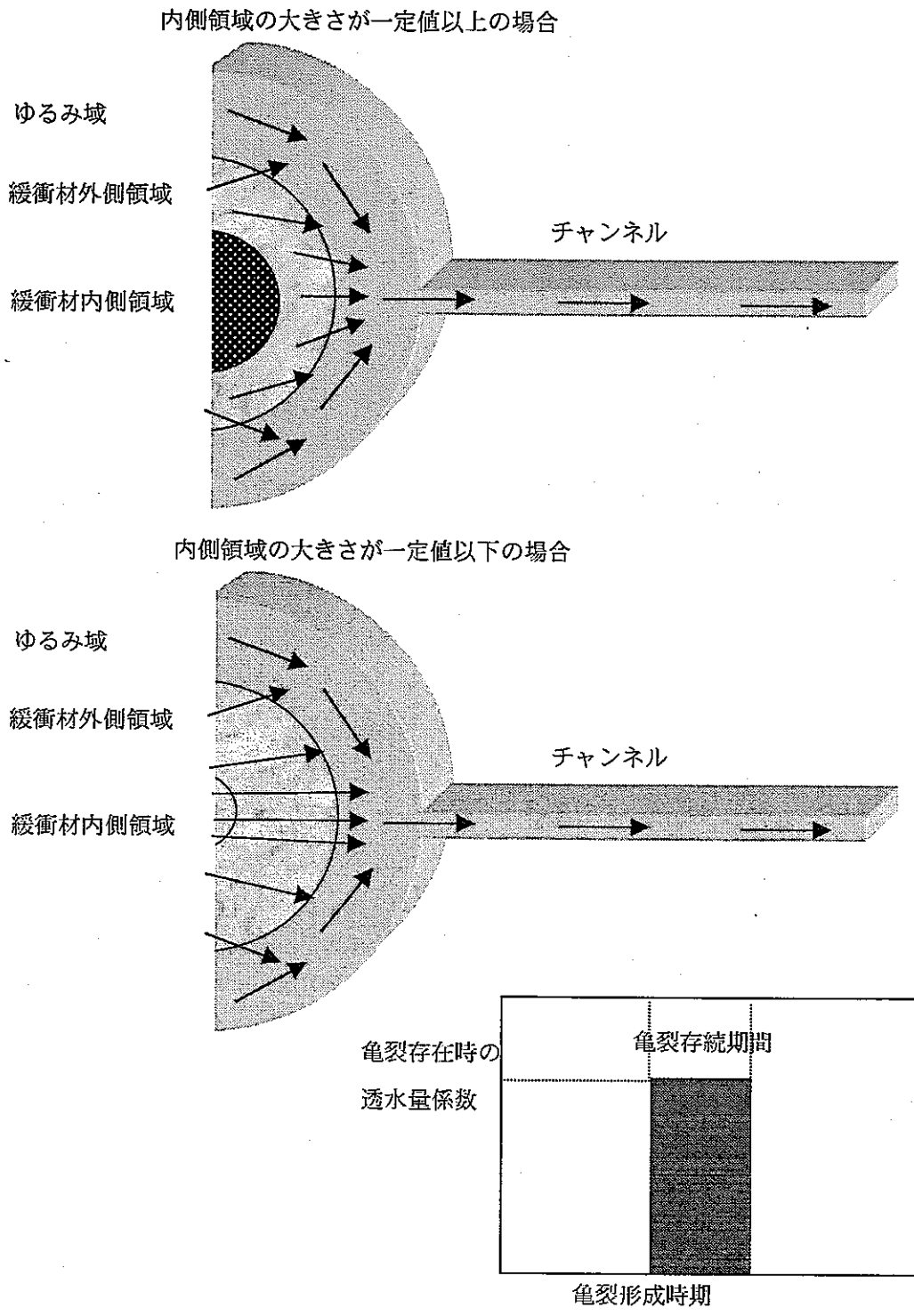


図 2.2.1.1 人工バリア中の移流の取り扱い

(3)地球化学

人工バリア中の地球化学的条件変化は、廃棄物あるいは系外から侵入する地球化学異常物質（例えば、酸素、あるいはコンクリート空隙水、等）によるものである。そして、これらの物質によって誘起される地球化学異常がどの程度の時間及び空間スケールにおいて伝播するかは、侵入する異常物質のフラックスと、異常物質を消費することにより地球化学条件の変化を緩衝し得るバリア材中の鉱物の量とのバランスに依存している。

人工バリア中核種移行シャドウモデルにおいては、地球化学異常の伝播は時間—空間平面上の楕円によって表現されていた。しかし、この方法では、専門家の知見との整合性が担保しにくいという問題があった。そこで、今年度作成した核種移行シャドウモデルでは、Tigerにおける定式化を参考として、地球化学異常物質の反応/移流/分散/マトリクス拡散問題についての偏微分方程式を数値的に解くこととした。但し、多数の統計的解析を効率的に実施するためには、各ケース毎に速度論的な反応/移行問題を計算することは現実的ではない。そこで、ここでは、局所瞬時平衡仮説を採用し、地球化学異常物質の濃度 A は、緩衝作用を有する鉱物の濃度（より正確には、単位流体当たりの鉱物質質量） B が非零である限りは 0 に保持されるものとする。なお、地球化学以上物質流入点は、廃棄体及びゆるみ域の二カ所とする。

以上の仮定の下に、緩衝材中の A 及び B の移行に関する本来の反応/移流/分散・拡散方程式

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta_b A_b}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_b (d_L v + D_b) \frac{\partial A_b}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_b v A_b}{\partial x} - \theta_b R(B_b) \\ \frac{\partial \theta_b B_b}{\partial t} &= -\theta_b R(B_b)\end{aligned}\tag{2.1}$$

の差をとることにより、

$$\frac{\partial \theta_b (A_b - B_b)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_b (d_L v + D_b) \frac{\partial A_b}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_b v A_b}{\partial x}\tag{2.2}$$

を得る。但し、廃棄体及びゆるみ域はそれぞれ単一のセルで表され、上記と同等の支配方程式が定義される。また、緩衝材とこれらのセルとの境界では濃度とフラックスの連続性を保証する様に境界条件が設定される。なお、 d_L は分散長であり、 D_b は緩衝材中の分子拡散係数である。さらに、瞬時平衡の仮定より

$$C \equiv A - B = \begin{cases} A, & \text{if } B = 0 \\ -B, & \text{if } B > 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

であることから、(2.2)式は新たな変数 C のみについての方程式に書き直すことが可能である

$$\frac{\partial \theta_b C_b}{\partial t} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_b (d_L v + D_b) \frac{\partial C_b}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_b v C_b}{\partial x} \right\} H(C_b) \quad (2.4)$$

但し、 $H(\)$ は Heaviside のステップ関数である。人工バリア中核種移行シャドウモデルは、廃棄体内及びゆるみ域での A 及び廃棄体（オーバーバック）及び緩衝材での B の初期値に基づき（ A の初期値は全域的に 0 であるものとする）、与えられたチャンネル形状と水理条件に対して(2.4)式を解法することにより C の系内でのプロファイルの経時変化を算出する。そして、以下の簡単な規則に基づき系内の各点が地球化学異常に属するか否かを定義する。

$C > 0$ 地球化学異常

$C < 0$ あるいは $C = 0$ 通常の地球化学条件

表 2.2.1.3 地球化学に関するパラメータ

| | | | |
|-------------|-------|--------|-----------------------|
| 廃棄体中異常物質濃度 | A_w | 時間依存 | [mol/m ³] |
| ゆるみ域中異常物質濃度 | A_e | 時間依存 | [mol/m ³] |
| 廃棄体中緩衝鉱物濃度 | B_w | 時間的に一定 | [mol/m ³] |
| 緩衝材中緩衝鉱物濃度 | B_b | 時間的に一定 | [mol/m ³] |
| ゆるみ域中緩衝鉱物濃度 | B_e | 時間的に一定 | [mol/m ³] |

(4) 廃棄体からの核種放出

オーバーパックが健全な期間においては、核種は廃棄体中に完全に閉じこめられるものとし、また、オーバーパックが破損した時点で全面開口を仮定し、その後核種は一定の割合でガラス固化体から浸出するものとする。

表 2.2.1.4 廃棄体からの核種放出に関するパラメータ

| | | | |
|-------------|-------|--------|--------|
| オーバーパック腐食期間 | T_w | 時間的に一定 | [yr] |
| ガラス浸出率 | g | 時間的に一定 | [1/yr] |

(5) 核種移行

核種移行の立式においては、瞬時平衡グループという複数の移行形態の全濃度を考えることとする。瞬時平衡グループ内における種々の形態（溶質、吸着種、沈澱、コロイド、等）の濃度間には瞬時平衡が成立するものとする。このことは、ある地球化学条件の下で、それぞれの瞬時平衡グループの全濃度が与えられれば、当該グループに属する各移行形態の濃度が一意に定まること、さらには、個々の移行形態の移動特性（拡散係数あるいは地下水に対する相対的な移流速度）が既知であればグループ全体としての移動特性が全濃度の関数として定まることを意味する。

溶質を含む従って可動な瞬時平衡グループ（第一グループ）、及び移行しない形態のみのグループ（第二グループ）という二つを考え、これら二つのグループ間では速度論的な反応により質量交換が行われるものとする。

以上の仮定の下に、第一及び第二の瞬時平衡グループについての反応/分散/移流方程式は以下の様に定式化される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_b c_b^{(1)}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_b \frac{\partial (d_L v \beta_b + D_b \alpha_b) c_b^{(1)}}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_b v \beta_b c_b^{(1)}}{\partial x} - \theta_b R_b(c_b^{(1)}, c_b^{(2)}) \\ \frac{\partial \theta_b c_b^{(2)}}{\partial t} &= \theta_b R_b(c_b^{(1)}, c_b^{(2)}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

但し、 c は全濃度であり、上添字は該当する瞬時平衡グループを、下添字は

チャンネル及びマトリクスをそれぞれ表す。また、 α 及び β はそれぞれ第一瞬時平衡グループの平均拡散係数並びに平均移流速度に対応し、以下の様に定義される。

$$\alpha = \frac{\sum_i D_i c_i^{(1)}}{D \sum_i c_i^{(1)}} \quad (2.6)$$

$$\beta = \frac{\sum_i v_i c_i^{(1)}}{v \sum_i c_i^{(1)}}$$

但し、 D_i 及び v_i はそれぞれ第一の瞬時平衡グループ内の i 番目の移行形態の分子拡散係数及び移流速度を表す。また、二つの瞬時平衡グループ間の速度論的反応 R は次式により表現される。

$$R_c(c_c^{(1)}, c_c^{(2)}) = \mu_c^{(12)}(1 - \beta_c)c_c^{(1)} - \mu_c^{(21)}c_c^{(2)} \quad (2.7)$$

$$R_m(c_m^{(1)}, c_m^{(2)}) = \mu_m^{(12)}(1 - \alpha_m)c_m^{(1)} - \mu_m^{(21)}c_m^{(2)}$$

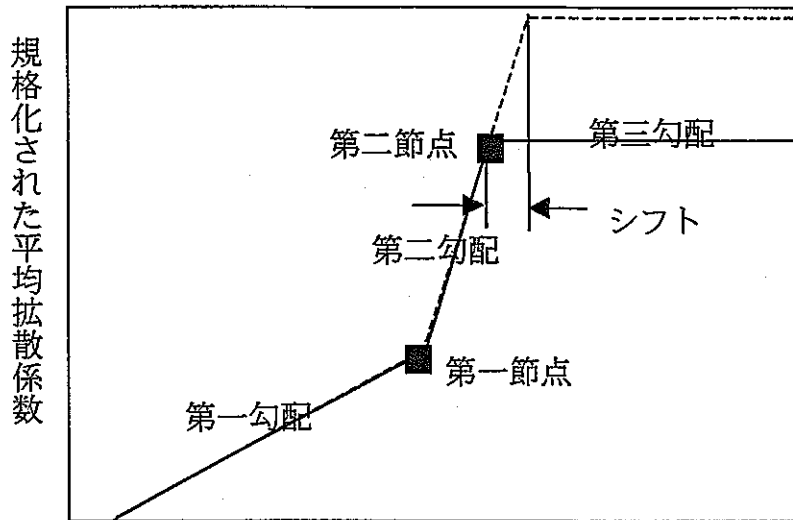
但し、 μ は反応速度定数である。

なお、第一瞬時平衡グループの平均移行特性 α 、 β 、及び速度論的反応速度定数 μ は地球化学条件に依存するものであり、地球化学異常の内外においてそれぞれ異なる数値を採り得る(1.3参照)。

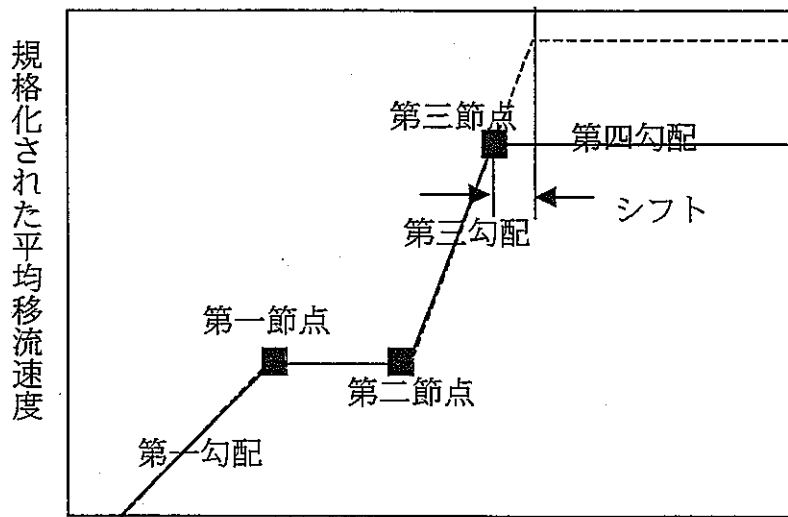
表 2.2.1.5 核種移行に関するパラメータ

| | | | |
|---|-----------------------------|--------|---------------------|
| 緩衝材中の 分子拡散係数 | D_b | 時間的に一定 | [m ² /s] |
| 緩衝材中の 分散長 | d_L | 時間的に一定 | [m] |
| 通常地球化学条件における 第一瞬時平衡グループの 平均拡散係数及び移流速度 | α_b β_b | 全濃度の関数 | [-] |
| 地球化学異常における第一 瞬時平衡グループの平均拡 散係数及び移流速度 | α_b^* β_b^* | 全濃度の関数 | [-] |
| 通常地球化学条件における 瞬時平衡グループ間の 速度論的反應速度定数 | μ_b μ_b | 時間的に一定 | [1/s] |
| 地球化学異常における瞬時 平衡グループ間の 速度論的反應速度定数 | μ_b^* μ_b^* | 時間的に一定 | [1/s] |

なお、平均拡散係数及び平均移流速度の関数形は、図 2.2.1.2 に示す通りである。



核種総濃度 (対数)



核種総濃度 (対数)

—— 平常時
 - - - - 地球化学異常

図 2.2.1.2 平均拡散係数及び平均移流速度

2.2.2 天然バリア

(1)幾何形状

ニアフィールド母岩中地下水移行経路は、人工バリアの取り扱い（連続体あるいは二重空隙）によらず、二重空隙のチャンネルとして表現される。チャンネルには、岩体マトリクスが附随しており、チャンネル及びマトリクスの幾何形状は、表 2.2.2.1 に示すパラメータ群によって指定される。

表 2.2.2.1 各チャンネルの幾何形状に関するパラメータ群

| | | | |
|--------------------|------------|--------|--------------------|
| チャンネル長さ | L | 時間的に一定 | [m] |
| チャンネル幅 | W | 時間的に一定 | [m] |
| 単位流体体積当たりのマトリクス表面積 | f | 時間依存 | [m ⁻¹] |
| チャンネル開口幅 | a | 時間依存 | [m] |
| チャンネル空隙率 | θ_c | 時間依存 | [-] |
| マトリクス拡散深さ | l | 時間的に一定 | [m] |
| マトリクス空隙率 | θ_m | 時間依存 | [-] |

表 2.2.2.1 に示す通り、後述する解析対象領域の大きさを規定するパラメータのみは時間に依らず固定する。このことは、主として計算効率の低下を避けるためのものであるが、領域のサイズを変更した場合の影響は、対応する水理（透水量係数、等）あるいは核種移行特性（マトリクス拡散係数、等）を広範囲において変更することにより少なくとも近似的には表現することが可能と考えられる。また、時間依存のパターンは、複数のステップを設けることによって表現される。

(2)水理

系内の地下水流動は、定常かつ飽和であり、

1. チャンネルにおける流速を入力する
2. チャンネルの上流側（即ちゆるみ域）及び下流側のジャンクションにおいて指定された水頭に基づき、以下のダルシー則と水収支式を解くことによ

り算出する

$$k \frac{P_d - P_u}{L} = v_D \quad (2.8)$$

という二つのオプションのいずれかにより指定される。

なお、表 2.2.2.2 に含まれる他の関連する諸物理量との間の関係は以下の通りである。

$$\begin{aligned} T &= (2l + \alpha) k \\ q &= (2l + \alpha) v_D W = a \theta_c v W \end{aligned} \quad (2.9)$$

また、時間依存性及び位置依存性の取り扱いは形状に関するパラメータの場合と同様である。

表 2.2.2.2 水理に関するパラメータ

| | | | |
|----------------|-------|------|---------------------|
| 上流側水頭 | P_u | 時間依存 | [m] |
| 下流側水頭 | P_d | 時間依存 | [m] |
| (全断面積の) 平均透水係数 | k | 時間依存 | [m/s] |
| ダルシー流速 | v_D | 時間依存 | [m/s] |
| 透水量係数 | T | 時間依存 | [m ² /s] |
| 流束 | q | 時間依存 | [m ³ /s] |
| 空隙内流速 | v | 時間依存 | [m/s] |

なお、動水勾配及びチャンネル透水量係数の時間変化は、それぞれ図 2.2.2.1 及び-2 に示す通りである。

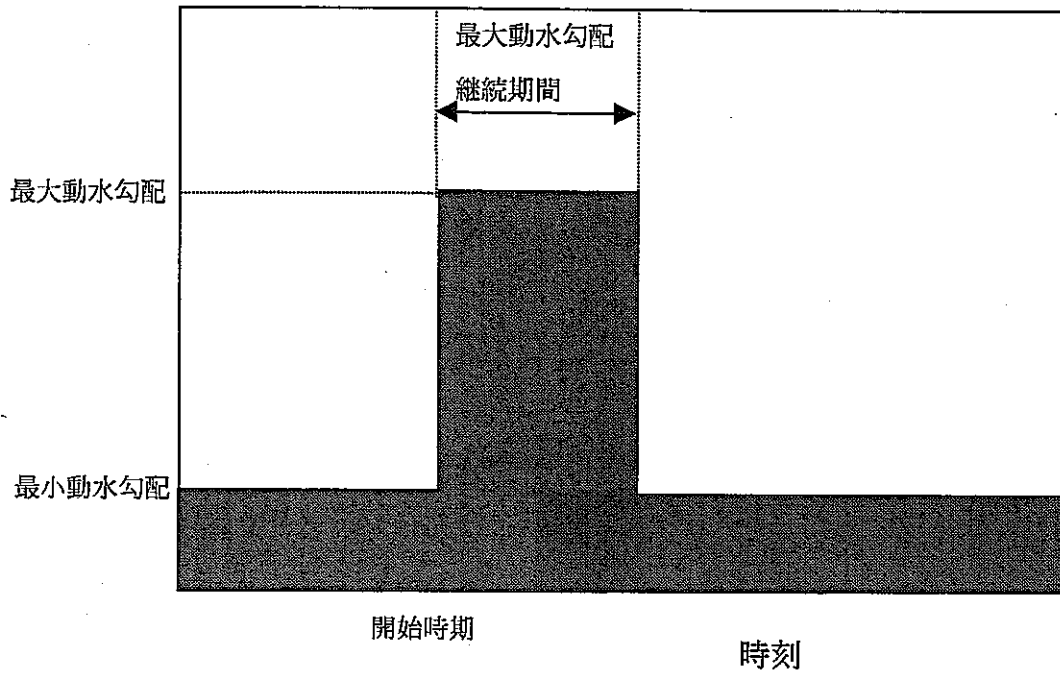


図 2.2.2.1 動水勾配の時間変化のモデル

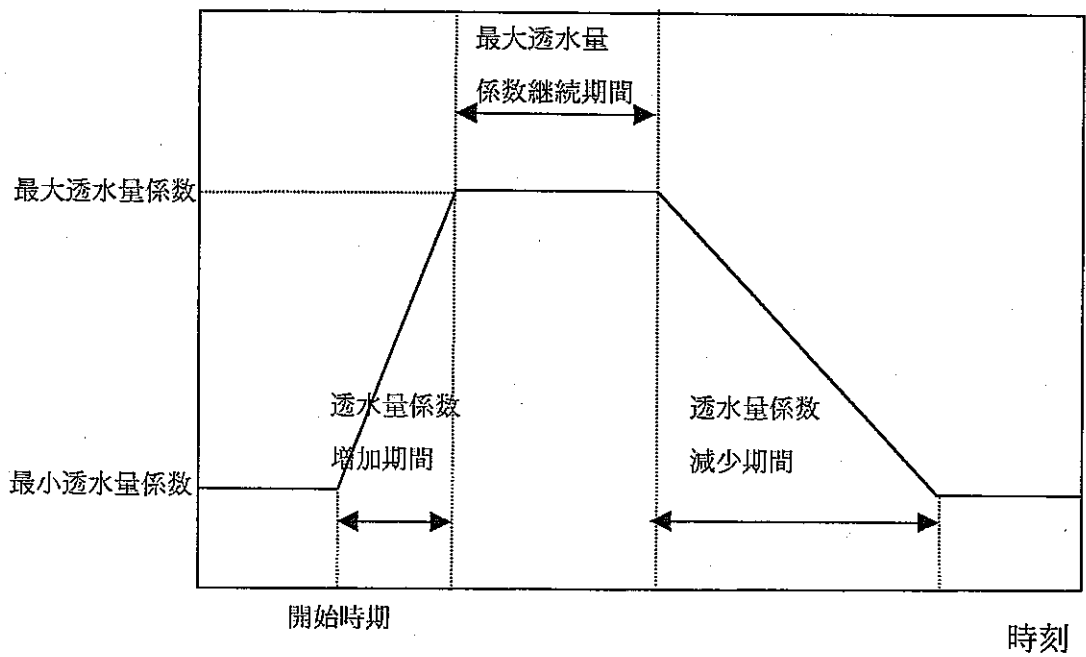


図 2.2.2.2 チャンネル透水量係数の時間変化のモデル

(3)地球化学

ニアフィールド母岩中の地球化学的条件の変化は、チャンネル及びマトリクス内に廃棄物あるいは系外から侵入する地球化学異常物質（例えば、酸素、あるいはコンクリート空隙水、等）によるものである。そして、これらの物質によって誘起される地球化学異常がどの程度の時間及び空間スケールにおいて伝播するかは、侵入する異常物質のフラックスと、異常物質を消費することにより地球化学条件の変化を緩衝し得る母岩中の鉱物の量とのバランスに依存している。

昨年度作成したニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルのプロトタイプにおいては、地球化学異常のフロントのみに着目し、その移動に関する常微分方程式として定式化していた。しかしながら、この方法では、フロントの移動を規定する種々の条件を表現するために多数のステップ関数が必要となり、このために計算効率が著しく低下する様な数値的に「硬い」問題を排除することが極めて難しいことがあきらかとなった。そこで、今年度作成した核種移行シャドウモデルでは、Tigerにおける定式化を参考として、地球化学異常物質の反応／移流／分散／マトリクス拡散問題についての偏微分方程式を数値的に解くこととした。但し、多数の統計的解析を効率的に実施するためには、各ケース毎に二重空隙媒体における速度論的な反応／移行問題を計算することは現実的ではない。そこで、ここでは、局所瞬時平衡仮説を採用し、地球化学異常物質の濃度 A は、緩衝作用を有する鉱物の濃度（より正確には、単位流体当たりの鉱物質量） B が非零である限りは 0 に保持されるものとする。

以上の仮定の下に、 A 及び B に関する本来の反応／移流／分散／マトリクス拡散方程式

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta_c A_c}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_c d_L v \frac{\partial A_c}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_c v A_c}{\partial x} - \theta_c R(B_c) + f \theta_m D_m \frac{\partial A_m}{\partial y} \Big|_{y=\frac{a}{2}} \\
\frac{\partial \theta_c B_c}{\partial t} &= -\theta_c R(B_c) \\
\frac{\partial \theta_m A_m}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_m D_m \frac{\partial A_m}{\partial x} \right) - \theta_m R(B_m) \\
\frac{\partial \theta_m B_m}{\partial t} &= -\theta_m R(B_m) \\
A_m \left(x, \frac{a}{2} \right) &= A_c(x)
\end{aligned} \tag{2.10}$$

の差をとることにより、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta_c (A_c - B_c)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_c d_L v \frac{\partial A_c}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_c v A_c}{\partial x} + f \theta_m D_m \frac{\partial A_m}{\partial y} \Big|_{y=\frac{a}{2}} \\
\frac{\partial \theta_m (A_m - B_m)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_m D_m \frac{\partial A_m}{\partial x} \right) \\
A_m \left(x, \frac{a}{2} \right) &= A_c(x)
\end{aligned} \tag{2.11}$$

を得る。但し、上式において下添字 c 及び m はそれぞれチャンネル並びにマトリクスを表すものとし、マトリクス内の最奥部 ($y=l+a/2$) では Neuman 条件が、また、上流側並びに下流側のジャンクションでは濃度とフラックスの連続性を保証する様に境界条件が設定される。なお、 d_L は分散長であり、 D_m はマトリクス空隙中の分子拡散係数である。さらに、瞬時平衡の仮定より

$$C \equiv A - B = \begin{cases} A, & \text{if } B = 0 \\ -B, & \text{if } B > 0 \end{cases} \tag{2.12}$$

であることから、(2.4)式は新たな変数 C のみについての方程式に書き直すことが可能である

$$\frac{\partial \theta_c C_c}{\partial t} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_c d_L v \frac{\partial C_c}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_c v C_c}{\partial x} + f \theta_m D_m \frac{\partial C_m}{\partial y} \Big|_{y=\frac{a}{2}} \right\} H(C_c)$$

$$\frac{\partial \theta_m C_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_m D_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \right) H(C_m) \quad (2.13)$$

$$C_m \left(x, \frac{a}{2} \right) = C_c(x), \quad \text{if } C_m \left(x, \frac{a}{2} \right), C_c(x) > 0$$

但し、 $H(\)$ は Heaviside のステップ関数である。ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルは、チャンネル入り口における A 及びチャンネルとマトリクス内での B の初期値に基づき (A の初期値は全域的に 0 であるものとする)、与えられたチャンネル形状と水理条件に対して(2.13)式を解法することにより C の系内でのプロファイルの経時変化を算出する。そして、以下の簡単な規則に基づき系内の各点が地球化学異常に属するか否かを定義する。

$C > 0$ 地球化学異常

$C < 0$ あるいは $C = 0$ 通常の地球化学条件

表 2.2.2.3 地球化学に関するパラメータ

| ゆるみ域中異常物質濃度 | A_{cin} | 時間依存 | [mol/m ³] |
|--------------|-----------|--------|-----------------------|
| チャンネル内緩衝鉍物濃度 | B_{co} | 時間的に一定 | [mol/m ³] |
| マトリクス内緩衝鉍物濃度 | B_{m0} | 時間的に一定 | [mol/m ³] |

(4)核種移行

ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルにおいても、溶質を含む従って可動な瞬時平衡グループ (第一グループ)、及び移行しない形態のみのグループ (第二グループ) という二つを考え、これら二つのグループ間では速度論的な反応により質量交換が行われるものとする。

以上の仮定の下に、第一及び第二の瞬時平衡グループについての反応/分散/移流/マトリクス拡散方程式は以下の様に定式化される。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta_c c_c^{(1)}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_c d_L \frac{\partial \nu \beta_c c_c^{(1)}}{\partial x} \right) - \frac{\partial \theta_c \nu \beta_c c_c^{(1)}}{\partial x} - \theta_c R_c(c_c^{(1)}, c_c^{(2)}) + f \theta_m D_m \frac{\partial \alpha_m c_m^{(1)}}{\partial y} \Big|_{y=\frac{a}{2}} \\
\frac{\partial \theta_c c_c^{(2)}}{\partial t} &= \theta_c R_c(c_c^{(1)}, c_c^{(2)}) \\
\frac{\partial \theta_m c_m^{(1)}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_m D_m \frac{\partial \alpha_m c_m^{(1)}}{\partial x} \right) - \theta_m R_m(c_m^{(1)}, c_m^{(2)}) \\
\frac{\partial \theta_m c_m^{(2)}}{\partial t} &= \theta_m R_m(c_m^{(1)}, c_m^{(2)}) \\
c_m^{(1)} \left(x, \frac{a}{2} \right) &= c_c^{(1)}(x)
\end{aligned} \tag{2.14}$$

但し、 c は全濃度であり、上添字は該当する瞬時平衡グループを、下添字はチャンネル及びマトリクスをそれぞれ表す。また、 α 及び β はそれぞれ第一瞬時平衡グループの平均拡散係数並びに平均移流速度に対応し、人工バリアの場合と同様に定義される。

表 2.2.2.4 核種移行に関するパラメータ

| | | | |
|--------------------------------------|-----------------------------|--------|---------------------|
| マトリクス空隙中の分子拡散係数 | D_m | 時間的に一定 | [m ² /s] |
| チャンネル中の分散長 | d_L | 時間的に一定 | [m] |
| 通常の地球化学条件における第一瞬時平衡グループの平均拡散係数及び移流速度 | α_m β_c | 全濃度の関数 | [-] |
| 地球化学異常における第一瞬時平衡グループの平均拡散係数及び移流速度 | α_m^* β_c^* | 全濃度の関数 | [-] |
| 通常の地球化学条件における瞬時平衡グループ間の速度論的反應速度定数 | μ_m μ_c | 時間的に一定 | [1/s] |
| 地球化学異常における瞬時平衡グループ間の速度論的反應速度定数 | μ_m^* μ_c^* | 時間的に一定 | [1/s] |

2.3 ソフトウェア構成及び数値解法

上述した通り定式化した数学的モデルは、Tiger を基礎として作成した核種移行ソルバである Shadow TIGER によって解法される。また、Shadow TIGER の入力ファイル特に後述する統計的解析のための大規模のバッチファイルを作成するために、STRIDER (人工バリアを連続体として表現する場合) 及び STEPPER (人工バリアを二重空隙モデルによる表現する場合) という二つのプリプロセッサを作成した。

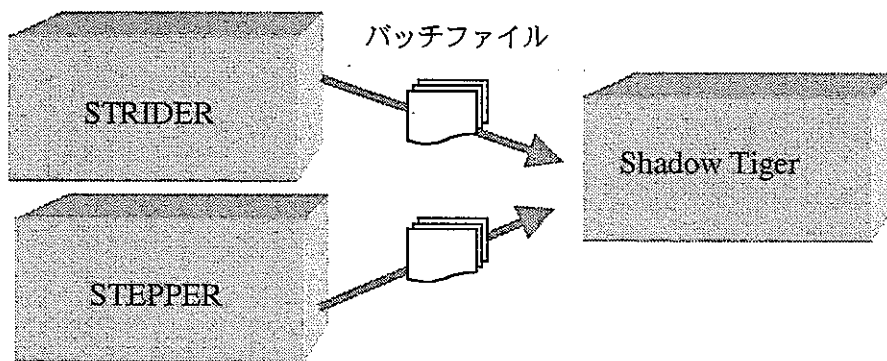


図 2.3.1 ソフトウェア構成

ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルを数値的に解法するために、Shadow Tiger は、まず、各チャンネルを図 2.3.2 に示す様にセルとセルリンクを用いて空間的に離散化する。

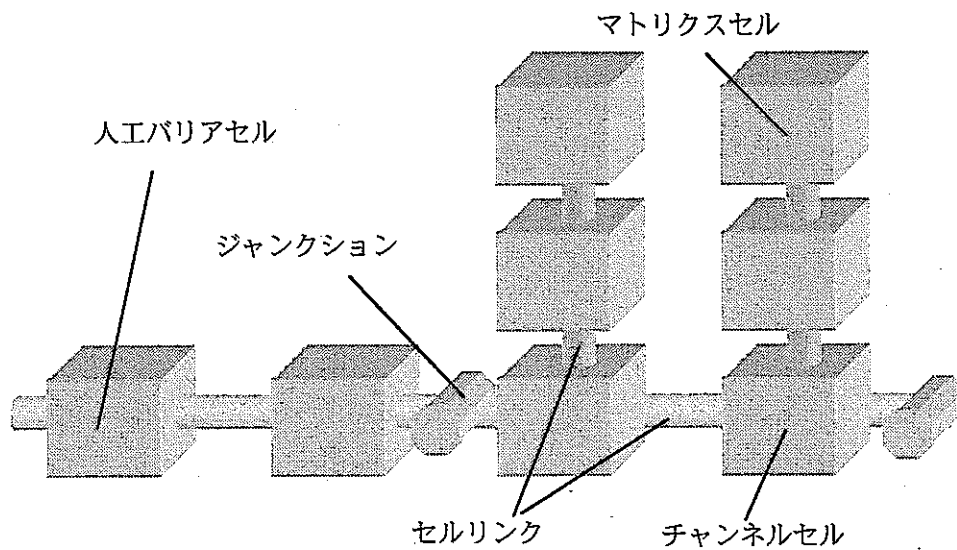


図 2.3.2 Shadow TIGER の空間離散化

図 2.3-2 に示す空間離散化に対応して、地球化学異常物質についての移行方程式、並びに核種移行方程式の差分化が行われる。この際、下図に示す様に各セル及びセルリンクにおいて濃度を指定し、対応する差分演算子が定義される。

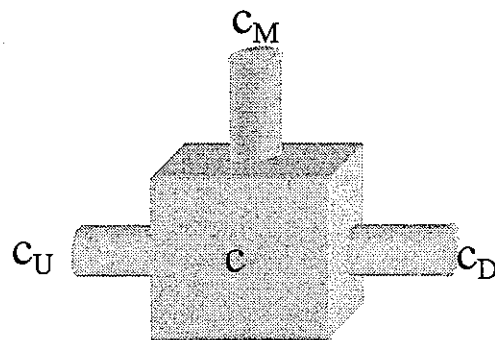


図 2.3.3 差分化における濃度指定位置

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_U &\equiv \frac{c - c_U}{\delta x/2} \\
 \left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_D &\equiv \frac{c_D - c}{\delta x/2} \\
 \left(\frac{\partial c}{\partial y}\right)_M &\equiv \frac{c_M - c}{\delta y/2}
 \end{aligned}
 \tag{2.15}$$

但し、 δx 及び δy はそれぞれチャンネル及びマトリクス部のセルの長さである（人工バリア中では、マトリクス部分を無視した演算子が用いられる）。

また、ジャンクションにおいては、以下の様に濃度及びフラックスの連続性が保証される。

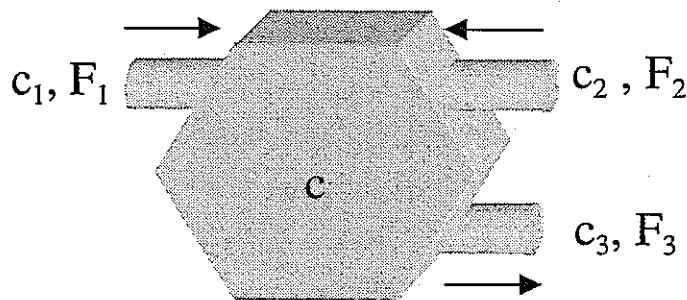


図 2.3.4 ジャンクションにおける濃度及びフラックス

$$\begin{aligned}
 0 &= F_1 + F_2 - F_3 \\
 c_1 &= c_2 = c_3 = c
 \end{aligned}
 \tag{2.16}$$

3. 探索型性能評価ツール

3.1 STRIDER

STRIDER はコンソールアプリケーションであり、例えば

STRIDER Case1

というコマンドを与えることにより起動することができる。この際、アプリケーションと.str ファイルとは動作中のディレクトリ内にあることが必要である。

STRIDER のインプットは、一般に、以下の形式を採る。

KEYWORD *argument1 (argument2, argument3)*

ここで、入力は一行ずつ行われ、入力は正しい順序でなされなくてはならない。なお、以下で言う分布タイプとしては、uni (均一分布) 及び log (対数均一分布) が可能である。また、以下のキーワードで先頭に W, B, E, C, 及び M があるものは、それぞれ、廃棄体、緩衝材、ゆるみ域、チャンネル、及びマトリクスに対応している。

(1) プログラムコントロール

NRUNS 統計的解析のケース数

(数値)

SEED 乱数発生のためのシード

(数値)

RUNTIME 各解析ケースの計算時間の上限

(数値)

(2) 廃棄体からの核種放出

W-CONTAINMENT-TIME オーバーバック腐食期間

(下限) (上限) (分布タイプ)

W-DISSOLUTION-TIME ガラス浸出期間
(下限) (上限) (分布タイプ)

(3) 形状

W-RADIUS 廃棄体半径
(数値)

B-RADIUS 緩衝材半径
(数値)

E-RADIUS ゆるみ域半径
(数値)

WBE-LENGTH 廃棄体長さ
(数値)

E-RADIUS ゆるみ域半径
(数値)

C-LENGTH チャンネル長さ
(数値)

(4) 材質

W-POROSITY 廃棄体空隙率
(数値)

B-POROSITY 緩衝材空隙率
(数値)

E-POROSITY ゆるみ域空隙率
(数値)

M-POROSITY マトリクス空隙率
(数値)

W-DENSITY 廃棄体密度
(数値)

B-DENSITY 緩衝材密度
(数値)

E-DENSITY ゆるみ域密度
(数値)

M-DENSITY マトリクス密度
(数値)

(5) 離散化

緩衝材は、一定期間非零の透水係数が与えられる外側領域と、常に透水係数 0 の内側領域とに二分され、それぞれの厚さは統計的に定められる。また、内側領域の厚さが一定値以下となった場合、この領域の地下水流速は外側領域と同一と見なされる。なお、廃棄体中の流速は常に緩衝材内側領域のそれと同じである。

B-INNER-CELLS 緩衝材内側領域内セル数
(数値)

B-OUTER-CELLS 緩衝材外側領域内セル数
(数値)

C-CELLS チャンネル内セル数
(数値)

M-CELLS マトリクス内セル数
(数値)

(6) 核種特性

現在のバージョンの STRIDER は単一あるいは親、娘の 2 核種を取り扱うことが可能であり、核種数の指定は以下のキーワードによって指定される。

NO-OF-NUCLIDES 核種数
(数値)

また、各核種の特性は以下のキーワード群によって指定される。

NUCLIDE (核種名) (半減期) (インベントリ)

- M-C-ALPHA1** マトリクス中平均拡散係数の第一節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- M-C-ALPHA2** マトリクス中平均拡散係数の第二節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- C-C-BETA1** チャンネル中平均移流速度の第一節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- C-C-BETA2** チャンネル中平均移流速度の第二節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- C-C-BETA3** チャンネル中平均移流速度の第三節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- M-R-ALPHA** マトリクス中平均拡散係数における遅延係数
(下限) (上限) (分布タイプ)
- C-R-BETA** チャンネル中平均移流速度における遅延係数
(下限) (上限) (分布タイプ)
- M-A0** マトリクス中平均拡散係数の第一勾配
(数値)
- M-A1** マトリクス中平均拡散係数の第二勾配
(下限) (上限) (分布タイプ)
- C-B0** マトリクス中平均移流速度の第一勾配
(数値)
- C-B1** マトリクス中平均移流速度の第二勾配
(数値)
- C-B2** マトリクス中平均移流速度の第三勾配
(下限) (上限) (分布タイプ)
-
- WBE-C-ALPHA1** 人工バリア中平均拡散係数の第一節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- WBE -C-ALPHA2** 人工バリア中平均拡散係数の第二節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- WBE -C-BETA1** 人工バリア中平均移流速度の第一節点濃度
(下限) (上限) (分布タイプ)
- WBE -C-BETA2** 人工バリア中平均移流速度の第二節点濃度

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBE -C-BETA3 人工バリア中平均移流速度の第三節点濃度

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBE -R-ALPHA 人工バリア中平均拡散係数における遅延係数

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBE -R-BETA 人工バリア中平均移流速度における遅延係数

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBE -A1 人工バリア中平均拡散係数の第二勾配

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBE -B2 人工バリア中平均移流速度の第三勾配

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBECM-K 地球化学異常におけるシフト (全域)

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBECM-m コロイドに対する移流速度増倍率 (全域)

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBECM-mu_I_II 瞬時平衡グループ I から II への反応速度定数 (全域)

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBECM-mu_II_I 瞬時平衡グループ II から I への反応速度定数 (全域)

(下限) (上限) (分布タイプ)

WBECM-DIFFUSION 空隙中拡散係数 (全域)

(数値)

以上のパラメータのうち、各節点濃度と遅延係数との間には相関関係が定義されており、例えば、

M-C-ALPHA1 1e-11 0.1 log

:

:

M-R-ALPHA 1 1e5 log

と指定した場合、平均拡散係数の第一節点濃度は、 $1e-11 \sim 0.1R\alpha$ の範囲からサ

ンプリングされることとなる。

(7) 人工バリア亀裂

B-FRACTURE-START 亀裂発生時刻

(下限) (上限) (分布タイプ)

B-FRACTURE-DURATION 亀裂存在期間

(下限) (上限) (分布タイプ)

B-FRACTURE-SIZE 緩衝材外側領域大きさ (厚さの割合)

(下限) (上限) (分布タイプ)

B-FRACTURE-CONDUCTIVITY 亀裂存在時の緩衝材透水係数

(下限) (上限) (分布タイプ)

(8) ニアフィールド母岩中チャンネル

NO-OF-CHANNELS ネットワーク中のチャンネル数

(数値=1)

C-TRANSMISS-MIN 透水量係数の最小値

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-TRANSMISS-MAX 透水量係数の最大値

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-FRACTURE-WIDTH 亀裂全幅

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-FLOW-WET 単位流体体積当たり亀裂表面積

(下限) (上限) (分布タイプ)

B-DISPERSION 人工バリア中分散係数

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-DISPERSION チャンネル内分散係数

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-A-FACTOR 開口幅と透水量係数平方根との間の比例定数

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-APERTURE-STEPS 開口幅の時間変化を記述するための期間数

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-START-INC 開口幅増加開始時期

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-DURATION-INC 開口幅最大値到達までに要する時間

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-DURATION-MAX 最大開口幅継続時間

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-DURATION-DEC 開口幅最小値到達までに要する時間

(下限) (上限) (分布タイプ)

M-DEPTH マトリクス拡散深さ

(下限) (上限) (分布タイプ)

(9) 動水勾配

EC-HYD-START 動水勾配増大開始時期

(下限) (上限) (分布タイプ)

EC-HYD-DURATION 最大動水勾配継続期間

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-HYD-PMIN 差圧最小値

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-HYD-PMAX 差圧最大値

(下限) (上限) (分布タイプ)

(10) 地球化学異常

W-GEOCHEM-START 廃棄体からの地球化学異常物質流入開始時期

(下限) (上限) (分布タイプ)

W-GEOCHEM-DURATION 廃棄体からの地球化学異常物質流入継続期間

(下限) (上限) (分布タイプ)

W-GEOCHEM-STRENGTH 廃棄体からの地球化学異常物質強度

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-GEOCHEM-START チャンネルからの地球化学異常物質流入開始時期

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-GEOCHEM-DURATION チャンネルからの地球化学異常物質流入継続期間

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-GEOCHEM-STRENGTH チャンネルからの地球化学異常物質強度

(下限) (上限) (分布タイプ)

W-BUFFER 地球化学異常物質に対する廃棄体の緩衝能力

(下限) (上限) (分布タイプ)

B-BUFFER 地球化学異常物質に対する緩衝材の緩衝能力

(下限) (上限) (分布タイプ)

E-BUFFER 地球化学異常物質に対するゆるみ域の緩衝能力

(下限) (上限) (分布タイプ)

C-BUFFER 地球化学異常物質に対するチャンネルの緩衝能力

(下限) (上限) (分布タイプ)

M-BUFFER 地球化学異常物質に対するマトリクスの緩衝能力

(下限) (上限) (分布タイプ)

(11)出力

計算結果は

OUTPUT-FILE *type [units] position*

を指定することによって出力される。ここで、タイプとしてはフラックスあるいは濃度が、また、単位としては mol あるいは Bq が指定できる。

出力時間は、**OUTPUT-TIMES** のキーワードを用いて例えば次の様に指定される。

OUTPUT-TIMES *START-TIME 1e0*

OUTPUT-TIMES *FINAL-TIME 1e7*

OUTPUT-TIMES *NUMBER-OF-TIMES 1 LIN*

3.2 STEPPER

STEPPER はコンソールアプリケーションであり、MS-DOS プロンプトから例えば

Stepper Case1

というコマンドを与えることにより起動することができる。この際、アプリケーションと.spf ファイルとは動作中のダイレクトリ内にあることが必要である。

STEPPER のインプットは、一般に、以下の形式を採る。

KEYWORD *argument1 (argument2, argument3)*

ここで、入力は一行ずつ行われ、入力は正しい順序でなされなくてはならない。

(9) プログラムコントロール

全ての.spf ファイルの最初の 3 行は以下のフォーマットである。

NRUNS 統計的解析のケース数

SEED 乱数発生のためのシード

RUNTIME 各解析ケースの計算時間の上限

(10) 人工バリア

次に、以下の情報を入力する。

NO-OF-EBS-CHANNELS 人工バリア中のチャンネル数

現在の設定では、最大の人工バリアチャンネル数は 4 である。人工バリアシステムを省略してニアフィールド母岩中の解析のみを行う場合には、上記のパラメータを 0 と設定する。

(11) 人工バリアを省略した場合

人工バリアを省略した計算では、ニアフィールド内のチャンネルネットワークに与えるソースタームを指定する必要がある。これは、人工バリア周辺のゆるみ域中での移流フラックスと最大核種濃度（デフォルトは 1 mol/m^3 ）との積によって与えられる最大核種放出率に対してある係数（**EBS-FACTOR** と呼ばれる）を乗ずることによって行われる。

EBS-FACTOR の指定は、

EBS-FACTOR *constant*

あるいは

EBS-FACTOR *min* *max* *log/uni*

という形式で行われる。前者では、全ての統計的ケースにおいて同一の定数が使用され、後者では、指定された範囲の対数あるいは線形の均一分布から各ケース毎に数値がランダムにサンプリングされる。

(12) 人工バリアを考慮する場合

人工バリアを考慮した解析においては、以下の一連の情報を入力することが必要である。

NO-OF-EBS-CHANNEL-CELLS 個々のチャンネル内の差分セル数

NO-OF-MATRIX-CELLS チャンネル内の点に附随するマトリクス内のセル数

WASTEFORM-VOLUME ガラス固化体体積

WASTEFORM-SA ガラス固化体の表面積

EBS-INNER-RADIUS 人工バリアの内側半径

EBS-OUTER-RADIUS 人工バリアの外側半径

EBS-SWITCH-TIMES 各チャンネルにおいて移流が開始する時期
EBS-POROSITY 人工バリア空隙率
EBS-DIFFUSION 人工バリア内拡散係数
EBS-CONDUCTIVITY 人工バリア内透水係数
EBS-BUFFER-CAPACITY 地球化学異常物質に対する人工バリアの緩衝能力
EBS-DENSITY 人工バリアの密度
CONTAINMENT-TIME 容器による閉じこめ時間
LEACH-TIME ガラス浸出期間

なお、ここで、**EBS-CONDUCTIVITY** は移流開始時期以降にのみ有効となるパラメータである。

(13) 核種特性

現在のバージョンの STEPPER は単一あるいは親、娘の 2 核種を取り扱うことが可能であり、核種数の指定は以下のキーワードによって指定される。

NO-OF-NUCLIDES 核種数

また、各核種の特性は以下のキーワード群によって指定される。

| NUCLIDE | 核種名 | 半減期 | インベントリ |
|-----------------|---------------|-----|--------|
| C-ALPHA1 | 平均拡散係数の第一節点濃度 | | |
| C-ALPHA2 | 平均拡散係数の第二節点濃度 | | |
| C-BETA1 | 平均移流速度の第一節点濃度 | | |
| C-BETA2 | 平均移流速度の第二節点濃度 | | |
| C-BETA3 | 平均移流速度の第三節点濃度 | | |
| A0 | 平均拡散係数の第一勾配 | | |
| A1 | 平均拡散係数の第二勾配 | | |
| B0 | 平均移流速度の第一勾配 | | |
| B1 | 平均移流速度の第二勾配 | | |
| B2 | 平均移流速度の第三勾配 | | |

R-ALPHA 平均拡散係数における遅延係数
R-BETA 平均移流速度における遅延係数
K 地球化学異常におけるシフト
m コロイドに対する移流速度増倍率
mu_I_II 瞬時平衡グループ I から II への反応速度定数
mu_II_I 瞬時平衡グループ II から I への反応速度定数

以上のパラメータのうち、各節点濃度と遅延係数との間には相関関係が定義されており、例えば、

```

C-ALPHA1  1e-11  0.1  log
:
:
R-ALPHA   1    1e5  log
  
```

と指定した場合、平均拡散係数の第一節点濃度は、 $1e-11 \sim 0.1R\alpha$ の範囲からサンプリングされることとなる。

(14) ニアフィールド母岩中チャンネルネットワーク (チャンネル内)

ニアフィールド内のチャンネルネットワークを指定するためには、以下のキーワード群を指定することが必要である。

NO-OF-CHANNELS ネットワーク中のチャンネル数 (1~3)
CHANNEL-CELLS チャンネル毎の差分セル数
CHANNEL-LENGTH チャンネルネットワークの全長
TRANSMISS-MIN 透水量係数の最小値
TRANSMISS-MAX 透水量係数の最大値
FRACTURE-WIDTH 亀裂全幅
FLOW-WET 単位流体体積当たり亀裂表面積
DISPERSION 分散係数
CHANNEL-DIFFUSION チャンネル内分子拡散係数

CHANNEL-BUFFER 地球化学異常物質に対するチャンネル内緩衝能力
CHANNEL-DENSITY チャンネル内充填物の密度

STEPPER は自動的にグリッドペクレ数の確認を行い、これが過大である場合には警告を発する。

以上に加えて、亀裂の開口幅を指定するために以下のキーワードを用いる。

A 開口幅

APERTURE-STEPS 開口幅の時間変化を記述するための期間数
START-INC 開口幅増加開始時期
DURATION-INC 開口幅最大値到達までに要する時間
DURATION-MAX 最大開口幅継続時間
DURATION-DEC 開口幅最小値到達までに要する時間

(15) ニアフィールド母岩中チャンネルネットワーク (マトリクス内)

チャンネルと同様、マトリクス特性についての設定は以下のキーワード群を用いて行う。

MATRIX-CELLS マトリクス内の差分セル数
MATRIX-DEPTH マトリクス拡散深さ
MATRIX-POROSITY マトリクス空隙率
MATRIX-DIFFUSION マトリクス拡散係数
MATRIX-BUFFER 地球化学異常物質に対するマトリクスの緩衝能力
MATRIX-DENSITY マトリクスの密度

(16) 動水勾配

動水勾配の指定は以下のキーワードによる。

HYD-START 動水勾配増大開始時期

HYD-DURATION 最大動水勾配継続期間

HYD-PMIN 差圧最小値

HYD-PMAX 差圧最大値

ただし、現在のバージョンの STEPPER では、デフォルトで差圧最大値と最大動水勾配継続期間との相関（昨年度報告書参照）が定義されており、**HYD-MAX** の指定値は使用されない。

(17) 地球化学異常

地球化学異常の条件は以下の三つのキーワードにより指定される。

GEOCHEM-START 地球化学異常物質流入開始時期

GEOCHEM-DURATION 地球化学異常物質流入継続期間

GEOCHEM-STRENGTH 地球化学異常物質強度

(10)出力

ニアフィールド内チャンネルネットワークについての計算結果は

OUTPUT-FILE *type* [*units*] *position*

を指定することによって出力される。ここで、タイプとしてはフラックスあるいは濃度が、また、単位としては mol あるいは Bq が指定できる。

なお、現在のバージョンの STEPPER では、ニアフィールド内の最下流側のチャンネルにおいてのみ出力が可能である。

出力時間は、**OUTPUT-TIMES** のキーワードを用いて例えば次の様に指定される。

OUTPUT-TIMES *START-TIME* *1e0*

OUTPUT-TIMES *FINAL-TIME* *1e7*

OUTPUT-TIMES *NUMBER-OF-TIMES* 1 *LIN*

3.3 Shadow TIGER

Shadow TIGER の計算条件は総て STRIDER あるいは STEPPER を通じて設定されるため、ユーザーは Shadow TIGER との直接のインターフェイスをとる必要がない。Shadow TIGER の計算コントロールパラメータも、

CONTROL *control* *arguments*

という形式で STRIDER あるいは STEPPER 内で指定される。例えば、

CONTROL *scale* *all* *1e-7*

CONTROL *CPU-LIMIT* *300*

によって、DYLAN の error tolerance が $1e-7$ に設定され、各計算ケースにおける計算時間が CPU タイムで 300 秒以内に制限されることとなる。

4. テストケース

4.1 解析条件

(1) 決定論的ケース

STRIDER と Shadow TIGER の組み合わせに対して、ソフトウェアの検証を目的とした解析を実施した。解析にあたっては、STRIDER の入力パラメータについての統計的サンプリング範囲をほとんど 0 とすることによって、決定論的にケース指定を行った。

解析ケースは以下の通りである。

- リファレンスケース（第二次報告書 4 月 21 日版）
- 水理学的変動ケース
- 地球化学的変動ケース（リファレンスケースと同等の吸着性、及び低吸着性の場合）
- 複合ケース

なお、各ケースの解析条件の詳細は表 4.1.1 にまとめる通りである。

(2) 統計的ケース

STRIDER において統計的サンプリングを行うことにより、約 100 ケースのアンサンブル計算を行った。計算に用いた STRIDER の入力ファイルは、付録 1 に示すものである。

表4.1-1 解析条件の設定

| | | | |
|------------|----------------|---|---|
| 人工バリア | 廃棄体半径 | 0.41 | m |
| | 緩衝材半径 | 1.1 放出面積は、円筒面積 (14.9m ²) | m |
| | ゆるみ域半径 | 1.61 放出面積は投影面積 (2.14m ²) | m |
| | 廃棄体条件 | | |
| | オーバーバック開口までの時間 | 0年 (1000年後のインベントリーを使用) | |
| | ガラス固化体溶解時間 | 66000 | 年 |
| | 廃棄体部空隙率 | 0.4 | - |
| 緩衝材空隙率 | 0.4 | - | |
| 緩衝材中空隙拡散係数 | 0.01 | m ² /y | |

| | | | |
|-------|--------------|------------------------------------|-------------------|
| 天然バリア | チャンネル長 | 100 | m |
| | 母岩空隙率 | 0.02 | - |
| | 動水勾配 | 0.01 | - |
| | 透水量係数 | 0.7 | m ³ /y |
| | チャンネル内拡散寄与面積 | 0.5m ² /1m ² | - |
| | マトリクス拡散深さ | 0.1 | m |
| | マトリクス中空隙拡散係数 | 0.005 | m ² /y |

| 核種毎設定 | | N p | T h | |
|---------|--|----------|----------|--------------------|
| 半減期 | | 2.14E+06 | 7340 | 年 |
| インベントリー | | 3.72 | 9.00E-05 | mol/CAN |
| 核種溶解度 | | 2.00E-08 | 5.00E-06 | mol/m ³ |
| 緩衝材分配係数 | | 1 | 1 | m ³ /kg |
| 母岩分配係数 | | 1 | 1 | m ³ /kg |

| 変動条件設定 | | 流動異常 | 化学異常 | 流動+化学異常 |
|--------|--|--|--|------------------------------|
| 開始期間 | | 100万年 | 100万年 | 100万年 |
| 継続期間 | | 1千万年 | 100万年 | 1千万年 ただし、化学異常の継続期間は100万年間 |
| 変動量 | | 人工バリアの一部が損傷し、移流支配となる。 (緩衝材外側40cmが移流条件となる) 母岩、ゆるみ域の地下水流量が2桁増加 | 廃棄体部分及びチャンネル入り口に酸性物質の流入を仮定する。 人工バリアおよび母岩中の鉱物等による緩衝性を仮定する。 | 左記条件の複合 |

4.2 解析結果

(1) 決定論的ケース

決定論的ケースについての解析結果を図 4.2.1～-20 に示す。

リファレンスケースについてのゆるみ域及びチャンネル出口からの核種フラックスは、第二次報告書における解析結果とほぼ同一である。また、廃棄体部分から緩衝材への核種流入フラックスは約 1 万年程度かかって定常に達し、ガラス浸出の終了する 66,000 年後以降徐々に減少している。この部分のフラックスの立ち上がり挙動は、廃棄体部分の体積に依存しているが、本解析では、これをオーバーパック外半径から算出している。なお、廃棄体部分の空隙率は緩衝材と同じ数値を用いている。

リファレンスケースの緩衝材及びチャンネル中濃度分布の時間的変化には振動等は見られず、数値解が安定しているものと見なせる。また、緩衝材中の初期の濃度分布が若干滑らかさを欠いているのは、計算精度の設定と離散化メッシュ数によるものと考えられる。また、母岩マトリクス中の核種量にも問題点は見られない。

水理学的変動ケースでは、100 万年時点で緩衝材の外側領域に亀裂が発生して移流支配となると共に、平均動水勾配が上昇してゆるみ域及びチャンネル中の地下水流量が 100 倍になることを想定している。ここでは、緩衝材内側が健全であるために、廃棄体から緩衝材への核種流入フラックスには顕著な影響は見られない。これに対して、ゆるみ域及びチャンネル出口部分でのフラックスは、水理学的な変動が生じるとともに急激に立ち上がり、その後徐々に減少していくという適切な挙動を示している。また、緩衝材及びチャンネル中の濃度分布時間的変化並びに母岩マトリクス中核種量にも問題点は見られない。

地球化学的変動ケースでは、100 万年時点で異常物質が廃棄体部分から移行し始め、徐々に地球化学条件を変更していく。これに対応して、廃棄体及びゆるみ域での核種フラックスは増加することとなる。しかしながら、異常時のシフトを 5 桁としているにもかかわらず、その影響は比較的小さい。これは、リ

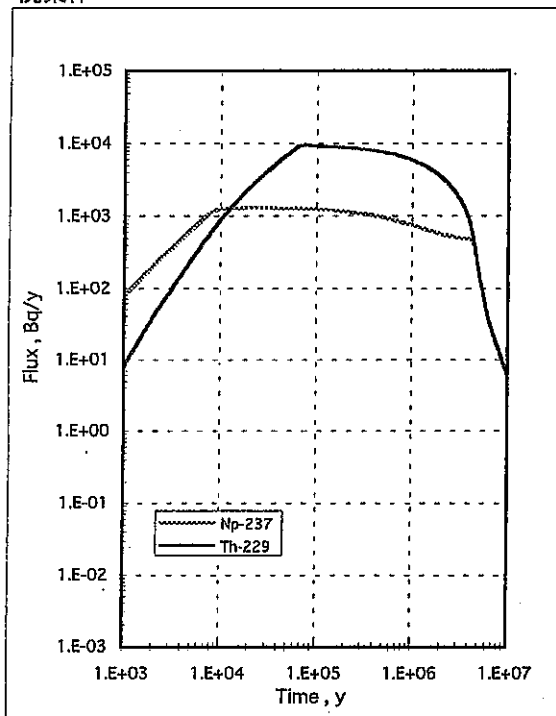
ファレンスケースで想定されている N_p の分配係数がかなり大きいため、仮に溶解度が非常に大きくなり、 N_p の全量が人工バリア中で吸着平衡になったとしても液相部の濃度が顕著には上昇しないためと考えられる。そこで、分配係数をリファレンスケースよりも 1 桁低下させた条件で同様の計算を実施した。この場合の、廃棄体及びゆるみ域での核種フラックスの増加は、前のケースに比べてより顕在化している。しかしながら、この場合でも、チャンネル出口におけるフラックスには有意な変化は見られない。

複合ケースでは、上述した影響の重合が見られる。また、ゆるみ域からの核種フラックスのスパイク後のテールの形が、水理学的変動のみを考慮した場合とは異なっている。なお、ここでは、分配係数はリファレンスケースの設定が用いられている。

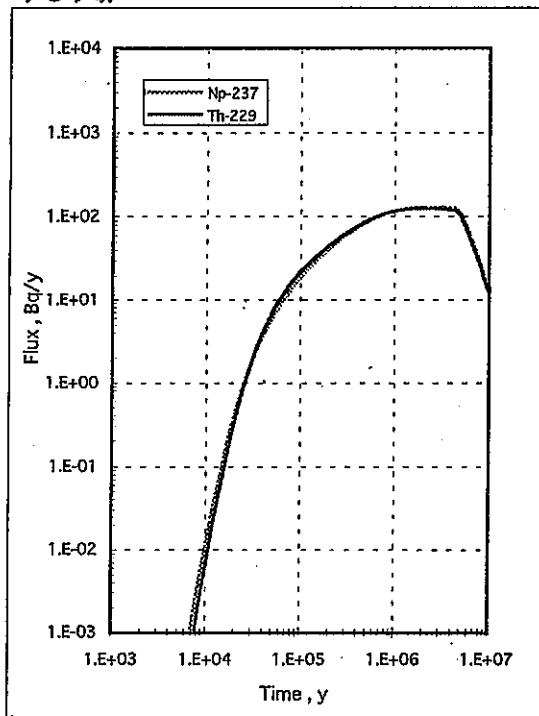
(2) 統計的解析ケース

スキッタプロット上のゆるみ域及びチャンネル出口部の核種フラックスの分布は、過去の人工バリア及び母岩中の統計的解析結果と比べて整合的な範囲に位置していると考えられる。また、計算効率としては 1 ケース当たり平均 7 分程度 (Pentium II プロセッサ 400MHz 使用) であり、統計的解析のための多数の解析を考慮しても十分なものと考えられる。

廃棄体



ゆるみ域



チャンネル出口

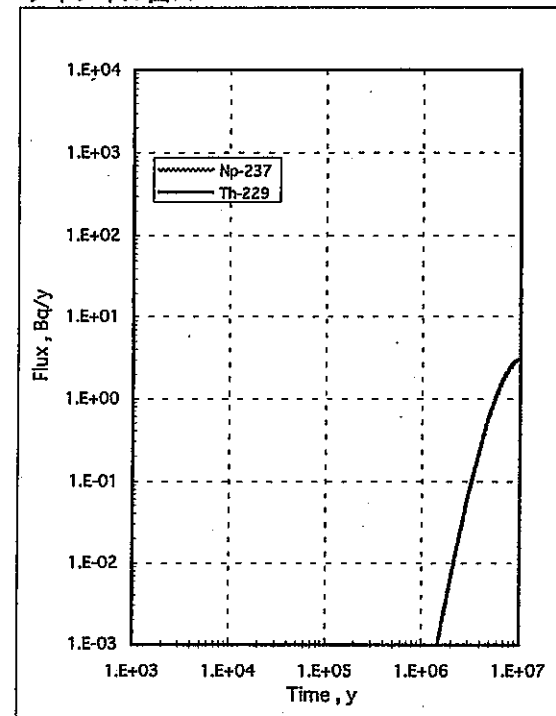
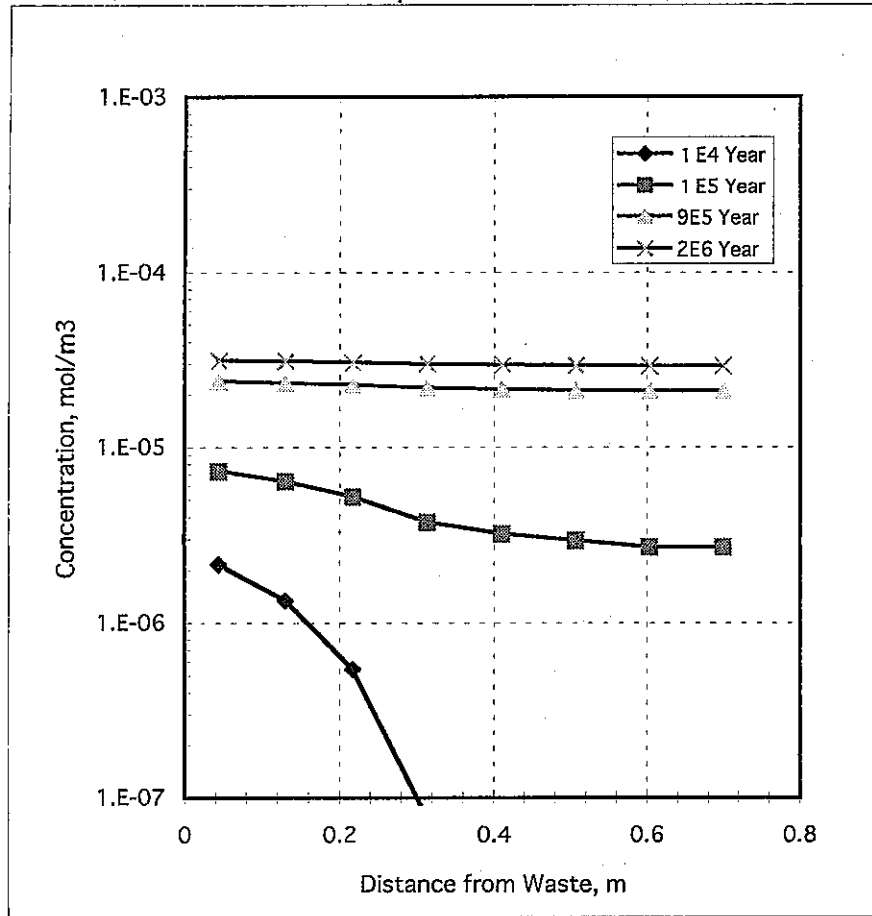


図4.2-1 フラックスの経時変化(リファレンスケース)

緩衝材中核種濃度 : Np-237



Th-229

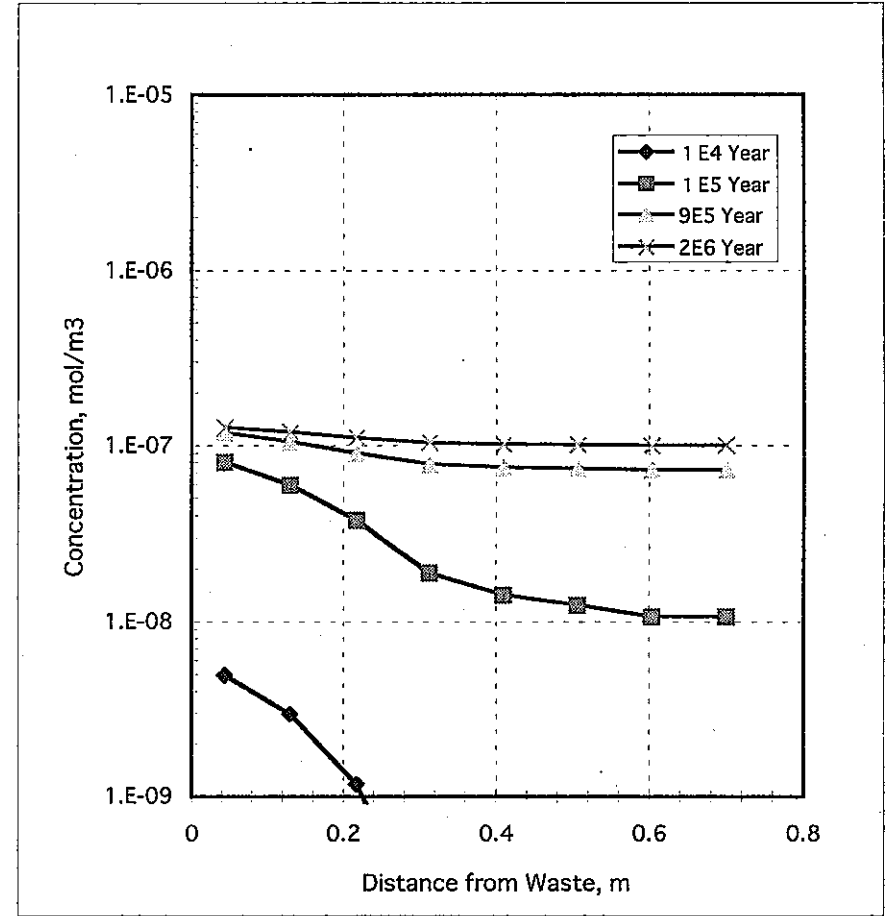
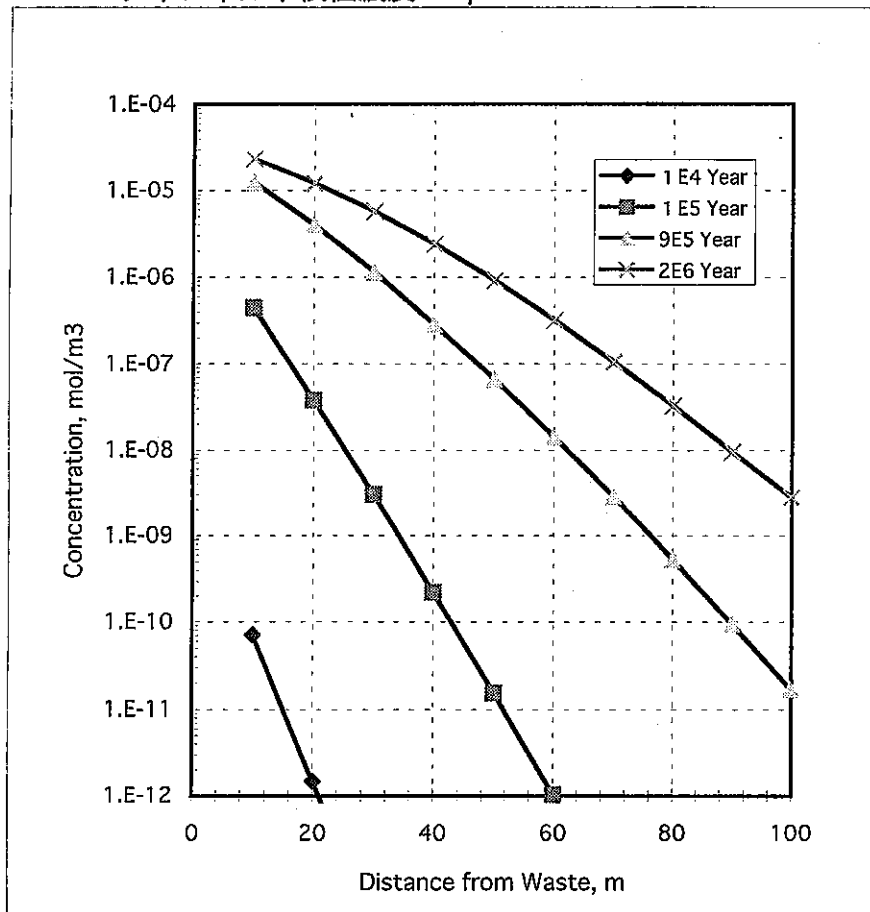


図4.2-2 緩衝材中核種濃度(リファレンスケース)

チャンネル中核種濃度：Np-237



Th-229

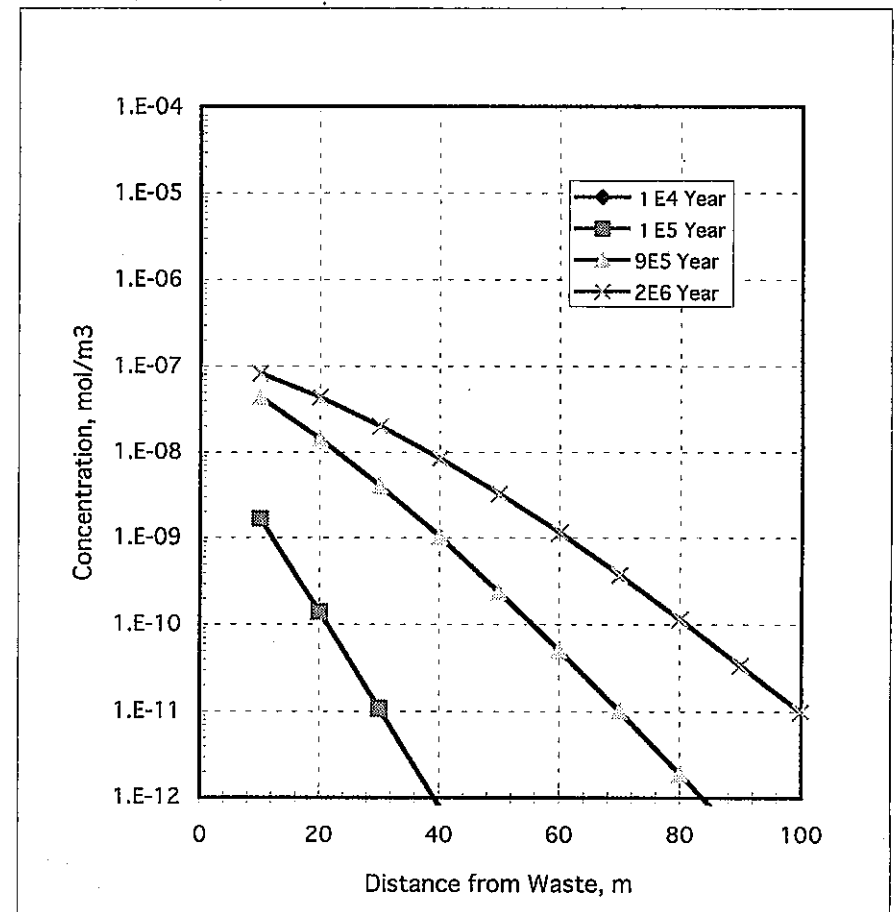


図4.2-3 チャンネル内部核種濃度(リファレンスケース)

母岩マトリクス中核種量

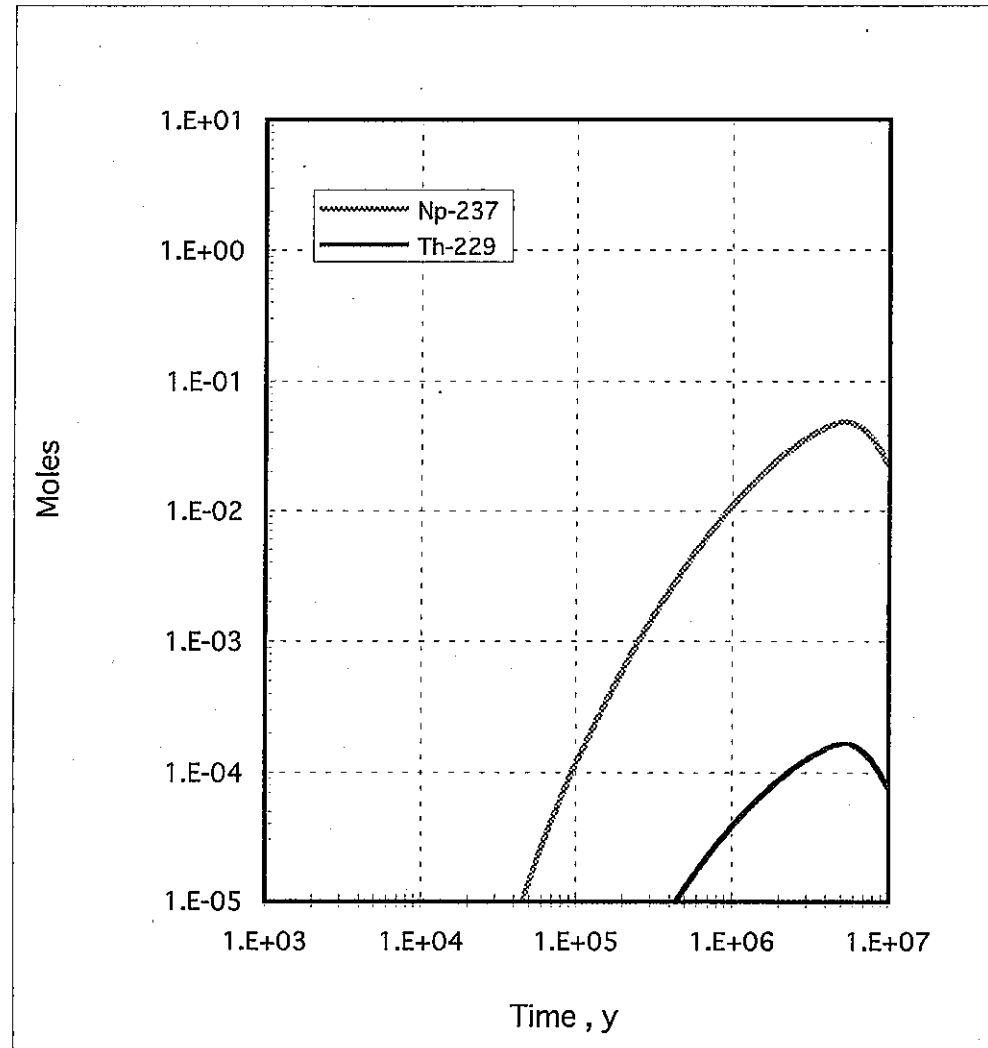
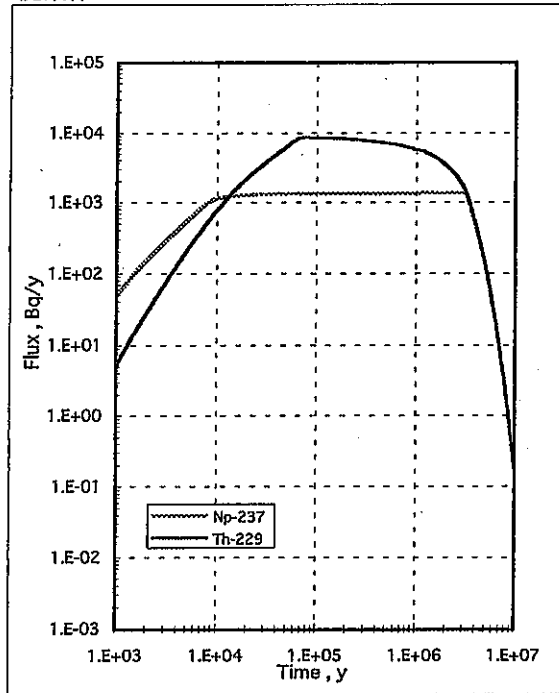
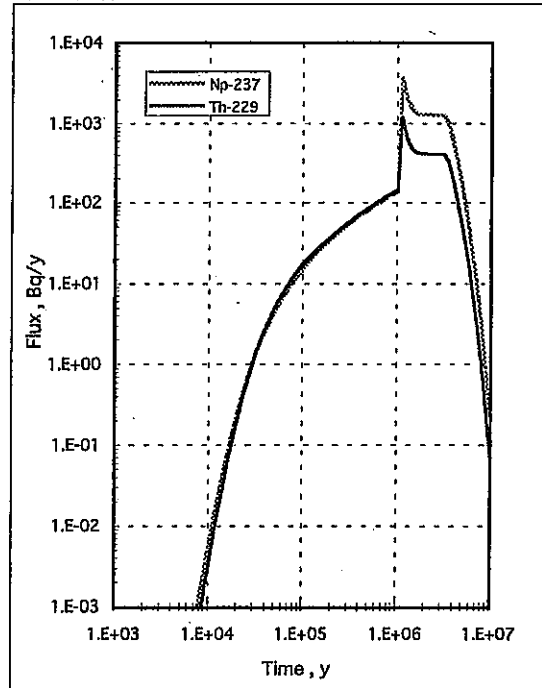


図4.2-4 母岩マトリクス中核種量(リファレンスケース)

廃棄体



ゆるみ域



チャンネル出口

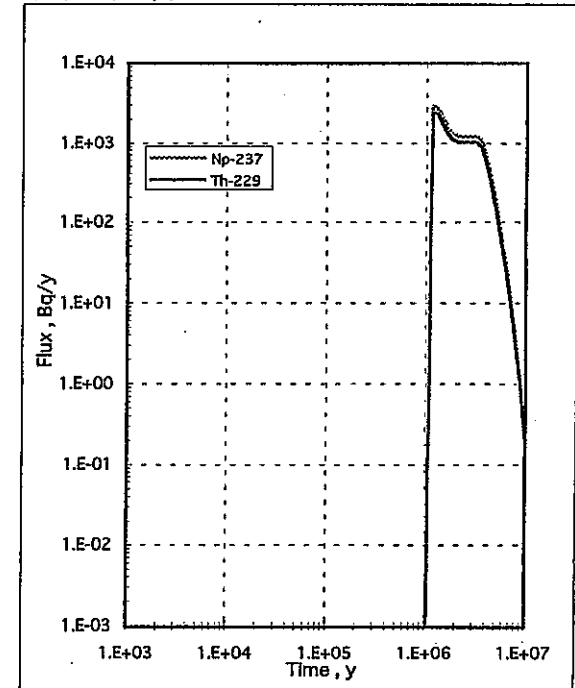
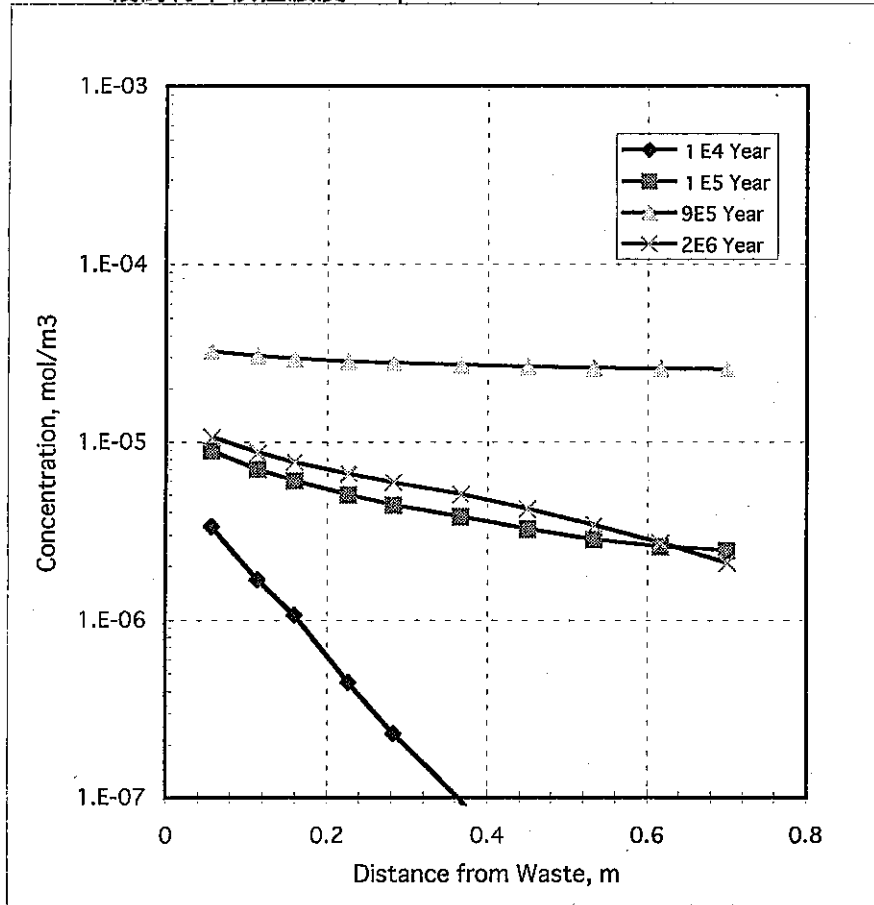


図4.2-5フラックスの経時変化(水理学的変動ケース)

緩衝材中核種濃度：Np-237



Th-229

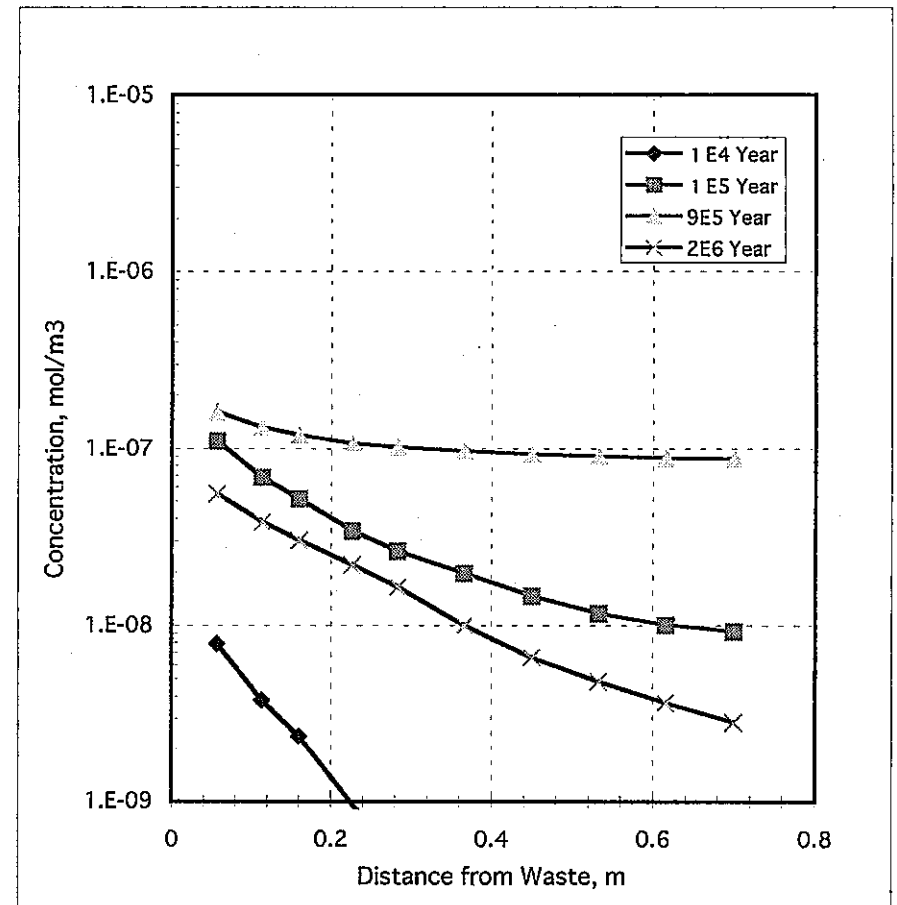
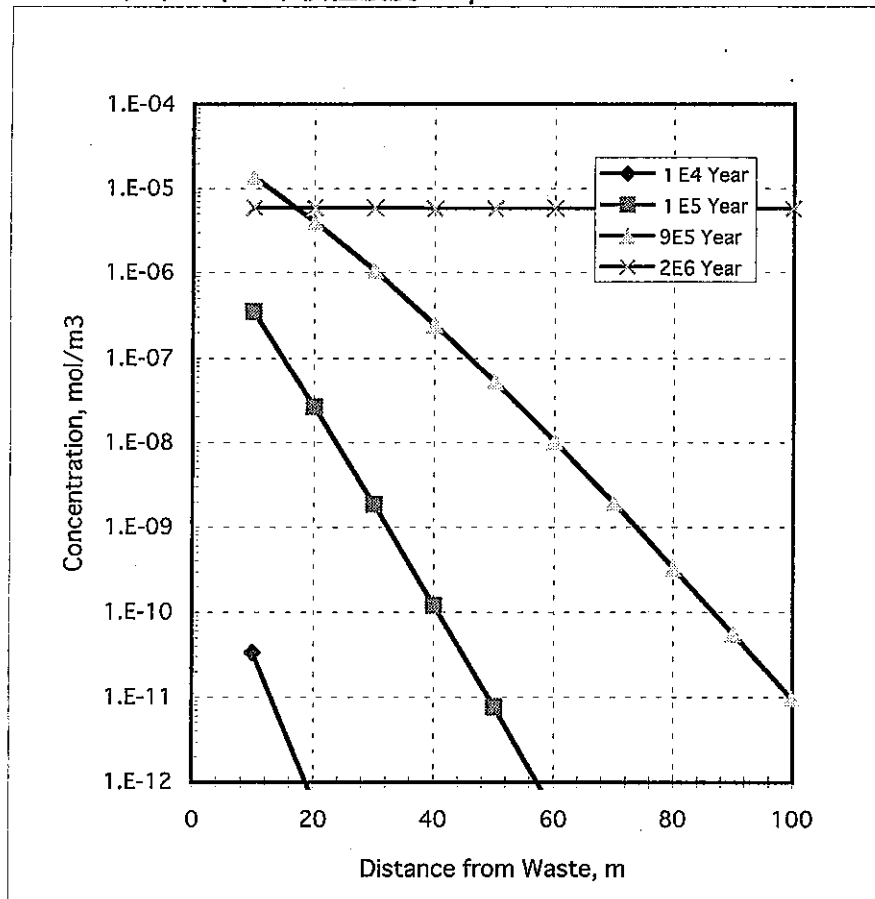


図4.2-6 緩衝材中核種濃度(水理学的変動ケース)

チャンネル中核種濃度：Np-237



Th-229

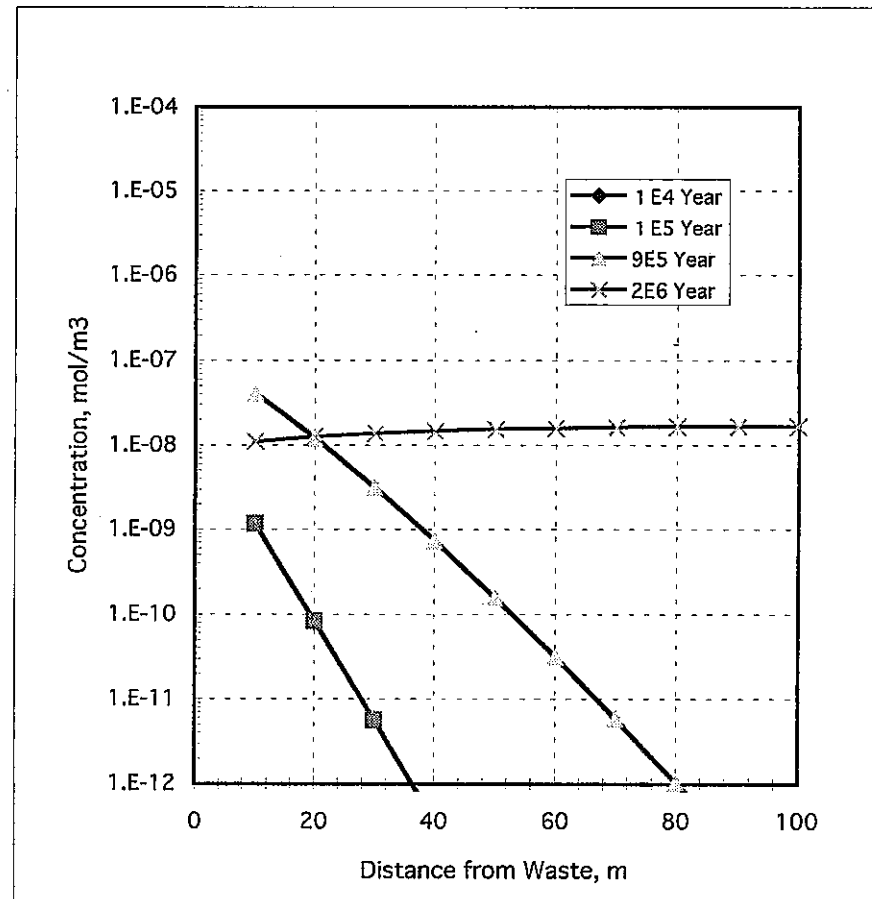


図4.2-7 チャンネル内部核種濃度(水理学的変動ケース)

母岩マトリクス中核種量

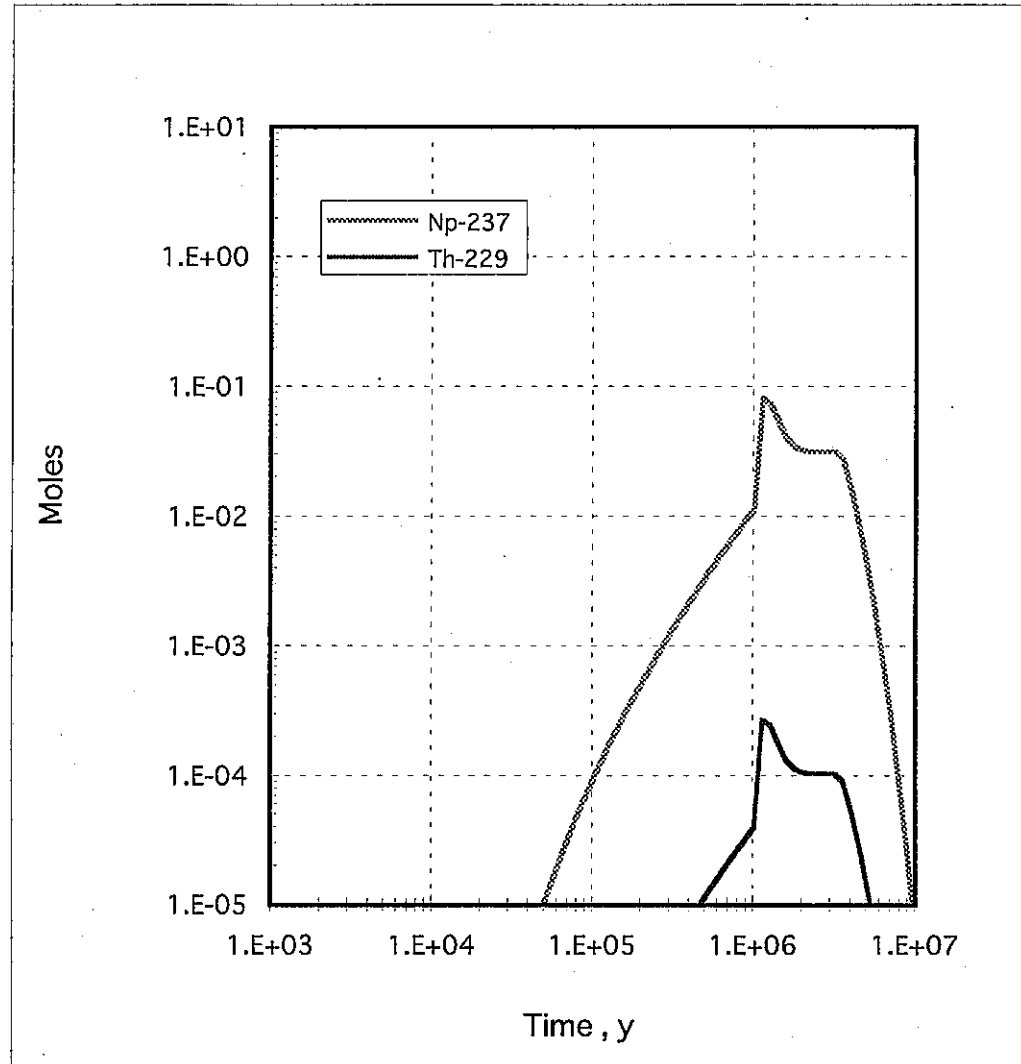
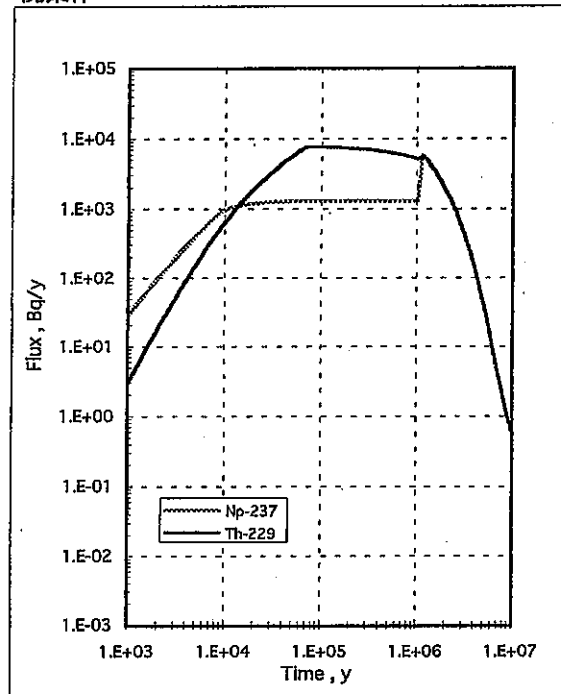
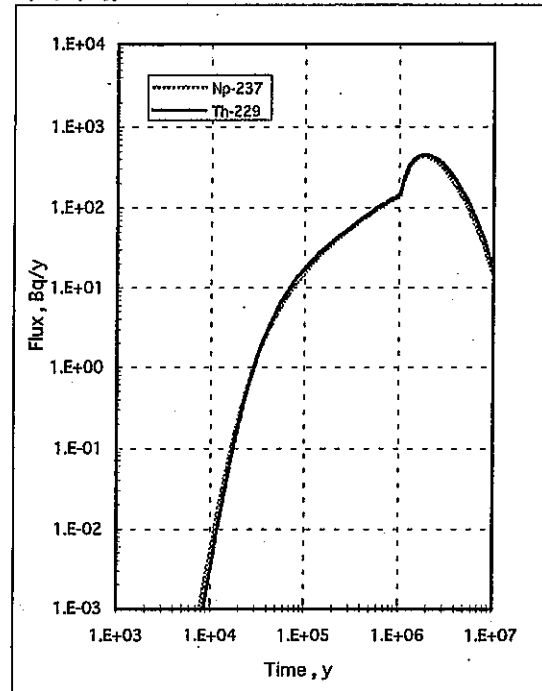


図4.2-8 母岩マトリクス中核種量(水理学的変動ケース)

廃棄体



ゆるみ域



チャンネル出口

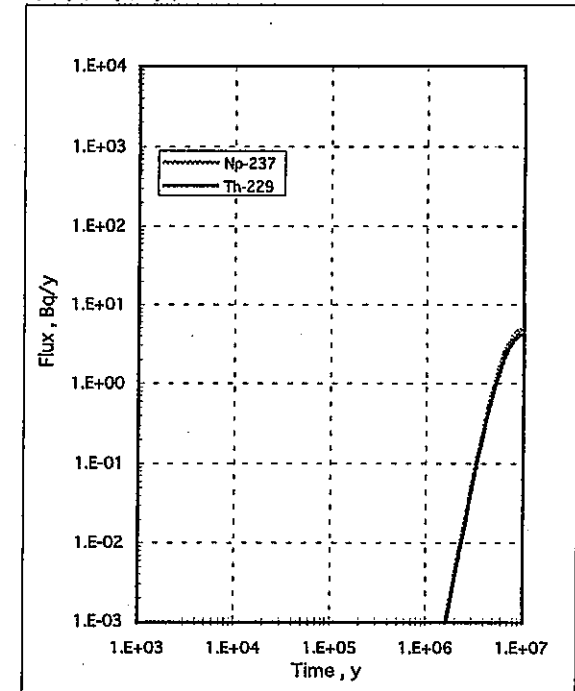
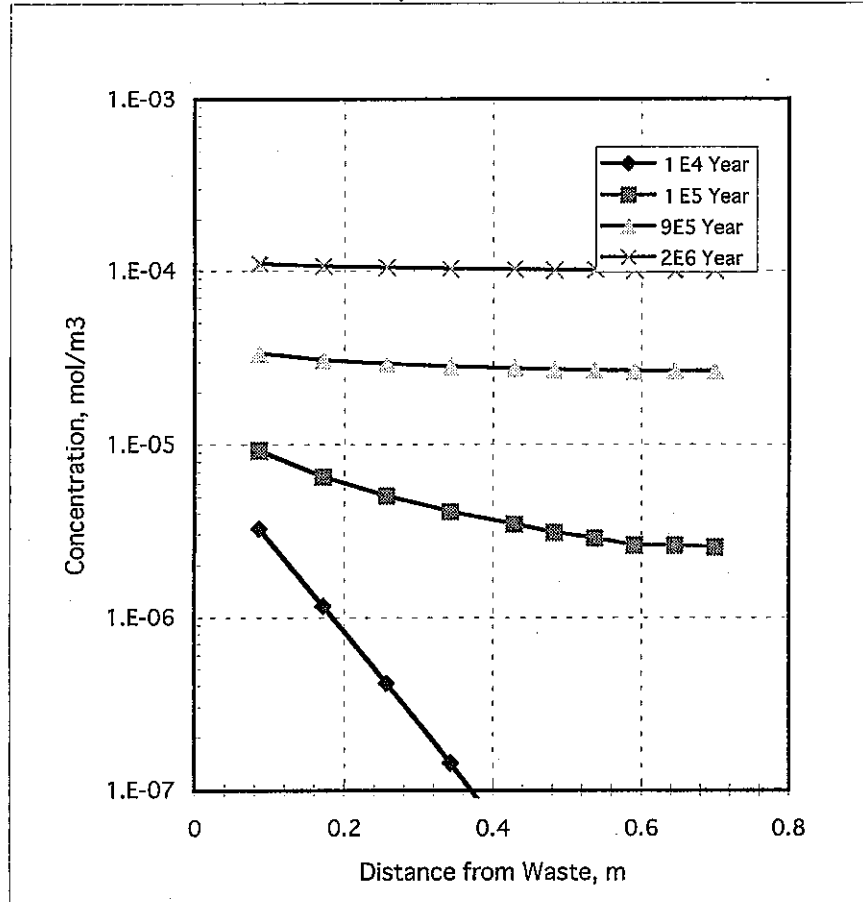


図4.2-9 フラックスの経時変化(地球化学的変動ケース)

緩衝材中核種濃度：Np-237



Th-229

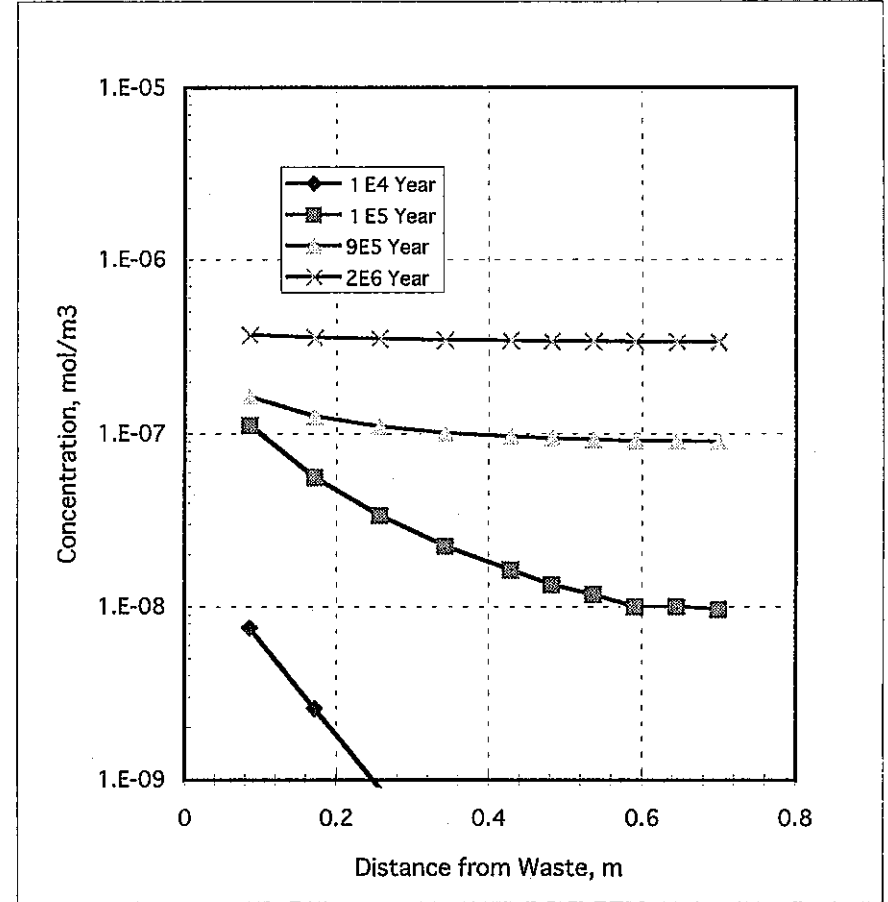
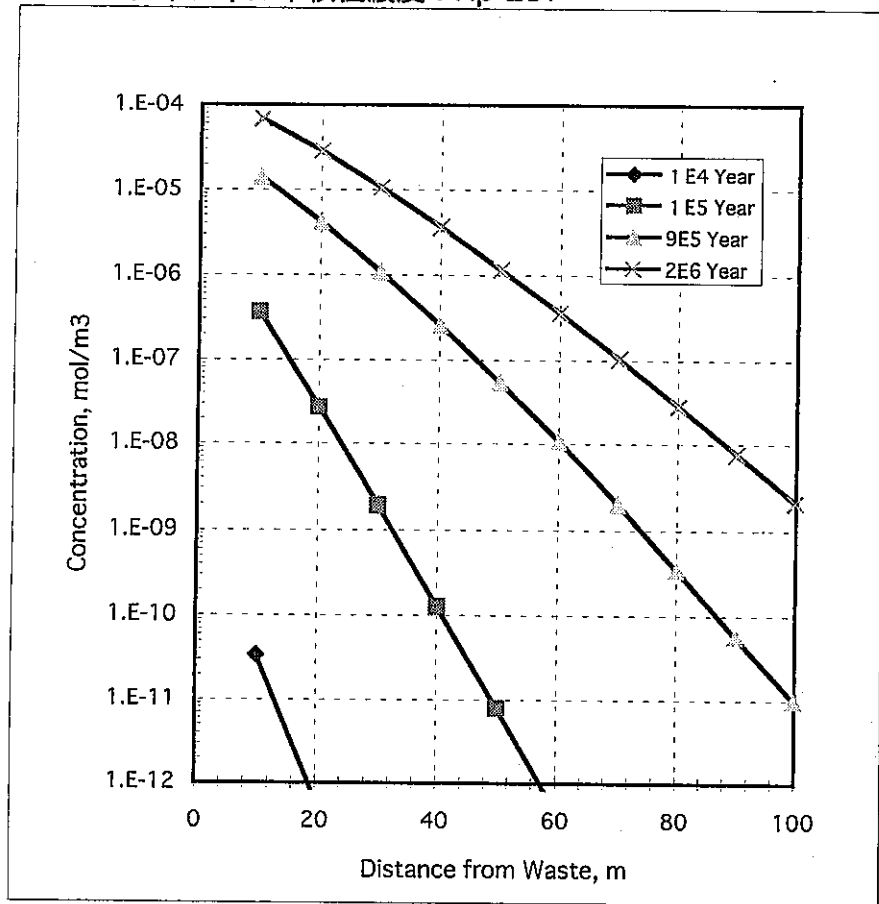


図4.2-10 緩衝材中核種濃度(地球化学的変動ケース)

チャンネル中核種濃度：Np-237



Th-229

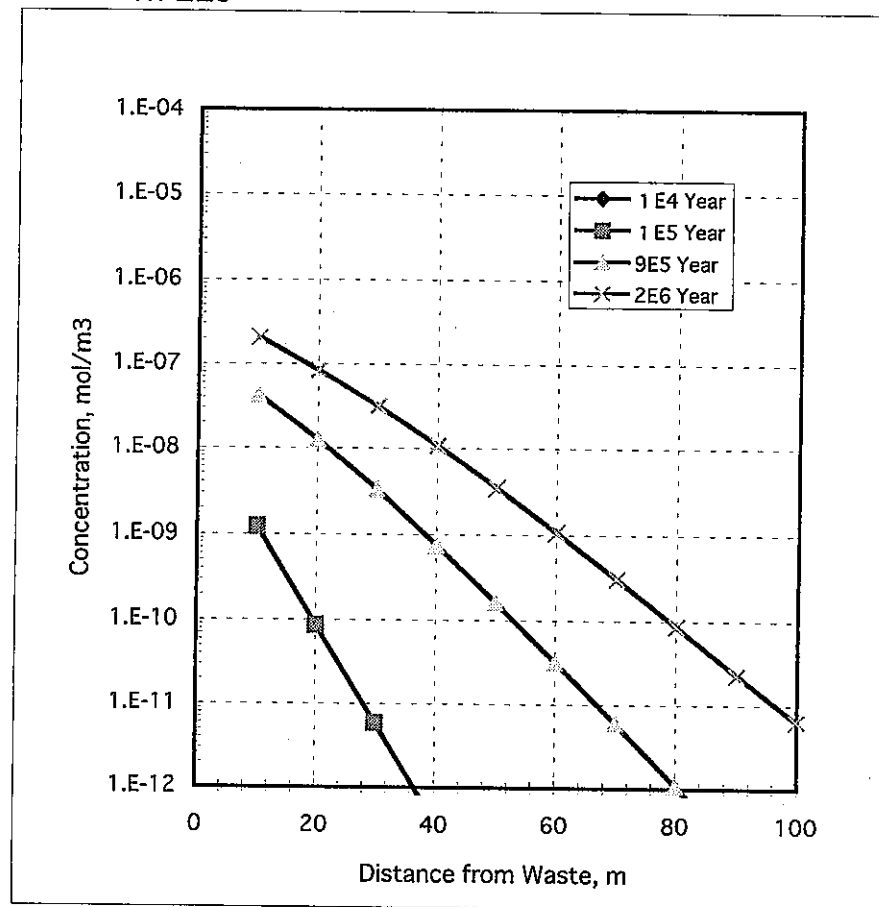


図4.2-11 チャンネル内部核種濃度(地球化学的変動ケース)

母岩マトリクス中核種量

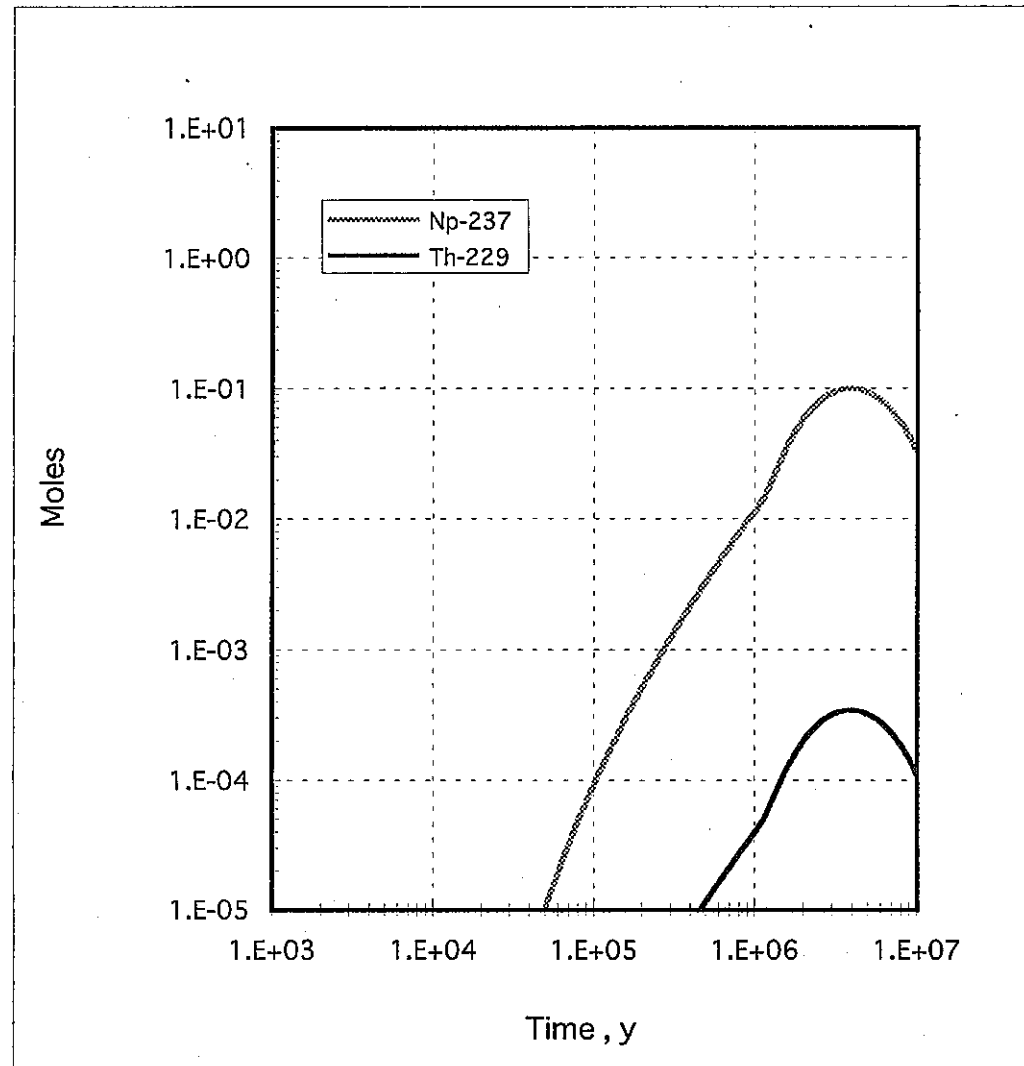
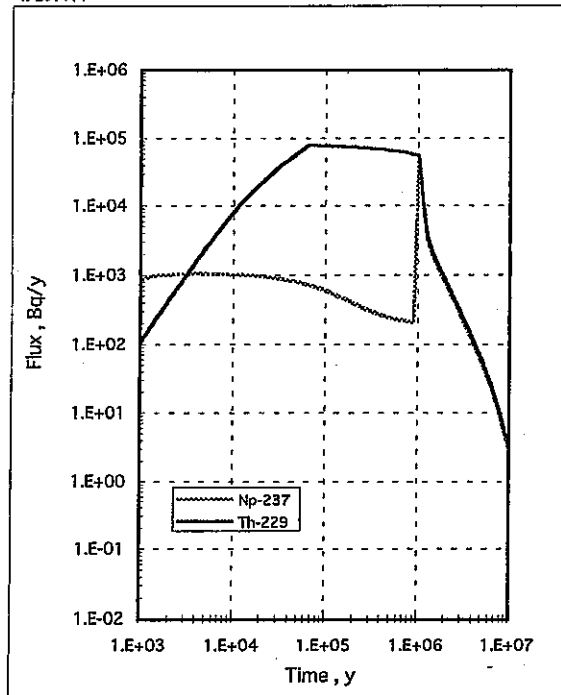
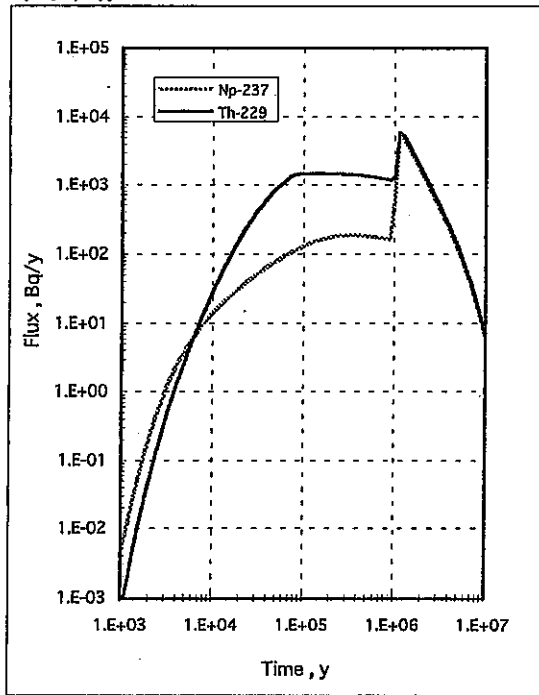


図4.2-12 母岩マトリクス中核種量(地球化学的変動ケース)

廃棄体



ゆるみ域



チャンネル出口

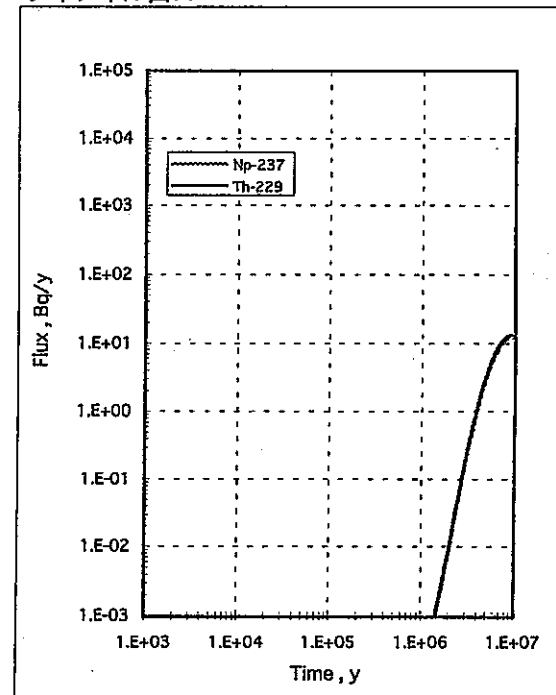
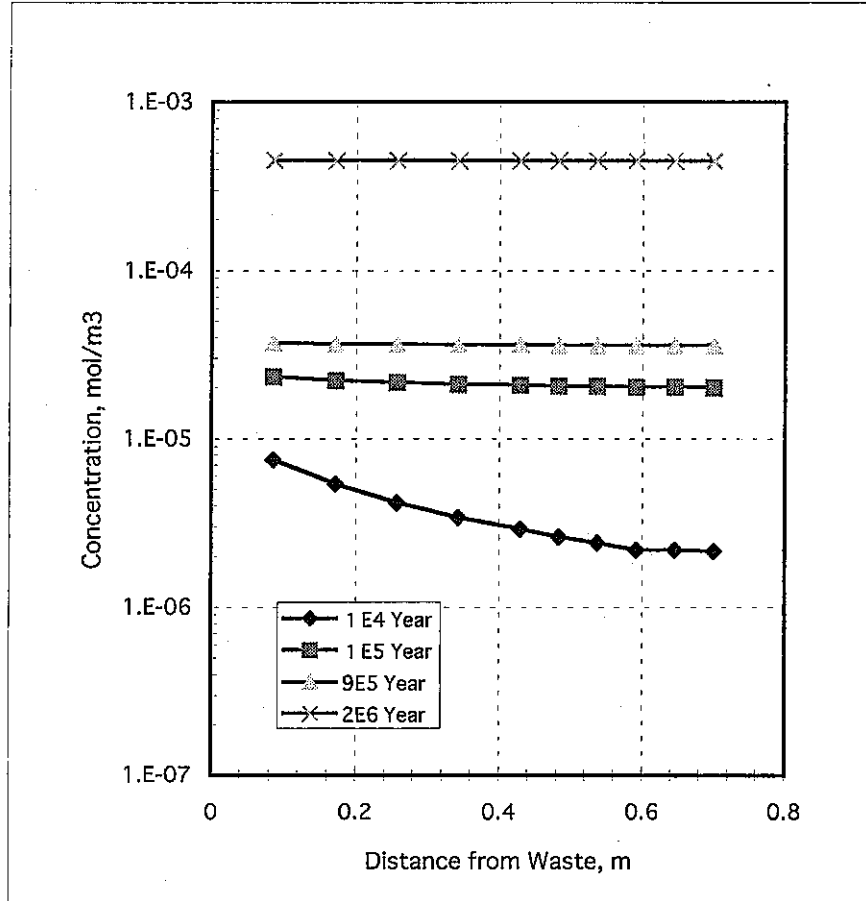


図4.2-13 フラックスの経時変化 (地球化学的変動・低吸着性ケース)

緩衝材中核種濃度：Np-237



Th-229

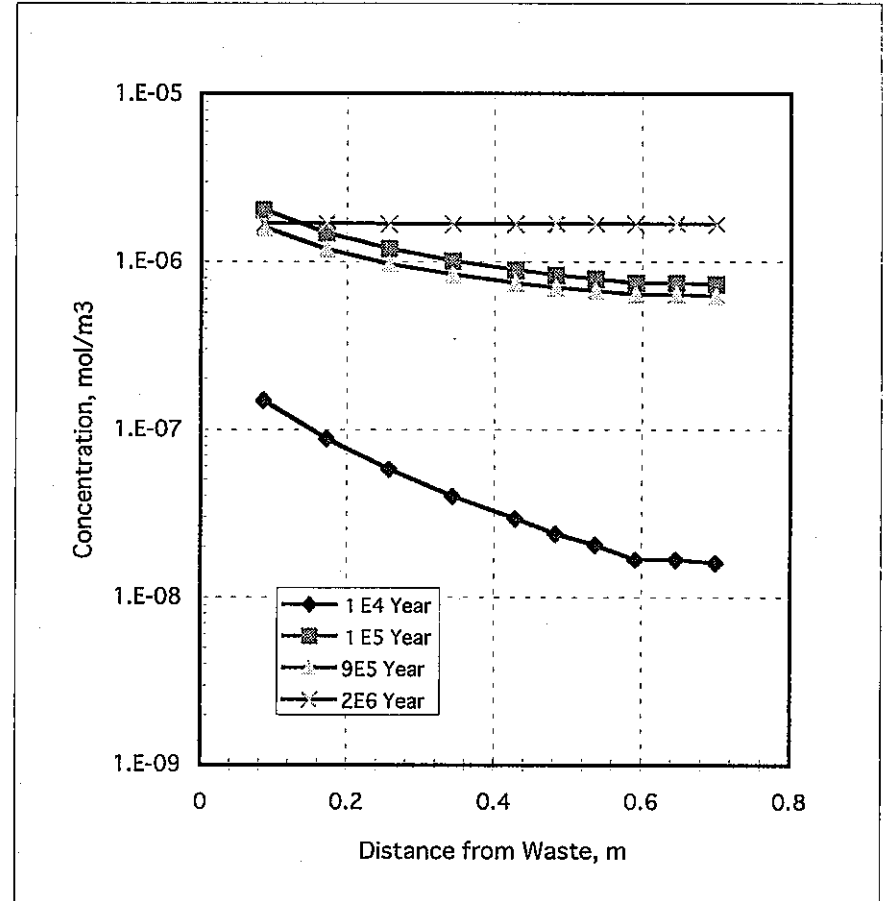
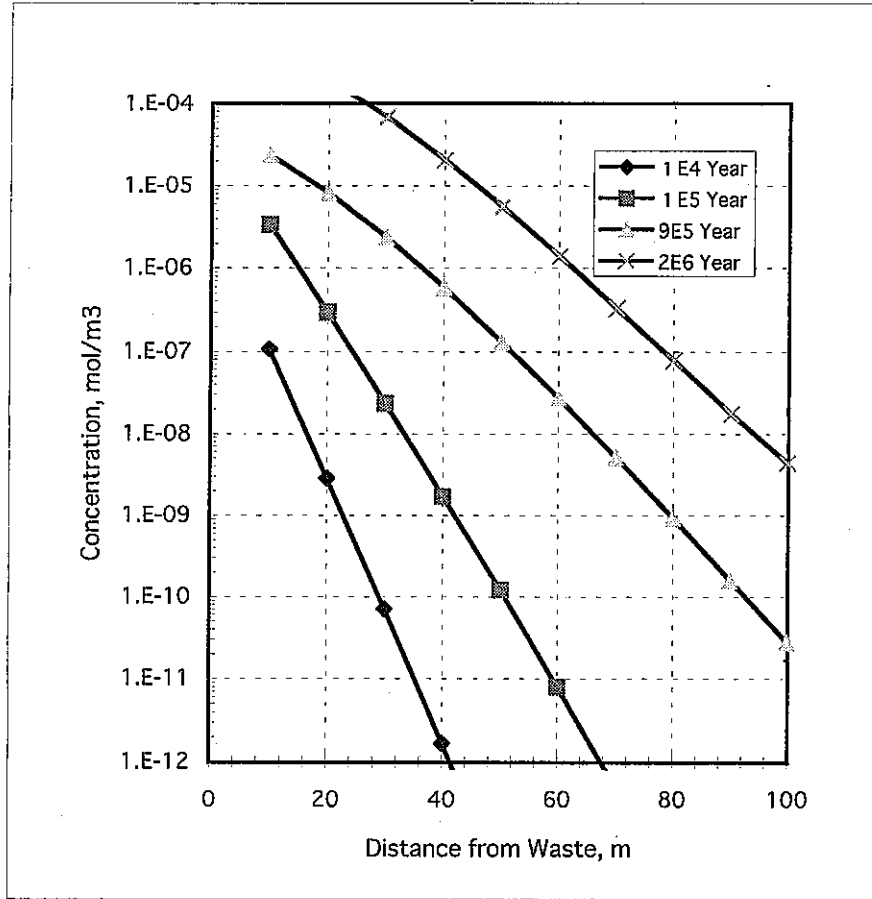


図4.2-14 緩衝材中核種濃度 (地球化学的変動・低吸着性ケース)

チャンネル中核種濃度 : Np-237



Th-229

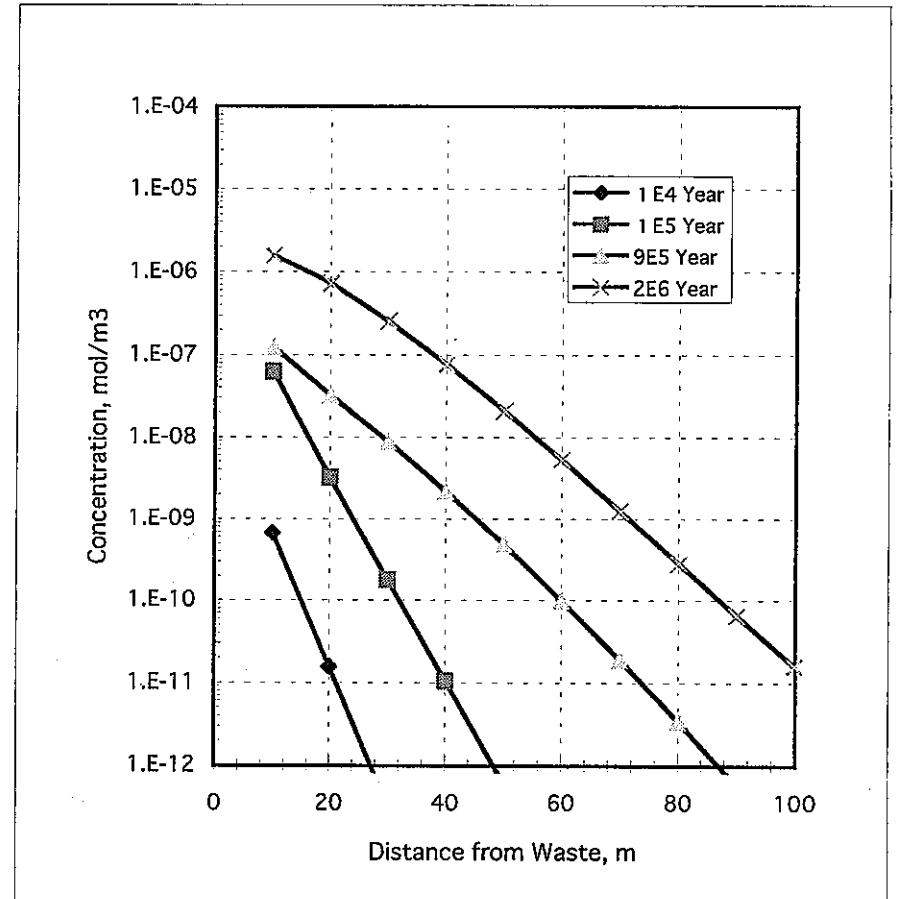


図4.2-15 チャンネル内部核種濃度 (地球化学的変動・低吸着性ケース)

母岩マトリクス中核種量

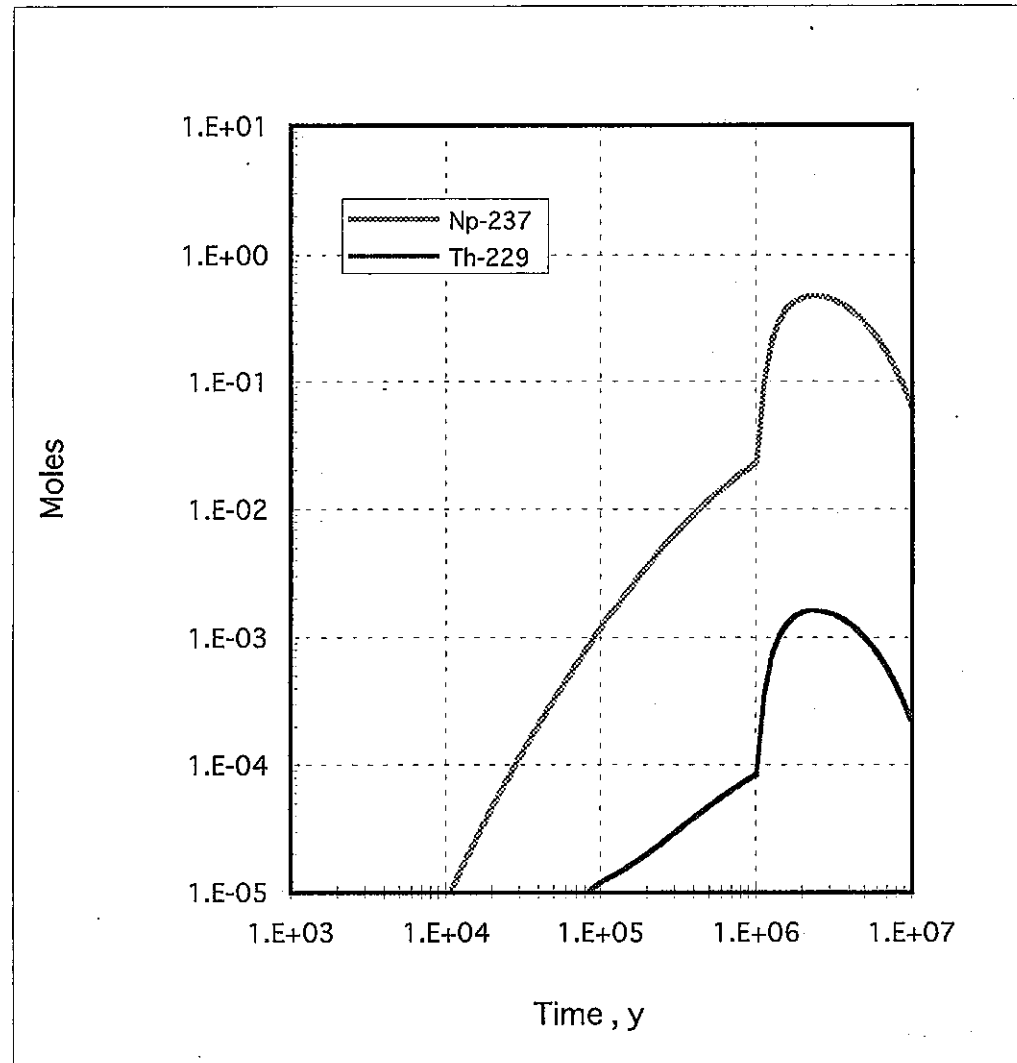
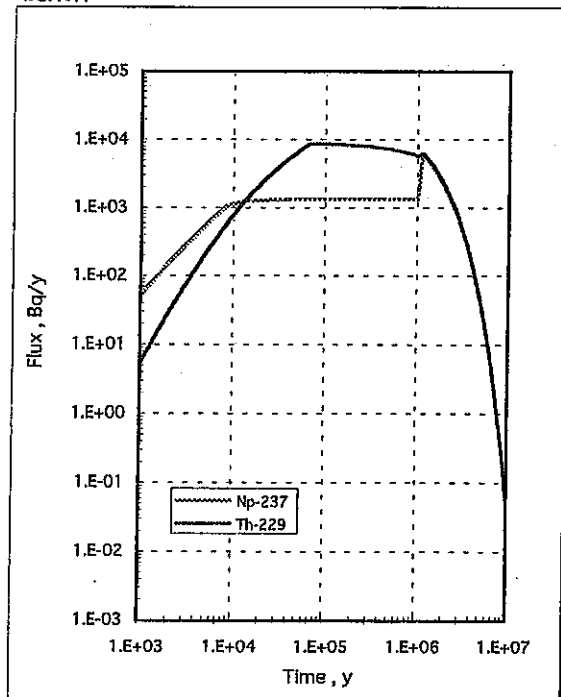
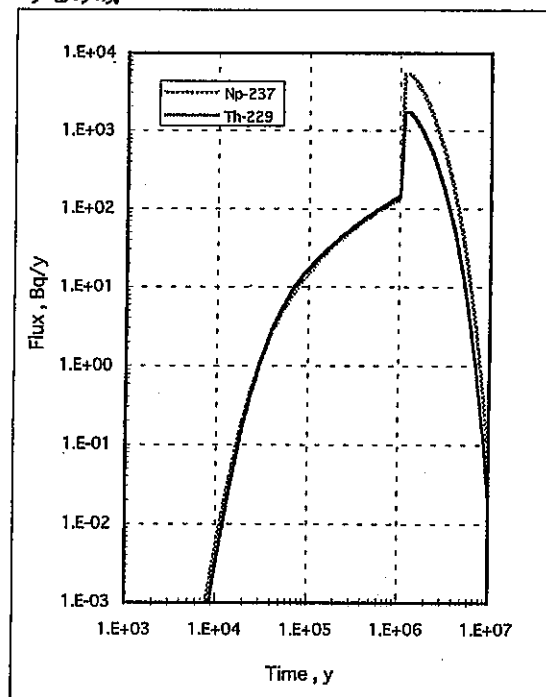


図4.2-16 母岩マトリクス中核種量 (地球化学的変動・低吸着性ケース)

廃棄体



ゆるみ域



チャンネル出口

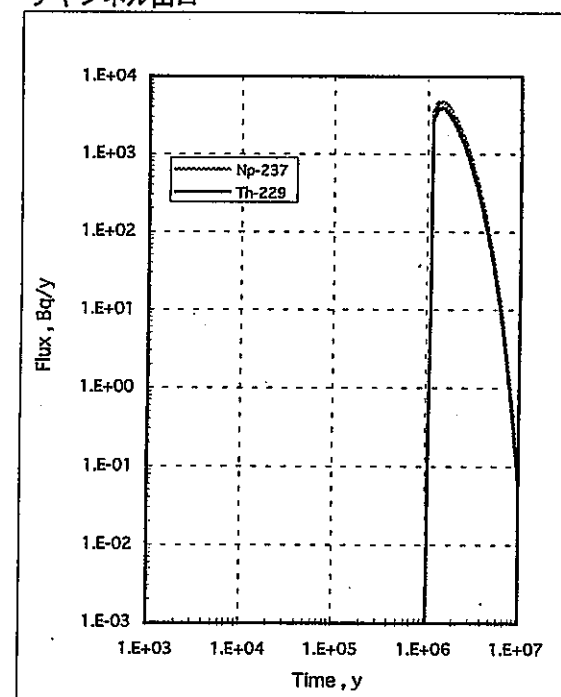
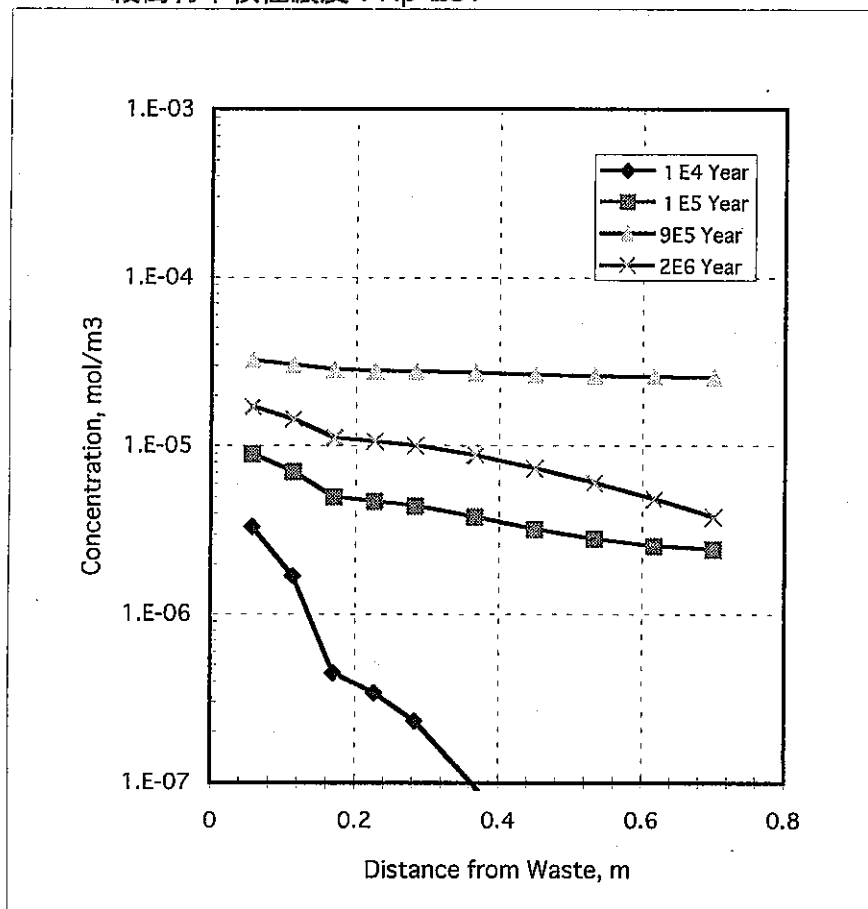


図4.2-17 フラックスの経時変化(複合ケース)

緩衝材中核種濃度：Np-237



Th-229

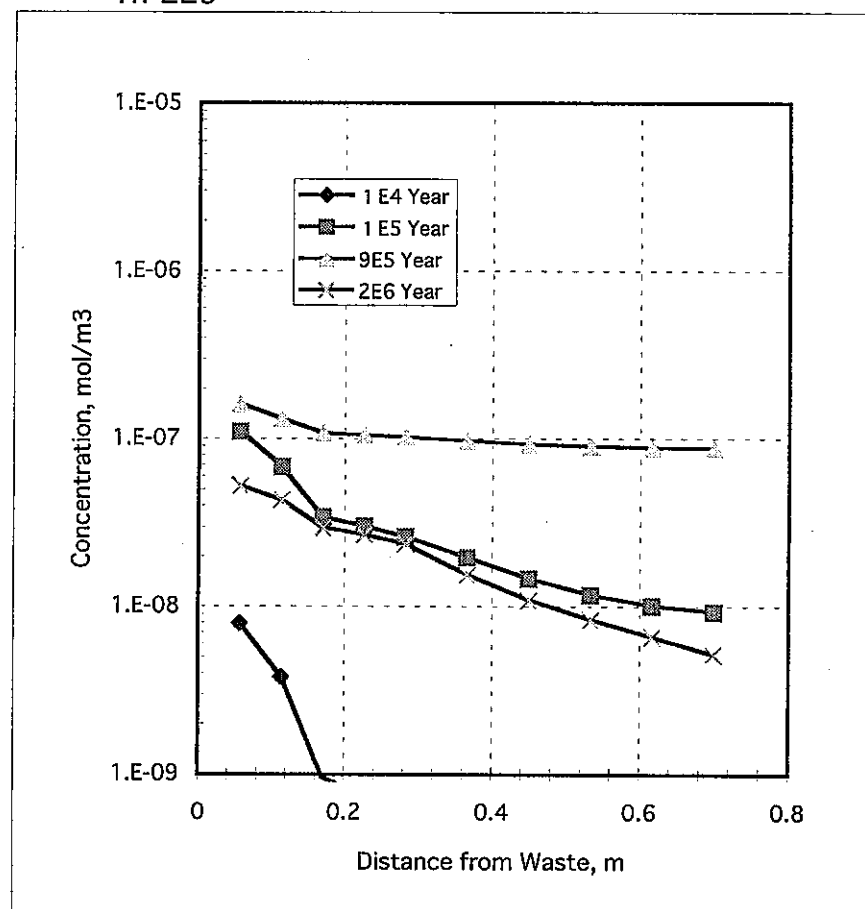
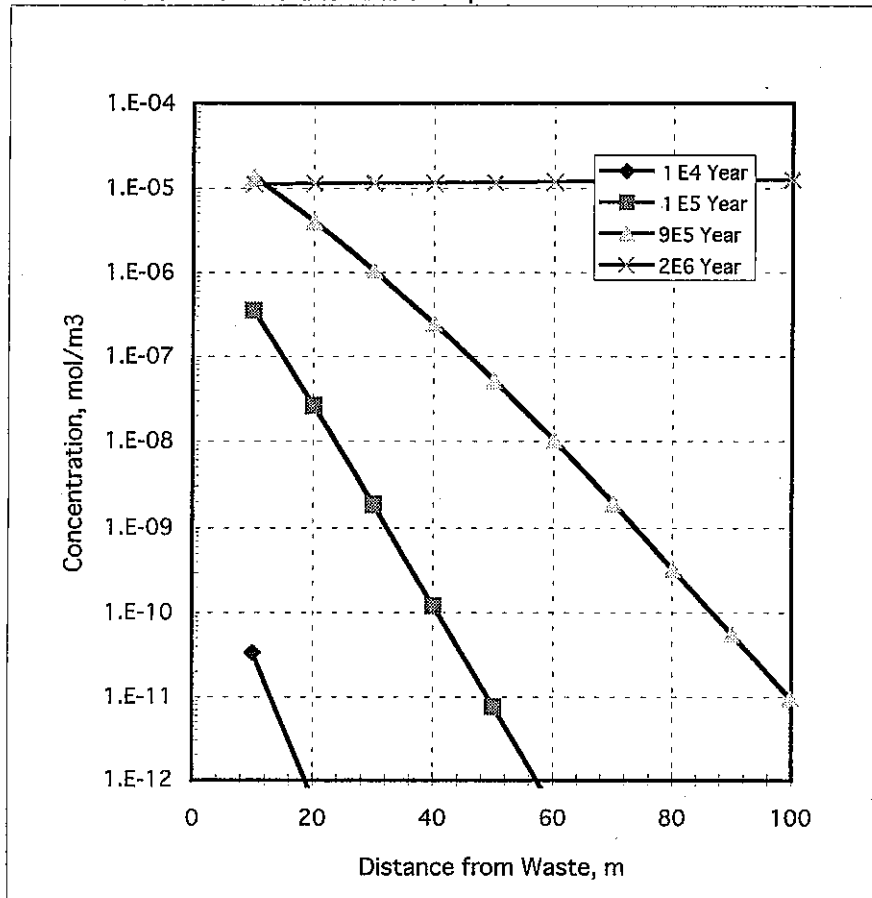


図4.2-18 緩衝材中核種濃度(複合ケース)

チャンネル中核種濃度：Np-237



Th-229

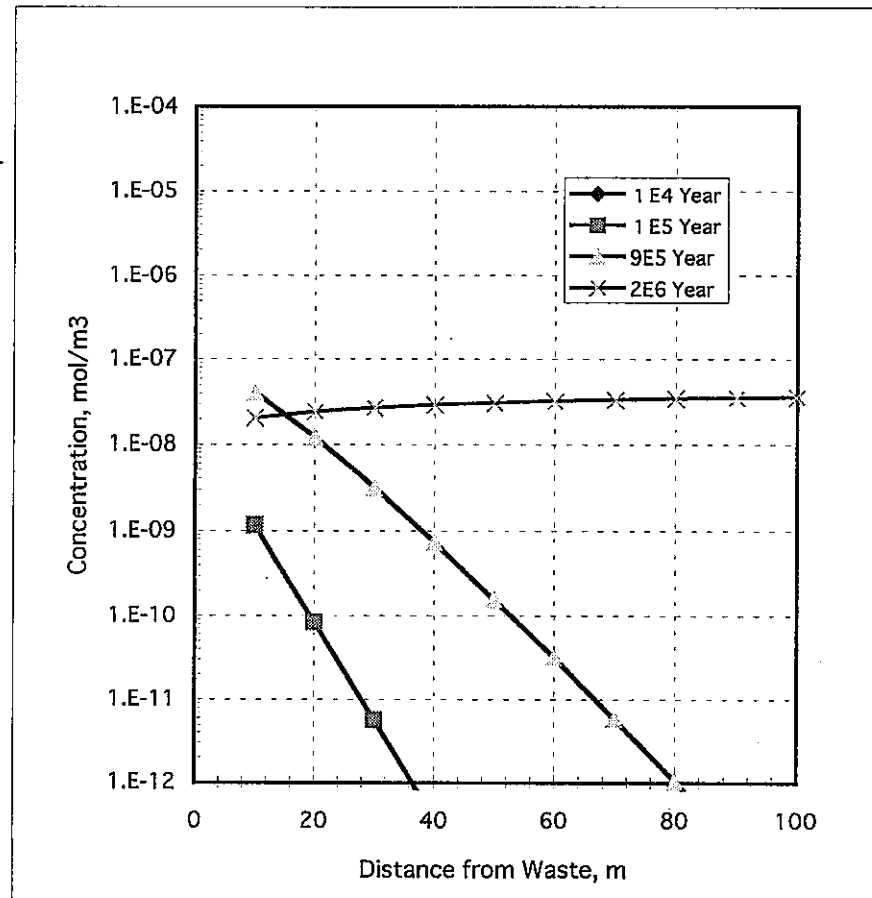


図4.2-19 チャンネル内部核種濃度(複合ケース)

母岩マトリクス中核種量

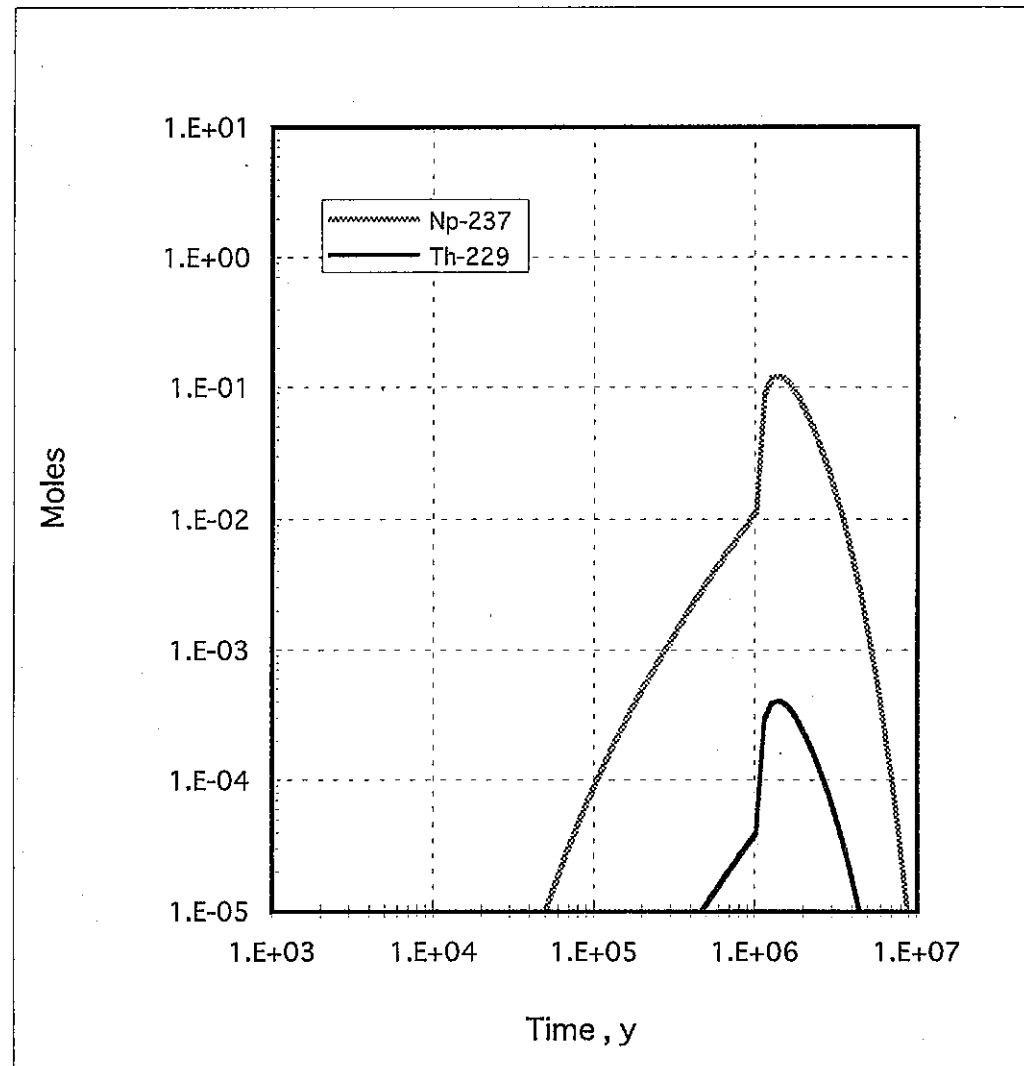
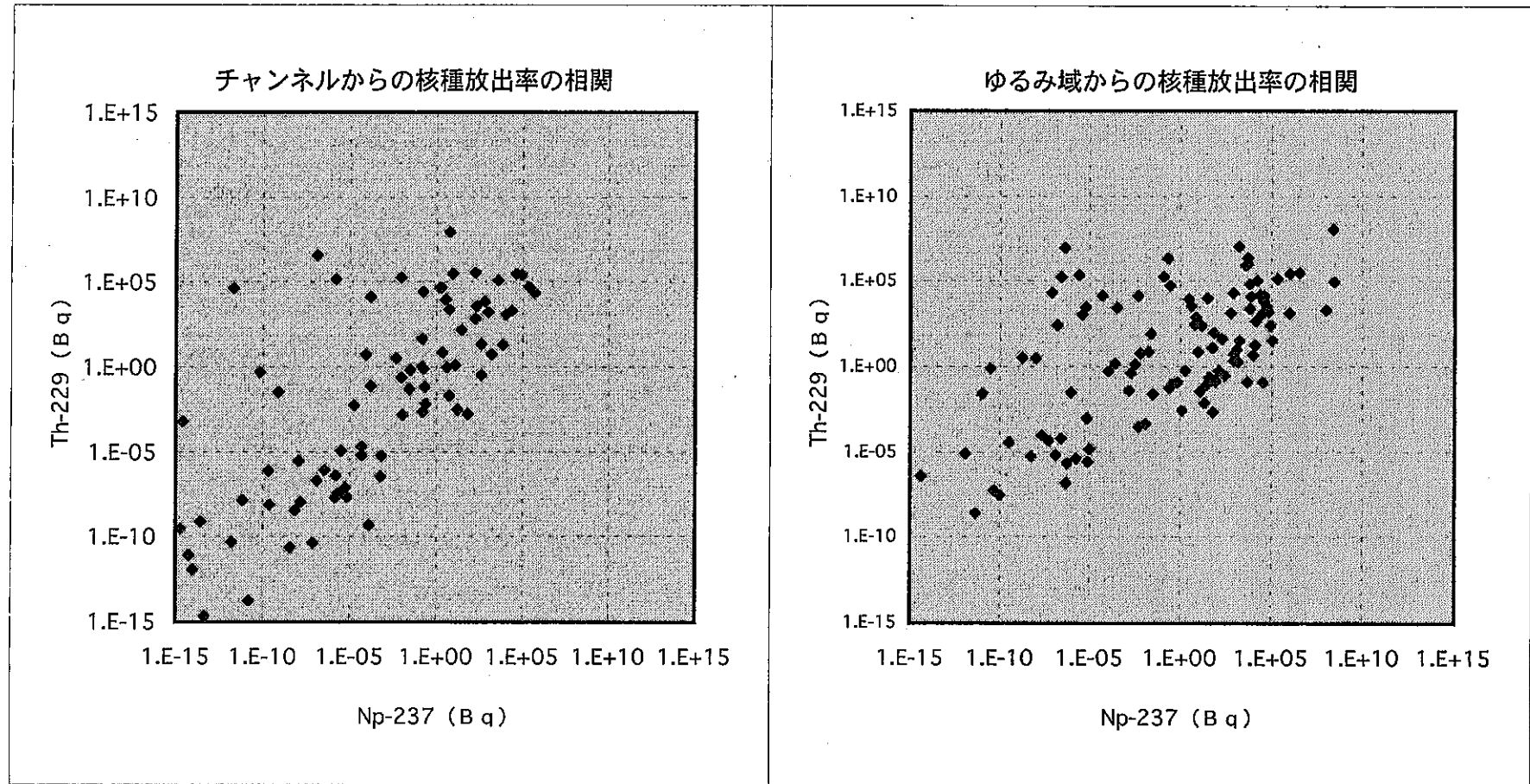


図4.2-20 母岩マトリクス中核種量(複合ケース)



| | | | |
|--------------------|-----|--------|-----------------|
| 計算ケース数 | 130 | 計算所用時間 | 15時間 |
| データ取得数 | 109 | | 7分/ケース |
| LinuxバージョンTigerで実施 | | | PentiumII400MHz |

図4.2-21 Striderによる計算実施例

参考文献

- [1] 動力炉・核燃料開発事業団 研究委託内容報告書、地層処分システム性能評価のための概括的感度解析手法の高度化(II)、PNC ZJ1281 98-005、1998年2月、日揮株式会社
- [2] 核燃料サイクル開発機構 研究委託内容報告書、地層処分システム性能評価のための概括的感度解析手法の高度化(III)、JNC TJ1400 99-017、1999年2月、日揮株式会社
- [3] 核燃料サイクル開発機構、地層処分研究開発第二次取りまとめ、第二ドラフト分冊3 地層処分システムの安全評価、JNC TN1400 99-009、平成11年4月21日

付録-1 STRIDER 入力ファイル例

```

NRUNS                200
SEED                 154
RUN-TIME             1e7

# THROUGHOUT, THE SUBDOMAIN FOR WHICH A PARAMETER IS
# RELEVANT HAS BEEN PREPENDED, EVEN WHERE IT IS OBVIOUS
# WHICH IS THE RELEVANT SUBDOMAIN

# containment parameters
W-CONTAINMENT-TIME  1e0 1e6 log
W-DISSOLUTION-TIME 1e0 1e6 log

# geometry
W-RADIUS            0.41
B-RADIUS            1.11
E-RADIUS            1.61
WBE-LENGTH          2.14
C-LENGTH            100

# structure
W-POROSITY          0.4
B-POROSITY          0.4
E-POROSITY          0.1
M-POROSITY          0.02
W-DENSITY           2700
B-DENSITY           2700
E-DENSITY           2700
C-DENSITY           1
M-DENSITY           2600

# discretisation
B-INNER-CELLS       5
B-OUTER-CELLS       5
C-CELLS             10
M-CELLS             3

NO-OF-NUCLIDES      2

NUCLIDE              Np-237 2.14e6 1.86
M-C-ALPHA1           1e-11 0.1 log
M-C-ALPHA2           1e-11 0.1 log
C-C-BETA1            1e-11 0.1 log
C-C-BETA2            1e-11 0.1 log
C-C-BETA3            1e-11 0.1 log
M-R-ALPHA            1 1e5 log
C-R-BETA             1 1e3 log
M-A0                 1
M-A1                 0 2 uni
C-B0                 1
C-B1                 1e-3
C-B2                 0 2 uni
WBE-C-ALPHA1         1e-11 0.1 log

```

| | | | |
|-----------------|-------|-----|-----|
| WBE-C-ALPHA2 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-C-BETA1 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-C-BETA2 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-C-BETA3 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-R-ALPHA | 1 | 1e5 | log |
| WBE-R-BETA | 1 | 1e3 | log |
| WBE-A1 | 0 | 2 | uni |
| WBE-B2 | 0 | 2 | uni |
| WBECM-K | 0 | 10 | uni |
| WBECM-m | 1 | | |
| WBECM-mu_I_II | 1e-6 | 1 | log |
| WBECM-mu_II_I | 1e-6 | 1 | log |
| WBECM-DIFFUSION | 0.01 | | |

| | | | |
|-----------------|--------|------|--------|
| NUCLIDE | Th-229 | 7340 | 9.6e-5 |
| M-C-ALPHA1 | 1e-11 | 0.1 | log |
| M-C-ALPHA2 | 1e-11 | 0.1 | log |
| C-C-BETA1 | 1e-11 | 0.1 | log |
| C-C-BETA2 | 1e-11 | 0.1 | log |
| C-C-BETA3 | 1e-11 | 0.1 | log |
| M-R-ALPHA | 1 | 1e5 | log |
| C-R-BETA | 1 | 1e3 | log |
| M-A0 | 1 | | |
| M-A1 | 0 | 2 | uni |
| C-B0 | 1 | | |
| C-B1 | 1e-3 | | |
| C-B2 | 0 | 2 | uni |
| WBE-C-ALPHA1 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-C-ALPHA2 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-C-BETA1 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-C-BETA2 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-C-BETA3 | 1e-11 | 0.1 | log |
| WBE-R-ALPHA | 1 | 1e5 | log |
| WBE-R-BETA | 1 | 1e3 | log |
| WBE-A1 | 0 | 2 | uni |
| WBE-B2 | 0 | 2 | uni |
| WBECM-K | 0 | 10 | uni |
| WBECM-m | 1 | | |
| WBECM-mu_I_II | 1e-6 | 1 | log |
| WBECM-mu_II_I | 1e-6 | 1 | log |
| WBECM-DIFFUSION | 0.01 | | |

| | | | |
|-------------------------|------|-----|-----|
| B-FRACTURE-START | 1e0 | 1e7 | log |
| B-FRACTURE-DURATION | 1e0 | 1e7 | log |
| B-FRACTURE-SIZE | 0 | 1 | uni |
| B-FRACTURE-CONDUCTIVITY | 1e-7 | 1e3 | log |

| | | | |
|------------------|------|------|-----|
| NO-OF-CHANNELS | 1 | | |
| C-TRANSMISS-MIN | 1e-7 | 1e3 | log |
| C-TRANSMISS-MAX | 1e-7 | 1e3 | log |
| C-FRACTURE-WIDTH | 1e-1 | 1e1 | log |
| C-FLOW-WET | 1e-3 | 1 | log |
| B-DISPERSION | 1 | 100 | uni |
| C-DISPERSION | 1 | 100 | uni |
| C-A-FACTOR | 5e-4 | 5e-3 | uni |
| C-APERTURE-STEPS | 4 | | |

| | | | |
|--------------------|------|------|-----|
| C-START-INC | 0.1 | 1e6 | log |
| C-DURATION-INC | 1e-1 | 1e6 | log |
| C-DURATION-MAX | 1e-1 | 1e6 | log |
| C-DURATION-DEC | 1e-1 | 1e6 | log |
| M-DEPTH | 0 | 1 | uni |
| BEC-HYD-START | 0.1 | 1e6 | log |
| BEC-HYD-DURATION | 1e-1 | 1e6 | log |
| B-HYD-PMIN | 1e-3 | 1e-1 | log |
| B-HYD-PMAX | 1e-1 | 1e2 | log |
| EC-HYD-START | 0.1 | 1e6 | log |
| EC-HYD-DURATION | 1e-1 | 1e6 | log |
| C-HYD-PMIN | 1e-3 | 1e-1 | log |
| C-HYD-PMAX | 1e-1 | 1e2 | log |
| W-GEOCHEM-START | 1 | 1e7 | log |
| W-GEOCHEM-DURATION | 1 | 1e7 | log |
| W-GEOCHEM-STRENGTH | 1e-3 | 1e3 | log |
| C-GEOCHEM-START | 1 | 1e7 | log |
| C-GEOCHEM-DURATION | 1 | 1e7 | log |
| C-GEOCHEM-STRENGTH | 1e-3 | 1e3 | log |
| W-BUFFER | 1e-2 | 1e5 | log |
| B-BUFFER | 1e-2 | 1e5 | log |
| E-BUFFER | 1e-2 | 1e5 | log |
| C-BUFFER | 1e-2 | 1e5 | log |
| M-BUFFER | 1e-2 | 1e5 | log |

付録-2 STEPPER 入力ファイル例

```

NRUNS                5
SEED                 154
RUN-TIME             1e7

NO-OF-EBS-CHANNELS  1

NO-OF-EBS-CHANNEL-CELLS  5
NO-OF-EBS-MATRIX-CELLS  5
WASTEFORM-VOLUME      1.
WASTEFORM-SA          1.
EBS-INNER-RADIUS      0.2
EBS-OUTER-RADIUS      0.7
EBS-SWITCH-TIMES     1 10000 log
EBS-POROSITY          0.3
EBS-DIFFUSION         1e-2 1e-2 uni
EBS-CONDUCTIVITY     0.1 0.1 uni
EBS-BUFFER-CAPACITY  1 100 uni
EBS-DENSITY           2600.

NO-OF-NUCLIDES      2

NUCLIDE              Np-237  2.14e6  148.8
C-ALPHA1             1e-11  0.1  log
C-ALPHA2             1e-11  0.1  log
C-BETA1              1e-11  0.1  log
C-BETA2              1e-11  0.1  log
C-BETA3              1e-11  0.1  log
A0                   1
A1                   0  2  uni
B0                   1
B1                   1e-3
B2                   0  2  uni
R-ALPHA              1  1e5  log
R-BETA                1  1e3  log
K                    0  10  uni
m                    1
mu_I_II              1e-6  1  log
mu_II_I              1e-6  1  log

NUCLIDE              Th-229  7340  9.6e-5
C-ALPHA1             1e-11  0.1  log
C-ALPHA2             1e-11  0.1  log
C-BETA1              1e-11  0.1  log
C-BETA2              1e-11  0.1  log
C-BETA3              1e-11  0.1  log
A0                   1
A1                   0  2  uni
B0                   1
B1                   1e-3
B2                   0  2  uni
R-ALPHA              1  1e5  log
R-BETA                1  1e3  log
K                    0  10  uni

```

| | | | | |
|-------------------|-----------------|------|-----|--|
| m | 1 | | | |
| mu_I_II | 1e-6 | 1 | log | |
| mu_II_I | 1e-6 | 1 | log | |
| NO-OF-CHANNELS | 1 | | | |
| CHANNEL-CELLS | 10 | | | |
| CHANNEL-LENGTH | 100 | | | |
| TRANSMISS-MIN | 1e-7 | 1e3 | log | |
| TRANSMISS-MAX | 1e-7 | 1e3 | log | |
| FRACTURE-WIDTH | 1e2 | 1e4 | log | |
| FLOW-WET | 1e-3 | 1 | log | |
| DISPERSION | 1 | 100 | log | |
| CHANNEL-DIFFUSION | 0 | | | |
| CHANNEL-BUFFER | 1e-5 | | | |
| CHANNEL-DENSITY | 0 | | | |
| A | 5e-4 | 5e-3 | uni | |
| APERTURE-STEPS | 4 | | | |
| START-INC | 0.1 | 1e6 | log | |
| DURATION-INC | 1e-1 | 1e6 | log | |
| DURATION-MAX | 1e-1 | 1e6 | log | |
| DURATION-DEC | 1e-1 | 1e6 | log | |
| MATRIX-CELLS | 3 | | | |
| MATRIX-DEPTH | 0 | 1 | uni | |
| MATRIX-POROSITY | 0.02 | | | |
| MATRIX-DIFFUSION | 0.001578 | | | |
| MATRIX-BUFFER | 1e-2 | 1e5 | log | |
| MATRIX-DENSITY | 2600 | | | |
| HYD-START | 0.1 | 1e6 | log | |
| HYD-DURATION | 1e-1 | 1e6 | log | |
| HYD-PMIN | 1e-3 | 1 | log | |
| HYD-PMAX | 1 | 1 | log | |
| GEOCHEM-START | 1 | 1e6 | log | |
| GEOCHEM-DURATION | 100 | 1e7 | log | |
| GEOCHEM-STRENGTH | 1e-3 | 1e3 | log | |
| OUTPUT-FILE | FLUX | Bq | 95 | |
| OUTPUT-FILE | PEAK-FLUX | Bq | 95 | |
| OUTPUT-TIMES | START-TIME | 1e0 | | |
| OUTPUT-TIMES | FINAL-TIME | 1e7 | | |
| OUTPUT-TIMES | NUMBER-OF-TIMES | 71 | GEO | |
| CONTROL | SCALE ALL | 1e-7 | | |
| CONTROL | MATRIX-REF | 2 | | |
| CONTROL | CPU-LIMIT | 300 | | |