JNC TJ8400 2003-032

熱－水－応力－化学連成挙動に関する研究（Ⅱ）

－成果報告書－

（核燃料サイクル開発機構 業務委託報告書）

2003 年 2 月

三菱重工業株式会社

株 式 会 社　間 組

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

〒３１９－１１８４　茨城県那珂郡東海村大字村松４番地４９
核燃料サイクル開発機構
技術展開部　技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:

Technical Cooperation Section,
Technology Management Division,
Japan Nuclear Cycle Development Institute
4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1184,
Japan

© 核燃料サイクル開発機構 （Japan Nuclear Cycle Development Institute）
2003

JNC TJ8400 2003-032
2003 年 2 月

熱－水－応力－化学連成挙動に関する研究（Ⅱ）
－成果報告書－

（核燃料サイクル開発機構　業務委託報告書）

石原義尚[*1], 千々松正和[*2], 根山敦史[*3],
田中由美子[*3]，　雨宮清[*2]，　塩崎功[*2],
伊藤隆哉[*1]

要　旨

本研究は、地層処分システムのニアフィールドにおける連成解析を実現させるため，既存の現象解析コード THAMES，Dtransu，phreeqe60 を用いた熱－水－応力－化学連成解析コードの開発，事例解析を実施した。

(1) 本研究では，THAMES（熱－水－応力解析コード），Dtransu（物質移行解析コード），phreeqe60（地球化学解析コード）のプロセスを自動制御し，連成解析全体を管理する連成管理プログラム（COUPLYS）を開発した。

(2) 本研究では，物質移行－地球化学連成において必要となる機能の拡張として，溶液濃度の受渡し，トータル濃度の受渡しに関する支援モジュールを作成した。更に，多元素を取り扱うことができるようにするため，物質移行解析コードの改良を実施した。

(3) 本研究では，THMC 物性・連成モジュールとして，既存の実験データに基づき緩衝材の透水係数が，化学反応（鉱物の溶解・沈殿）による密度変化や NaCl 濃度に依存するモデルを作成した。連成管理プログラム（COUPLYS）に THAMES, Dtransu, phreeqe60, 物性・連成モジュールを搭載することにより，THMC 解析コードを構築し，感度解析を実施した。

(4) 本研究では，開発した THMC 解析コードの適用性を確認するため，HLW ニアフィールド体系を対象として，1 次元，3 次元モデルによる事例解析を実施した。

本報告書は、三菱重工業株式会社，株式会社間組が核燃料サイクル開発機構との委託研究契約により実施した研究成果である。

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
処分バリア性能研究グループ

＊１三菱重工業株式会社
＊２株式会社間組
＊３コンピュータソフト開発株式会社

JNC TJ8400 2003-032
February, 2003

Investigation research on the evaluation of a coupled thermo-hydro-mechanical-chemical phenomena(Ⅱ) －result report－

(Document Prepared by Other Institute, Based on the Trust Contract)

Yoshinao Ishihara*[1], Masakazu Chijimatsu*[2], Atsushi Neyama*[3], Yumiko Tanaka*[3], Kiyoshi Amemiya*[2], Isao Shiozaki*[2], Takaya Ito*[1]

Abstract

In order to realize a coupling analysis in the near field of the geological disposal system, the coupling analysis code on the thermo-hydro-mechanical-chemical phenomena by THAMES, Dtransu and phreeqe60, which are existing analysis code, is developed in this study. And we carried out the case analysis on the thermo-hydro-mechanical-chemical phenomena by this code.

(1) We have developed coupling analysis system to manage coupling analysis and to control coupling process automatically for THAMES (thermo-hydro-mechanical analysis code), Dtransu (mass transport analysis code) and phreeqe60 (geochemical analysis code).

(2) Some supporting module, which includes transfer of dissolution concentration and total concentration (dissolution + precipitation concentration), was prepared as a functional expansion. And in order to treat multi- chemical elements, we have modified mass transport analysis code.

(3) We have prepared hydraulic conductivity module of buffer material depending on change of dry density due to chemical equilibrium (dissolution and precipitation of minerals), and change of concentration of NaCl solutions. After THAMES, Dtransu, phreeqe60 and hydraulic conductivity module were installed in the COUPLYS, sensitivity analysis was carried out to check basic operation.

(4) In order to confirm the applicability of the developed THMC analysis code, we have carried out case analysis on 1-dimensional and 3-dimensional model which including vitrified waste, over-pack, buffer material and rock in the HLW near-field.

This work was performed by Hazama Corporation and Mitsubishi Heavy Industries, LTD. under contract with Japan Nuclear Cycle Development institute.
JNC Liaison : Barrier Performance Group Waste Isolation Research Division
Waste Management and Fuel Cycle Research Center TOKAI WORKS
＊1 Mitsubishi Heavy Industries, LTD.
＊2 Hazama Corporation
＊3 Computer Software Development Co., Ltd.

目　　次

1. はじめに.....1
2. 連成管理プログラムの作成.....2
2.1 連成管理プログラムの概要.....3
2.2 メモリ管理手法.....5
2.2.1 概要.....5
2.2.2 データの種類および宣言.....6
2.2.3 高速データアクセス.....9
2.2.4 アプリケーションインタフェース.....13
2.3 プロセス管理手法.....14
2.4 連成管理プログラム.....22
2.4.1 連成管理プログラム単体.....22
2.4.2 個別現象解析コードの搭載.....40
2.5 THMC ベーシック版の構築.....42
3. 物質移行解析コードの機能拡張.....50
3.1 HYDROGEOCHEM／Dtransu 物質移行機能の比較.....50
3.2 Dtransu 物質移行解析部の機能拡張.....59
3.3 地球化学コード支援モジュールの作成.....64
3.4 物質移行－地球化学連成解析コードの構築.....64
3.5 検証解析.....64
4. 熱－水－応力－化学連成解析コードの構築.....76
4.1 全体構成.....76
4.1.1 THMC 連成物性モジュールの調査.....77
4.1.2 THMC 連成物性モジュールの作成.....112
4.1.3 THMC 連成物性モジュールの検証.....133
4.1.4 THMC 連成のためのデータセット作成.....146
4.2 検証.....149
5. 熱－水－応力－化学連成挙動の事例解析の実施.....183
5.1 事例解析の実施.....183
5.1.1 小規模 1 次元事例解析.....183
5.1.2 大規模 3 次元事例解析.....199
6. 今後の課題.....214
7. おわりに.....222
8. 謝辞.....224
9. 参考文献.....225

図 目 次

図 2.1-1 連成管理プログラム「COUPLYS」の構成 4
図 2.2-1 解析プロセスと共有メモリの関係 5
図 2.2-2 クラスの階層構造宣言 8
図 2.2-3 COUPLYS データファイル 8
図 2.2-4 変数名を用いた共有メモリのアクセス 9
図 2.2-5 ハッシュテーブルと参照テーブル 10
図 2.2-6 レジスタと参照テーブル 12
図 2.3-1 セマフォの例 15
図 2.3-2 解析コードの連携パターン 16
図 2.3-3 プロセス制御シーケンス 18
図 2.3-4 実行シーケンスの例 20
図 2.4-1 実行制御プログラム 36
図 2.4-2 COUPYS 単体テスト用実行シーケンス 37
図 2.4.3 THAMES（結果ファイル）－Dtransu 連成仕様 41
図 2.4.4 THAMES（結果ファイル）－Dtransu 連成解析結果の一例 41
図 2.5-1 Dtransu－phreeqe60 による連成仕様 43
図 2.5-2 THMC ベーシック版による連成仕様 44
図 2.5-3 Dtransu－phreeqe60 動作確認用解析モデル図 46
図 2.5-4 THMC 解析モデル図 46
図 2.5-5 THMC 解析メッシュ図 47
図 2.5-6 カラム内の方解石分布 48
図 2.5-7 カラム内の pH 分布 48
図 2.5-8 THMC ベーシック版による動作確認解析結果 49
図 3.1.1 HYDROGEOCHEM のモジュール間のデータの流れ 51
図 3.5-1 収束ループ内の物質移行－地球化学連成計算処理フロー 65
図 3.5-2 THMC 修正前のカラム内沈殿濃度分布 67
図 3.5-3 THMC 修正後のカラム内沈殿濃度分布 67
図 3.5-4 イタレーション過程におけるトータル濃度の変遷（要素 10） 68
図 3.5-5 イタレーション過程における沈殿（方解石）濃度の変遷（要素 10） 68
図 3.5-6 イタレーション過程における修正γの変遷（要素 10） 68
図 3.5-7 イタレーション過程における液相濃度の変遷（要素 10） 71
図 3.5-8 THMC 修正後【トータル濃度の補正：式(9)含む】のカラム内
沈殿濃度分布 72

図 3.5-9　収束ループ内の物質移行－地球化学連成で使用している関連変数..... 73
図 3.5-10　カラム内の pH 分布【連成方式 3，式(6)】 74
図 3.5-11　カラム内の Ca，C 溶液濃度分布【連成方式 3，式(6)】 74
図 3.5-12　カラム内の方解石濃度分布【連成方式 3，式(6)】 75
図 3.5-13　カラム内 Ca，C トータル濃度分布【連成方式 3，式(6)】 75
図 4.1-1　THMC 連成解析コードと連成物性モジュールの関係..... 76
図 4.1-2　水理物性の温度依存..... 78
図 4.1-3　力学物性の温度依存..... 78
図 4.1-4　熱物性の飽和度依存..... 78
図 4.1-5　力学物性の含水比依存 78
図 4.1-6　熱物性の密度依存 78
図 4.1-7　水理物性の密度依存..... 78
図 4.1-8　熱物性の溶液濃度依存 78
図 4.1-9　沈殿などによる熱物性の変化 78
図 4.1-10　鉱物の変質による熱物性の変化..... 78
図 4.1-11　水理物性の溶液濃度依存..... 78
図 4.1-12　沈殿などによる水理物性の変化..... 78
図 4.1-13　鉱物の変質による水理物性の変化 78
図 4.1-14　力学物性の溶液濃度依存..... 78
図 4.1-15　沈殿などによる力学物性の変化..... 78
図 4.1-16　鉱物の変質による力学物性の変化 78
図 4.1-17　実効拡散係数のベントナイト密度依存性 87
図 4.1-18　実効拡散係数のケイ砂混合率依存性..... 88
図 4.1-19　飽和透水係数と有効粘土密度の関係..... 90
図 4.1-20　膨潤応力と有効粘土密度の関係..... 93
図 4.1.21　不飽和領域における膨潤応力の概念図..... 121
図 4.1.22　溶解・沈殿にともなう固相，液相の関係 123
図 4.1.23　有効粘土密度と透水係数の関係..... 129
図 4.1.24　乾燥密度と透水係数の関係（B:S=7:3 130
図 4.1.25　連成物性モジュール：熱力学データの温度依存性モジュール 132
図 4.1.26　鉱物の密度 144
図 4.1.27　平成 14 年度 THMC（THAMES－Dtransu－phreeqe60）モジュール構成
..... 148
図 4.2-1　検証解析ケース 1-1，1-2 解析仕様..... 150
図 4.2-2　検証解析ケース 2-1 解析仕様..... 151
図 4.2-3　検証解析ケース 2-2 解析仕様..... 151

図 4.2-4　検証解析ケース 3-1 解析仕様 152
図 4.2-5　検証解析ケース 3-2 解析仕様 152
図 4.2-6　ケース 1_1：NaCl 濃度の空間分布 156
図 4.2-7　ケース 1_2：NaCl 濃度の空間分布 156
図 4.2-8　ケース 1_2：温度の空間分布 157
図 4.2-9　ケース 1_2：飽和度の空間分布 157
図 4.2-10　ケース 1_2：pH の空間分布 158
図 4.2-11　ケース 1_2：Na 溶液濃度の空間分布 158
図 4.2-12　ケース 1_2：透水係数の空間分布 169
図 4.2-13　ケース 2_1：温度の空間分布 163
図 4.2-14　ケース 2_2：温度の空間分布 163
図 4.2-15　ケース 2_1：飽和度の空間分布 164
図 4.2-16　ケース 2_2：飽和度の空間分布 164
図 4.2-17　ケース 2_1：pH の空間分布 165
図 4.2-18　ケース 2_2：pH の空間分布 165
図 4.2-19　ケース 2_1：Ca 溶液濃度の空間分布 166
図 4.2-20　ケース 2_2：Ca 溶液濃度の空間分布 166
図 4.2-21　ケース 2_1：方解石沈殿濃度の空間分布 167
図 4.2-22　ケース 2_2：方解石沈殿濃度の空間分布 167
図 4.2-23　ケース 2_1：透水係数の空間分布 168
図 4.2-24　ケース 2_2：透水係数の空間分布 168
図 4.2-25　ケース 2_1：乾燥密度の空間分布 169
図 4.2-26　ケース 2_2：乾燥密度の空間分布 169
図 4.2-27　ケース 2_1：空隙率の空間分布 170
図 4.2-28　ケース 2_2：空隙率の空間分布 170
図 4.2-29　ケース 3_1：温度の空間分布 174
図 4.2-30　ケース 3_2：温度の空間分布 174
図 4.2-31　ケース 3_1：飽和度の空間分布 175
図 4.2-32　ケース 3_2：飽和度の空間分布 175
図 4.2-33　ケース 3_1：pH の空間分布 176
図 4.2-34　ケース 3_2：pH の空間分布 176
図 4.2-35　ケース 3_1：Ca 溶液濃度の空間分布 177
図 4.2-36　ケース 3_2：Ca 溶液濃度の空間分布 177
図 4.2-37　ケース 3_1：Na 溶液濃度の空間分布 178
図 4.2-38　ケース 3_2：Na 溶液濃度の空間分布 178
図 4.2-39　ケース 3_1：方解石沈澱濃度の空間分布 179

図 4.2-40　ケース 3_2：方解石沈澱濃度の空間分布 179
図 4.2-41　ケース 3_1：透水係数の空間分布 180
図 4.2-42　ケース 3_2：透水係数の空間分布 180
図 4.2-43　ケース 3_1：乾燥密度の空間分布 181
図 4.2-44　ケース 3_2：乾燥密度の空間分布 181
図 4.2-45　ケース 3_1：空隙率の空間分布 182
図 4.2-46　ケース 3_2：空隙率の空間分布 182
図 5.1-1　1 次元事例解析解析モデル図 184
図 5.1-2　pH の関数として異なった炭酸塩化学種種の濃度 188
図 5.1-3　温度分布（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃） 189
図 5.1-4　飽和度分布（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃） 190
図 5.1-5　pH 分布（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃） 191
図 5.1-6　Ca 溶液濃度分布（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃）. 192
図 5.1-7　透水係数分布（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃） 193
図 5.1-8　温度分布（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃） 194
図 5.1-9　飽和度分布（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃） 195
図 5.1-10　pH 分布（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃） 196
図 5.1-11　Ca 溶液濃度分布（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃）. 197
図 5.1-12　透水係数分布（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃） 198
図 5.1-13　大規模 3 次元事例解析用モデル 200
図 5.1-14　大規模 3 次元事例解析用ガラス固化体発熱特性 201
図 5.1-15　大規模 3 次元事例解析評価ラインおよび評価位置 201
図 5.1-16　熱－水に係るパラメータの空間分布 206
図 5.1-17　熱－水に係るパラメータの時間変化（緩衝材内側） 207
図 5.1-18　物質移行－地球化学に係るパラメータの空間分布 208
図 5.1-19　物質移行－地球化学に係るパラメータの時間変化（緩衝材内側） 209
図 5.1-20　温度分布 210
図 5.1-21　飽和度分布 211
図 5.1-22　pH 分布 212
図 5.1-23　Ca 溶液濃度分布 213

図 6.2-1　TAHMES-HYDROGEOCHEM-phreeqe60 連成解析系の概要 216
図 6.2-2　空間離散化概念の相違による「計算メッシュ」の違い 217
図 6.2-3　四面体の体積（Heron 公式） 217
図 6.2-4　節点処理に基づく空間領域の処理モジュール概略フロー 220

表 目 次

表 2.2-1 COUPLYS の基本データ型 7
表 2.3-1 可算セマフォの動作 17
表 2.3-1 実行シーケンス定義データ 20
表 2.4-1 COUPLYS コントローラの起動オプション 23
表 2.4-2 COUPLYS コントローラのコマンド 23
表 2.4-3 SPY のコマンド 24
表 2.4-4 初期化関数 24
表 2.4-5 初期化関数（コントロール/データファイル指定） 25
表 2.4-6 終了処理関数 25
表 2.4-7 値取得関数 25
表 2.4-8 整数データ取得関数 25
表 2.4-9 単精度浮動小数点データ取得関数 26
表 2.4-10 倍精度浮動小数点データ取得関数 26
表 2.4-11 4 倍精度浮動小数点データ取得関数 26
表 2.4-12 文字列データ取得関数 26
表 2.4-13 バイナリデータ取得関数 26
表 2.4-14 配列データ一括取得関数 27
表 2.4-15 整数配列データ一括取得関数 27
表 2.4-16 単精度浮動小数点配列データ一括取得関数 27
表 2.4-17 倍精度浮動小数点配列データ一括取得関数 27
表 2.4-18 4 倍精度浮動小数点配列データ一括取得関数 28
表 2.4-19 配列文字列データ一括取得関数 28
表 2.4-20 バイナリ配列データ一括取得関数 28
表 2.4-21 配列データ取得関数 28
表 2.4-22 整数配列データ取得関数 29
表 2.4-23 単精度浮動小数点配列データ取得関数 29
表 2.4-24 倍精度浮動小数点配列データ取得関数 29
表 2.4-25 4 倍精度浮動小数点配列データ取得関数 29
表 2.4-26 配列文字列データ取得関数 29
表 2.4-27 バイナリ配列データ取得関数 30
表 2.4-28 値設定関数 31
表 2.4-29 整数データ設定関数 31
表 2.4-30 単精度浮動小数点データ設定関数 31

表 2.4-31　倍精度浮動小数点データ設定関数 31
表 2.4-32　4 倍精度浮動小数点データ設定関数 31
表 2.4-33　文字列データ設定関数 32
表 2.4-34　バイナリデータ設定関数..... 32
表 2.4-35　配列データ一括設定関数..... 32
表 2.4-36　整数配列データ一括設定関数 32
表 2.4-37　単精度浮動小数点配列データ一括設定関数..... 32
表 2.4-38　倍精度浮動小数点配列データ一括設定関数..... 33
表 2.4-39　4 倍精度浮動小数点配列データ一括設定関数..... 33
表 2.4-40　配列文字列データ一括設定関数..... 33
表 2.4-41　バイナリ配列データ一括設定関数 33
表 2.4-42　配列データ設定関数..... 34
表 2.4-43　整数配列データ設定関数..... 34
表 2.4-44　単精度浮動小数点配列データ設定関数 34
表 2.4-45　倍精度浮動小数点配列データ設定関数 34
表 2.4-46　4 倍精度浮動小数点配列データ設定関数 34
表 2.4-47　配列文字列データ設定関数 35
表 2.4-48　バイナリ配列データ設定関数 35
表 2.4-49　プロセス停止関数 36
表 2.4-50　プロセス終了通知関数 36
表 2.4-51　COUPYS 単体テスト用実行シーケンスのプロセス概要..... 37
表 2.5-1　THAMES，Dtransu 配下の連成物性／支援モジュール一覧表..... 42
表 2.5-2　Dtransu－phreeqe60 動作確認用解析条件 45
表 2.5-3　THMC ベーシック版動作確認用解析条件..... 45
表 3.2-1　ブロックコモンの内容 60
表 3.2-2　変数一覧表 60
表 3.2-3　境界条件，初期濃度分布ファイル 61
表 3.2-4　修正γ入力ファイルフォーマット 63
表 3.2-5　UNIT 番号 64
表 3.5-1　Dtransu－phreeqe60 時間ステップ 1 におけるイタレーション中の
計算結果..... 69
表 3.5-2　HGC－phreeqe60 時間ステップ 1 におけるイタレーション中の計算結果69
表 3.5-3　詳細数値（HGC-phreeqe60【10 分割】，DTRA-phreeqe60【式(9)補正】）
..... 72
表 4.1-1　物性値の相関マトリクス..... 78
表 4.1-2　人工バリア構成要素材料の固有透過度..... 79

表 4.1-3　人工バリア構成要素材料の VG モデルにおけるパラメータの値 79
表 4.1-4　人工バリア構成要素材料の固有透過度 80
表 4.1-5　人工バリア構成要素材料の温度勾配水分拡散係数の係数の値 80
表 4.1-6　人工バリア構成要素材料のにおいて同定された F 値 81
表 4.1-7　第２次取りまとめ緩衝材再冠水解析に用いられた物性値 81
表 4.1-8　人工バリア構成要素材料の熱物性の含水比依存性 85
表 4.1-9　人工バリア構成要素材料の力学物性の含水比依存性 85
表 4.1-10　THMC 連成物性の現状一覧表 96
表 4.1-11　膨潤評価式における材料パラメータの設定（クニゲル V1 相当）[4] 116
表 4.1-12　膨潤評価式における物理定数 116
表 4.1-13　膨潤評価式における環境条件パラメータ 116
表 4.1-14　検証用テストケースの解析仕様 133
表 4.1-15　本モジュールを用いた計算結果と手計算の比較 137
表 4.1-16　本モジュールを用いた計算結果と手計算の比較 143
表 4.1-17　THAMES，Dtransu 配下の連成物性／支援モジュール一覧表 147
表 4.1-18　phreeqe60 配下の連成物性／支援モジュール一覧表 147
表 4.2-1　検証解析仕様一覧 153
表 4.2-2　検証解析入力データ（THAMES） 154
表 4.2-3　検証解析入力データ（Dtransu） 154
表 4.2-4　検証解析入力データ（phreeqe60） 154
表 5.1-1　THAMES 入力条件（小規模 1 次元事例解析用） 185
表 5.1-2　Dtransu 入力条件（小規模 1 次元事例解析用） 185
表 5.1-3　phreeqe60 入力条件（小規模 1 次元事例解析用） 186
表 5.1-4　THAMES 入力条件（大規模３次元事例解析用） 202
表 5.1-5　Dtransu 入力条件（大規模３次元事例解析用） 203
表 5.1-6　phreeqe60 入力条件（大規模３次元事例解析用） 203

1．はじめに

高レベル放射性廃棄物地層処分における処分場閉鎖後のニアフィールドの挙動は，廃棄体からの放熱，周辺岩盤から人工バリアへの地下水浸潤，地下水浸潤による緩衝材の膨潤圧の発生，緩衝材／間隙水組成の変化など，熱的，水理学的，力学的，化学的なプロセスが相互に影響することが予想される。

本研究は，地層処分システムにおいて想定される熱－水－応力－化学連成挙動の時間的・空間的な変遷を予測するために，現象理解に基づく数値解析システムの構築を目指すものである。

平成 13 年度は，熱－水－応力連成解析コードへの物質移行モデルの追加，および数値解析コード開発環境ツールを用いた予備的な連成解析の実施を行った。

本年度は，緩衝材／間隙水組成の変化といった挙動を捉えるために，熱－水－応力連成モデル，物質移行モデル，地球化学モデルの連成を実現する熱－水－応力－化学連成解析コードを構築し，ニアフィールドを対象として 1 次元，3 次元モデルによる熱－水－応力－化学連成挙動の事例解析を実施した。

2. 連成管理プログラムの作成

熱－水－応力－化学連成解析コードの汎用性を確保するためには, 柔軟な連成解析体系を実現することが肝要である。平成 13 年度は，共有メモリを活用した方法で，解析コード間のデータ授受を効率的に行い, 柔軟な連成解析体系を短期的に実現するメモリ管理手法を検討した。

本年度は，さらに，熱－水－応力連成解析，物質移行解析，地球化学解析のプロセス（解析コード）を自動制御し，連成解析全体を管理するプロセス管理手法を検討することにより，

- 解析プロセス間のデータ授受
- 複数解析プロセスの実行制御

を行う連成管理プログラム「COUPLYS」の開発を行った。

プロセス実行制御のプログラムの作成に際しては，以下に示す要件を配慮した。

- プロセス（解析コード）の種類に依存しない汎用的なプログラムとする。
- 複数の解析コードの停止，再開を交互に短時間で行うことを考慮し，プロセスの停止，再開を高速に行える機能を開発する。
- プロセスの停止中は，CPU に負荷をかけないものとする。
- 既存の解析コードに多くの改良を加えることなしに，プロセス管理プログラムとの連携を行えるものとする。なお，既存の解析コードは，FORTRAN 言語もしくは C/C++言語で作成されたものとする。
- 本プログラムは，C++言語を用いて UNIX 計算機上で開発する。

2.1 連成管理プログラムの概要

連成管理プログラム「COUPLYS」は，共有メモリおよびセマフォを用いることにより，プロセス間のデータ授受やプロセス制御を行う。共有メモリとは，通常の解析プログラムで使用されるメモリ（ローカルメモリ）とは異なり，計算機共通のプロセスとは独立したメモリであり，複数のプロセスから透過的にアクセスすることが可能である。また，セマフォとは，複数のプロセスの間の同期や単一プロセス中の複数のスレッドの同期を行うことを目的とした計算機共通のリソースである。

COUPLYS では，この共有メモリを，解析コード間で共通に用いられるデータの格納場所として使用し，また，セマフォを，複数の解析コードの実行シーケンスの制御に用いる。

図 2.1-1 は，COUPLYS の構成を示したものである。コントローラは，COUPLYS の中心的なプログラムであり，共有メモリの作成やプロセス（解析コード）の実行制御を行う。ここで，共有メモリ内に格納されるデータの種類およびプロセスの実行順序は，それぞれデータファイルとコントロールファイルに記述される。すなわち，ユーザは，COUPLYS プログラムを改良することなく，解析内容に応じてデータファイルとコントロールファイルを作成するだけで，複数の解析コードで共通に使われるデータや解析コードの実行シーケンスを定義することができる。

インタフェースは，共有メモリにアクセスするためのライブラリ（C 言語や FORTRAN 言語から利用可能な関数群）であり，解析コードからは，本インタフェースを用いることにより，容易に共有メモリ内のデータにアクセスすることができる。また，SPY ツールは，連成解析実行時のデータ確認用（デバッグ用）として，COUPLYS 実行中にインタラクティブに共有メモリ内のデータの表示やプロセスの実行状況の確認を行うことができる。

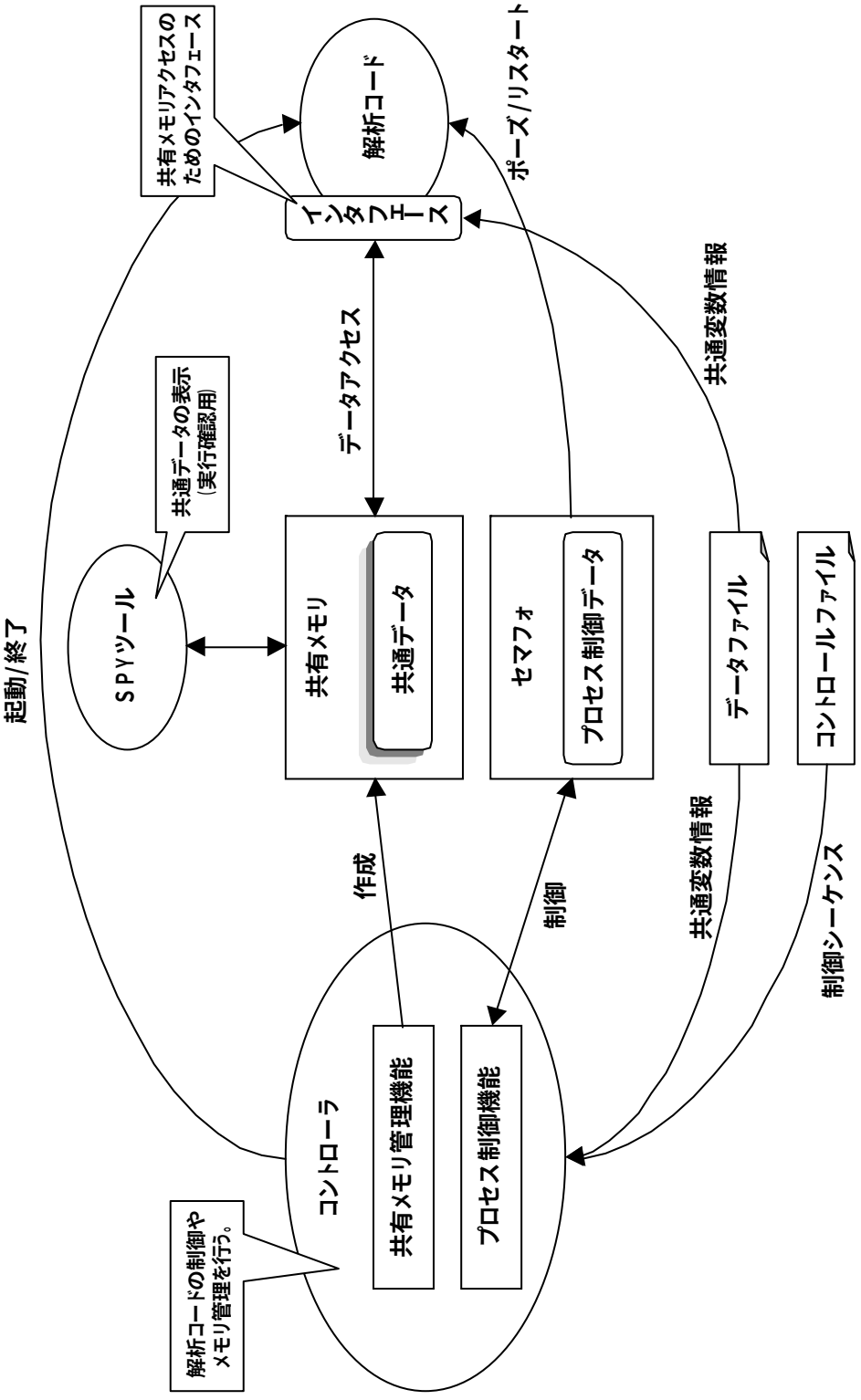


図 2.1-1 連成管理プログラム「COUPLYS」の構成

2.2 メモリ管理手法

2.2.1 概要

解析コードや解析結果の単位変換等を行うサポートコード（以下，解析プロセス）から共通にアクセスされるデータは，異なるプロセス（実行プログラム）から共通してアクセス可能な共有メモリ（shard memory）に格納される。図 2.2-1 に，解析プロセスと共有メモリの関係について示す。

共有メモリは，解析プロセスとは独立して，計算機に属するメモリとして存在する。例えば，図 2.2-1 に示すように解析プロセスAの解析結果を，解析プロセスBの入力値とする場合には，最初に解析プロセスAが，ローカルメモリ上に格納されている計算結果を，COUPLYS が提供するインタフェースプログラム（以下，API：application interface）を用いて共有メモリに書き込む。次に解析プロセスBが，書き込みと同様に API を介して，共有メモリ内のデータを読み込み，ローカルメモリに書き込む。そして，このローカルメモリを用いて解析プロセスBが計算処理を行う。このようにして，解析プロセス間でのデータ授受が行われる。

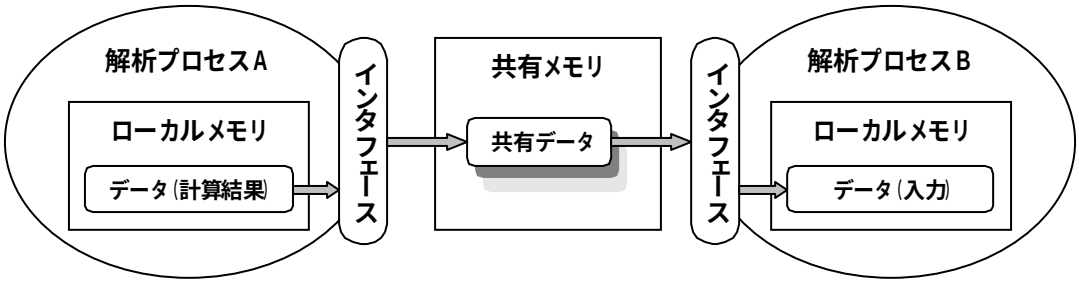


図 2.2-1 解析プロセスと共有メモリの関係

解析プロセスと共有メモリの間のデータ授受は，頻繁に行われること，ならびに 3 次元データなど多量のデータが扱われることを想定して，高速処理に行う必要がある。また，解析プロセスと COUPLYS との統合を容易に行えること，すなわち，解析コードの改良が最小限かつ簡単に行えることが重要である。

このため，本年度は，以下の方針に従い，昨年度開発したメモリ管理プログラムの改

良を行った。

- 解析プロセス（解析コードの開発者）からは，共有メモリや共有メモリ内のデータの位置（アドレス）を意識することなく，変数名を用いてデータにアクセス可能とする。

  例）set(“Na_Conc”, 0.1)　　Na の濃度を，0.1 に設定する。

  上記関数を，解析コードの所定の場所に挿入することにより，共有メモリにデータを書き込むことが可能
- 変数名と共有メモリ内のデータ位置（アドレス）の変換を効率的に行うことにより，高速なデータアクセスを実現する。
- 数値や文字列，バイナリデータ，配列データなど様々な形態のデータを，共有メモリに格納可能とする。
- COUPLYS が提供する API は，プログラミング言語によらず利用可能とする。

2.2.2 データの種類および宣言

共有メモリ内のデータは，プログラミング言語によらず利用可能とすることから，COUPLYS 独自のデータ型を用いて宣言する。このデータ型は，整数など一般的な型に加えて，オブジェクト指向技術のひとつである「クラス」の宣言も可能とする。

クラスを用いることにより，データのグループ化や階層化ができ，複雑なデータを効率的に定義することが可能である。以下に，COUPLYS で取扱い可能なデータ型を示す。

a) 基本データ型

COUPLYS で利用可能な基本的なデータ型を，表 2.2-1 に示す。

基本データ型は，変数名の末尾に「[ ]」を，加えることにより，配列を宣言することができる。（「[ ]」を複数宣言することにより，多次元配列の宣言も可能）。なお，配列の添え字は，「0」から開始する。

表 2.2-1　COUPLYS の基本データ型

データ型	内容	サイズ	例
int	符号付き整数 C/C++の「int」に相当 FORTRAN の「INTEGER」に相当	4 バイト	int val
float	単精度浮動小数点 C/C++の「float」に相当 FORTRAN の「REAL」に相当	4 バイト	float val
double	倍精度浮動小数点 C/C++の「double」に相当 FORTRAN の「REAL*8」に相当	8 バイト	double val
double2	2 倍精度浮動小数点 C/C++の「long double」に相当 FORTRAN の「REAL*16」に相当	16 バイト	double2 val
string	文字列 C/C++の「char」の配列に相当 FORTRAN の「character*」に相当	1 バイト×文字数	string*10 val (10 文字の文字列)
binary	バイナリデータ C/C++の「char」に相当	1 バイト	binary val

b) クラス宣言

クラス宣言は，以下に示すように，識別子「class」および複数の基本データ型の変数（属性）により定義される。

```
class クラス名 extends 親クラス名(
   基本データ型 変数名
   基本データ型 変数名
)
                    「extends 親クラス名」は省略可
例)
class ClassName (
    int id
    double val
)
```

クラスのインスタンス（実体の変数）は,

```
ClassName2 data
```

と宣言する。

クラスの階層構造（extends 親クラス名）を宣言した場合には，図 2.2-2 に示すように，親クラスの属性を継承する。

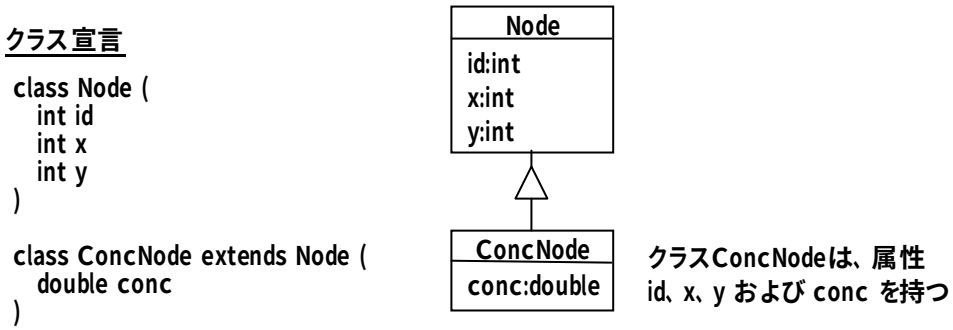


図 2.2-2 クラスの階層構造宣言

c) クラス/変数定義

クラスおよび変数の定義は，データファイルに宣言する。COUPLYS コントローラは，図 2.2-3 に示すように，起動時にデータファイルに従い，共有メモリの作成（アロケーション）や変数の配置を行う。また，解析プロセスも同様に，起動時にインタフェース（API）を介してデータファイルを読み込み，共有メモリ内の変数の配置状態（アドレス）を取得してから，共有メモリにアクセスする。これにより，複数のプロセス間で整合性を持ったデータアクセスが可能になる。

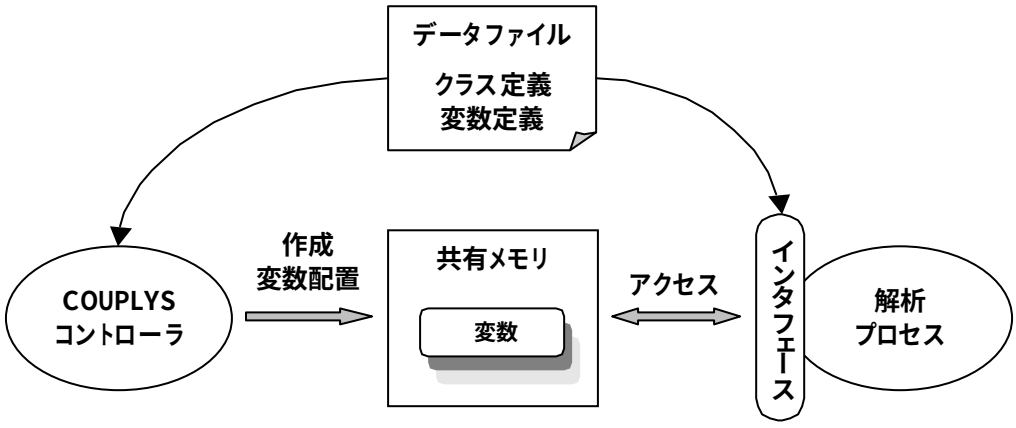


図 2.2-3 COUPLYS データファイル

2.2.3 高速データアクセス

熱－水－応力－化学連成解析は，THAMES，Dtransu，phreeqe60 ならびに単位変換等を行う複数のサポートコードを用いて行われ，各コード間では，タイムステップ毎や節点毎に，様々なデータのやり取りが行われる。このため，各コードから利用される COUPLYS インタフェースでは，共有メモリへの高速なデータアクセスを実現する必要がある。一方，前述したように，解析コードと COUPLYS の統合を容易に行うためには，解析コードからは，共有メモリの存在を意識することなく変数名を用いて共有メモリ内のデータへアクセスできる必要がある。このためには，図 2.2-4 に示すように，変数名をキーとして，共有メモリの所定の位置に高速にアクセスできるメカニズムが必要になる。

昨年度は，上記を踏まえ，変数名と共有メモリ中のアドレスの関係を記述した参照テーブルとハッシュテーブルを用いて共有メモリへアクセスする方法を実現した。本年度は，多量な変数の扱いを可能とするように，このハッシュテーブルを改良することにより，高速に共有メモリにアクセスできる手法を検討した。

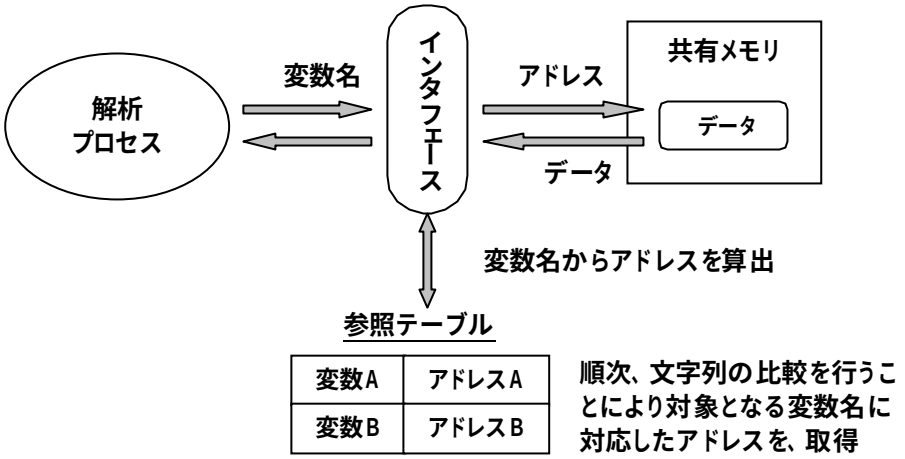


図 2.2-4 変数名を用いた共有メモリのアクセス

昨年度は，図 2.2-5 に示すように変数名の１文字目をハッシュキーとしたハッシュテーブルを採用していたため，衝突（ひとつのハッシュキーに複数の変数‐アドレスの関

係が割り振られる状況）が頻繁に生じていた。このため，変数が増えると，変数名－アドレス変換のパフォーマンスが悪化した。本年度は，変数の増加によるパフォーマンスの悪化を軽減するため，ハッシュ関数を見直し，より衝突が小さくなる，すなわち，変数名の探索空間を小さくし，変数名‐アドレス変換を高速に行う方法を開発した。

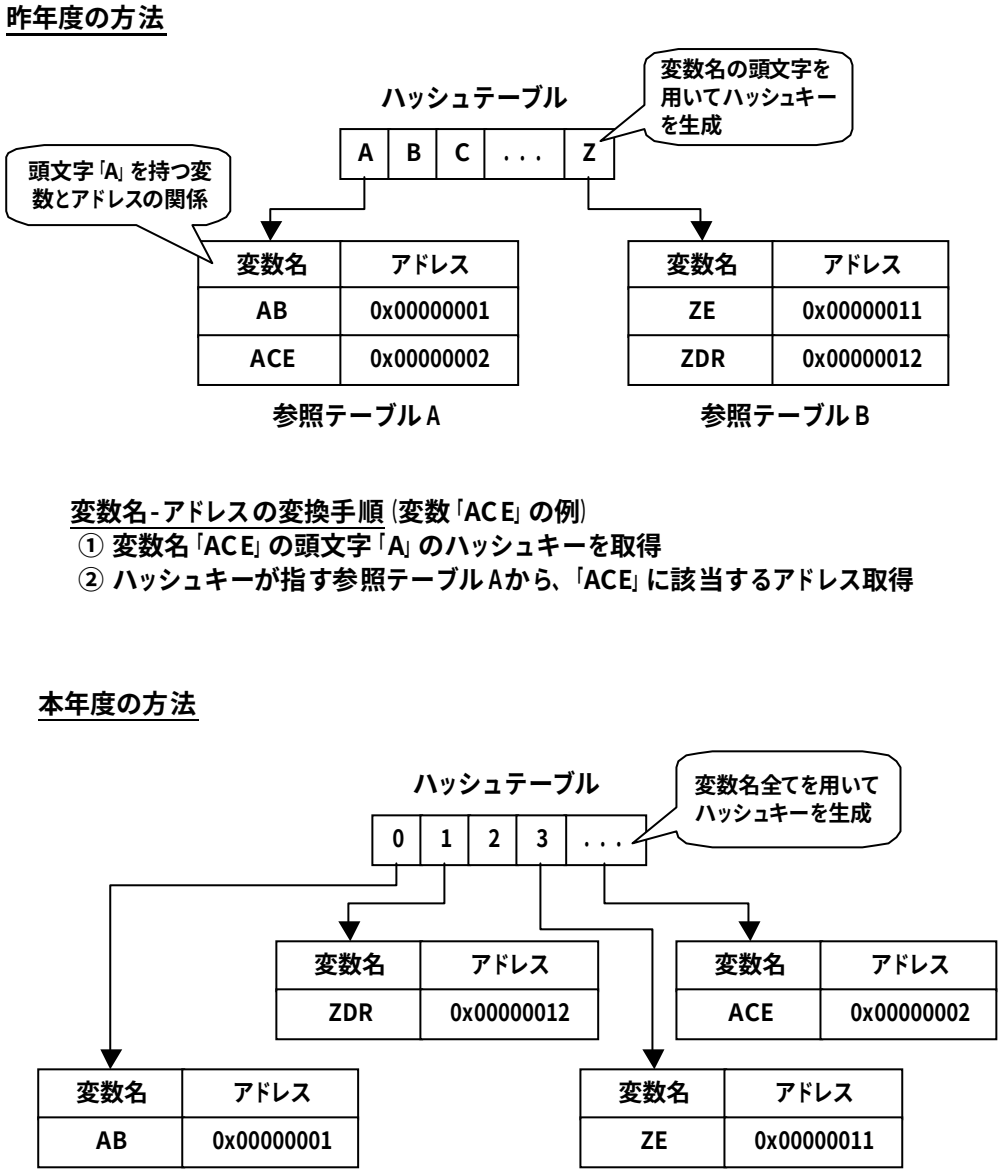


図 2.2-5 ハッシュテーブルと参照テーブル

本年度のハッシュ関数は，変数名を用いて以下の方法で算出する。

$$h = \Sigma\ C_i\ \%\ S \qquad (1)$$

h：ハッシュキー

Ci：i 番目の文字コード

S：テーブルのサイズ（キーの値を分散させるために素数とする。）

%：modulo 演算子（除算の余り）

ここで，S の値を大きくするとハッシュテーブルのサイズ（ハッシュ－キーの個数）が増え衝突が少なくなる。このため，S は，変数の個数以上，かつ個数に最も近い素数とする。

本年度は，データの高速アクセスを実現するため上記のハッシュテーブルに加えて，さらに，図 2.2-6 に示したレジスターを用いた方法を採用する。本方法は，頻繁にアクセスする変数名とアドレスの関係（参照テーブル）を，レジスターと呼ばれる領域に格納しておき，ハッシュテーブルを用いる前に，最初に，レジスターに登録された参照テーブルから変数名を検索する。これにより，例えば，繰返し処理中に同一の変数にアクセスする場合では，ハッシュキーの計算が不要になり，高速に共有メモリにアクセスすることができる。

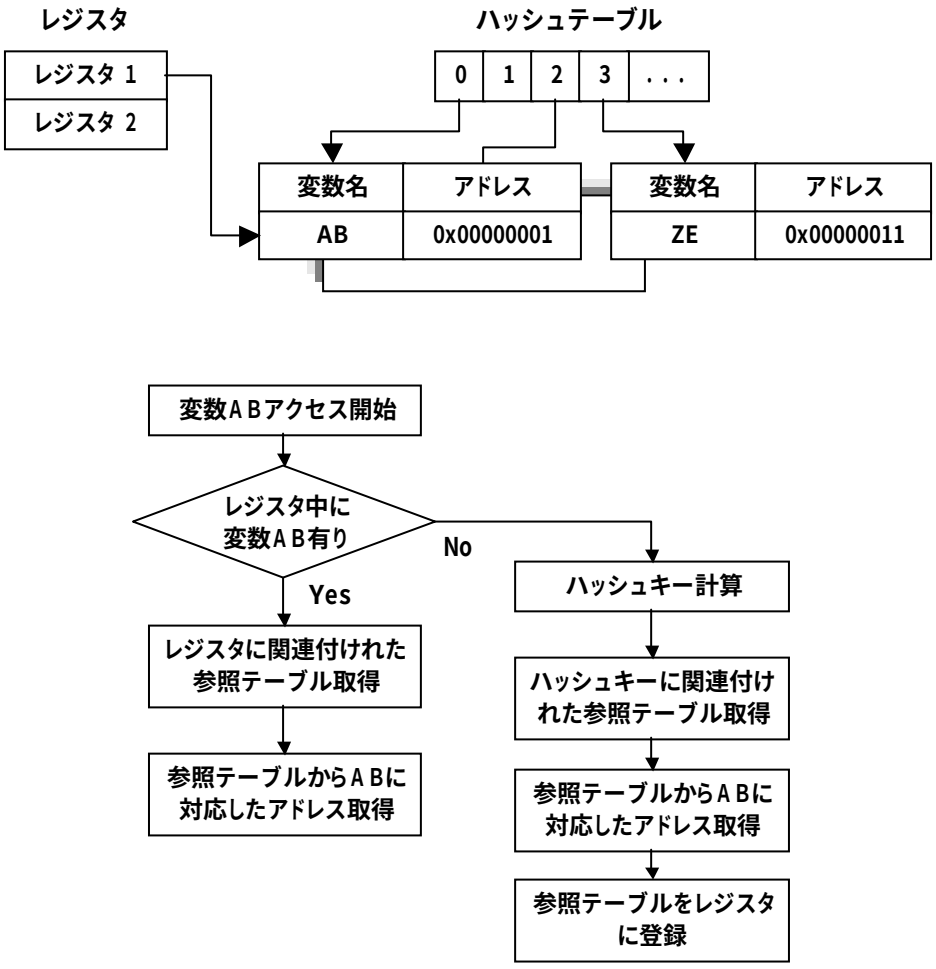


図 2.2-6 レジスタと参照テーブル

2.2.4 アプリケーションインタフェース

アプリケーションインタフェースは, 解析プロセスから共有メモリにアクセスするためのライブラリを提供する。本インタフェースは，以下の機能を備え，FORTRAN 言語または C/C++言語を用いて作成された解析コードから利用することができる。

① データ書込み機能

本機能は，前述したように変数名をキーとして，ハッシュテーブルを用いて共有メモリにアクセスし，解析プロセスのローカルメモリ中の値を，共有メモリの所定の場所にコピーする。なお，変数が配列データの場合には，高速アクセスのため配列データ全体の一括書込みを行うことが可能である。

② データ読込み機能

本機能は，データ書込み機能と同様に，変数名をキーとして値を取得し，解析プロセスのローカルメモリにコピーする。

2.3 プロセス管理手法

ここでは，個別現象解析コード，連成物性･支援モジュール（追加機能，連成のための関係式）のプロセスを制御するためのプログラムを作成する。本プログラムは，プロセスの実行順序や終了条件を記述したテキスト形式の入力ファイルデータに基づき，プロセスの起動，停止（スリープ）／再開，終了を行う。なお，本プログラムの開発に際しては，以下の要件を考慮する。

- 解析プロセス（プログラム）の起動，終了に加えて，プロセスの一時停止／再開を，高速に行えるものとする。
- 解析コードの計算速度に影響を与えないため，解析プロセスの一時停止中は，そのプロセスが CPU に負荷をかけないものとする。

2.3.1 概要

熱－水－応力－化学連成解析コードの汎用性や保守性，拡張性を確保するためには，連成プロセスを一つの大規模解析コードとして開発するのではなく，個々のプロセスを，個別の解析コードとして開発し，これら解析コードを部品として組み上げることにより連成解析コードを構築していくアプローチが有効である。このためには，解析コードの開発に加えて，複数の解析コードの実行制御，すなわち，連成解析のシーケンスに応じて解析コードの起動，停止/再開，終了を行うメカニズムが必要になる。

連成管理プログラムでは，このような解析コードの実行制御に，セマフォ（semaphore）を用いる。セマフォとは，UNIX 計算機に標準で実装されており，複数のプロセスの間の同期や，あるプロセス中の複数のスレッドの間の同期のために用いられる汎用的な機能である。

図 2.3-1 に，セマフォの最も簡単な例として，2 値セマフォについて示す。2 値セマフォとは，OS が管理している共有フラッグであり，２つのプロセスが，このフラッグを参照することにより，プロセスの実行・停止が交互に行われる。なお，セマフォの特徴として，セマフォが特定の値になるまでの待機しているプロセスは，CPU に負荷をかけることがなく，他のプロセスの計算処理に影響を与えることがない。

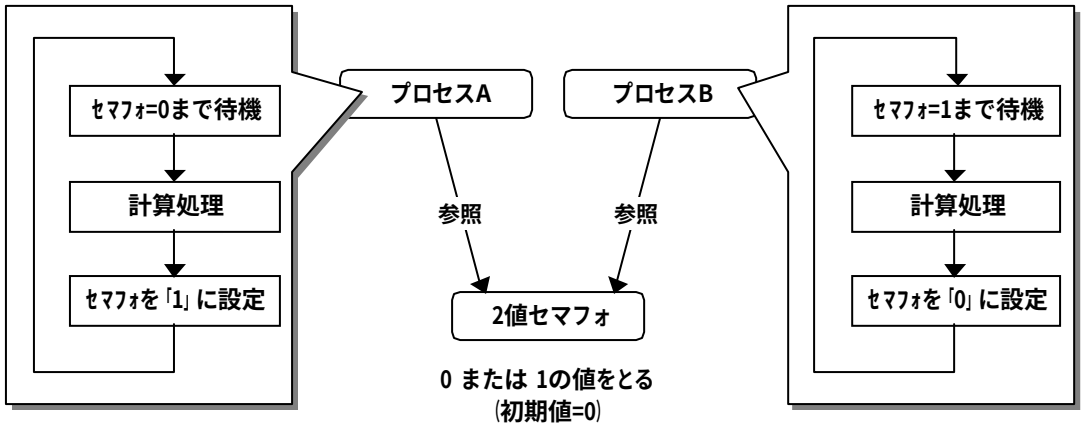


図 2.3-1 セマフォの例

連成管理プログラムでは，複数の解析プロセスの柔軟な制御を行うため，2 値セマフォより拡張性のある可算セマフォ集合を用いる。可算セマフォ集合では，値が 0 からある上限値（一般には, 32767）の間をとることができるセマフォを複数扱うことができ，これを利用することにより，3 つ以上のプロセスの同期制御を行うことができる。次項に, COUPLYS における可算セマフォ集合を用いたプロセス制御の方法について詳しく述べる。

2.3.2 プロセス制御

熱－水－応力－化学連成解析では, Dtransu や phreeqe60 等の複数の解析コードを, 適切なシーケンスで実行する必要がある。このためには, 解析コードの単なる起動・終了に加えて, 図 2.3-2 に示すように, 一つの解析コード（以下, メイン解析コード）を, 段階的に他の解析コード（以下, サブ解析コード）と連携して実行できる機能が必要になる。さらに, メイン解析コードの停止中は, サブ解析コードの実行速度に悪影響を与えないため, CPU リソースを消費しないことが必要となる。

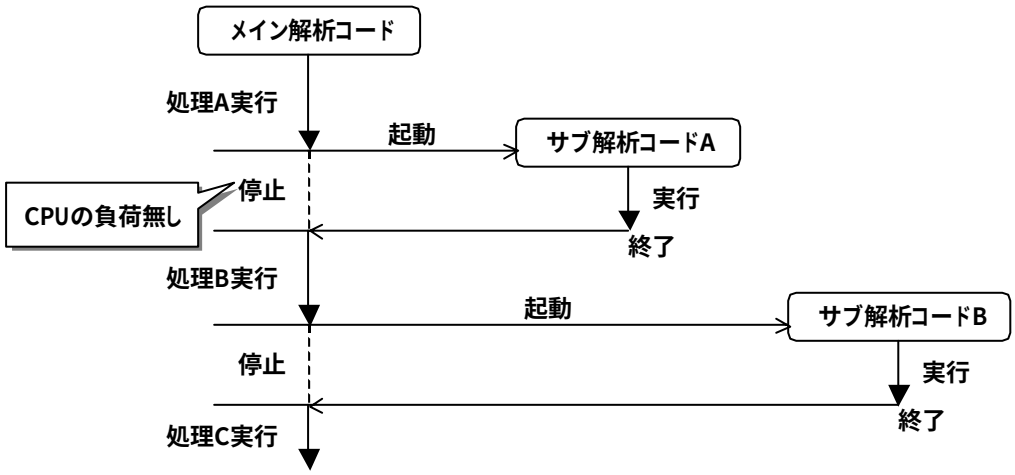


図 2.3-2 解析コードの連携パターン

上記要件を満たすため, COUPLSY では, 可算セマフォを用いて解析コード（プロセス）の実行制御を行う。可算セマフォとは, 表 2.3-1 に示すように, セマフォ値の操作に応じて, 操作を要求したプロセスが停止等の動作を行う。例えば, あるプロセスが, 「操作値＝－１」で, セマフォを操作した場合には, そのプロセスは, セマフォ値が, 「１」以上になるまで停止することになる。そして, セマフォ値が「１」以上になった場合には停止中のプロセスが実行され, さらに, セマフォ値が,「１」減じられることになる。

表 2.3-1 可算セマフォの動作

操作値（op）	動作	設定後のセマフォ値（val）
op ＞ 0	セマフォ値の増加	設定値が, セマフォ値に加算される。 val = val + op
op ＝ 0	セマフォ値が「0」になるまでプロセスが停止する。（スリープ状態になる。）	変化なし
op ＜ 0	セマフォ値が設定値の絶対値以上になるまでプロセスが停止する。	スリープ状態解除後, セマフォ値が設定値の絶対値, 減算される。 val = val －|op|

注）操作値：あるプロセスが，セマフォに対して操作する値

COUPLYS におけるプロセスの実行制御は，この可算セマフォを，制御する解析コードの個数分用意した可算セマフォ集合を作成し，このセマフォ集合に基づいて，コントローラが，各プロセスの停止／再開制御を行う。図 2.3-3 に，図 2.3-2 に示した解析コードの連携を行う場合のプロセス制御方法について示す。

図 2.3-3 に示したプロセスの制御は，以下の手順で行われる。

① 実行シーケンスに基づき，解析コードにトリガが設定される。
② コントローラが，解析コードを起動する。
③ 解析コードは，セマフォ値が「２」になるまで待機（停止）する。
④ コントローラが，セマフォ値を「２」に設定する。これにより，解析コードの演算処理が開始される。なお，コントローラは，セマフォ設定後，セマフォ値が,「３」になるまで待機する。
⑤ 解析コードは，演算処理を行う。
⑥ 解析コードは, 演算処理終了後, セマフォ値を「３」に設定し, セマフォ値が,「０」になるまで待機する。
⑦ コントローラの処理が開始され，セマフォ値を「０」に設定した後，セマフォ値が,「１」になるまで待機する。
⑧ 解析コードの処理が開始され，セマフォ値を「１」に設定した後，セマフォ値が,「２」になるまで待機する。（該当解析コードに再度トリガーが設定されるまで，停止状態になる。）

⑨　コントローラは，他の解析コードを実行する。

⑩　他のプロセス終了後，セマフォ値を，「２」に設定する。

⑪　解析コードが，再度実行される。

⑫　③から⑧の処理が行われる。

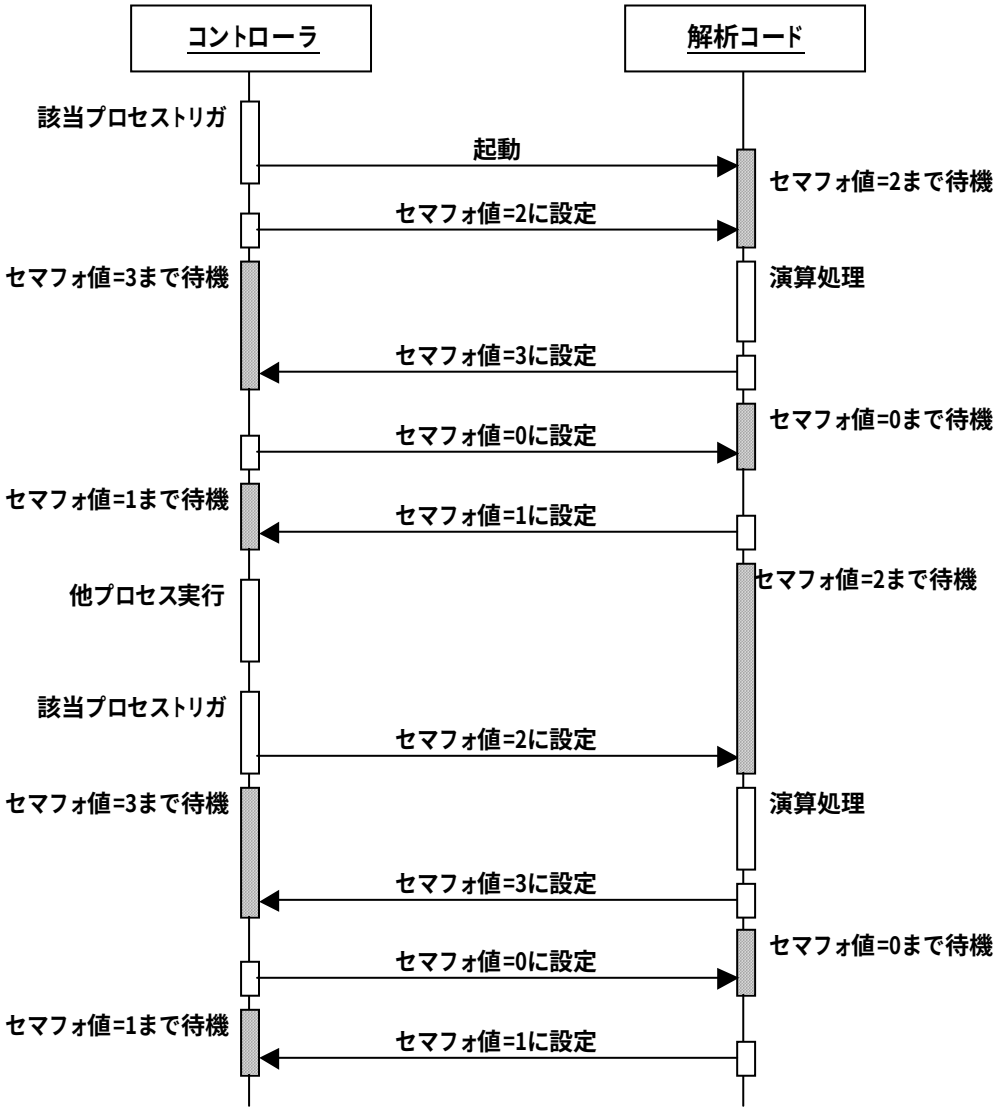


図 2.3-3 プロセス制御シーケンス

COUPLSY では，図 2.3-3 に示した制御方法を用いて，一つの解析コードが，停止／再開を繰返しながら，他の解析コードとの連携を行うプロセスを，「常駐プロセス」と呼ぶ。熱－水－応力－化学連成解析では，THAMES が，この常駐プロセスに相当し，停止／再開を繰返しながら，phreeqe60 等との連携を行う。

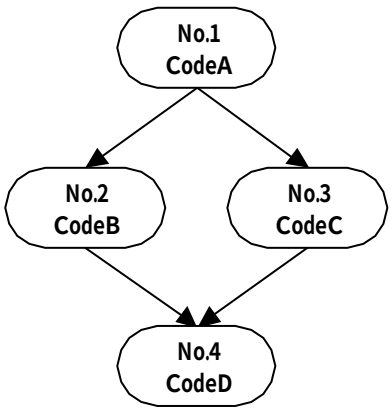
2.3.3 実行シーケンスの定義

解析コードの実行や停止の順序，すなわち，実行シーケンスはコントロールファイルに記述される。このコントロールファイルは，解析コード等の外部のプロセスを表わすPROCESS データブロックと外部プロセスの実行シーケンスを表わす SEQUENCE データブロックから構成される。表 2.3-1 に各データブロックに指定されるデータ項目を示す。

表 2.3-1 実行シーケンス定義データ

ブロック	項目	内容
PROCESS	識別番号	プロセスをユニークに決定するための識別番号
	プロセス名称	プロセスの名称
	タイプ	外部プログラムのタイプ １－通常プロセス ２－常駐プロセス（注）
	実行プログラム	実行プログラムのパス
SEQUENCE	識別番号	ノードをユニークに決定するための識別番号
	ノード名称	ノードの名称
	プロセス番号	ノードに関係付けるプロセスの番号
	下位ノード （複数設定可）	該当ノードの下位に位置するノードの識別番号 （該当ノード終了時に起動されるノードの識別番号）

図 2.3-4 に４種類の解析コードを順次，実行する場合の実行シーケンスを示す。



実行順序
① CodeA実行
② CodeA終了後、CodeB、CodeC実行
③ CodeB、CodeC実行後、CodeD実行

実行シーケンスの定義

```
<process>
1 CodeA 1 ./code_a
2 CodeB 1 ./code_b
3 CodeC 1 ./code_c
4 CodeD 1 ./code_d
</process>
<sequence>
1 No.1 1 2 3
2 No.2 2 4
3 No.3 3 4
4 No.4 4
</sequence>
```

図 2.3-4 実行シーケンスの例

SEQUENCE データブロックには，プロセスの繰り返し処理（ループ処理）を行うため，LOOP データブロックを設定することができる。この LOOP ブロックは，以下のように記述される。

```
<loop rule=”ルール”>
  ノードデータ
</loop>
```

ここで，ルール部には，以下に示すように共有メモリ内の変数名，等号/不等号演算子および定数を用いて判定文を設定することにより，ループの終了条件を定義する。

変数名 or 定数 演算子　変数名 or 定数

演算子：　=, !=, >, >=, <, <=

例えば，共有メモリ内に，時間を表わす変数「time」を宣言し，時間が，「1000」以上になった場合に，ループ処理を終了する場合には，以下のように LOOP データブロックを指定する。

```
<loop rule= “time < 1000”>
ノードデータ
</loop>
```

2.4 連成管理プログラムの構築

昨年度に提案した短期改善型のメモリ管理プログラムと前記「2.3 プロセス管理手法の開発」で開発したプログラムを統合することにより，プロセス制御と併せてプロセス間でのデータの授受を行える連成管理プログラムを構築した。さらに，連成管理プログラムを作成した後，ダミー簡易解析コード（数行のプログラム）を用いた簡易動作確認および HYDROGEOCHEM－phreeqe60 を対象とした動作確認を行った。

2.4.1 連成管理プログラム単体

連成管理プログラムは，共有メモリの管理やプロセスの実行制御を行うコントローラ，解析コードの実行状況や共有メモリ内のデータの確認を行う SPY ツールおよび解析コードから共有メモリにアクセスするためのインタフェースを提供するライブラリから構成される。

（1）コントローラ

コントローラは，COUPLYS の中心となるプログラムであり，共有メモリの管理やセマフォを用いたプロセスの実行制御を行う。本プログラムは，C++言語を用いて開発されており，UNIX をベースとした計算機上で利用することができる。

コントローラの起動は，コマンドラインにて「Couplys」とタイプすることにより行う。なお，起動の際には，表 2.4-1 に示すオプションを付加することができる。

コントローラ起動後は，ユーザが定義した実行シーケンスに従い，各解析コードがデータ授受を伴って自動的に実行される。なお，コントローラ実行中は，表 2.4-2 に示すコマンドを入力することにより，共有メモリ内のデータやプロセスの実行状況を確認することができる。

表 2.4-1 COUPLYS コントローラの起動オプション

オプション	内容
-cntl ｺﾝﾄﾛｰﾙﾌｧｲﾙ名	実行シーケンスが定義されたコントロールファイル名を指定する。本オプションが省略された場合は，カレントディレクトリにある「control.dat」ファイルが自動的に使用される。
-data ﾃﾞｰﾀﾌｧｲﾙ名	データファイル名を指定する。本オプションが省略された場合は，カレントディレクトリにある「data.dat」ファイルが自動的に使用される。
-log ﾛｸﾞﾌｧｲﾙ名	ログファイル名を指定する。本ファイルには，プロセスの実行順が格納される。
-debug	プロセスの起動状況等を表示するデバッグモードで，コントローラーを起動する。

表 2.4-2　COUPLYS コントローラのコマンド

コマンド	内容
g	コマンド入力後，変数名を入力することにより，共有メモリ内の変数を表示する。
h	ヘルプを表示する。
r	共有メモリおよびプロセスの実行状況（セマフォ）の状態を表示する。
p	プロセスの状態を表示する。
q	コントローラを終了する。
s	コマンド入力後，変数名および値を入力することにより，共有メモリ内の変数を設定する。
v	変数の宣言を表示する。

（2）SPY ツール

SPY ツールは，C++言語を用いて開発されており，COUPLYS の実行状況の確認やデバッグを目的として，共有メモリ内の変数やプロセス状態を表示する。SPY ツールの使用方法は，コントローラ実行中に，コマンドラインにて，「Spy」とタイプし，その後，表 2.4-3 に示すコマンドを入力する。

表 2.4-3 SPY のコマンド

コマンド	内容
g	コマンド入力後，変数名を入力することにより，共有メモリ内の変数を表示する。
h	ヘルプを表示する。
r	共有メモリおよびプロセスの実行状況（セマフォ）の状態を表示する。
p	プロセスの状態を表示する。
q	コントローラを終了する。
s	コマンド入力後，変数名および値を入力することにより，共有メモリ内の変数を設定する。
v	変数の宣言を表示する。

（3）COUPLYS ライブラリ

COUPLYS ライブラリは,共有メモリ内のデータのアクセスやプロセス制御を行うための機能を，解析コード等の他のプログラムに提供する。本ライブラリは，C/C++言語または FORTRAN 言語を用いて作成されたプログラムから利用することができる。本ライブラリを使用する場合には，libCouplys.a ファイルをリンクする。また，C/C++言語から利用する場合には,「couplys.h」ファイルをインクルードする。以下に本ライブラリが提供する関数を示す。

（a）初期化／終了処理

COUPLSY ライブラリを使用する解析コードは，プログラムの始端および終端にそれぞれ以下に示す初期化関数と終了処理関数を記述する。

表 2.4-4 初期化関数

関数名	**CS_initialize()　(C/C++プログラム用)** **CsInitialize()　(FORTRAN プログラム用)**
内容	**解析コードと COUPLYS 連携のための初期化処理を行う。** **本関数は，プログラムの起動時にコールする。** **なお，コントロールファイルおよびデータファイルは，それぞれ，プログラム起動時のカレントディレクトリ内の「control.dat」および「data.dat」が用いられる。**

表 2.4-5 初期化関数（コントロール/データファイル指定）

関数名	CS_initializeEx(const char* cntl, const char* data)　(C/C++プログラム用) CsInitializeEx(const char* cntl, const char* data)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	cntl	コントロールファイル名
	data	データファイル名
内容	引数として与えられたファイルを用いて，解析コードと COUPLYS 連携のための初期化処理を行う。 本関数は，プログラムの起動時にコールする。	

表 2.4-6 終了処理関数

関数名	CS_shutdown()　(C/C++プログラム用) CsShutdown()　(FORTRAN プログラム用)
内容	
内容	解析コードと COUPLYS 連携を解除するため，終了処理を行う。 本関数は，プログラム終了時にコールする。

（b）値の取得

共有メモリ内のデータの取得（読込み）は，初期化関数を呼び出した後，以下の関数を用いて行う。

表 2.4-7 値取得関数

関数名	CS_get (void* val, const char* nm)　(C/C++プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数へのポインタ
	nm	変数名
内容	共有メモリ内の変数の値を取得し，「val」に格納する。なお，val の型は，共有メモリ内の変数の型と一致する必要がある。	

表 2.4-8 整数データ取得関数

関数名	CsGetInt(int* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
内容	共有メモリ内の整数型 (int) の変数の値を取得し，「val」に格納する。 例) 変数「temp」を取得する。 integer temp call CsGetInt(temp, 'temp')	

表 2.4-9 単精度浮動小数点データ取得関数

関数名	CsGetFloat(float* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
処理	共有メモリ内の単精度浮動小数点型 (float) の変数の値を取得し，「val」に格納する。	

表 2.4-10 倍精度浮動小数点データ取得関数

関数名	CsGetDouble(double* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
内容	倍精度浮動小数点値(double)の取得	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
内容	共有メモリ内の倍精度浮動小数点型 (double) の変数の値を取得し，「val」に格納する。	

表 2.4-11 4 倍精度浮動小数点データ取得関数

関数名	CsGetDouble2(long double* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
内容	共有メモリ内の 4 倍精度浮動小数点型 (double2) の変数の値を取得し，「val」に格納する。	

表 2.4-12 文字列データ取得関数

関数名	CsGetString(char* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
内容	共有メモリ内の文字列型 (string) の変数の値を取得し，「val」に格納する。	

表 2.4-13 バイナリデータ取得関数

関数名	CsGetBinary(char* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
内容	共有メモリ内のバイナリ型 (binary) の変数の値を取得し，「val」に格納する。	

表 2.4-14 配列データ一括取得関数

関数名	CS_getD (void* val, const char* nm, int num)　(C/C++プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数へのポインタ
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	共有メモリ内の配列変数の全ての値（配列の全要素）を取得し，「val」に格納する。なお，val の型は，共有メモリ内の変数の型と一致する必要がある。また，val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-15 整数配列データ一括取得関数

関数名	CsGetIntD(int* val, const char* nm, int* num)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	共有メモリ内の整数型（int）の配列変数の全ての値（配列の全要素）を取得し，「val」に格納する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。 例）変数「conc[10]」を取得する。 integer conc(10) call CsGetIntD(conc, ‘conc’, 10)	

表 2.4-16 単精度浮動小数点配列データ一括取得関数

関数名	CsGetFloatD(float* val, const char* nm, int* num)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	共有メモリ内の単精度浮動小数点型（float）の配列変数の全ての値（配列の全要素）を取得し，「val」に格納する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-17 倍精度浮動小数点配列データ一括取得関数

関数名	CsGetDoubleD(double* val, const char* nm, int* num)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	共有メモリ内の倍精度浮動小数点（double）の配列変数の全ての値（配列の全要素）を取得し，「val」に格納する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-18 4 倍精度浮動小数点配列データ一括取得関数

関数名	CsGetDouble2D(long double* val, const char* nm, int* num) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	共有メモリ内の 4 倍精度浮動小数点型 (double2) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) を取得し，「val」に格納する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-19 配列文字列データ一括取得関数

関数名	CsGetStringD(char* val, const char* nm, int* num) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	共有メモリ内の文字列型 (string) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) を取得し，「val」に格納する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-20 バイナリ配列データ一括取得関数

関数名	CsGetBinaryD(char* val, const char* nm, int* num) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
処理	共有メモリ内のバイナリ型 (binary) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) を取得し，「val」に格納する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-21 配列データ取得関数

関数名	CS_getEx (void* val, const char* nm, . . .) (C/C++プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数へのポインタ
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数，[%]の個数分指定必要)
内容	共有メモリ内の配列変数の値を取得し，「val」に格納する。なお，val の型は，共有メモリ内の変数の型と一致する必要がある。	

表 2.4-22 整数配列データ取得関数

関数名	CsGetIntEx(int* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	num	配列要素数
内容	共有メモリ内の整数型 (int) の配列変数の値を取得し,「val」に格納する。 例) 変数「conc[10][3]」を取得する。 integer conc call CsGetIntEx(conc, 'conc[%][%]', 1, 3)	

表 2.4-23 単精度浮動小数点配列データ取得関数

関数名	CsGetFloatEx(float* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	共有メモリ内の単精度浮動小数点型 (float) の配列変数の値を取得し,「val」に格納する。	

表 2.4-24 倍精度浮動小数点配列データ取得関数

関数名	CsGetDoubleEx(double* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	共有メモリ内の倍精度浮動小数点型(double) の配列変数の値を取得し,「val」に格納する。	

表 2.4-25 4 倍精度浮動小数点配列データ取得関数

関数名	CsGetDouble2Ex(long double* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	共有メモリ内の 4 倍精度浮動小数点型 (double2) の配列変数の値を取得し,「val」に格納する。	

表 2.4-26 配列文字列データ取得関数

関数名	CsGetStringEx(char* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	共有メモリ内の文字列型 (string) の配列変数の値を取得し,「val」に格納する。	

表 2.4-27 バイナリ配列データ取得関数

関数名	CsGetBinaryEx(char* val, const char* nm, . . .) （FORTRAN プログラム用）	
引数	val	取得される値を格納する変数
	nm	変数名 （変数名[%]の形式で指定 例：conc[%][%]）
	. . .	配列の添え字 （可変引数，[%]の個数分指定必要）
内容	共有メモリ内の配列変数のバイナリ型（binary）の値を取得し，「val」に格納する。	

（c）値の設定

共有メモリへのデータの設定（書込み）は，初期化関数を呼び出した後，以下の関数を用いて行う。

表 2.4-28 値設定関数

関数名	CS_set (void* val, const char* nm)　(C/C++プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数へのポインタ
	nm	変数名
内容	「val」に格納された値を共有メモリ内の変数に設定する。なお，val の型は，共有メモリ内の変数の型と一致する必要がある。	

表 2.4-29 整数データ設定関数

関数名	CsSetInt(int* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
内容	「val」に格納された値を共有メモリ内の整数型 (int) の変数に設定する。 例) 変数「temp」を設定する。 integer temp = 20 call CsSetInt(temp, 'temp')	

表 2.4-30 単精度浮動小数点データ設定関数

関数名	CsSetFloat(float* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
内容	「val」に格納された値を共有メモリ内の単精度浮動小数点型 (float) の変数に設定する。	

表 2.4-31 倍精度浮動小数点データ設定関数

関数名	CsSetDouble(double* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
内容	「val」に格納された値を共有メモリ内の倍精度浮動小数点型 (double) の変数に設定する。	

表 2.4-32 4 倍精度浮動小数点データ設定関数

関数名	CsSetDouble2(long double* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
内容	「val」に格納された値を共有メモリ内の 4 倍精度浮動小数点型 (double2) の変数に設定する。	

表 2.4-33 文字列データ設定関数

関数名	CsSetString(char* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
内容	「val」に格納された値を共有メモリ内の文字列型 (string) の変数に設定する。	

表 2.4-34 バイナリデータ設定関数

関数名	CsSetBinary(char* val, const char* nm)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
内容	「val」に格納された値を共有メモリ内のバイナリ型 (binary) の変数に設定する。	

表 2.4-35 配列データ一括設定関数

関数名	CS_setD (void* val, const char* nm, int num)　(C/C++プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数へのポインタ
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	「val」に格納された値を，共有メモリ内の配列変数の全ての値 (配列の全要素) に設定する。なお，val の型は，共有メモリ内の変数の型と一致する必要がある。また，val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-36 整数配列データ一括設定関数

関数名	CsSetIntD(int* val, const char* nm, int* num)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	「val」に格納された値を，共有メモリ内の整数型 (int) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) に設定する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。 例) 変数「conc[10]」を設定する。 integer conc(10) call CsSetIntD(conc, ‘conc’, 10)	

表 2.4-37 単精度浮動小数点配列データ一括設定関数

関数名	CsSetFloatD(float* val, const char* nm, int* num)　(FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	「val」に格納された値を，共有メモリ内の単精度浮動小数点型 (float) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) に設定する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-38 倍精度浮動小数点配列データ一括設定関数

関数名	CsSetDoubleD(double* val, const char* nm, int* num) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	共「val」に格納された値を，共有メモリ内の倍精度浮動小数点 (double) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) に設定する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-39 4 倍精度浮動小数点配列データ一括設定関数

関数名	CsSetDouble2D(long double* val, const char* nm, int* num) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	「val」に格納された値を，共有メモリ内の 4 倍精度浮動小数点型 (double2) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) に設定する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-40 配列文字列データ一括設定関数

関数名	CsSetStringD(char* val, const char* nm, int* num) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	「val」に格納された値を，共有メモリ内の文字列型 (string) 配列変数の全ての値 (配列の全要素) に設定する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-41 バイナリ配列データ一括設定関数

関数名	CsSetBinaryD(char* val, const char* nm, int* num) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名
	num	配列要素数
内容	「val」に格納された値を，共有メモリ内のバイナリ型 (binary) の配列変数の全ての値 (配列の全要素) に設定する。val の配列数は，共有メモリ内の変数の配列と整合を取る必要がある。	

表 2.4-42 配列データ設定関数

関数名	CS_setEx (void* val, const char* nm, . . .) (C/C++プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数へのポインタ
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	「val」に格納された値を, 共有メモリ内の配列変数に設定する。なお, val の型は, 共有メモリ内の変数の型と一致する必要がある。	

表 2.4-43 整数配列データ設定関数

関数名	CsSetIntEx(int* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	num	配列要素数
内容	「val」に格納された値を, 共有メモリ内の整数型 (int) の配列変数に設定する。 例) 変数「conc[10][3]」を設定する。 integer conc call CsSetIntEx(conc, 'conc[%][%]', 1, 3)	

表 2.4-44 単精度浮動小数点配列データ設定関数

関数名	CsSetFloatEx(float* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	「val」に格納された値を, 共有メモリ内の単精度浮動小数点型 (float) の配列変数に設定する。	

表 2.4-45 倍精度浮動小数点配列データ設定関数

関数名	CsSetDoubleEx(double* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	「val」に格納された値を, 共有メモリ内の倍精度浮動小数点型(double)の配列変数に設定する。	

表 2.4-46 4 倍精度浮動小数点配列データ設定関数

関数名	CsSetDouble2Ex(long double* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	「val」に格納された値を, 共有メモリ内の 4 倍精度浮動小数点型 (double2) の配列変数に設定する。	

表 2.4-47 配列文字列データ設定関数

関数名	CsSetStringEx(char* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	「val」に格納された値を, 共有メモリ内の文字列型 (string) の配列変数に設定する。	

表 2.4-48 バイナリ配列データ設定関数

関数名	CsSetBinaryEx(char* val, const char* nm, . . .) (FORTRAN プログラム用)	
引数	val	設定される値を格納した変数
	nm	変数名 (変数名[%]の形式で指定 例: conc[%][%])
	. . .	配列の添え字 (可変引数, [%]の個数分指定必要)
内容	「val」に格納された値を, 共有メモリ内のバイナリ型 (binary) の配列変数に設定する。	

（d）実行制御

図 2.3-2 に示したように，一つの解析コード（メイン解析コード）が，他の解析コードと段階的に連携を行う場合には，初期化関数を呼び出した後，以下の関数を呼出し，メイン解析コードの一時停止およびコントローラへのメイン解析コードの処理終了を通知する。

表 2.4-49 プロセス停止関数

関数名	**CS_waitActivation()　(C/C++プログラム用)** **CsWaitActivation()　(FORTRAN プログラム用)**
内容	**常駐プロセスを対象として，COUPLYS から該当プロセスに実行開始のトリガが設定されるまで，実行を一時停止する。** **本関数は，図 1.4-1 に示すように COUPLYS と連携する演算処理の先頭に，設定する。**

表 2.4-50 プロセス終了通知関数

関数名	**CS_doneExecution ()　(C/C++プログラム用)** **CsDoneExecution ()　(FORTRAN プログラム用)**
内容	**常駐プロセスを対象として，該当プロセスの処理が終了した事を，COUPLYS に通知する。** **本関数は，図 1.4-1 に示すように COUPLYS と連携する演算処理の終端に，設定する。**

```
. . .
call CsInitialize                COUPLYSの初期化
. . .
call CsWaitActivation()          制御待ち
演算処理
call CsDoneExecution()           終了通知
. . .
call CsShutdown                  COUPLYSの終了処理
. . .
```

図 2.4-1 実行制御プログラム

（4）ダミープログラムによる動作確認

ループ状の実行シーケンスおよび図 2.3-2 に示したような段階的な解析コード実行制御の確認を目的として，図 2.4-2 に示す実行シーケンスを用いて COUPLYS 単体の動作テストを行い，正常に動作することを確認した。

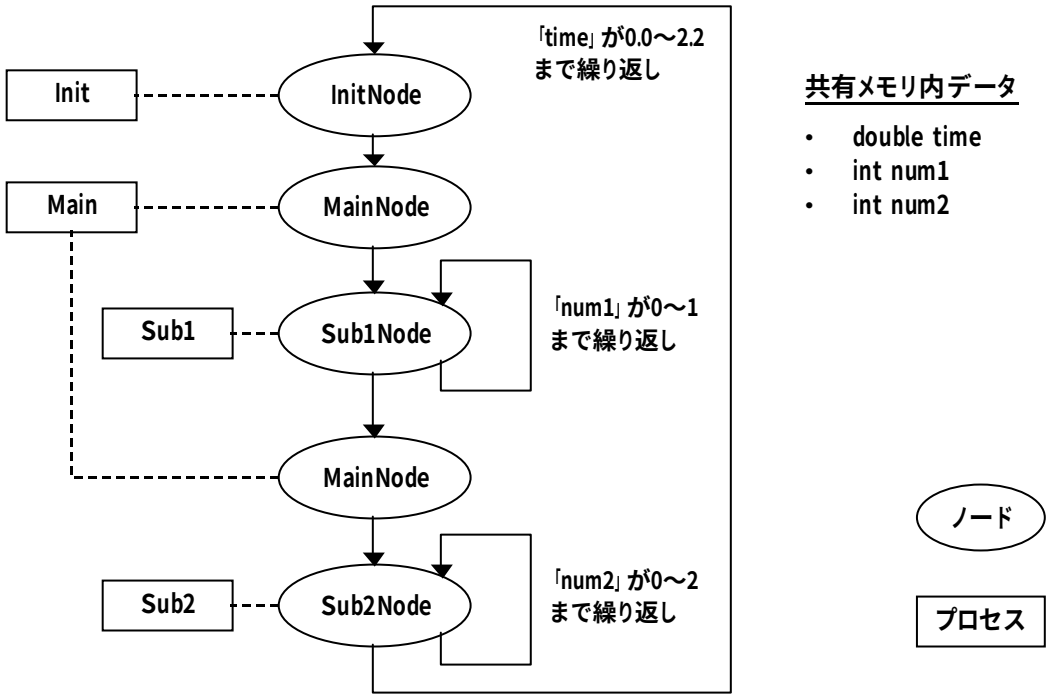


図 2.4-2 COUPYS 単体テスト用実行シーケンス

表 2.4-51 COUPYS 単体テスト用実行シーケンスのプロセス概要

プロセス名	プロセスタイプ	内容
Init	通常プロセス	共有メモリの初期化を行う。
Main	常駐プロセス	中心となる処理。2 段階に処理が分割され，それぞれが，「Sub1」，「Sub2」の実行前に処理が行われる。
Sub1	通常プロセス	補助的な処理。変数「num1」のインクリメントを行う。
Sub2	通常プロセス	補助的な処理。変数「num2」のインクリメントを行う。

図 2.4-2 に示した実行シーケンスの制御ファイルおよびデータファイルは,以下の通り。

制御ファイル control.dat

```
<process>
1 Main 2 ./main
2 Init 1 ./init
3 Sub1 1 ./sub1
4 Sub2 1 ./sub2
</process>
<sequence>
1 InitNode 2 2
<loop rule="time < 2.0">
      2 MainNode 1 3
      <loop rule="num1 < 2">
            3 Sub1Node 3 4
      </loop>
      4 MainNode 1 5
      <loop rule="num2 < 3">
            5 Sub1Node 4
      </loop>
</loop>
</sequence>
```

データ定義ファイル

```
double time
int num1
int num2
```

実行シーケンスの各ノードに関連付けられるプロセス（ダミーの解析コード）のプログラムを以下に示す。

Init プログラム

```
      real*8 time
      call CsInitialize()                 COUPLYS 初期処理
      time = 0
      call CsSetDouble(time, 'time¥0')    変数「time」の初期化
      call CsShutdown()                   COUPLYS 終了処理
      stop
      end
```

Main プログラム

```
      real*8 time
      integer num
```

```
      call CsInitialize()                    COUPLYS 初期処理
      do 100 i=1,2
C     最初の処理（Sub1 実行前に行う。）
      call CsWaitActivation()                実行制御待ち
      call CsGetDouble(time, 'time¥0')       変数「time」の取得
      time = time + 1.0
      call CsSetDouble(time, 'time¥0')       変数「time」の設定
      num = 0
      call CsSetInt(num, 'num1¥0')           変数「num1」の初期化
      call CsSetInt(num, 'num2¥0')           変数「num2」の初期化
      call CsDoneExecution()                 処理終了通知
C     2 番目の処理（Sub1 実行後に行う。）
      call CsWaitActivation()                実行制御待ち
      （演算処理 ）
      call CsDoneExecution()                 処理終了通知
  100 continue
      call CsShutdown()                      COUPLYS 終了処理
      stop
      end
```

Sub1 プログラム

```
      integer num
      call CsInitialize()                    COUPLYS 初期処理
      call CsGetInt(num, 'num1¥0')           変数「num1」の取得
      num = num + 1
      call CsSetInt(num, 'num1¥0')           変数「num1」の設定
      call CsShutdown()                      COUPLYS 終了処理
      stop
      end
```

Sub2 プログラム

```
      integer num
      call CsInitialize()                    COUPLYS 初期処理
      call CsGetInt(num, 'num2¥0')           変数「num2」の取得
      num = num + 1
      call CsSetInt(num, 'num2¥0')           変数「num2」の設定
      call CsShutdown()                      COUPLYS 終了処理
      stop
      end
```

2.4.2 個別現象解析コードの搭載

本項では，今年度作成した連成管理プログラムに，昨年度の研究において実施したTHAMES（結果ファイル）－Dtransu を搭載して基本的な動作確認を行った。

（1）連成仕様

本検討では，昨年度実施した THAMES（結果ファイル）－Dtransu と同一問題を対象とした。連成仕様は，図 2.4-3 に示すように THAMES の結果ファイルを共有メモリに格納し，格納された値を Dtransu の計算で読み取り，計算を実行するものである。

（2）解析条件

THAMES，Dtransu の解析条件は，昨年度実施した塩の蓄積に関するテストケースと同一の条件を採用した（表 2.5-3 参照)。

（3）動作確認結果

昨年度に得られた結果と COUPLYS を用いた結果を図 2.4-4 に示す。両者は，一致しており，本章で開発した連成管理プログラムの基本動作が正常であることが確認できた。

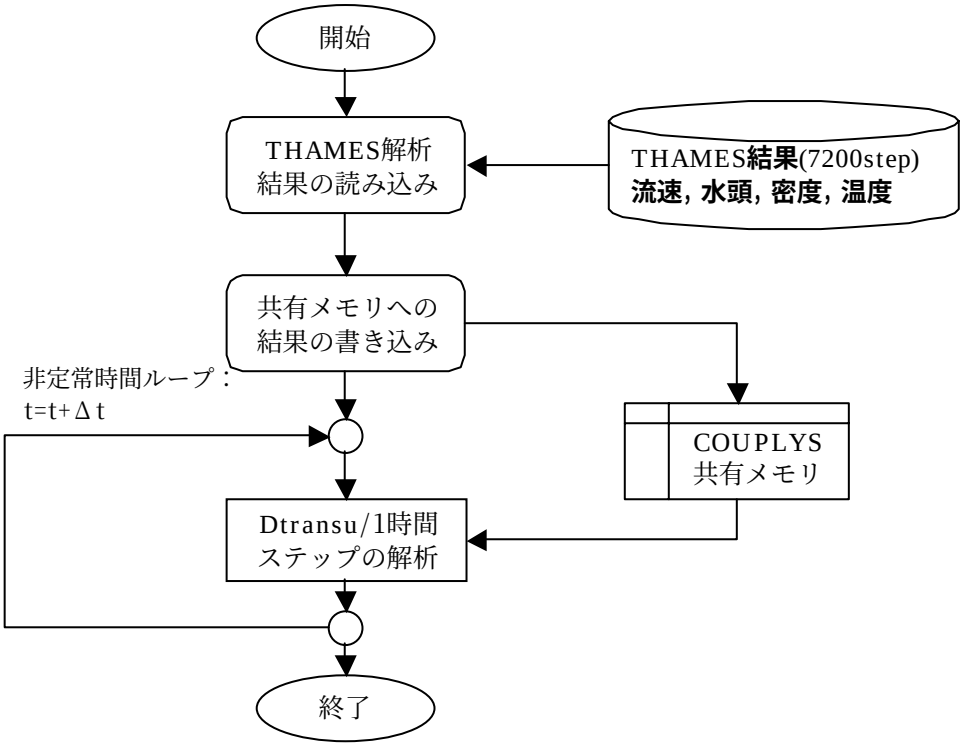
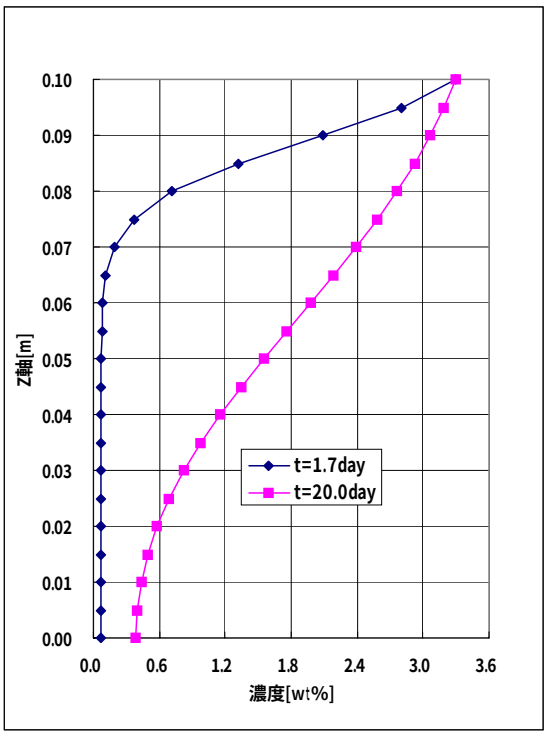
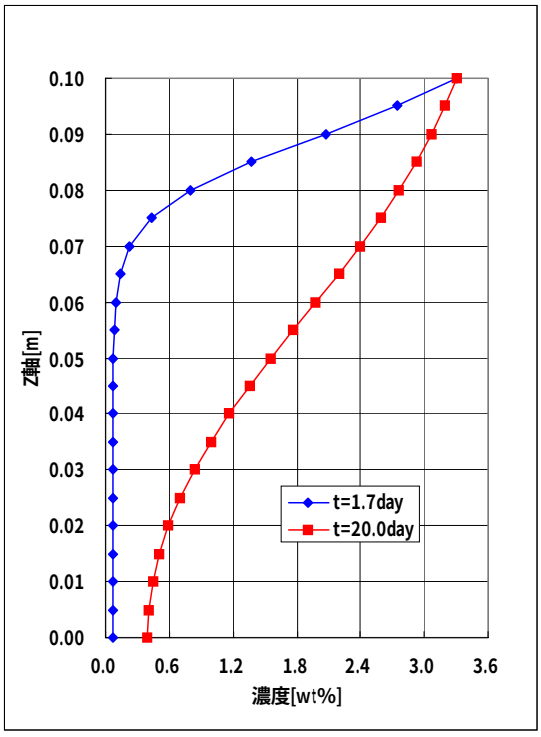


図 2.4-3 THAMES（結果ファイル）－Dtransu 連成仕様



【平成 13 年度：THAMES-Dtransu】



【本年度：COUPLYS 版 THAMES-Dtransu】

図 2.4-4 THAMES（結果ファイル）－Dtransu 連成解析結果の一例

2.5 THMC ベーシック版の構築

前記簡易動作確認の後，連成管理プログラムに THAMES，Dtransu，phreeqe60 を実装し，THMC ベーシック版を構築しデモンストレーションを行う。作業手順としては，Dtransu+phreeqe60 の連成を実施した後，前記 2.4 の結果との比較を行ない，最終的に THAMES を実装した。THMC ベーシック版は，4 連成に必要な最低限の THMC 連成物性モジュールの接続を考慮した。ここでは，THAMES で計算される温度を地球化学の平衡定数に反映させた計算を実施するための接続を考慮した。

（1）連成仕様

1) Dtransu－phreeqe60 連成仕様

物質移行－地球化学連成解析を連成管理プログラム COUPLYS 環境下にて構築したフローを図 2.5-1 に示す。また，本連成において使用した連成支援モジュールの一覧を表 2.5-1 に示す。

2) THMC ベーシック版連成仕様

THAMES－Dtransu－phreeqe60 を連成管理プログラム COUPLYS 環境下にて構築したフローを図 2.5-2 に示す。また，本連成において使用した連成支援モジュールの一覧を表 2.5-1 に示す。

表 2.5-1　THAMES，Dtransu 配下の連成物性／支援モジュール一覧表

No.	モジュール名称	支援モジュール，連成物性モジュールの内訳
1	MESHCONV1	メッシュ（要素・節点）データコンバート
2	MESHCONV2	節点温度など THAMES 解析結果データの Dtransu 用への変換
3	CC_CONVT1	節点濃度から要素中心濃度への変換
4	CC_CONVT2	要素濃度から節点濃度への変換
5	CHECK_CONVG	濃度に関する収束のチェック
6	NTOE_CONVERT	節点温度等の要素中心値への変換

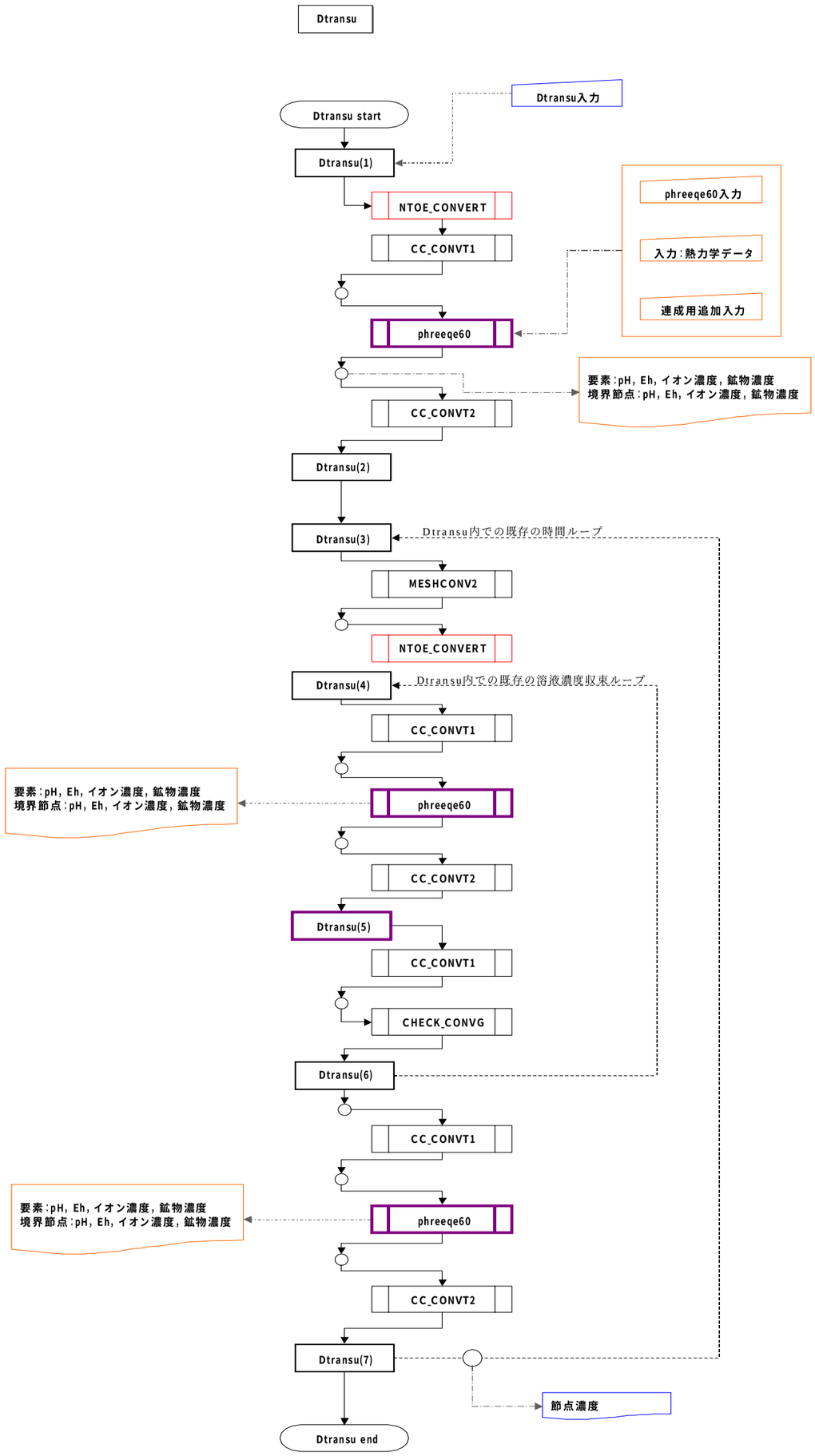


図 2.5-1　Dtransu－phreeqe60 による連成仕様

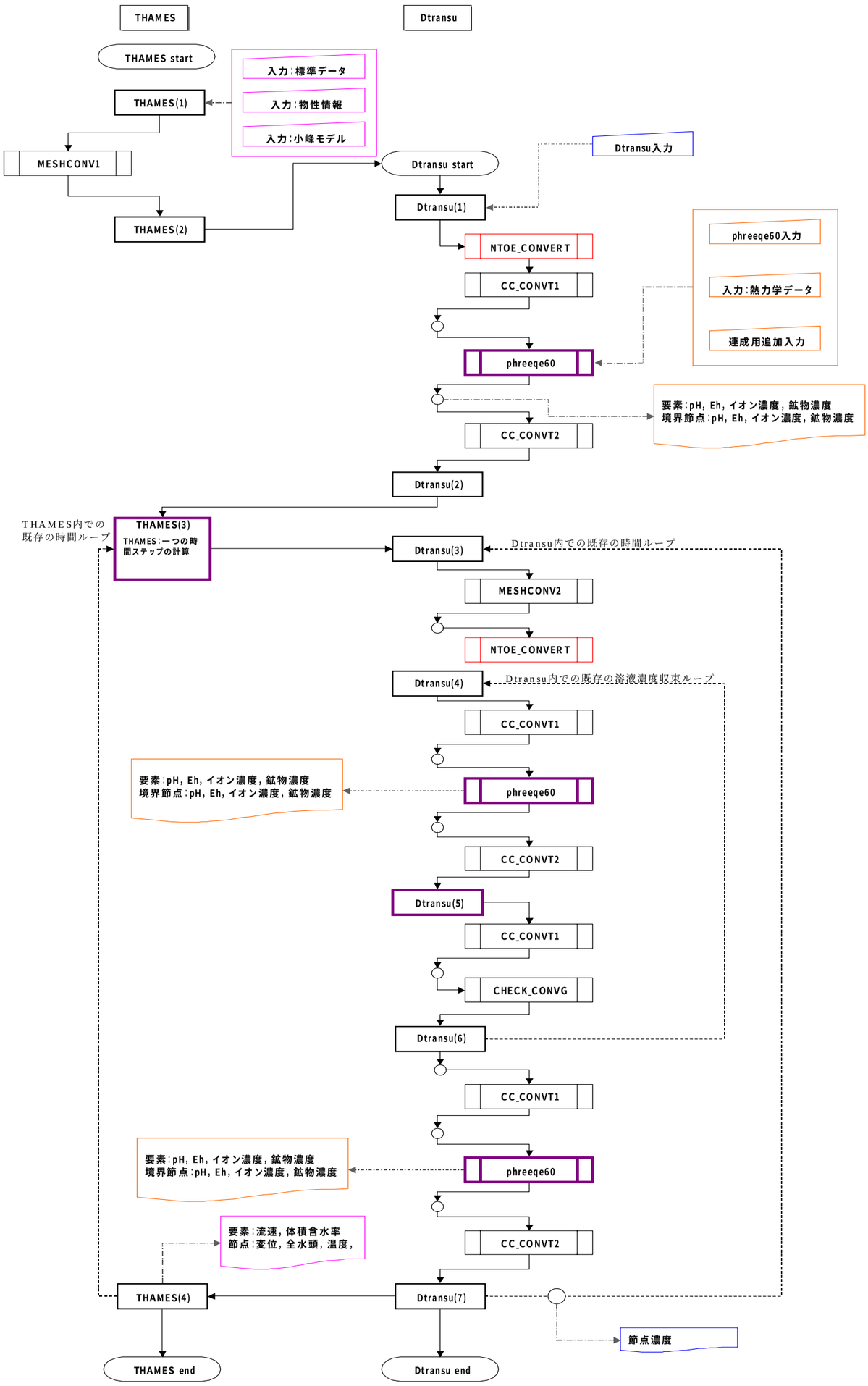


図 2.5-2　THMC ベーシック版による連成仕様

（2）物性条件

物質移行－地球化学連成解析用の解析条件を表 2.5-2 に示す。また，THMC ベーシック版連成解析用解析条件を表 2.5-3 に示す。これらの解析条件は，昨年度と同一の解析条件としている。

表 2.5-2　Dtransu－phreeqe60 動作確認用解析条件

No.	項目	単位	数値／条件	備考
1	拡散係数	m^2/sec	3.2×10^{-10}	分子拡散係数×屈曲率
2	空隙率	－	1.0	
3	境界濃度	mol/l	1.0×10^{-2}	
4	境界濃度	〃	1.0×10^{-4}	
5	初期濃度	〃	1.0×10^{-3}	
6	時間メッシュ	年	1.0	
7	評価期間	年	10.0	
8	比較時間ポイント	年	10.0	
9	溶解・沈殿鉱物種	－	Calcite	－
10	使用熱力学データベース	－	phreeqe.tdb	第２次とりまとめ

表 2.5-3　THMC ベーシック版動作確認用解析条件

No.	項目	単位	数値／条件	備考
1	温度 【高温側－低温側】	℃	100－80	JNC TJ8400 2002-004 表 4-1，Case1-2 参照
2	温度勾配水分拡散係数 【D_T】	$cm^2/s/K$	7×10^{-12}	〃
3	初期含水比	%	5.2500	〃
4	注水圧	Mpa	0.0000	〃
5	分散長	m	0.0000	〃
6	初期塩濃度	wt%	0.0717	〃
7	注水塩濃度	wt%	3.3000	〃
8	鉱物種	－	Halite	－
9	使用熱力学データベース	－	SPRON.JNC	JNC 殿の提供情報

1) Dtransu－phreeqe60 解析モデル

図 2.5-3 に解析モデルを示す。１次元カラムを模擬したモデルであり，充填材料は方解石（Calcite）としている

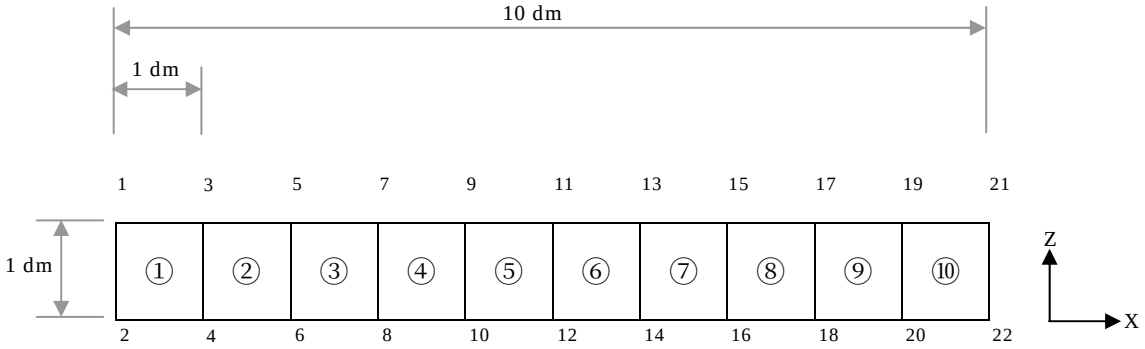
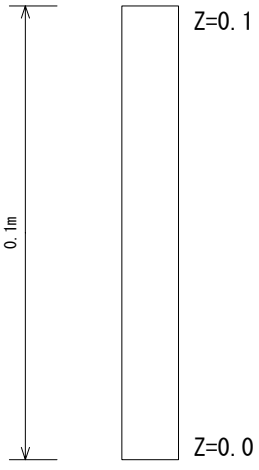


図 2.5-3　Dtransu－phreeqe60 動作確認用解析モデル図

2) THMC 解析モデル

図 2.5-4 に解析モデルを示す。１次元カラムを模擬したモデルであり，材料はクニゲル V1 とケイ砂の混合体（クニゲル V1：ケイ砂＝７：３，乾燥密度 1.6g/cm^3）としている。



初期条件（モデル全体）
１）体積含水率：0.098506
２）温度：25℃
３）濃度：CASE-A,C,D
0.0717, 3.3%
CASE-B
0.0%

境界条件
１）温度：Z=0.0, 40℃
Z=0.1, 25℃
２）流れ場：CASE-A（供試体外部から浸潤無し）
上面，底面，側面，流入出無し
CASE-B,C,D（供試体外部から浸潤有り）
上面：水頭固定（圧力水頭0.1m）
底面，側面，流入出無し
３）濃度：CASE-C，濃度固定，塩濃度0.0%
CASE-B,D，濃度固定，塩濃度3.3%

図 2.5-4　THMC 解析モデル図

3) THMC 解析メッシュ

図 2.5.5 に解析メッシュ図を示す。鉛直方向（Z方向）に 50 分割し，ΔZ =0.002m（2mm）とした。

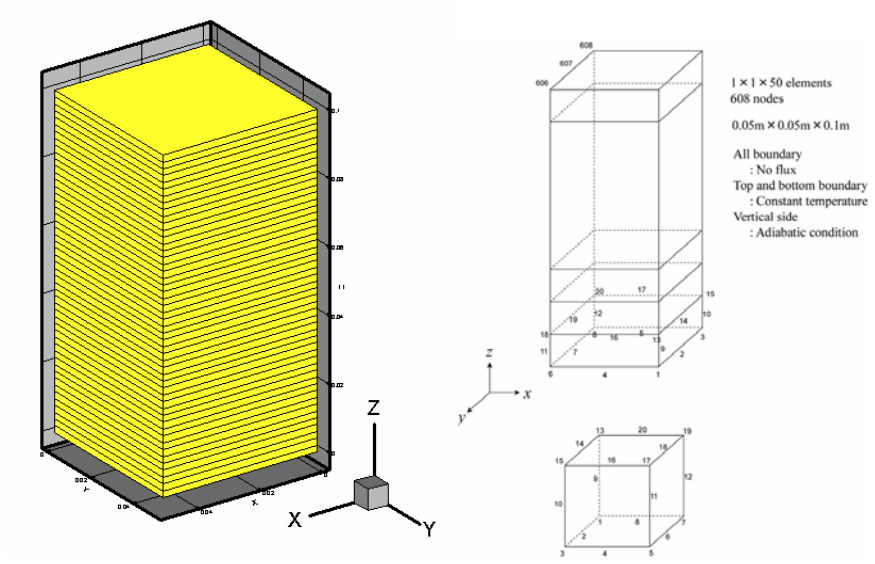


図 2.5-5　THMC 解析メッシュ図

（3）動作確認結果

1) Dtransu－phreeqe60 動作確認結果

前記の解析条件に基づき，解析を行なった結果を図 2.5-6，2.5-7 に示す。Dtransu－phreeqe60（COUPLYS 版）の結果は，HYDROGEOCHEM－phreeqe60 の結果とほぼ一致していることを確認した。

2) THMC ベーシック版動作確認結果

前記の解析条件に基づき，解析を行なった結果を図 2.5-8 に示す。THAMES（出力ファイル）－Dtransu の結果は，THAMES－Dtransu－phreeqe60（COUPLYS 版）の結果とほぼ一致していることを確認した。

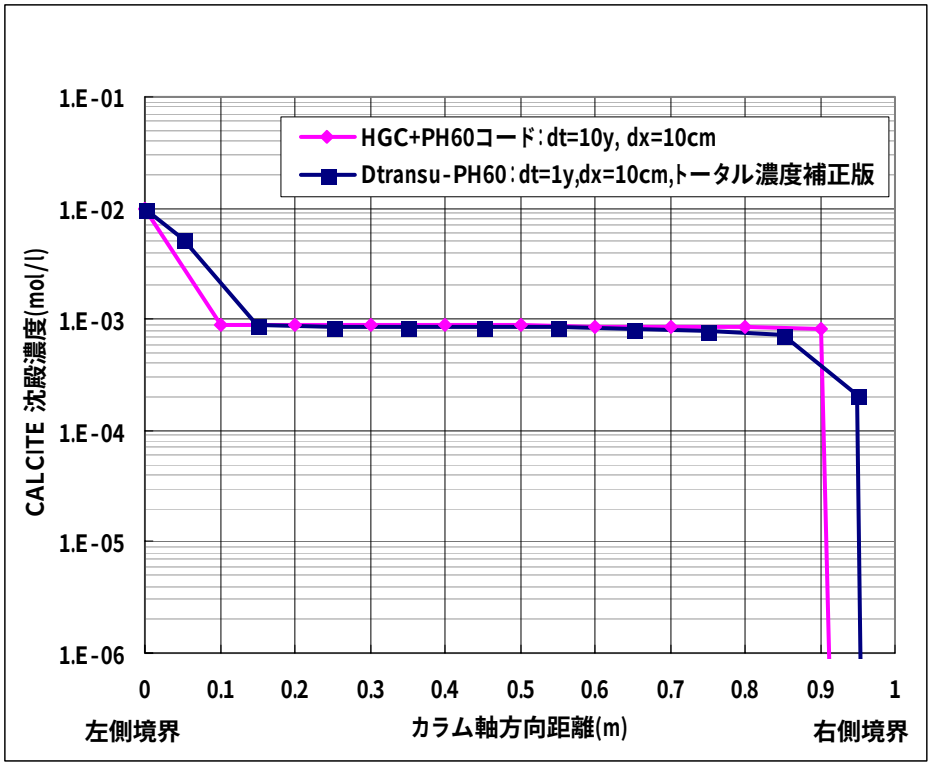


図 2.5-6　カラム内の方解石分布

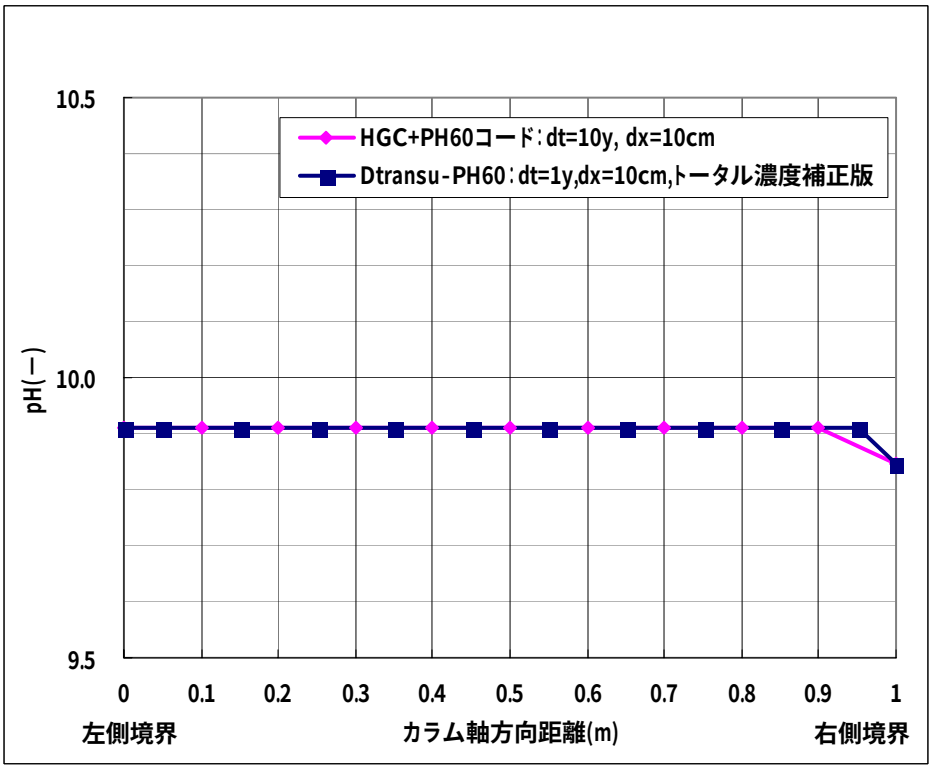


図 2.5-7　カラム内の pH 分布

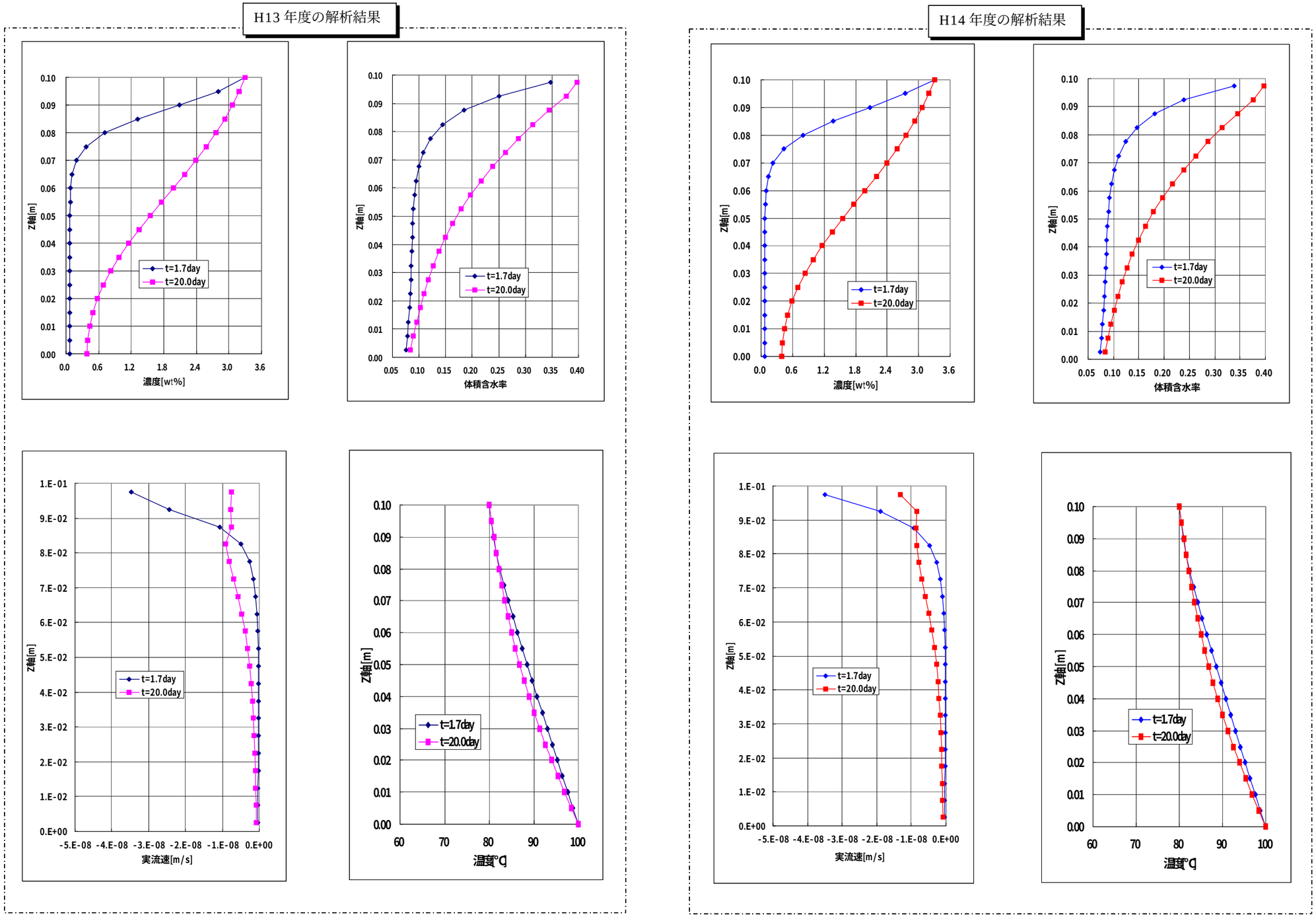


図 2.5-8　THMC ベーシック版による動作確認解析結果

3．物質移行解析コードの機能拡張

地球化学解析コードとの連成を実現するため，平成 13 年度に熱-水-応力連成解析コード THAMES に追加した物質移行解析コードの機能を拡張する。物質移行解析コードは，地球化学解析コードとの連成にあたって必要となる機能を拡張した後に，物質移行-地球化学の連成解析コードを構築，さらに検証解析を実施した。

3.1 HYDROGEOCHEM／Dtransu 物質移行移行機能の比較

3.1.1 HYDROGEOCHEM 物質移行機能

既存報告書から HYDROGEOCHEM（以下，HGC と呼ぶ）の物質移行の支配方程式を抜粋し，以下に示す。

【物質移行方程式】

化学種 j についての未知変数を総濃度 Tj とする次式の偏微分方程式を基礎式としている。

$$\theta\frac{\partial T_j}{\partial t}+\frac{\partial \theta}{\partial t}T_j - L\left(T_j\right)=-L\left(S_j+P_j\right)+QC_j^* \quad , \quad j=1,2,\cdots,N_a \tag{1}$$

ここで，$L(*)$は移流拡散による物質移行を表す微分演算子であり：

$$L(*)=-L\left(-V\bullet\nabla+\nabla\bullet\theta D\bullet\nabla-Q+\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)(*) \tag{2}$$

ここで，

θ　：体積含水率，

T_j　：ｊ番目水溶成分（Aqueous Componet）の総濃度，

S_j　：ｊ番目水溶成分の総吸着（イオン交換も加味）濃度，

P_j　：ｊ番目水溶成分の総沈殿濃度，

Q　：水の流入・流出流量，

C_j^*　：ｊ番目水溶成分の総溶解濃度【ただし，source（水流入）のとき j 番目水溶成分の流入濃度，sink（水流出）のとき濃度$C_j^*=C_j$】，

V　：地下水浸透流速場，

$$C_j=c_j+\sum_{i=1}^{Mx}a_{ij}^x x_i \quad , \quad j=1,2,\cdots,N_a \tag{3}$$

$$S_j=\sum_{i=1}^{My}a_{ij}^y y_i+\sum^{M_z}a_{ij}^z z_i \quad , \quad j=1,2,\cdots,N_a \tag{4}$$

$$P_j = \sum_{i=1}^{Mp} a_{ij}^{p} p_i \quad , \quad j = 1,2,\cdots,N_a \tag{5}$$

$$T_j = C_j + S_j + P_j = c_j + \sum_{i=1}^{Mx} a_{ij}^{x} x_i + \sum_{i=1}^{My} a_{ij}^{y} y_i + \sum_{i=1}^{M_z} a_{ij}^{z} z_i + \sum_{i=1}^{Mp} a_{ij}^{p} p_i \quad , \quad j = 1,2,\cdots,N_a \tag{6}$$

M_x ：錯体種(complexed species)の数

c_j ：ｊ番目水溶成分種(aqueous component species)の濃度$\left[M / L^3\right]$

a_{ij}^{x} ：ｉ番目錯体種についてのｊ番目水溶成分に対する化学量論係数（stoichiometric coefficient ）

x_i ：ｉ番目錯体種の濃度$\left[M / L^3\right]$

M_y ：吸着種の数

a_{ij}^{y} ：ｉ番目吸着種についてのｊ番目水溶成分に対する化学量論係数

y_i ：ｉ番目吸着種の濃度$\left[M / L^3\right]$

p_j ：ｊ番目沈殿成分種の濃度$\left[M / L^3\right]$

M_z ：イオン交換種の数

a_{ij}^{z} ：イオン交換種ｉについての水溶成分ｊに対する化学量論係数

z_i ：ｉ番目イオン交換種の濃度$\left[M / L^3\right]$

M_p ：沈殿種の数

a_{ij}^{p} ：ｉ番目沈殿種についてのｊ番目水溶成分に対する化学量論係数

p_i ：ｉ番目沈殿種の濃度$\left[M / L^3\right]$

である。

式(6)に基づき物質移行解析モジュールでは，化学種ごとに総濃度を算出するために，総溶解濃度，総吸着濃度，総沈殿濃度を用いている。これを図示すると，図 3.1-1 のようになる。ただし，本連成解析では，化学平衡計算を phreeqe60 で実行することを前提とするため本研究では，吸着濃度 S は常に 0 として取り扱う必要がある。

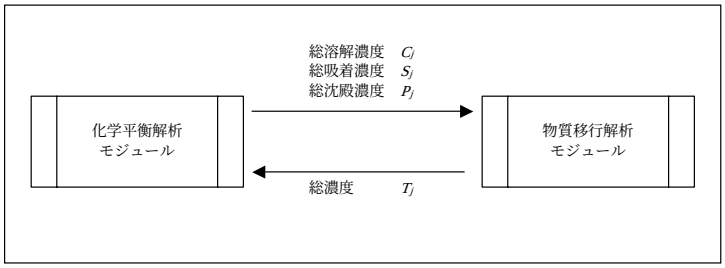


図 3.1-1　HYDROGEOCHEM のモジュール間のデータの流れ

3.1.2 HYDROGEOCHEM と Dtransu の比較

HGC と Dtransu の物質移行の支配方程式を比較するため，式(1)を再度以下に示し，式(8)に Dtransu（以下，Dtra と呼ぶ）の物質移行の支配方程式を示す。

HGC：

$$\theta\frac{\partial T_j}{\partial t}+\frac{\partial \theta}{\partial t}T_j - L\left(T_j\right)=-L\left(S_j+P_j\right)+QC_j^* \quad , \quad j=1,2,\cdots,N_a \tag{7}$$

Dtra：

$$R\theta\rho\frac{\partial c}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta\rho D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}\right)-\theta\rho V_i\frac{\partial c}{\partial x_i}-R\theta\rho\lambda c-Q_c \tag{8}$$

HGC の式(7)と Dtra の式(7)を比較すると，以下のようになる。

①HGC の総濃度 T に相当する濃度が Dtra の正規化濃度 C となる。ただし，C は１つの水溶成分のみである。

②HGC 左辺第１項は，Dtra の左辺に相当する。

③HGC 左辺第２項は，Dtra には相当項が無い。これは，体積含水率の変化に伴う濃度変化を表す項であり，昨年度 Dtransu に追加した濃縮／希釈機能に相当する。

④HGC 左辺第３項は，まさに移流分散方程式であり，Dtra の右辺に相当する。

⑤HCG 右辺第１項の詳細取り扱いは検討出来ていないが，物質移行における固相への吸着濃度，沈殿濃度変化を取り扱う項と考えられる。ここで，吸着濃度については化学平衡計算を phreeqe60 で実行する場合, 常にゼロとして取り扱うため(図-1 参照)，Dtra では，遅延係数 R=1 で対応することが可能である。また，沈殿濃度変化については, 昨年度 Dtransu に追加した陽的な連成となる沈殿機能をそのまま流用することで対応することが出来ると考えられる。

上記のことから，HGC の物質移行機能相当の機能を Dtransu に付加するため必要な項目として，以下の項目が考えられる。

１）他種類の水溶濃度の取り扱い。

① 正規化濃度 C のディメンジョンを必要な水溶成分数に拡張する。

② 分散項に対する連立一次方程式の解法を複数の濃度を効率良く解くための修正。（ＰＣＧ法を複数ベクトル用に修正するか，直接法の採用など）

２）水溶濃度，吸着濃度，沈殿濃度の追加

③ 各水溶成分に対して上記の３成分用のディメンジョンの確保。ただし，吸着濃度に関してはディメンジョンの確保のみであり, 他に影響を与えないと考えられる。

④ ３成分用に濃縮／希釈／沈殿機能を対応する。

3.1.3 Dtransu でのトータル濃度の取り扱い方

（1）はじめに

物質移行（Dtransu）－地球化学（phreeqe60）の連成方法に関して，第２次取りまとめにおける人工バリア中核種移行解析コード（MESHNOTE）の解法について，サイクル機構技術資料（若杉ほか，1999）に基づいて整理する。MESHNOTE は，放射性核種の人工バリア中の拡散移行を解析するための 1 次元円筒座標系の有限差分コードであり，核種の拡散，収着，沈殿を取り扱うことが可能であり，THMC 連成（特に，沈殿を含む物質移行－地球化学の連成手法）を検討する上で参考になると考えられる。

（2）支配方程式

人工バリア（緩衝材）中の核種移行に関する MESHNOTE の支配方程式は，次式で表される。（緩衝材のみを対象とし，リザーバ・ミキシングセルは，ここでは考えない。）

$$\frac{\partial A_{ij}(r,t)}{\partial t} = \varepsilon Dp_i \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_{ij}(r,t)}{\partial r}\right) - \lambda_{ij} A_{ij}(r,t) + \lambda_{IJ} A_{IJ}(r,t) \qquad (1)$$

ここで，A_{ij} ：元素 i 核種 j の全濃度 [mol/m^3]

C_{ij} ：元素 i 核種 j の間隙水中濃度 [mol/m^3]

ε ：緩衝材間隙率 [-]

Dp_i ：元素 i の間隙水中拡散係数 [m^2/y]

λ_{ij} ：元素 i 核種 j の崩壊定数 [1/y]

λ_{IJ} ：元素 i 核種 j の親核種の崩壊定数 [1/y]

t ：時間 [y]

r ：半径 [m]

(1)式に含まれる全濃度 A_{ij} は，液相濃度 C_{ij} ，収着濃度，および沈殿濃度の和として，次式で表される。（飽和系のみを対象としているため，体積含水率は含まれない。）

$$A_{ij} = \varepsilon C_{ij} + (1-\varepsilon) S_{ij} + P_{ij} \qquad (2)$$

ここで，S_{ij} ：元素 i 核種 j の収着濃度 [mol/m^3]

P_{ij} ：元素 i 核種 j の沈殿濃度 [mol/m^3]

緩衝材中の液相濃度，収着濃度，および沈殿濃度の関係について整理する。先ず，液相と固相（ベントナイト）の間に分配平衡が成り立つと仮定すると，収着濃度は液相濃度の関数として次式で定義することができる。

$$S_i[C_i] \equiv \frac{\alpha_i C_i}{1+\beta_i C_i} \tag{3}$$

ここで，α_i　：元素 i の収着係数 [-]

β_i　：元素 i の収着係数 [-]

ただし，C_i は元素 i の液相濃度で，核種 j の濃度の総和で与えられる。（収着濃度 S_i も同様に元素 i の濃度。）

$$C_i = \sum_j C_{ij} \tag{4}$$

なお，線形収着を仮定（$\beta_i = 0$）すれば，(3)式は一般的な分配係数モデルとなり，次式で表すことができる。

$$S_i[C_i] = \alpha_i C_i = \rho Kd_i C_i \tag{3'}$$

ここで，ρ　：緩衝材の真密度 [kg/m^3]

Kd_i　：元素 i の分配係数 [m^3/kg]

次に沈殿濃度について考える。ここで，元素 i の液相濃度の上限である溶解度を導入する。元素 i の緩衝材中の溶解度を C_i^* とすれば，沈殿を除く緩衝材中の元素濃度の上限値は溶解度で規定され，次式で与えられる。

$$\Gamma_i = \varepsilon C_i^* + (1-\varepsilon) S_i[C_i^*] \tag{5}$$

ここで，Γ_i　：元素 i の緩衝材中の上限濃度（沈殿を除く）[mol/m^3]

C_i^*　：元素 i の緩衝材間隙水中の溶解度 [mol/m^3]

なお，線形収着が成り立つ場合は，遅延係数 Rd_i を用いて次式で表される。

$$\Gamma_i = \varepsilon C_i^* + (1-\varepsilon)\rho Kd_i C_i^* = \varepsilon Rd_i C_i^* \tag{5'}$$

緩衝材中の元素 i の全濃度 $A_i = \sum A_{ij}$ が上限濃度 Γ_i よりも小さければ，緩衝材中に沈殿が生じることはない。したがって，沈殿濃度は $P_i = P_{ij} = 0$ となる。逆に，元素 i の全濃度 A_i が上限濃度 Γ_i よりも大きければ，上限濃度を超える分が沈殿として生成し，$P_i = A_i - \Gamma_i$ となる。すなわち，

$$A_i = \sum_j A_{ij} \geq \Gamma_i \tag{6}$$

が成り立つ場合は沈殿が生成し，緩衝材中の核種 ij の液相濃度，収着濃度，沈殿濃度は，元素 i の全濃度および溶解度から，次式で求めることができる。

液相濃度： $C_{ij} = C_i^* \dfrac{A_{ij}}{A_i}$ (7)

収着濃度： $S_{ij} = S_i\left[C_i^*\right]\dfrac{A_{ij}}{A_i}$ (8)

沈殿濃度： $P_{ij} = A_{ij} - \Gamma_i \dfrac{A_{ij}}{A_i}$ (9)

（3）解法

1)数学的取り扱い

(1)式で表される 1 つの支配方程式に対して，未知変数が 2 個（全濃度 A と液相濃度 C ）含まれることになり，このままでは計算することができない。このため，MESHNOTE では次の 2 つの変数（関係式）を導入し，線形近似して計算を行っている。

液相濃度と全濃度の比： $\gamma_i(r,t) = \dfrac{C_i(r,t)}{A_i(r,t)}$ (10)

収着濃度と全濃度の比： $\sigma_i(r,t) = \dfrac{S_i(r,t)}{A_i(r,t)}$ (11)

ここで，収着濃度と液相濃度の関係は(3)式で定義されており，これを(11)式に代入すると，次式が得られる。

$$\sigma_i(r,t) = \frac{\alpha_i\,\gamma_i(r,t)}{1+\beta_i\,\gamma_i(r,t)\,A_i(r,t)} \quad (12)$$

ただし，線形収着が成り立つ場合は次式となる。

$$\sigma_i(r,t) = \alpha_i\,\gamma_i(r,t) \quad (12')$$

新たに導入した変数 γ_i および σ_i の計算は，全濃度 A_i と上限濃度 Γ_i の関係から次の 2 つのケースに分けて計算している。

①全濃度 A_i ＞上限濃度 Γ_i

この場合は緩衝材中で沈殿が生じ，液相濃度は溶解度で規定される。したがって，液相濃度と全濃度の比 γ_i は，(10)式に溶解度を代入して得られる。

$$\gamma_i(r,t)=\frac{C_i^*}{A_i(r,t)} \tag{13}$$

また，収着濃度と全濃度の比σ_iは，(12)式で得られる。（線形収着の場合は(12')式で得られる。）

②全濃度A_i＜上限濃度Γ_i

この場合は緩衝材中で沈殿が生じることはなく，沈殿濃度は$P_i = P_{ij} = 0$となる。したがって，(2)式は液相濃度と収着濃度で表され，元素濃度で表せば次式となる。

$$A_i = \varepsilon C_i + (1-\varepsilon)S_i \tag{14}$$

これに，(10)式および(11)式を代入し，さらに(12)式を用いて整理すると，最終的に次式が得られる。

$$\left[\varepsilon\beta_i A_i\right]\gamma_i^2 + \left[\varepsilon + (1-\varepsilon)\alpha_i - \beta_i A_i\right]\gamma_i - 1 = 0 \tag{15}$$

この 2 次方程式から，液相濃度と全濃度の比γ_iを求めることができ，さらに(12)式から収着濃度と全濃度の比σ_iを求めることができる。（なお，線形収着の場合は$\beta_i = 0$であり，(15)式は単純な代数式となる。）

上記の計算から変数γ_iおよびσ_iが求まれば，支配方程式(1)式を数値的に解析して得られる核種ijの全濃度A_{ij}から，各核種の液相濃度，収着濃度，沈殿濃度が計算できる。

液相濃度：$C_{ij} = \gamma_i A_{ij}$

収着濃度：$S_{ij} = \sigma_i A_{ij}$

沈殿濃度：$P_{ij} = A_{ij} - \varepsilon C_{ij} - (1-\varepsilon)S_{ij}$

2)離散化（有限差分法）

支配方程式(1)式の離散化は，(10)式の線形近似式を(1)式に代入し，未知変数を全濃度A_{ij}として，有限差分法（陰解法）で離散化している。導出は省略するが，(1)式の離散化方程式は(16)式で表される。（ただし，核種を表す添え字ijは省略した。）なお，MESHNOTE では，核種の崩壊項は拡散項とは分離して計算しており，あるタイムステップにおいて，あらかじめ Bateman 方程式により崩壊（連鎖含む）を計算してから，拡散移行を計算するアルゴリズムを採用している。このため，(16)式の離散化方程式には，崩壊項は含まれていない。

$$\frac{V_k}{\delta t}\left(A_k^{n+1} - A_k^n\right) = \frac{\varepsilon Dp}{\delta r}\left[S_k^-\left(\gamma_{k-1}A_{k-1}^{n+1} - \gamma_k A_k^{n+1}\right) - S_k^+\left(\gamma_k A_k^{n+1} - \gamma_{k+1}A_{k+1}^{n+1}\right)\right] \tag{16}$$

ここで，k　：空間メッシュを表す添え字

n　：タイムメッシュを表す添え字（$\delta t = t^{n+1} - t^n$）

$S_k^{\pm}$　：メッシュの表面積

$$S_k^{\pm} = 2\pi\left(r_k \pm \frac{\delta r}{2}\right)L \quad (k = 1,\cdots,N)$$

V_k　：メッシュの体積

$$V_k = 2\pi r_k \delta r L \quad (k = 2,\cdots,N-1)$$

（4）Dtransu－phreeqe60 の連成

THMC 連成解析コードで対象とする物質移行（Dtransu）と地球化学（phreeqe60）を連成させた支配方程式は，次式で表される（Dtransu の支配方程式における時間微分項の濃度を全濃度に置換。ただし，密度項，崩壊項，ソース／シンク項は省略）。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}\right) - \theta V_i \frac{\partial c}{\partial x_i} \tag{17}$$

一つの方程式に未知変数（全濃度 T と液相濃度 c）が 2 個含まれることから，MESHNOTE と同様に，線形近似して計算する。

例えば，全濃度を液相濃度の線形関数式 $T = \gamma(x_j,t)c$ で近似すれば，(17)式は次式となる。ただし，比 γ は空間および時間に依存した変数となる。

$$\frac{\partial\left(\gamma(x_j,t)c\right)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}\right) - \theta V_i \frac{\partial c}{\partial x_i} \tag{18}$$

これを離散化すると，左辺の γ の空間依存の因子は失われ，左辺の時間微分項は一般的には次式になる。

$$\frac{\xi}{\delta t}\left(\gamma_k^{n+1} c_k^{n+1} - \gamma_k^n c_k^n\right) \tag{19}$$

ここで，ξ：任意の係数（離散化の方法に依存）

逆に，液相濃度を全濃度の線形関数式 $c = \gamma'(x_j,t)T$ で近似すれば，(17)式は次式となる（MESHNOTE で採用している方法）。ただし，比 γ' は先と同様に空間および時間に依存した変数である。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta D_{ij}\frac{\partial\left(\gamma'(x_j,t)T\right)}{\partial x_j}\right) - \theta V_i \frac{\partial\left(\gamma'(x_j,t)T\right)}{\partial x_i} \tag{20}$$

これを離散化すると，MESHNOTE と同様に，γ の空間依存の因子を考慮した離散化方程式が得られると思われる。この場合，γ は隣接するメッシュの影響を受けることになり，2 つの異なる媒体を定義した場合（緩衝材と岩盤），その界面の要素の計算では，異なる媒体の影響が入り込むことになる。

(18)式と(20)式を比較した場合，どちらも線形 1 次近似であるため，精度的には差がないと思われるが，支配方程式のマスバランス（濃度の連続性）を液相濃度で取るか，全濃度で取るかの違いが，解析結果（濃度分布）に現れるのではないかと想定される。また, 離散化方程式を導出した際に, 比 γ の時間依存の因子を取込むか, 空間依存の因子を取込むかの違いにより，収束性や数値計算精度が変化することも想定される。

（5）THMC コード作成に係る不飽和状態の取り扱い

前記（1）～（4）は飽和状態でモデルを表現しているが，本研究では，飽和・不飽和を取り扱うことから，以下に，地球化学の計算を行う上での処理方法について示す。

① 初期鉱物濃度：時間ステップ１の最初の処理は，式(1)とする。

$$p\left[mol-元素/l-間隙水\right]=\frac{P\left[\dfrac{mol-元素}{l-要素体積}\right]}{\theta_l\left[\dfrac{l-間隙水}{l-要素体積}\right]} \qquad 式(1)$$

ここで,

P ：元素の沈殿濃度／入力値　　(mol－元素／l－媒体体積or要素体積)

p ：元素の沈殿濃度／処理後　　(mol－元素／l－間隙水)

θ_l ：体積含水率　　(–)

である。

② 沈殿濃度の更新：時間ステップ１の２番目の処理は，式(2)とする。また，時間ステップ２以降の２番目の処理も式(2)とする。

$$p'\left[mol-元素/l-間隙水\right]=p+p_{phreeqe_delta_phase} \qquad 式(2)$$

ここで，$p_{phreeqe_delta_phase}$ は，地球化学モジュール（phreeqe60）の DeltaPhase を示す。

③ 各要素の沈殿質量の算出：単位間隙水当たりの元素質量【式(2)】に空隙水体積

$(\theta_l^{(t)} \times V)$ を乗じる。

④ 飽和度を考慮した沈殿濃度の算出：前記の沈殿質量に対して，空隙水体積$(\theta_l^{(t)} \times V)$で割る。

なお，オーバーパックの近傍における緩衝材間隙水の加熱効果による間隙水の蒸発がもたらす濃縮・希釈の現象については，現バージョンの Dtransu で取り扱っている体積含水率が，水理学的な水の移動効果と蒸発水による効果を含んでいる。これらの効果は，容易に補正することが困難であること，本年度に予定している事例解析は塩濃度が顕著でないケースを取り扱うことから，本研究の溶液濃度は，蒸発水による濃縮・希釈の効果を考慮しないこととした。

3.2 Dtransu 物質移行解析部の機能拡張

前記「HYDROGEOCHEM／Dtransu 物質移行機能の比較」結果に基づき，Dtransu 物質移行解析部の機能拡張を実施する。追加機能としては，多種類の水溶成分の取り扱い，水溶濃度・吸着濃度・沈殿濃度の追加，物質移行方程式へのトータル濃度の導入を実施した。

3.2.1 物質移行元素数 20 種に対する拡張

20 種に対する拡張は従来の Dtransu に対して，別途ブロックコモン文で配列を設定した。表 3.2-1 にブロックコモンの内容を示す。また，表 3.2-2 に各変数の説明を示す。配列の大きさは，修正が行い易いようにパラメータ文で設定した。

表 3.2-1　ブロックコモンの内容

```
CT2#
      PARAMETER (MXCHEM=20,MUMNPC=2000,MUMELC=4000)
      CHARACTER*4 MAT20
      COMMON / CHEM00 / NXCHEM,ITERCM,MAT20(MXCHEM)
      COMMON / CHEM01 / MTCHEMR,MTCHERW,MTCHEMG
      COMMON / CHEM02 / KODEC20(MUMNPC,MXCHEM)
      COMMON / CHEM03 / CNC20(MUMNPC,MXCHEM),GRETA(MUMELC,MXCHEM)
      COMMON / CHEM04 / CNCP20(MUMNPC,MXCHEM),GRETAP(MUMELC,MXCHEM)
      COMMON / CHEM05 / CQ20(MUMNPC,MXCHEM)
      COMMON / CHEM06 / TPRE20(MUMNPC,MXCHEM)
CT2#
```

表 3.2-2　変数一覧表

変数名	型	配列	内　　容
MAXCHEM	整数	－	最大対応物質数（パラメータ文で 20 に設定）
MUMNPC	整数		最大節点数（パラメータ文で 2000 に設定）
MUMELC	整数		最大要素数（パラメータ文で 2000 に設定）
NXCHEM	整数	－	取り扱う物質数
ITERCM	整数	－	修正γに対する反復数カウント
MAT20	文字*4	MAXCHEM	対象物質名を４文字で入力
MTCHEMR	整数	－	境界条件，初期濃度分布入力 UNIT 番号
MTCHEMW	整数	－	濃度分布出力 UNIT 番号
MTCHEMG	整数	－	修正γ入力 UNIT 番号
KODEC20	整数	(MUMNPC,MXCHEM)	濃度境界条件（節点数分）
CNC20	r*8	(MUMNPC,MXCHEM)	濃度（節点数分）
GRETA	r*8	(MUMELC,MXCHEM)	修正γ（節点数分）
CNCP20	r*8	(MUMNPC,MXCHEM)	１step 前の濃度（節点数分）
GRETAP	r*8	(MUMELC,MXCHEM)	１step 前の修正γ（要素数分）
CQ20	r*8	(MUMNPC,MXCHEM)	濃度フラックス（節点数分）
TPRE20	r*8	(MUMNPC,MXCHEM)	移流濃度（節点数分）

整数：4 バイト整数型，文字：文字型（ここでは 4 バイト：4 文字），r*8：倍精度実数型

3.2.2 境界条件，初期濃度分布ファイル(UNIT71)

表 3.2-3 に 20 種の濃度境界条件，初期濃度分布ファイルのフォーマットを示す。

表 3.2-3　境界条件，初期濃度分布ファイル

行	カラム	書式	変数名	備考
1	1～ 5	I5	NXCHEM	右つめ
2～2+NXCHEM-1	1～ 4	A4	MAT20	左つめ
節点数繰り返し	1～ 4	A4	MAT20	
	5	－	－	空白
	6～10	I5	節点番号	右つめ
	11～15	I5	KODEC20	右つめ
	16～25	F10.0	CNC20	右つめ
	26～35	F10.0	QC20	右つめ

サンプルを以下に示す。

対象元素数：2，物質名「CL」,「NA」，節点数 84

```
   2
CL
NA
CL     1    0    0.0717       0.0
CL     2    0    0.0717       0.0
CL     3    0    0.0717       0.0
CL     4    0    0.0717       0.0
CL     5    0    0.0717       0.0
CL     6    0    0.0717       0.0
CL     7    0    0.0717       0.0
CL     8    0    0.0717       0.0
CL     9    0    0.0717       0.0
CL    10    0    0.0717       0.0
CL    11    0    0.0717       0.0
CL    12    0    0.0717       0.0
CL    13    0    0.0717       0.0
CL    14    0    0.0717       0.0
CL    15    0    0.0717       0.0
CL    16    0    0.0717       0.0
CL    17    0    0.0717       0.0
CL    18    0    0.0717       0.0
CL    19    0    0.0717       0.0
CL    20    0    0.0717       0.0
CL    21    0    0.0717       0.0
CL    22    0    0.0717       0.0
CL    23    0    0.0717       0.0
CL    24    0    0.0717       0.0
CL    25    0    0.0717       0.0
CL    26    0    0.0717       0.0
CL    27    0    0.0717       0.0
CL    28    0    0.0717       0.0
CL    29    0    0.0717       0.0
CL    30    0    0.0717       0.0
CL    31    0    0.0717       0.0
CL    32    0    0.0717       0.0
CL    33    0    0.0717       0.0
CL    34    0    0.0717       0.0
CL    35    0    0.0717       0.0
CL    36    0    0.0717       0.0
CL    37    0    0.0717       0.0
CL    38    0    0.0717       0.0
CL    39    0    0.0717       0.0
CL    40    0    0.0717       0.0
CL    41    0    0.0717       0.0
CL    42    0    0.0717       0.0
CL    43    0    0.0717       0.0
CL    44    0    0.0717       0.0
CL    45    0    0.0717       0.0
CL    46    0    0.0717       0.0
CL    47    0    0.0717       0.0
CL    48    0    0.0717       0.0
CL    49    0    0.0717       0.0
CL    50    0    0.0717       0.0
CL    51    0    0.0717       0.0
CL    52    0    0.0717       0.0
CL    53    0    0.0717       0.0
CL    54    0    0.0717       0.0
CL    55    0    0.0717       0.0
CL    56    0    0.0717       0.0
CL    57    0    0.0717       0.0
CL    58    0    0.0717       0.0
CL    59    0    0.0717       0.0
CL    60    0    0.0717       0.0
CL    61    0    0.0717       0.0
CL    62    0    0.0717       0.0
CL    63    0    0.0717       0.0
CL    64    0    0.0717       0.0
CL    65    0    0.0717       0.0
CL    66    0    0.0717       0.0
CL    67    0    0.0717       0.0
CL    68    0    0.0717       0.0
CL    69    0    0.0717       0.0
CL    70    0    0.0717       0.0
CL    71    0    0.0717       0.0
CL    72    0    0.0717       0.0
CL    73    0    0.0717       0.0
CL    74    0    0.0717       0.0
CL    75    0    0.0717       0.0
CL    76    0    0.0717       0.0
CL    77    0    0.0717       0.0
CL    78    0    0.0717       0.0
CL    79    0    0.0717       0.0
CL    80    0    0.0717       0.0
CL    81    1       5.0       0.0
CL    82    1       5.0       0.0
CL    83    1       5.0       0.0
CL    84    1       5.0       0.0
NA     1    0    0.0717       0.0
NA     2    0    0.0717       0.0
NA     3    0    0.0717       0.0
NA     4    0    0.0717       0.0
NA     5    0    0.0717       0.0
NA     6    0    0.0717       0.0
NA     7    0    0.0717       0.0
NA     8    0    0.0717       0.0
NA     9    0    0.0717       0.0
NA    10    0    0.0717       0.0
NA    11    0    0.0717       0.0
NA    12    0    0.0717       0.0
NA    13    0    0.0717       0.0
NA    14    0    0.0717       0.0
NA    15    0    0.0717       0.0
NA    16    0    0.0717       0.0
NA    17    0    0.0717       0.0
NA    18    0    0.0717       0.0
NA    19    0    0.0717       0.0
NA    20    0    0.0717       0.0
NA    21    0    0.0717       0.0
NA    22    0    0.0717       0.0
NA    23    0    0.0717       0.0
NA    24    0    0.0717       0.0
NA    25    0    0.0717       0.0
NA    26    0    0.0717       0.0
NA    27    0    0.0717       0.0
NA    28    0    0.0717       0.0
NA    29    0    0.0717       0.0
NA    30    0    0.0717       0.0
NA    31    0    0.0717       0.0
NA    32    0    0.0717       0.0
NA    33    0    0.0717       0.0
NA    34    0    0.0717       0.0
NA    35    0    0.0717       0.0
NA    36    0    0.0717       0.0
NA    37    0    0.0717       0.0
NA    38    0    0.0717       0.0
NA    39    0    0.0717       0.0
NA    40    0    0.0717       0.0
NA    41    0    0.0717       0.0
NA    42    0    0.0717       0.0
NA    43    0    0.0717       0.0
NA    44    0    0.0717       0.0
NA    45    0    0.0717       0.0
NA    46    0    0.0717       0.0
NA    47    0    0.0717       0.0
NA    48    0    0.0717       0.0
NA    49    0    0.0717       0.0
NA    50    0    0.0717       0.0
NA    51    0    0.0717       0.0
NA    52    0    0.0717       0.0
NA    53    0    0.0717       0.0
NA    54    0    0.0717       0.0
NA    55    0    0.0717       0.0
NA    56    0    0.0717       0.0
NA    57    0    0.0717       0.0
NA    58    0    0.0717       0.0
NA    59    0    0.0717       0.0
NA    60    0    0.0717       0.0
NA    61    0    0.0717       0.0
NA    62    0    0.0717       0.0
NA    63    0    0.0717       0.0
NA    64    0    0.0717       0.0
NA    65    0    0.0717       0.0
NA    66    0    0.0717       0.0
NA    67    0    0.0717       0.0
NA    68    0    0.0717       0.0
NA    69    0    0.0717       0.0
NA    70    0    0.0717       0.0
NA    71    0    0.0717       0.0
NA    72    0    0.0717       0.0
NA    73    0    0.0717       0.0
NA    74    0    0.0717       0.0
NA    75    0    0.0717       0.0
NA    76    0    0.0717       0.0
NA    77    0    0.0717       0.0
NA    78    0    0.0717       0.0
NA    79    0    0.0717       0.0
NA    80    0    0.0717       0.0
NA    81    1       1.0    0.0717
NA    82    1       1.0    0.0717
NA    83    1       1.0    0.0717
NA    84    1       1.0    0.0717
```

3.2.3 修正γ入力ファイル(UNIT75)

表 3.2-4 に修正γの入力フォーマットを示す表 3.2.2-1 に 20 種の濃度境界条件，初期濃度分布ファイルのフォーマットを示す。

表 3.2-4　修正γ入力ファイルフォーマット

行	カラム	書式	変数名	備考
物質数 要素数繰り返し	１～　４	A4	MAT20	
	１～　４	A4	MAT20	
	５	－	－	空白
	６～１０	I5	要素番号	右つめ
	１１～１５	I5	GRETA	右つめ

以下に，サンプルを示す。

対象元素数：２，物質名「CL」,「NA」，要素数 20

```
CL      1       1.0                     NA      1       1.0
CL      2       1.0                     NA      2       1.0
CL      3       1.0                     NA      3       1.0
CL      4       1.0                     NA      4       1.0
CL      5       1.0                     NA      5       1.0
CL      6       1.0                     NA      6       1.0
CL      7       1.0                     NA      7       1.0
CL      8       1.0                     NA      8       1.0
CL      9       1.0                     NA      9       1.0
CL      10      1.0                     NA      10      1.0
CL      11      1.0                     NA      11      1.0
CL      12      1.0                     NA      12      1.0
CL      13      1.0                     NA      13      1.0
CL      14      1.0                     NA      14      1.0
CL      15      1.0                     NA      15      1.0
CL      16      1.0                     NA      16      1.0
CL      17      1.0                     NA      17      1.0
CL      18      1.0                     NA      18      1.0
CL      19      1.0                     NA      19      1.0
CL      20      1.0                     NA      20      1.0
```

3.2.4 Dtransu における UNIT 番号

表 3.2-5 に修正 Dtransu で用いている入出力用の UNIT 番号を示す。

表 3.2-5　UNIT 番号

Dtransu 内部	THAMES との入出力	地球化学との入出力
２：データ入力	８５：入力	７１：境界条件，初期濃度
１，３：テンポラリ	８８：出力	７５：修正γ入力
７：構造データ		７２：濃度出力
８：ポストデータ		
４０：テンポラリ		
４１，４２：リスタート用		
５１～６０：テンポラリ		

3.3 地球化学コード支援モジュールの作成

地球化学コード phreeqe60 に付加する機能についてプログラムを作成する。付加機能としては，平衡鉱物の自動設定（沈殿，再溶解，枯渇），緩衝材可溶性塩の取り扱い機能，コンクリート相互作用（Berner モデル）を対象とした。

3.4 物質移行－地球化学連成解析コードの構築

前記「連成管理プログラムの構築」の成果に基づき，Dtransu および phreeqe60 オリジナルコードに対して入力データ, 連成コマンド入力, 連成管理プログラム用データ（変数, 連成制御シーケンス）を作成し，基本動作を確認した。

3.5 検証解析

前記 3.4 で構築した連成解析コードの検証は，H13 年度に実施した検証問題（1 次元カラムに充填した方解石の溶解･沈殿）を対象として，同一の解析を実施する。比較項目は，任意時刻におけるカラム内での方解石，間隙水組成（Ca，C，pH）の分布について比較した。地球化学，物質移行個別機能の検証解析を実施した（H13 年度の成果利用）。

本研究では，物質移行－地球化学連成の収束部分の解について，昨年度に開発した HYDROGEOCHEM－phreeqe60 連成解析コードとの比較した。

収束処理過程での，物質移行（Dtransu）－地球化学（phreeqe60）の連成およびトータル濃度T，修正γの計算フローを図 3.5-1 に示す。

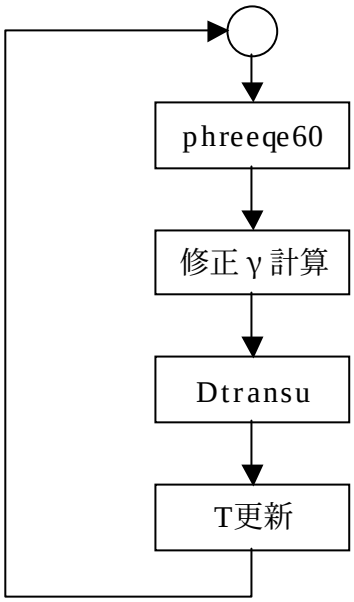


図 3.5-1　収束ループ内の物質移行－地球化学連成計算処理フロー

（1） 連成方法 0

連成方法 1 は，図 3.5-1 のトータル濃度 T 算出部分は，式（4）により定義していた。

$$T^{t,n} = \gamma^{t,n-1} C^{t,n} \qquad \text{式(4)}$$

ここで，

$T^{t,n}$　：現イタレーションの地球化学に受け渡されるトータル濃度（mol/l）

$\gamma^{t,n-1}$　：前イタレーションで求められた修正γ　（－）

$C^{t,n}$　：現イタレーションで求められた液相濃度　（mol/l）

である。

本方法では，物質移行の解析中に以下の様に沈殿濃度が更新されるため，不適切と判断した。また，トータル濃度も HGC-phreeqe60 との解離が大であった。

$$T^{t,n} = \gamma^{t,n-1} C^{t,n} = \frac{T^{t,n-1}}{C^{t,n-1}} C^{t,n} = \frac{C^{t,n-1} + P^{t,n-1}}{C^{t,n-1}} C^{t,n} = C^{t,n} + \frac{C^{t,n}}{C^{t,n-1}} P^{t,n-1} \qquad \text{式(5)}$$

（2） 連成方法 1

前記(1)の方法では，本来，物質移行に考慮されない沈殿濃度の更新を行っていることから，不適切と考え，式(5)から以下の式に改訂した。

$$T^{t,n} = C^{t,n} + P^{t,n-1} = C^{t,n} + C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) \quad \text{式(6)}$$

ここで,

$$\gamma^{t,n-1} = \frac{C^{t,n-1} + P^{t,n-1}}{C^{t,n-1}}$$

$$P^{t,n-1} = \gamma^{t,n-1} \times C^{t,n-1} - C^{t,n-1} = C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) \quad \text{式(7)}$$

である。

本方法を採用した場合も, HGC－phreeqe60 と一致しなかったことから以下に示す（３）の方法が代替案として挙げられた（図 3.5-2 参照)。ただし，⊿t の取り方によっては差が発生している（図 3.5-3 参照)。本解析結果は，10 年時点でのカラム内における方解石の濃度分布を示している。図 3.5-3 の凡例について以下に解説する。

dt　　：時間メッシュ幅（年）

x　　：空間メッシュ幅（cm）

Boundary：境界要素は，内側の節点濃度を直接参照。それ以外のケースは，要素濃度算出時に境界節点を考慮した平均濃度としている。

収束判定トータル相対値：収束判定条件として，トータル濃度差の相対値としている。それ以外のケースは, 溶液濃度差の相対値としている。

式(6)に基づくトータル濃度（沈殿濃度，修正γを含む）は，図 3.5-4～図 3.5-6 に示す様に，収束回数 3 以降 HGC-phreeqe60，Dtransu-phreeqe60 との差が生じる。本結果は，要素番号 10 における時間ステップ 1 でのイタレーション過程での物質移行，地球化学の結果を示している。Dtransu-phreeqe60 は，トータル濃度が少なく見積もられることから，沈殿濃度も連動して小さくなる。

参考のため，図 3.5-4～3.5-6 に対応した詳細なデジタル値を表 3.5-1，3.5-2 にそれぞれ示す。

式(6)に基づくトータル濃度の算出を補正するためには，修正γの時間変化項の補正が必要と考えられた。

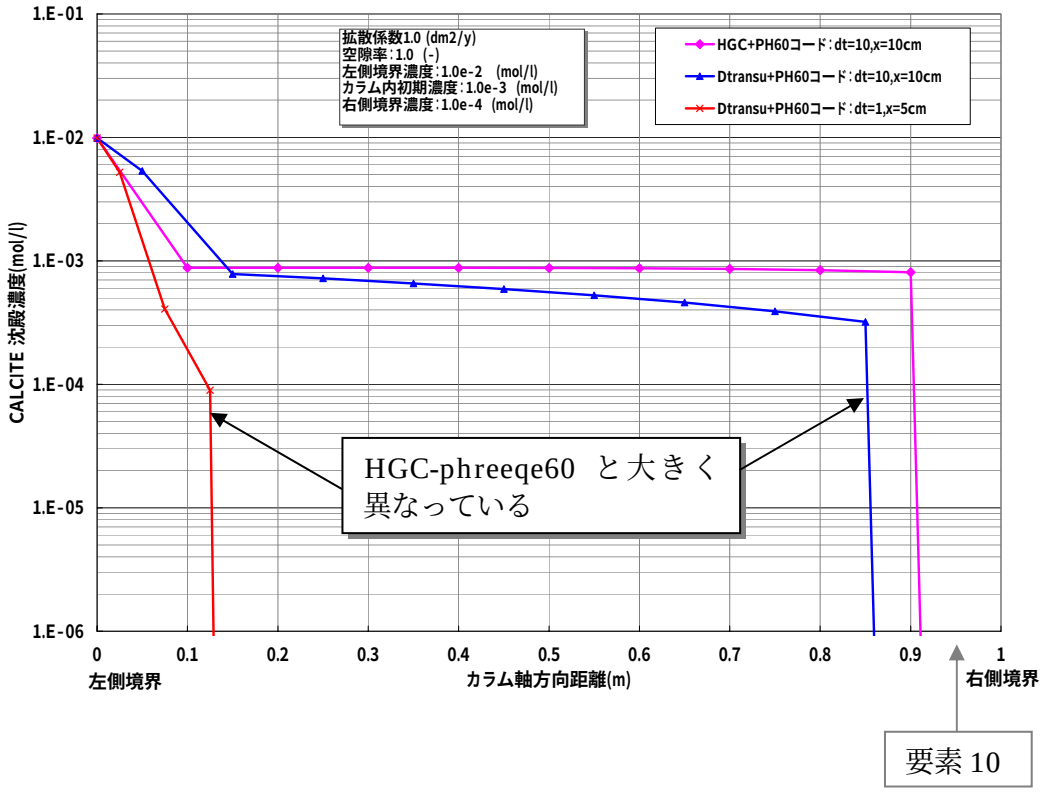


図 3.5-2　THMC 修正前のカラム内沈殿濃度分布

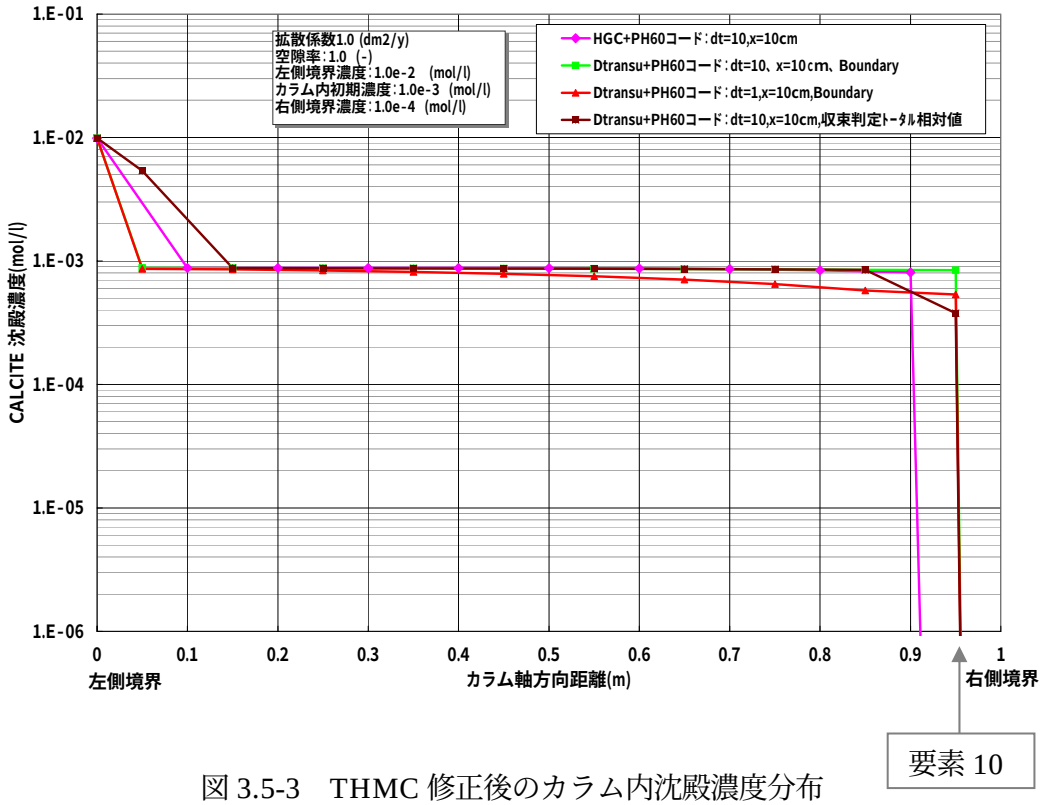


図 3.5-3　THMC 修正後のカラム内沈殿濃度分布

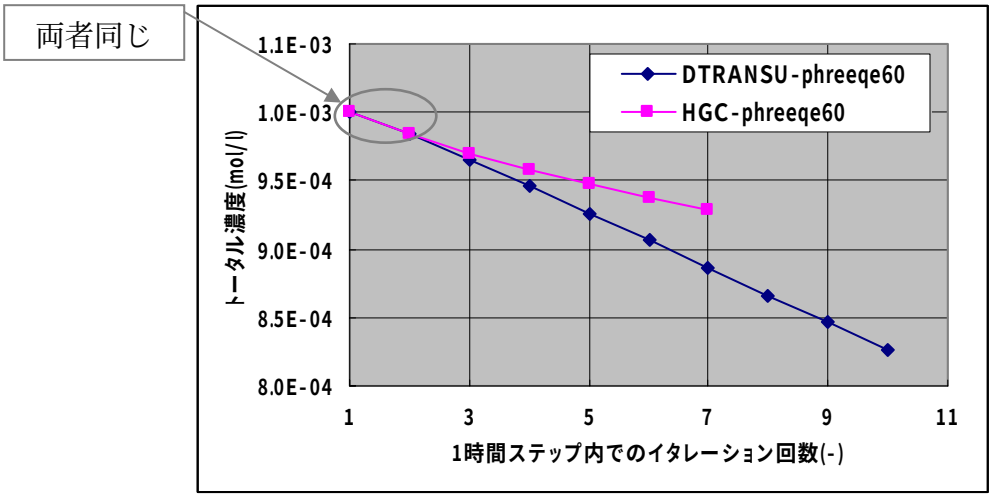


図 3.5-4　イタレーション過程におけるトータル濃度の変遷（要素 10）

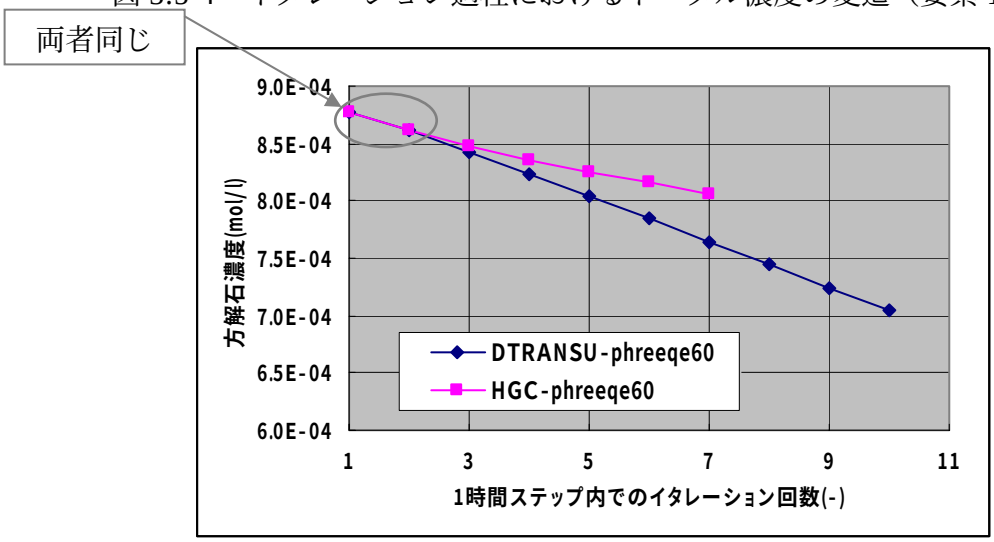


図 3.5-5　イタレーション過程における沈殿（方解石）濃度の変遷（要素 10）

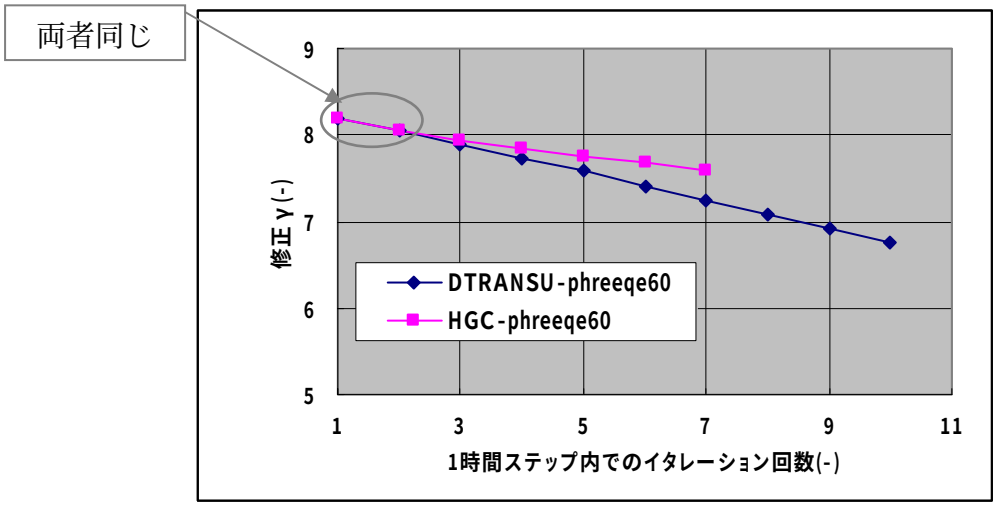


図 3.5-6　イタレーション過程における修正γの変遷（要素 10）

表 3.5-1　Dtransu－phreeqe60 時間ステップ 1 におけるイタレーション中の計算結果

ITIT	DTRANSU	phreeqe60			γ
	溶液濃度	トータル	沈殿濃度	溶液濃度	
(-)	(mol/l)	(mol/l)	(mol/l)	(mol/l)	(-)
1	1.06025E-04	1.00000E-03	8.77900E-04	1.22210E-04	8.1828
2	1.03563E-04	9.83820E-04	8.61610E-04	1.22210E-04	8.0505
3	1.02821E-04	9.65180E-04	8.42970E-04	1.22210E-04	7.8979
4	1.02511E-04	9.45790E-04	8.23580E-04	1.22210E-04	7.7313
5	1.02365E-04	9.26100E-04	8.03890E-04	1.22210E-04	7.5781
6	1.02293E-04	9.06250E-04	7.84050E-04	1.22210E-04	7.4158
7	1.02259E-04	8.86340E-04	7.64130E-04	1.22210E-04	7.2528
8	1.02239E-04	8.66390E-04	7.44190E-04	1.22210E-04	7.0896
9	1.02230E-04	8.46400E-04	7.24220E-04	1.22210E-04	6.9262
10	1.02225E-04	8.26450E-04	7.04240E-04	1.22210E-04	6.7627
11	－	－	－	－	－

表 3.5-2　HGC－phreeqe60 時間ステップ 1 におけるイタレーション中の計算結果

ITIT	HGC	phreeqe60			γ
	トータル濃度	トータル	沈殿濃度	溶液濃度	
(-)	(mol/l)	(mol/l)	(mol/l)	(mol/l)	(-)
1	9.83819E-04	1.00000E-03	8.77940E-04	1.22206E-04	8.1829
2	9.70100E-04	9.83819E-04	8.61613E-04	1.22206E-04	8.0505
3	9.58100E-04	9.70100E-04	8.47890E-04	1.22206E-04	7.9382
4	9.47400E-04	9.58100E-04	8.35900E-04	1.22206E-04	7.8401
5	9.37710E-04	9.47400E-04	8.25190E-04	1.22206E-04	7.7524
6	9.28870E-04	9.37710E-04	8.15500E-04	1.22206E-04	7.6732
7	－	9.28870E-04	8.06660E-04	1.22206E-04	7.6008
8	－	－	－	－	－
9	－	－	－	－	－
10	－	－	－	－	－
11	－	－	－	－	－

赤○印：現状，DTRANSU－phreeqe60 は，HYDROGEOCHEM－phreeqe60 よりもトータル濃度の計算において差が生じている。DTRANSU－phreeqe60 の方が小さいトータル濃度となることから，沈殿濃度を過少評価し，方解石の枯渇を促進する結果となっている。

（３） 連成方式 2

式(7)に基づき，式(3)の左辺第 1 項の効果を考慮し，以下の代替案を検討することとなった。

$$T^{t,n} = C^{t,n} + P^{t,n-1} = C^{t,n} + C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) + C^{t,n}(\gamma^{t,n-1} - \gamma^{t-1}) \qquad \text{式(8)}$$

HGC－phreeqe60 と Dtransu－phreeqe60 の違いは, Dtransu－phreeqe60 の方が，低いトータル濃度と設定され，結果的に低い沈殿濃度が算出されていることである。本方法を採用した場合，式(8)の右辺第 3 項に，トータル濃度増加分を期待していることになる。ただし，検証テストケースにおいて，γ の値は時間の経過（イタレーションの増加）につれて減少しており，式(8)の右辺第 3 項を追加した場合，トータル濃度が更に減少することとなる。トータル濃度の減少に係わる手計算結果を以下に示す。式(8)ならびに表 1 に示す初期条件，Dtransu の結果に基づき計算した。

【時間ステップ 1，ITIT=2 のトータル濃度の算出】

$$T^{t,n} = C^{t,n} + C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) + C^{t,n}(\gamma^{t,n-1} - \gamma^{t-1})$$

$$T^{1,2} = 1.06025\times10^{-4} + 8.77900\times10^{-4} + 1.06025\times10^{-4}(8.1828 - 8.1828)$$

$$T^{1,2} = 9.83925\times10^{-4}(mol/l)$$

この数値は，概ね OK である。沈殿濃度の時間項が理論的，数値解析的にも適用されないため。

【時間ステップ 1，ITIT=3 のトータル濃度の算出】

$$T^{t,n} = C^{t,n} + C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) + C^{t,n}(\gamma^{t,n-1} - \gamma^{t-1})$$

$$T^{1,3} = 1.03562799\times10^{-4} + 8.6161\times10^{-4} + 1.03562799\times10^{-4}(8.0505 - 8.1828)$$

$$T^{1,3} = 9.5147144\times10^{-4}(mol/l)$$

この数値は，式(7)のトータル濃度よりも減少しており，HGC-phreeqe60 の結果と比較しても差が広がる傾向を示している。従って，式(8)の補正は，適切と考えることはできない。

物質移行による溶液濃度の変遷（イタレーション過程での）は図 3.5-7 に示すように，Dtransu-phreeqe60，HYDROGEOCHEM-phreeqe60 で大きく異なっている。Dtransu-phreeqe60 の溶液濃度を厳密に補正するためには，時間項，空間項を考慮する必要があるが，便宜的に式(8)の右辺第 3 項の符号をマイナスとした。

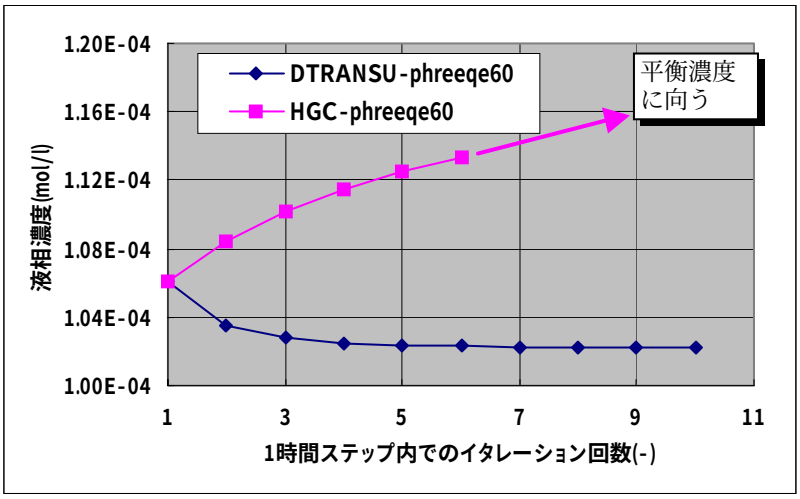


図 3.5-7　イタレーション過程における液相濃度の変遷（要素 10）

$$T^{t,n} = C^{t,n} + P^{t,n-1} = C^{t,n} + C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) - C^{t,n}(\gamma^{t,n-1} - \gamma^{t-1}) \qquad \text{式(9)}$$

【時間ステップ 1，ITIT=2 のトータル濃度の算出】

$$T^{t,n} = C^{t,n} + C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) - C^{t,n}(\gamma^{t,n-1} - \gamma^{t-1})$$

$$T^{1,2} = 1.06025 \times 10^{-4} + 8.77900 \times 10^{-4} - 1.06025 \times 10^{-4}(8.1828 - 8.1828)$$

$$T^{1,2} = 9.83925 \times 10^{-4}(mol/l)$$

この数値は，概ね OK である。沈殿濃度の時間項が理論的，数値解析的にも適用されないため。

【時間ステップ 1，ITIT=3 のトータル濃度の算出】

$$T^{t,n} = C^{t,n} + C^{t,n-1}(\gamma^{t,n-1} - 1) - C^{t,n}(\gamma^{t,n-1} - \gamma^{t-1})$$

$$T^{1,3} = 9.78874157 \times 10^{-4}(mol/l)$$

この数値は，式(7)のトータル濃度よりも増加傾向は示し，かつ HGC-phreeqe60 とほぼ一致する傾向となるが，理論的な根拠に欠ける。ただし，ここで考慮した補正項の係数（-1.0）は，物質移行方程式を近似的に解法していることに対する係数と位置付けることとする。式(9)の補正係数を考慮した結果を図 3.5-8，表 3.5-3 にそれぞれ示す。DTRA－phreeqe60 は，HGC－phreeqe60 と沈殿濃度分布の傾向がほぼ一致することが確認できた（→H13 年のテストケースとの比較は次章参照）。

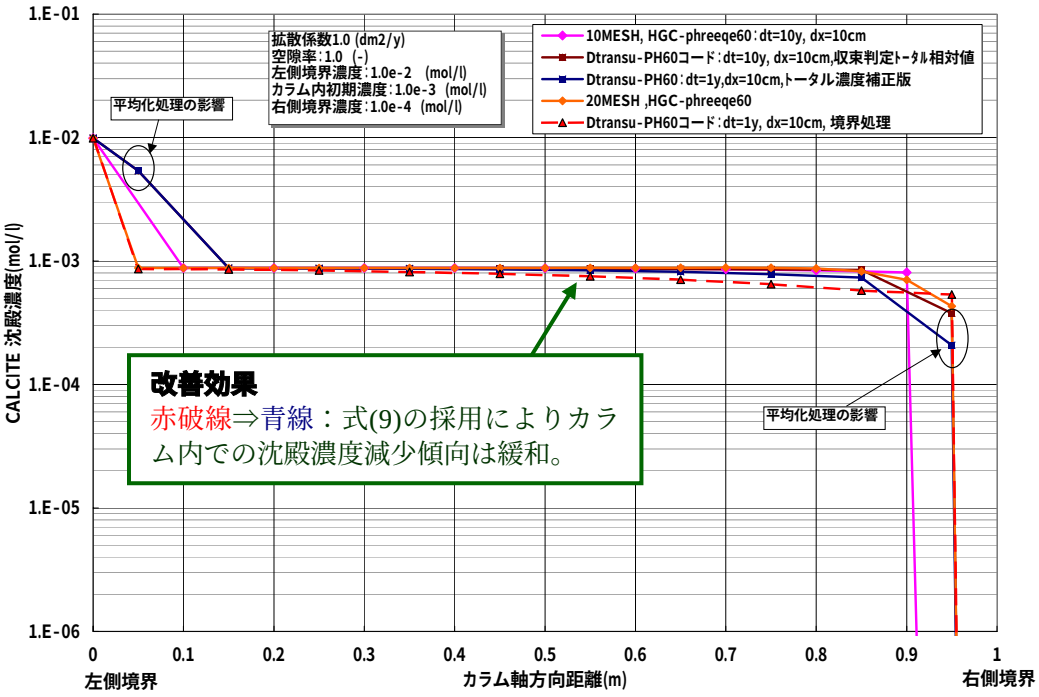


図 3.5-8　THMC 修正後【トータル濃度の補正：式(9)含む】のカラム内沈殿濃度分布

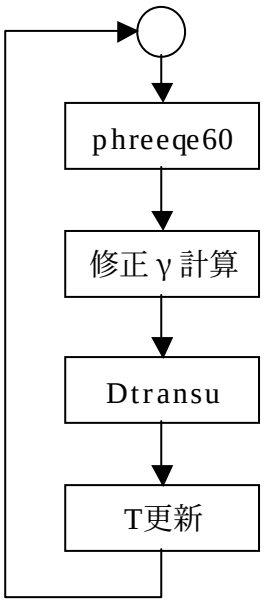
表 3.5-3　詳細数値（HGC-phreeqe60【10 分割】，DTRA-phreeqe60【式(9)補正】）

	座標(m)	DTR-phreeqe60	HGC-phreeqe60
境界節点	0.00	9.8778E-03	
要素 1	0.05	5.3765E-03	―
節点 1	0.10	―	8.7810E-04
要素 2	0.15	8.7360E-04	―
節点 2	0.20	―	8.7820E-04
要素 3	0.25	8.6958E-04	―
節点 3	0.30	―	8.7810E-04
要素 4	0.35	8.6352E-04	―
節点 4	0.40	―	8.7720E-04
要素 5	0.45	8.5411E-04	―
節点 5	0.50	―	8.7500E-04
要素 6	0.55	8.3952E-04	―
節点 6	0.60	―	8.7010E-04
要素 7	0.65	8.1718E-04	―
節点 7	0.70	―	8.6020E-04
要素 8	0.75	7.8353E-04	―
節点 8	0.80	―	8.4141E-04
要素 9	0.85	7.3363E-04	―
節点 9	0.90	―	8.0670E-04
要素 10	0.95	2.0776E-04	―
境界節点	1.00	1.0000E-30	

（4） 連成方式 3

これまでの連成方式は，収束ループ内での溶液濃度の更新を Dtransu の前時間ステップでの濃度としていたが, 連成方式 3 では, 収束ループ内において, 収束ループ過程での更新濃度を図 3.5-9 に示すように地球化学解析コード phreeqe60 の溶液濃度とした。これは，元来，収束の判断として，物質移行で計算される溶液濃度と地球化学で計算される溶液濃度が, ある許容値の範囲内であれば収束するといったロジックに対応させることを考慮したものである。

HYDROGEOCHEM オリジナルの収束計算過程では，図 3.5-7 に示す様に物質移行で計算される溶液濃度が，イタレーション回数の増加にしたがい，化学平衡濃度に漸近することから，連成方式 3 の方法は適切であると考えた。



連成方式 1	連成方式 3	備考
T^{n-1} ↓ C_{ph}^{n}, P_{ph}^{n}	同左	
$\gamma^{n} = \dfrac{T^{n-1}}{C_{pH}^{n}}$	同左	
γ^{n}, C_{Dt}^{t-1} ↓ C_{Dt}^{n}	γ^{n}, C_{ph}^{n} ↓ C_{Dt}^{n}	
式(6) $T^{n} = C_{Dt}^{n} + P_{ph}^{n}$	同左	

図 3.5-9　収束ループ内の物質移行－地球化学連成で使用している関連変数

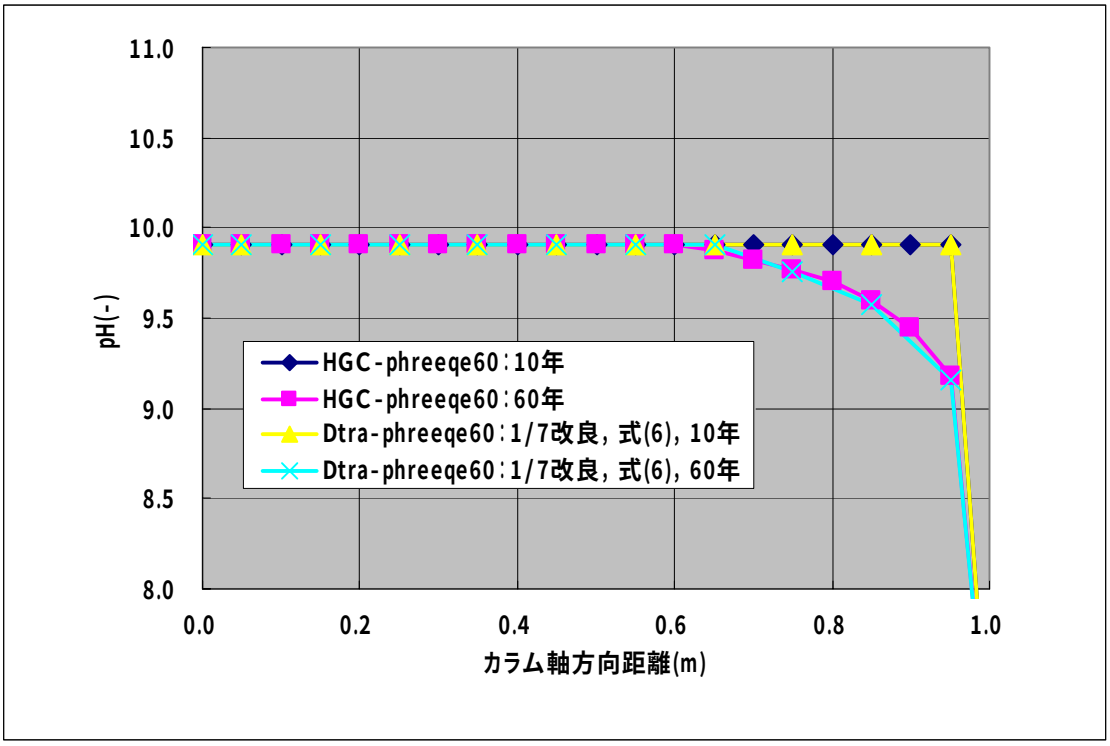


図 3.5-10　カラム内の pH 分布【連成方式 3，式(6)】

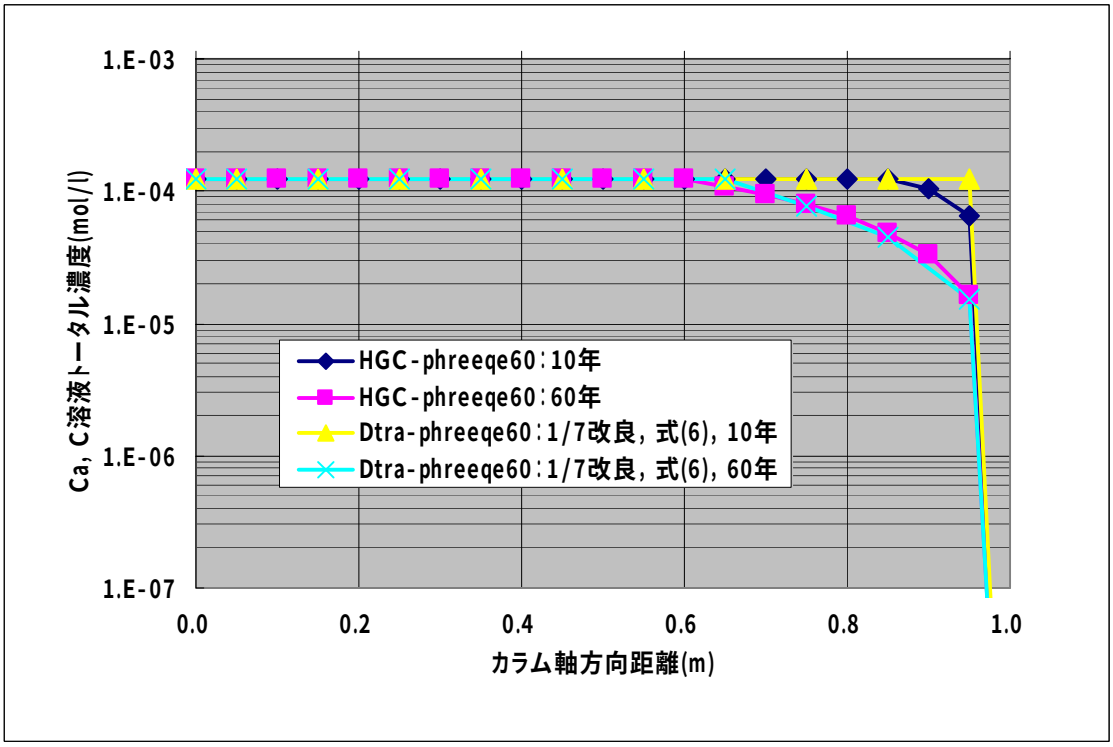


図 3.5-11　カラム内の Ca，C 溶液濃度分布【連成方式 3，式(6)】

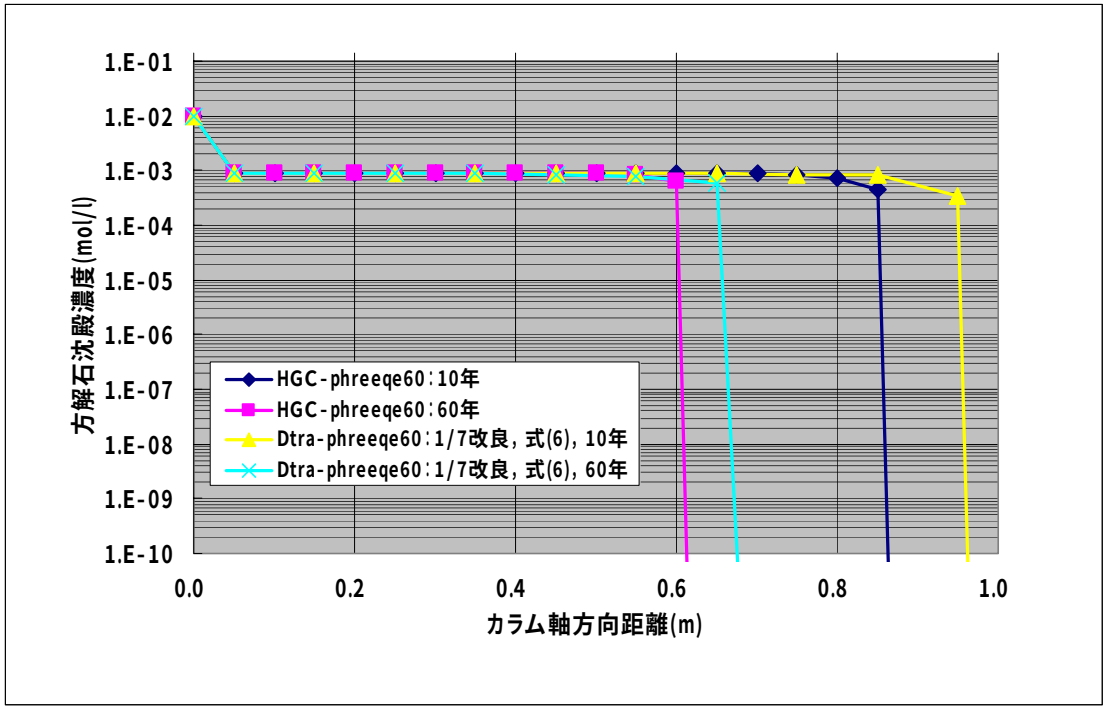


図 3.5-12　カラム内の方解石濃度分布【連成方式 3，式(6)】

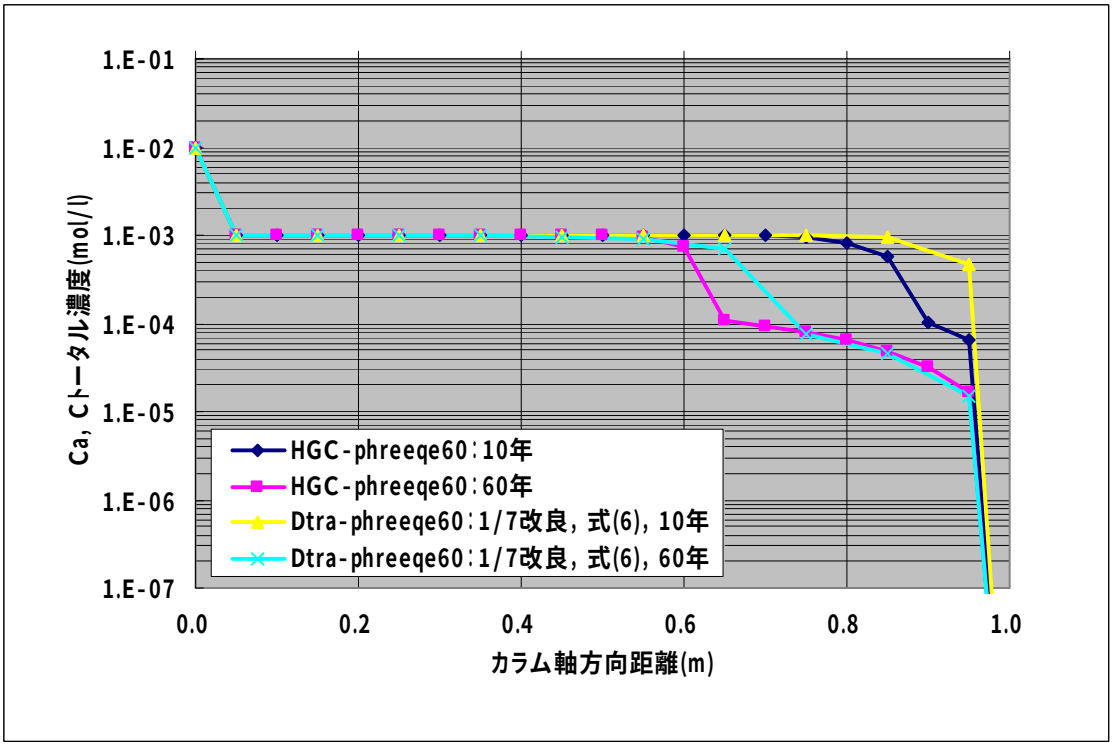


図 3.5-13　カラム内 Ca，C トータル濃度分布【連成方式 3，式(6)】

4．熱－水－応力－化学連成解析コードの構築

本年度構築する熱－水－応力－化学連成解析コードは，熱－水－応力連成解析，物質移行解析，地球化学解析の連成を実現するものとする。第２章，第３章の成果に基づき，メモリ管理プログラム，連成管理プログラムを使用して，熱－水－応力連成解析コードTHAMES，第３章で構築された物質移行（Dtransu），地球化学連成解析コード（phreeqe60）の連成を実現する熱－水－応力－化学連成解析コードを構築した。

4.1 全体構成

本項では，図 4.1-1 に示す個別現象－個別現象，個別現象－THM 連成現象で必要となる関係情報に関する調査を行ない，導入可能な部分については THMC 連成解析コードに導入する。また，連成情報に直接関与しない THMC 物性･連成モジュール（例えば，時間ループ更新，濃度更新など）の作成を行ない，THMC コードを構築する。

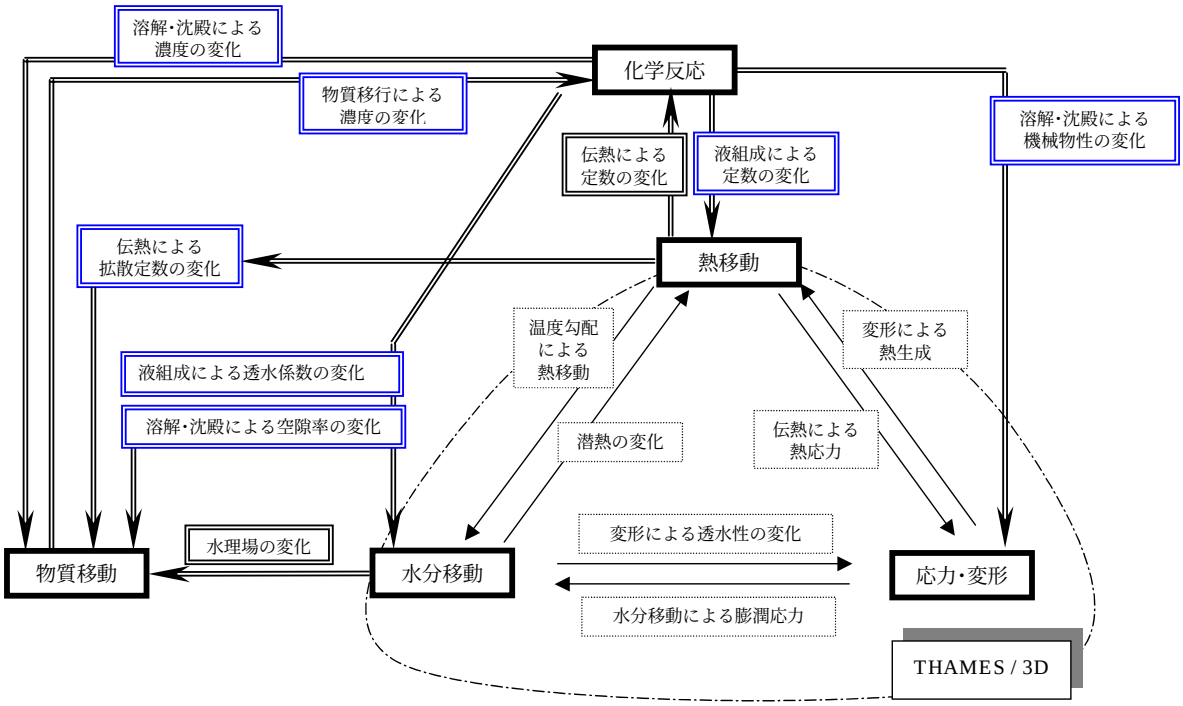


図 4.1-1 THMC 連成解析コードと連成物性モジュールの関係

4.1.1 THMC 連成物性モジュールの調査

THMC 連成を行う上で必要となる連成物性の整備を行うためには，現状を把握しておく必要があることから，先ず，各個別現象の組合せを考慮し，現時点で考えられ得る連成物性について整理した。

① 熱→水　　：水理物性の温度依存性
② 熱→応力　：力学物性の温度依存性
③ 熱→化学　：化学物性の温度依存性
④ 水→熱　　：熱物性の含水比依存
⑤ 水→応力　：力学物性の含水比依存
⑥ 水→化学　：化学物性の含水比依存
⑦ 応力→熱　：熱物性の密度依存
⑧ 応力→水　：水理物性の密度依存
⑨ 応力→化学：化学物性の密度依存
⑩ 化学→熱　：熱物性の化学環境依存
⑪ 化学→水　：水理物性の化学環境依存
⑫ 化学→応力：力学物性の化学環境依存

これらの組み合わせを相関マトリクスとしてまとめた結果を表 4.1-1 に示す。本表に示した THMC 連成物性を対象として，サイクル機構殿が所有しているデータについて整理した結果についてまとめている。

表 4.1-1　物性値の相関マトリクス

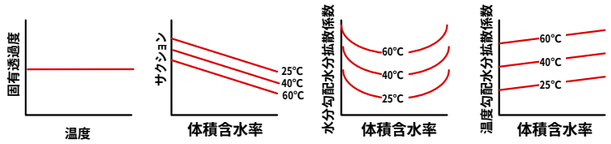
<table>
<tr>
<td>熱</td>
<td>①熱→水
 

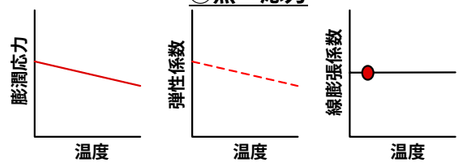
図 4.1-2　水理物性の温度依存</td>
<td>②熱→応力
 

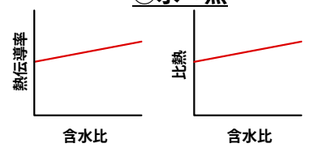
図 4.1-3　力学物性の温度依存</td>
<td>③熱→化学
1）平衡定数の温度依存性
2）分子拡散係数の温度依存性</td>
</tr>
<tr>
<td>④水→熱
 

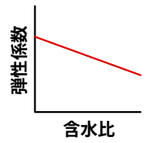
図 4.1-4　熱物性の飽和度依存</td>
<td>水</td>
<td>⑤水→応力
 

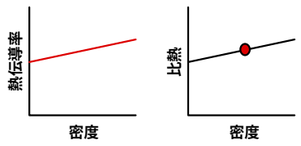
図 4.1-5　力学物性の含水比依存</td>
<td>⑥水→化学
特に無し</td>
</tr>
<tr>
<td>⑦応力→熱
 

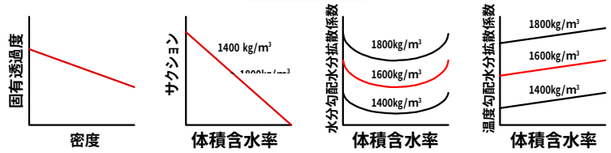
図 4.1-6　熱物性の密度依存</td>
<td>⑧応力→水
 

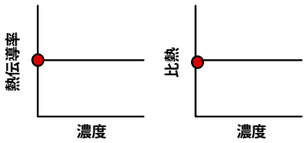
図 4.1-7　水理物性の密度依存</td>
<td>応力</td>
<td>⑨応力→化学
1）実効拡散係数の乾燥密度依存性</td>
</tr>
<tr>
<td>⑩化学→熱
1）間隙水組成に起因するもの
 

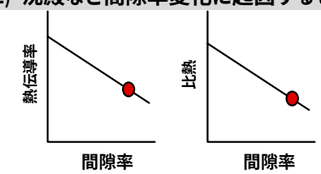
図 4.1-8　熱物性の溶液濃度依存
2）沈殿など間隙率変化に起因するもの
 

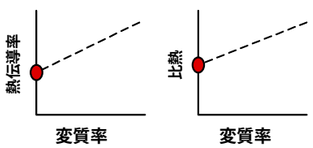
図 4.1-9　沈殿などによる熱物性の変化
3）鉱物の変質に起因するもの
 

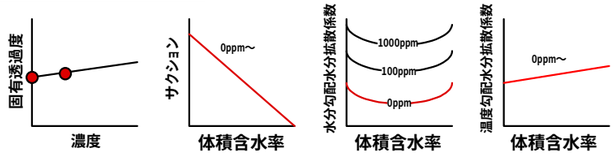
図 4.1-10　鉱物の変質による熱物性の変化</td>
<td>⑪化学→水
1）間隙水組成に起因するもの
 

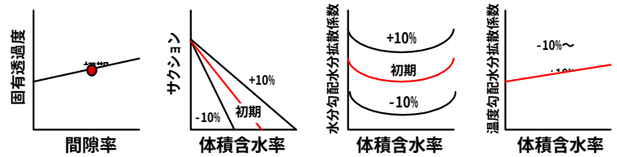
図 4.1-11　水理物性の溶液濃度依存
2）沈殿など間隙率変化に起因するもの
 

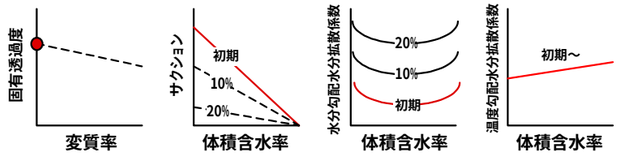
図 4.1-12　沈殿などによる水理物性の変化
3）鉱物の変質に起因するもの
 

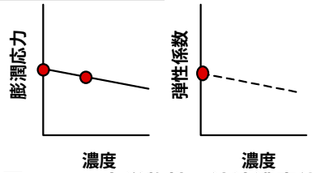
図 4.1-13　鉱物の変質による水理物性の変化</td>
<td>⑫化学→応力
1）間隙水組成に起因するもの
 

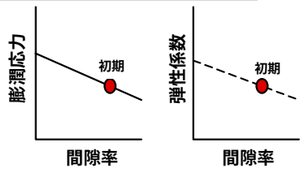
図 4.1-14　力学物性の溶液濃度依存
2）沈殿など間隙率の変化に起因するもの
 

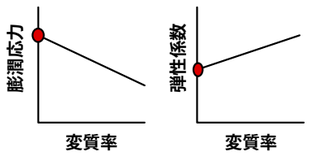
図 4.1-15　沈殿などによる力学物性の変化
3）鉱物の変質に起因するもの
 

図 4.1-16　鉱物の変質による力学物性の変化</td>
<td>化学</td>
</tr>
</table>

(1) 水理物性の温度依存性【熱→水】

① 固有透過度

温度依存なし（表 4.1-2 参照）。

表 4.1-2　人工バリア構成要素材料の固有透過度

係数	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelV1	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelOT-9607	ｹｲ砂混合材
a_1	$1.76\times10^{-8}T$-3.04×10^{-7}	$3.68\times10^{-8}T$-2.08×10^{-7}	$2.99\times10^{-8}T$-3.74×10^{-7}
a_2	-$1.48\times10^{-7}T$+2.98×10^{-6}	-$3.58\times10^{-9}T$-2.19×10^{-7}	-$1.50\times10^{-8}T$+1.49×10^{-7}
b_1	-3.68×10^{-3}	-1.00×10^{-3}	-2.49×10^{-3}
b_2	$5.22\times10^{-3}T$+2.68×10^{-1}	0.41	$5.59\times10^{-4}T$+3.93×10^{-1}
θ_s	0.333	0.389	0.403
K	4.00×10^{-21}	2.00×10^{-20}	4.00×10^{-20}

T ；温度[℃]

② サクション

実測では若干の温度依存性が認められるが(JNC TN8430 99-010　緩衝材の不飽和水理物性)，THAMES では温度依存なしの取り扱い。THAMES では水分勾配水分拡散係数の温度依存性を考慮しているため，不飽和水分移動の温度影響は考慮している。

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \{1 + |\alpha\psi|^n\}^{-m} \qquad (\alpha > 0)$$
$$m = 1 - \frac{1}{n} \qquad (0 < m < 1,\ n > 1)$$

表 4.1-3　人工バリア構成要素材料の VG モデルにおけるパラメータの値

	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelV1	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelOT-9607	ｹｲ砂混合材
θs [-]	0.333	0.389	0.403
θr [-]	0.000	0.000	0.000
α [1/cm]	6.0×10^{-6}	1.5×10^{-5}	8.0×10^{-5}
n [-]	2.5	1.8	1.6

③ 水分勾配水分拡散係数

$$D_\theta = D_{\theta v} + D_{\theta l} = \frac{a_1(\theta - \theta_s)}{(\theta - b_1)(b_1 - \theta_s)} + \frac{a_2\,\theta}{b_2(\theta - b_2)}$$

表 4.1-4　人工バリア構成要素材料の水分勾配水分拡散係数の係数の値

係数	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelV1	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelOT-9607	ｹｲ砂混合材
a_1	$1.76\times10^{-8}T-3.04\times10^{-7}$	$3.68\times10^{-8}T-2.08\times10^{-7}$	$2.99\times10^{-8}T-3.74\times10^{-7}$
a_2	$-1.48\times10^{-7}T+2.98\times10^{-6}$	$-3.58\times10^{-9}T-2.19\times10^{-7}$	$-1.50\times10^{-8}T+1.49\times10^{-7}$
b_1	-3.68×10^{-3}	-1.00×10^{-3}	-2.49×10^{-3}
b_2	$5.22\times10^{-3}T+2.68\times10^{-1}$	0.41	$5.59\times10^{-4}T+3.93\times10^{-1}$
θ_s	0.333	0.389	0.403
K	4.00×10^{-21}	2.00×10^{-20}	4.00×10^{-20}

T ；温度[℃]

④ 温度勾配水分拡散係数

$$D_T = D_{To}\,exp\left(\alpha_T \frac{T - T_o}{T_o}\right)$$

表 4.1-5　人工バリア構成要素材料の温度勾配水分拡散係数の係数の値

	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelV1	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelOT-9607	ｹｲ砂混合材
D_{To} [$cm^2/s/℃$]	2.0×10^{-8}	1.0×10^{-7}	7.0×10^{-8}
T_o [℃]	-	10.0	-
α_T [-]	0.0	0.1	0.0

(2) 力学物性の温度依存性【熱→応力】

① 膨潤応力

実測では温度が高くなると膨潤応力が低下する傾向が認められている(JNC TN8400 99-038　緩衝材の膨潤物性)。THAMES では膨潤応力の温度依存性は考慮されていない。

$$\pi' = F\pi = F\rho_l g\left|\int_{\theta_0}^{\theta_1}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}d\theta\right|$$

表 4.1-6　人工バリア構成要素材料において同定された F 値

	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelV1	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelOT-9607	ｹｲ砂混合材
F値	0.160	0.120	0.050

② 弾性係数

実測では温度が高くなると弾性係数が低下する可能性が認められている(JNC TN8400 99-038　緩衝材の膨潤物性)が，測定数が少なくデータのばらつきも多い。THAMES では弾性係数の温度依存性は考慮されていない（表 4.1-7 参照)。

③ 線膨張係数

線膨張係数の温度依存性に関するデータは無く, THAMES でも線膨張係数は一定値の取り扱いである（表 4.1-7 参照)。

表 4.1-7　第２次取りまとめ緩衝材再冠水解析に用いられた物性値

物性値	ガラス固化体	ｵｰﾊﾞｰﾊﾟｯｸ	緩衝材	埋め戻し材	岩盤
弾性係数 [MPa]	8.2×10^{4}	2.0×10^{5}	$58.74\text{-}1.87\omega$	3.0×10^{0}	3.7×10^{4}
ポアソン比 [-]	0.3	0.3	0.3	0.4	0.25
乾燥密度 [Mg m^{-3}]	2.80	7.80	1.60	1.80	2.67
固有透過度 [m^2]	1.0×10^{-30}	1.0×10^{-30}	4.0×10^{-20}	6.0×10^{-19}	1.0×10^{-15}
熱伝導率 [W m^{-1} K^{-1}]	1.2	53.0	(4.3.1-19)式	(4.3.1-19)式	2.8
比熱 [kJ kg^{-1} K^{-1}]	0.96	0.46	(4.3.1-20)式	(4.3.1-20)式	1.0
熱膨張係数 [K^{-1}]	1.0×10^{-6}	1.64×10^{-6}	1.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}

(3) 化学物性の温度依存性【熱→化学】

① 平衡定数

水溶性化学種，鉱物化学種の平衡定数の温度依存性は，経験的な多項近似式【式(4.1)】または，Van't Hoff の式【式(4.2)】により導出される。これらの式は，地球化学コード phreeqe60 の機能として備わっており，両式で使われている係数を水溶性化学種，鉱物化学種毎に phreeqe60 の熱力学データベースに登録する必要がある。本研究では，温度依存の熱力学データが比較的整備されているサイクル機構殿の SPRON.JNC が利用候補の対象として挙げられる。

$$\log K = A_1 + A_2 T + A_3 / T + A_4 \log T + A_5 / T^2 \qquad \text{式(4.1)}$$

$$\ln K - \ln K_0 = -\frac{\Delta_r H_m^0}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right) \qquad \text{式(4.2)}$$

② 分子拡散係数

「拡散係数の温度依存性に関しては，実効拡散係数の温度依存性に関する実測データは報告されていないものの，自由水中の拡散係数には温度依存性があることが知られている。これは，温度上昇に伴ってブラウン運動していた分子の運動エネルギーが増加するためである。また，温度上昇にともなって間隙水の粘性が小さくなり，物質が移動し易くなることも一因として上げられる。」(JNC TN1400 99-023　第２次取りまとめ分冊３)

「実効拡散係数の温度依存性は，拡散する化学種とベントナイト表面との静電的相互作用に温度依存性がないとすれば，理論的には拡散する化学種の自由水中の拡散係数の温度依存性と等しくなる。したがって，イオンの自由水中の拡散の活性化エネルギーによって補正することができる。活性化エネルギーは，イオンによって異なるものの，H+と OH-を除く他のイオンに対しては，水を媒体とする電導現象ではどんな場合でもおおよそ 15.05kJ/mol である。」(JNC TN1400 99-023　第２次取りまとめ分冊３)

自由水中の拡散係数(＝分子拡散係数)の温度依存性は，アレニウスの式で算出できる(PNC TN8410 98-097 Data Setting for Effective Diffusion Coefficients (De) of Nuclides in the Buffer for Reference Case in

Performance Assessment of the Geological Disposal of Highe-Level Radioactive Waste (I))。

$$Do = D \cdot \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$$

ここで,

Do ：自由水中の拡散係数(＝分子拡散係数)

D ：frequency factor

Q ：activation energy（活性化エネルギー)

である。

なお，実行拡散係数 De と自由水中の拡散係数(＝分子拡散係数) Do の関係は,以下の式で記述される(JNC TN1400 99-023　第２次取りまとめ分冊３)。

$$De = \frac{\varepsilon\delta}{\tau^2} Do$$

ここで,

ε ：間隙率

δ ：収れん度

τ^2 ：屈曲度

である。

実効拡散係数 De は，以下の支配方程式で使用される(PNC TN8410 98-097 Data Setting for Effective Diffusion Coefficients (De) of Nuclides in the Buffer for Reference Case in Performance Assessment of the Geological Disposal of Highe-Level Radioactive Waste (I))。

$$(\varepsilon + \rho Kd)\frac{\partial C}{\partial t} = De\nabla^2 C - \lambda_d(\varepsilon + \rho Kd)C$$

ここで,

ρ ：dry bulk density of bentonite(ベントナイト乾燥密度)

Kd ：distribution coefficient(分配係数)

λ_d ：decay constant(崩壊定数)

である。

一方, Dtransu の支配方程式および分散テンソルは以下のようになっており,

取り扱いが多少異なる。

a）支配方程式

$$R\theta\rho\frac{\partial c}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta\rho D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j})-\theta\rho V_i\frac{\partial c}{\partial x_i}-R\theta\rho\lambda c-Q_c$$

ここで,

R	：遅延係数	[-]
D_{ij}	：分散テンソル	[L^2T^{-1}]
V_i	：実流速	[LT^{-1}]
Q_c	：源泉項（解析領域内での湧き出し）	[ML^3T^{-1}]
λ	：減衰定数	[T^{-1}]
θ	：体積含水率	[-]
ρ	：流体密度	[ML^{-3}]
c	：濃度	[-]
t	：時間	[T]

である。

b）分散テンソル

$$D_{ij}=\alpha_T\|V\|\delta_{ij}+(\alpha_L-\alpha_T)\frac{V_iV_j}{\|V\|}+\alpha_m\tau\delta_{ij}$$

ここで,

α_T	：横分散長	[L]
α_L	：縦分散長	[L]
V_i	：実流速ベクトル	[LT^{-1}]
$\|V\|$	：実流速の絶対値	[LT^{-1}]
α_m	：分子拡散係数	[L^2T^{-1}]
τ	：屈曲率	[-]
δ_{ij}	：クロネッカデルタ	

である。

(4) 熱物性の含水比依存性【水→熱】

① 熱伝導率

THAMES では熱伝導率を含水比の関数として与えている。

② 比熱

THAMES では比熱を含水比の関数として与えている。

表 4.1-8　人工バリア構成要素材料の熱物性の含水比依存性

	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelV1	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelOT-9607	ｹｲ砂混合材
熱伝導率 [W/m/K]	5.58×10^{-1} $+6.17\times10^{-2}\omega+$ $-5.28\times10^{-4}\omega^2$ $-9.67\times10^{-6}\omega^3$	$0.050\omega+0.503$	4.44×10^{-1} $+1.38\times10^{-2}\omega+$ $+6.14\times10^{-3}\omega^2$ $-1.69\times10^{-4}\omega^3$
比熱 [kJ/kg/K]	$\frac{32.3+4.18\,\omega}{100+\omega}$	$\frac{42.6+4.18\,\omega}{100+\omega}$	$\frac{34.1+4.18\,\omega}{100+\omega}$

(5) 力学物性の含水比依存性【水→応力】

① 弾性係数

THAMES では弾性係数を含水比の関数として与えている。

表 4.1-9　人工バリア構成要素材料の力学物性の含水比依存性

	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelV1	ﾍﾞﾝﾄﾅｲﾄKunigelOT-9607	ｹｲ砂混合材
弾性係数[MPa]	1140.0 - 55.64ω	254.9 - 8.854ω	58.74 - 1.87ω
ポアソン比[-]	0.3	0.3	0.3

ω ; 含水比 [%]

(6) 化学物性の含水比依存性【水→化学】

特に無し。

(7) 熱物性の密度依存性【応力→熱】

① 熱伝導率

熱伝導率のベントナイト乾燥密度依存性に関するデータは実測されている(PNC TN8410 92-057　緩衝材の物性試験(Ⅰ)ほか)。なお，THAMES は熱伝導率の密度依存性を考慮していない。

② 比熱

比熱のベントナイト乾燥密度依存性に関するデータは実測がないものの，理論式で算定可能である。なお，THAMES は比熱の密度依存性を考慮していない。

$$\rho c = c_s \rho_s + c_w \rho_w + c_a \rho_a$$

(8) 水理物性の密度依存性【応力→水】

① 固有透過度

固有透過度のベントナイト乾燥密度依存性は有効粘土密度で整理されている(PNC TN8410 97-296　緩衝材の飽和透水特性)。なお，THAMES は固有透過度のベントナイト乾燥密度依存性は考慮していない。

$$K = \exp\left(-42.1 + 1.1447\rho_b - 2.1232{\rho_b}^2\right)$$

② サクション

ベントナイト乾燥密度の違いによるサクションの顕著な差異はない(PNC TN8410 96-117　緩衝材の不飽和水理特性)。THAMES もサクションのベントナイト乾燥密度依存性は考慮していない。

③ 水分勾配水分拡散係数

水分勾配水分拡散係数のベントナイト乾燥密度依存性に関するデータはない。THAMES もこれを考慮していない。

④ 温度勾配水分拡散係数

温度勾配水分拡散係数のベントナイト乾燥密度依存性に関するデータはない。

THAMES もこれを考慮していない。

(9) 化学物性の密度依存性【応力→化学】

① 実効拡散係数

実効拡散係数のベントナイト密度依存性に関するデータが取得されている（図 4.1-17 参照：JNC TN1400 99-023　第２次取りまとめ分冊３，PNC TN8410 98-097 Data Setting for Effective Diffusion Coefficients (De) of Nuclides in the Buffer for Reference Case in Performance Assessment of the Geological Disposal of Highe-Level Radioactive Waste (I))。この図で記載されているデータは，クニゲル V1 単体に対する実効拡散係数である。第２次取りまとめでは，実効拡散係数のベントナイト密度依存性が得られている Cs, HTO については，最小二乗回帰して実験式を導出し，密度 1.6Mg/m3 での値が求められている。

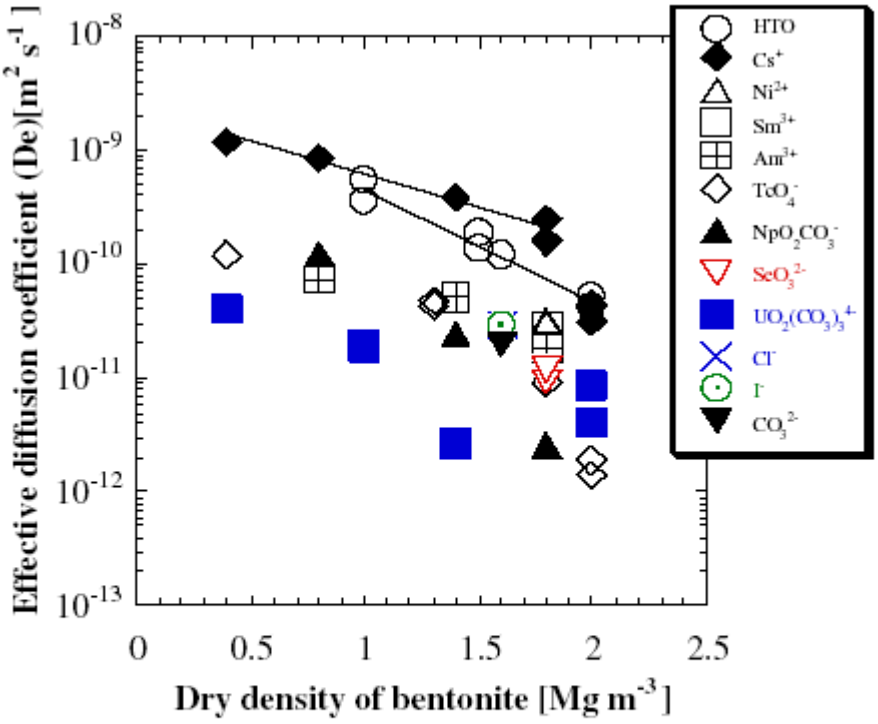


図 4.1-17　実効拡散係数のベントナイト密度依存性

【備考：実効拡散係数に与えるケイ砂混合の影響】

密度 1.6Mg/m3 のベントナイトでの HTO，I^-，Cl^-，CO_3^{2-}の実効拡散係数のケイ砂混合率依存性の実測結果では，ケイ砂混合率の増加にともなって実効拡散係数も増加傾向がみられる（図 4.1-18 参照：JNC TN1400 99-023　第２次取りまとめ分冊３，PNC TN8410 98-097 Data Setting for Effective Diffusion Coefficients (De) of Nuclides in the Buffer for Reference Case in Performance Assessment of the Geological Disposal of Highe-Level Radioactive Waste (I)）。HTO については，70wt%の混合率でさえ 2 倍程度の増加であるが，陰イオンの I^-，Cl^-，CO_3^{2-}については，比較的低い混合率から若干の実効拡散係数のケイ砂混合率依存性がみられる。

以上の知見より, 第 2 次取りまとめでは, Cs および HTO については, 30wt%のケイ砂混合による値の補正は行わないこととしている。一方, I^-については, 実効拡散係数のケイ砂混合率依存性から，ケイ砂 30wt%での値を求め，これを Se に対する設定値としている。

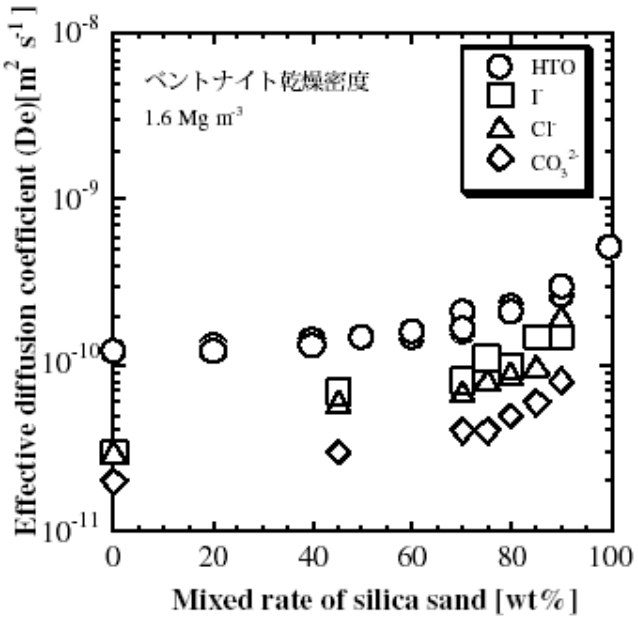


図 4.1-18　実効拡散係数のケイ砂混合率依存性

(10)熱物性の化学環境依存性【化学→熱】

1) 間隙水組成に起因するもの

① 熱伝導率，比熱

熱伝導率，比熱の溶液濃度依存性に関するデータはない。溶液自身の熱伝導率，比熱が溶液濃度によってどのくらい変化するかを確認する必要がある。これが微小なものであれば，媒体の熱伝導率，比熱の溶液濃度依存性を考慮する必要はない。

2) 沈殿など間隙率の変化に起因するもの

① 熱伝導率，比熱

熱伝導率，比熱に関して，沈殿など間隙率変化の依存性に関するデータはない。データ取得も難しいことから，何らかの算定式を導入することが求められる。比熱に関しては気液固の存在比率を把握すれば理論式が利用可能である（固相の比熱が組成に依存しないとすれば…）。熱伝導率に関しては，気液固の存在形態＝空間分布を仮定した推定式がいくつか提案されている（JNC TJ8400 2000-017 熱点源法による緩衝材の熱物性値の測定(埋め戻し材の物性測定と計測装置の改良)ほか）。これらを導入するにあたっては，間隙率変化が熱伝導率，比熱にどの程度の影響を及ぼすか事前に確認することが必要である。

3) 鉱物の変質に起因するもの

① 熱伝導率，比熱

鉱物の変質による熱伝導率，比熱の変化に関するデータはない。変質鉱物自身の熱伝導率，比熱が変質前と大きく変化するものかどうか事前に確認が必要である。

(11)水理物性の化学環境依存性【化学→水】

1) 間隙水組成に起因するもの

① 固有透過度

人工海水のデータが取得されている（図 4.1-19 参照）。JNC では今後，

温度および塩濃度をパラメータとしたデータの拡充を行う予定である。また，茨城大学小峰助教授の透水特性評価式を調査したところ，Na 型ベントナイトに蒸留水を通水した場合の透水係数評価となっており，地下水が陽イオンを多く含まない場合にのみ適用できるとされていた（土木学会論文集 No.708/Ⅲ-59，133-144，2002.6　ベントナイト緩衝材・埋戻し材の透水特性と簡易評価法の提案)。論文の中では，「今後，ベントナイトの種類や水質，温度を変化させた透水実験を行いデータを蓄積すると共に，理論的な検討を行う必要がある。」と記述されている。

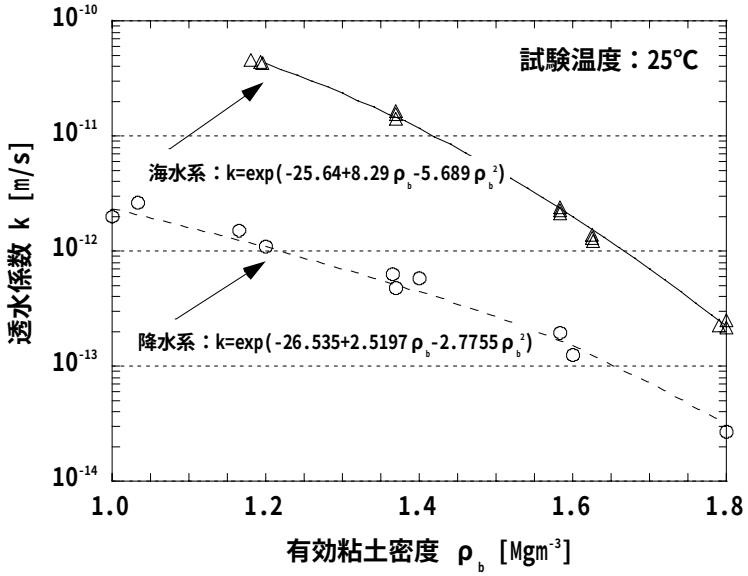


図 4.1-19　飽和透水係数と有効粘土密度の関係

② サクション

水理解析で必要となるサクションはマトリックポテンシャルと言われる。マトリックポテンシャルは間隙水組成に左右されない媒体物性であり，JNC 殿で取得してきたサクションもマトリックポテンシャルとして整理されている。

③ 水分勾配水分拡散係数

水分勾配水分拡散係数の間隙水組成依存性に関するデータはない。固有透過度の変化率から水分勾配水分拡散係数を推定する（$D_\theta / D_{\theta 0} = K / K_0$）

か，間隙水組成を変化させた浸潤試験でデータ取得を行うことになる。ただし，試験中には浸潤方向の濃度分布が発生するため，水分勾配水分拡散係数 vs.体積含水率 vs.溶液濃度の関係について網羅的にデータ整備するのは難しい。

④ 温度勾配水分拡散係数

温度勾配水分拡散係数の間隙水組成依存性に関するデータはない。主に水蒸気移動を表現するパラメータであり，間隙水組成に影響を受けないものと推察される。

2) 沈殿など間隙率の変化に起因するもの

① 固有透過度

固有透過度に関して, 沈殿など間隙率変化の依存性に関するデータはない。データ取得は難しいことから，何らかの算定式を導入することが求められる。

Kozeny-Carman の経験式：$K = n^3 / 5S^2 (1-n)^2$ 、S ：固相の比表面積

② サクション

サクションに関して, 沈殿など間隙率変化の依存性に関するデータはない。ベントナイトのサクションはスメクタイト含有率で正規化できる(JNC TN8410 96-117　緩衝材の水分ポテンシャルと水分拡散係数)。沈殿などで変化した間隙率に対応する VG モデルパラメータを，この正規曲線とのフィッティングから算定することは可能である。

③ 水分勾配水分拡散係数

水分勾配水分拡散係数に関して, 沈殿など間隙率変化の依存性に関するデータはない。データ取得は難しいことから，固有透過度の変化率から水分勾配水分拡散係数を推定する（$D_\theta / D_{\theta 0} = K / K_0$）などの対処になる。

④ 温度勾配水分拡散係数

温度勾配水分拡散係数に関して, 沈殿など間隙率変化の依存性に関するデータはない。主に水蒸気移動を表現するパラメータであり，間隙率変化に影響を受けないものと推察される。

3) 鉱物の変質に起因するもの

① 固有透過度

クニゲル V1 を強制的にカルシウム型化させた Ca 型化クニゲル V1 の固有透過度が測定されている。Ca 型化クニゲル V1 の固有透過度は，有効粘土密度が 1.6～1.7kg/m3 程度以上において同等の値を示すが，それ以下の有効粘土密度領域で Ca 型化クニゲル V1 の固有透過度は，クニゲル V1 の値よりも大きい値を示す傾向にある(PNC TN8410 98-021　カルシウム型化およびカルシウム型ベントナイトの基本特性－膨潤圧，透水係数，一軸圧縮強度および弾性係数)。なお，ケイ砂 30wt%混合体乾燥密度 1.6Mg/m3 の有効粘土密度：1.6×(1－0.3)÷(1－1.6×0.3÷2.64)＝1.37Mg/m3 である。

② サクション

鉱物の変質によるサクションの変化に関するデータはない。鉱物の変質による影響の程度を文献調査等で確認する必要がある。

③ 水分勾配水分拡散係数

鉱物の変質による水分勾配水分拡散係数の変化に関するデータはない。データ取得は難しいことから，固有透過度の変化率から水分勾配水分拡散係数を推定する（$D_\theta / D_{\theta 0} = K / K_0$）などの対処になる。

④ 温度勾配水分拡散係数

鉱物の変質による温度勾配水分拡散係数の変化に関するデータはない。主に水蒸気移動を表現するパラメータであり，鉱物の変質に影響を受けないものと推察される。

(12)力学物性の化学環境依存性【化学→応力】

1) 間隙水組成に起因するもの

① 膨潤応力

人工海水のデータが取得されている（JNC TN8400 99-038　緩衝材の膨潤特性，図 4.1-20 参照)。人工海水を用いた場合の膨潤応力は，有効粘土密度が低い範囲で蒸留水を用いた場合の膨潤応力の値より低下している（ケイ砂 30wt%混合体乾燥密度 1.6Mg/m3 の有効粘土密度：1.6×(1－0.3)÷(1－1.6×0.3÷2.64)＝1.37Mg/m3)。また，茨城大学小峰助教授は，「砂・ベントナイト混合材料や海外産ベントナイトへ適用可能とするため，砂とベントナイトの配合割合および含有される交換性陽イオンの種類や組成を考慮できる膨潤評価式」(粘土科学第 41 巻第 4 号 182-189,2002　高レベル放射性廃棄物処分におけるベントナイト粘土の役割と技術開発動向)を構築している。この評価式では，間隙水のイオン濃度および誘電率を考慮できるようになっているが，人工海水等を浸潤させた場合の膨潤応力の算定はなされていない。

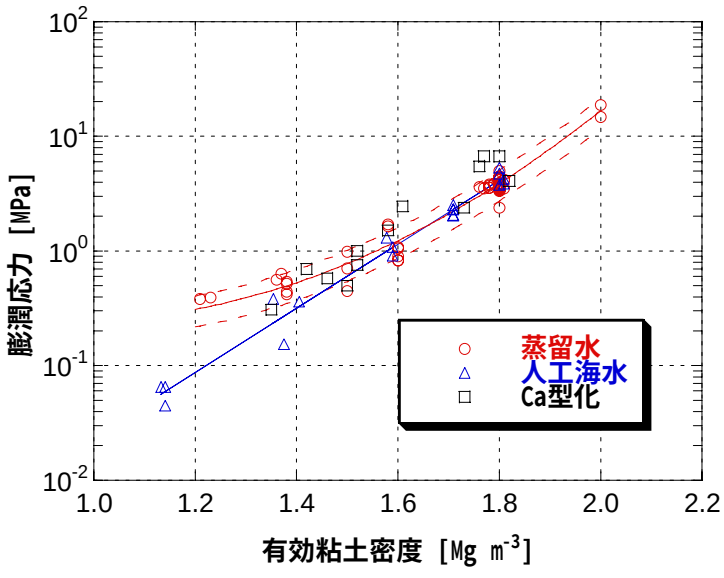


図 4.1-20　膨潤応力と有効粘土密度の関係

② 弾性係数

弾性係数の間隙水組成依存性に関するデータはない。今後，緩衝材の力学特性試験にて人工海水の弾性係数(含水飽和状態)が取得される計画である。

2) 沈殿など間隙率変化に起因するもの

① 膨潤応力

膨潤応力に関して，沈殿など間隙率変化の依存性に関するデータはない。ただし，ベントナイトの膨潤応力はスメクタイト含有率で正規化することが可能である(JNC TN8400 99-038　緩衝材の膨潤特性，図 4.1-20 参照)。

② 弾性係数

弾性係数に関して，沈殿など間隙率変化の依存性に関するデータはない。データ取得および算定式の構築も難しい。

3) 鉱物の変質に起因するもの

① 膨潤応力

クニゲル V1 を強制的にカルシウム型化させた Ca 型化クニゲル V1 の膨潤圧が測定されている。Ca 型化クニゲル V1 の膨潤圧は，有効粘土密度が 1.6～1.7kg/m3 程度以上において同等の値を示すが，それ以下の有効粘土密度領域で Ca 型化クニゲル V1 の膨潤圧は，クニゲル V1 の値よりも小さい値を示す傾向にある(PNC TN8410 98-021　カルシウム型化およびカルシウム型ベントナイトの基本特性－膨潤圧，透水係数，一軸圧縮強度および弾性係数)。なお，ケイ砂 30wt%混合体乾燥密度 1.6Mg/m3 の有効粘土密度：1.6×(1－0.3)÷(1－1.6×0.3÷2.64)＝1.37Mg/m3 である。

② 弾性係数

クニゲル V1 を強制的にカルシウム型化させた Ca 型化クニゲル V1 の弾性係数が測定されている。Ca 型化クニゲル V1 の弾性係数は，クニゲル V1 の値よりも大きい値を示す傾向にある(PNC TN8410 98-021　カルシウム型化およびカルシウム型ベントナイトの基本特性－膨潤圧, 透水係数, 一軸圧縮強度および弾性係数)。

(13)まとめ

前記(1)～(12)までを整理した結果を表 4.1-10 に示す。本表では，整備状況についても併せて整理しており，今年度に導入可能な THMC 連成物性モジュールは，以下に示す 5 種類とした。

- ■ 溶液組成に依存した膨潤応力の変化
- ■ 鉱物の溶解・沈殿による空隙率，密度の変化
- ■ 緩衝材の乾燥密度による透水係数の変化
- ■ 緩衝材間隙水の NaCl 濃度による透水係数の変化
- ■ 場の温度変化による化学平衡定数の変化

本年度に導入した THMC 連成物性モジュールの詳細については，次項に示す。

表 4.1-10　THMC 連成物性の現状一覧表

1．　熱物性，

1．1　熱伝導率

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
熱	①	$\lambda_m = const.$	―	―				○			○	○
④水→熱	①	―	依存性考慮なし	―				○				○
	②	$\lambda_m = f(S_r)$，$\lambda_m = f(\theta)$，$\lambda_m = f(\omega)$	実験データ				●					
	③	$\lambda_m = \theta\lambda_l + (1-n)\lambda_s$	理論式	並列モデルによる理論式	○				○			
	④	$\lambda_e = (1/\phi)^{[\phi_a/(\phi_a+\phi_l)]}[\lambda_s\phi_s + \lambda_l(1-\phi_s)]^{\phi_s}\lambda_l^{\phi_l}\lambda_a^{\varphi_a}$	理論式	Kiyohashi et al.					○			
	⑤	$\lambda_m = a + b\omega + c\omega^2 + d\omega^3$	緩衝材：実験式	JNC TN8400 99-052	○		▲				○	
	⑥	$\lambda_m = a - b\left[1+\exp\{(S_r - c)/d\}\right]^{-1}$	緩衝材：実験式	FEBEX	○		▲					
⑦応力→熱	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$\lambda_m = \theta\lambda_l + (1-n)\lambda_s$	理論式	並列モデルによる理論式	○				○			
	③	$\lambda_e = (1/\phi)^{[\phi_a/(\phi_a+\phi_l)]}[\lambda_s\phi_s + \lambda_l(1-\phi_s)]^{\phi_s}\lambda_l^{\phi_l}\lambda_a^{\varphi_a}$	理論式	Kiyohashi et al.					○			
	④	乾燥密度 1.6～2.0g/cm³ に対する実験データ	緩衝材：実験 data	PNC TN8410 92-057					○			
⑩化学→熱	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$\lambda_m = \theta\lambda_l + (1-n)\lambda_s$	理論式	並列モデルによる理論式	○				○			
	③	$\lambda_e = (1/\phi)^{[\phi_a/(\phi_a+\phi_l)]}[\lambda_s\phi_s + \lambda_l(1-\phi_s)]^{\phi_s}\lambda_l^{\phi_l}\lambda_a^{\varphi_a}$	理論式	Kiyohashi et al.								
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$\lambda_m = \theta\lambda_l + (1-n)\lambda_s$	理論式	並列モデルによる理論式	○				○			
	③	$\lambda_e = (1/\phi)^{[\phi_a/(\phi_a+\phi_l)]}[\lambda_s\phi_s + \lambda_l(1-\phi_s)]^{\phi_s}\lambda_l^{\phi_l}\lambda_a^{\varphi_a}$	理論式	Kiyohashi et al.					○			
	④	気液固の存在形態＝空間分布を仮定した推定式	推定式	JNC TJ8400 2000-017					○			
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○

	②	$\lambda_m = \theta\lambda_l + (1-n)\lambda_s$	理論式	並列モデルによる理論式	○				○			
	③	$\lambda_e = (1/\phi)^{[\phi_a/(\phi_a+\phi_l)]}\left[\lambda_s\phi_s + \lambda_l(1-\phi_s)\right]^{\phi_s}\lambda_l^{\phi_l}\lambda_a^{\varphi_a}$	理論式	Kiyohashi et al.					○			

A：THAMES 内で整備済み，B：物性･連成モジュールで整備済み，C：物性･連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外

【C欄注釈】　◎：Ｈ１４で新規整備予定，●：Ｈ１５以降で新規整備予定，▲：Ｈ１５以降でＡ→Ｃとして整備予定

1．2 比熱

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
熱	①	$(\rho C)_m = const.$	―	―				○			○	○
④水→熱	①	―	依存性考慮なし	―				○				○
	②	$(\rho C)_m = \theta\rho_l C_l + (1-n)\rho_s C_s$	理論式	理論式	○				○			
	③	$C_m = \dfrac{C_s + C_l\omega}{1+\omega}$	緩衝材に対する実験式	JNC TN8400 99-052	○		▲				○	
⑦応力→熱	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$(\rho C)_m = \theta\rho_l C_l + (1-n)\rho_s C_s$	理論式	理論式			●					
	③	$C_m = \dfrac{a\rho_d + b + C_l\omega}{1+\omega}$	緩衝材に対する実験式	JNC TN8400 99-052			●					
⑩化学→熱	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$(\rho C)_m = \theta\rho_l C_l + (1-n)\rho_s C_s$	理論式	理論式	○				○			
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$(\rho C)_m = \theta\rho_l C_l + (1-n)\rho_s C_s$	理論式	理論式	○				○			
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$(\rho C)_m = \theta\rho_l C_l + (1-n)\rho_s C_s$	理論式	理論式	○				○			

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2. 水理物性

2.1 水の密度

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$\rho_l = \rho_{l0}\{1-\beta_T(T-T_0)+\beta_p(p-p_0)\}$	温度と圧力の関数		○		▲					
水	①	$\rho_l = const.$	―	―				○			○	○
	②	$\rho_l = \rho_{l0}\{1-\beta_T(T-T_0)+\beta_p(p-p_0)\}$	温度と圧力の関数		○		▲					
⑧応力→水	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
⑪化学→水	1) 間隙水組成に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外

【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2．2 水の粘性係数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
	②	$\mu_l = f(T)$	温度の関数		○		▲					
水	①	$\mu_l = const.$	―	―				○			○	○
⑧応力→水	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○
⑪化学→水	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	○

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2．3　間隙率

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
水	①	$n = const.$	ー	ー				○			○	○
⑧応力→水	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	②	要素体積ひずみから算出			○		▲					
⑪化学→水	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○				○
	②	溶解／沈殿量と溶解／沈殿物真密度から算出					◎				○	
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】　◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2．4 固有透過度

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	$K = const.$	依存性なし	一般的見解				○			○	○
水	①	$K = const.$	－	－				○			○	○
⑧応力→水	①	－	依存性考慮なし	－				○			○	○
	②	$K = \exp\left(a + b\rho_b + c\rho_b^{\,2}\right)$ $K = \exp\left(a + b\rho_b\right)$	緩衝材に対する実験式	JNC TN8410 97-296			◎					
	③	$K = \left(a + bn^3\right)$	実験式	カナダ花崗岩			●					
	④	$K = \left(ae^b\right)$	実験式	MX-80			●					
	⑤	$\log K = ae + b$	実験式	Lambe et al.			●					
	⑤	Kozeny-Carman の式	経験式	JNC TJ8400 2001-036					○			
⑪化学→水	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	－	依存性考慮なし	－				○			○	○
	②	人工海水に対する実験式 $K = \exp\left(a + b\rho_b + c\rho_b^{\,2}\right)$	緩衝材に対する実験式	JNC TW8433 2002-001			◎					
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	－	依存性考慮なし	－				○			○	○
	②	Kozeny-Carman の式	経験式	JNC TJ8400 2001-036					○			
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	－	依存性考慮なし	－				○			○	○
	②	Ca 型化クニゲル V1 に対する実験データ（参考レベル）	緩衝材に対する実験データ	PNC TN8410 98-021					○			

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外

【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2．5 水分特性曲線

		関係式／データ	種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
水	①	$\psi = f(\theta)$, $\psi = f(S_r)$		ー	○		▲					
	②	$\frac{\theta-\theta_r}{\theta_s-\theta_r} = \left[1+(\alpha\psi)^n\right]^{-m}$	van Genuchten モデル		○		▲				○	○
	③	$\frac{\theta-\theta_r}{\theta_s-\theta_r} = \left[1+(\alpha\psi)^n\right]^{-m} \times \left[1-\alpha'\psi\right]^{m'}$	修正 van Genuchten モデル	FEBEX			●					
	④	$\frac{\theta-\theta_r}{\theta_s-\theta_r} = \left(\frac{\psi_{cr}}{\psi}\right)^{\lambda}$	Brooks & Corey 式				●					
⑧応力→水	①	ー	依存性考慮なし	参考文献： PNC TN8410 96-117				○			○	○
	②	$\frac{\theta-\theta_r}{\theta_s-\theta_r} = \left(\frac{\psi_{cr}}{\psi}\right)^{\lambda}$ $\ln\psi_{cr} = ae+b$	限界毛管水頭 ψ_{cr} が間隙比 e の関数				●					
⑪化学→水	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	②	スメクタイト含有率による正規化	緩衝材に対する実験式	PNC TN8410 96-117			●					
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2．6 不飽和透水係数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	ー	依存性考慮なし	ー	○						ー	○
水	①	$k_r = f(\theta)$	ー	ー	○				○		ー	
	②	$k_r = S_r^{\ n}$	Irmay の式		○				○		ー	
	③	$k_r = S_e^{\ 1/2}\left[1-\left(1-S_e^{\ 1/m}\right)^m\right]^2$	van Genuchten モデル		○		▲				ー	○
⑧応力→水	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			ー	○
⑪化学→水	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			ー	○
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			ー	○
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			ー	○

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2．7 水分勾配水分拡散係数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	$D_\theta = D_{\theta v} + D_{\theta l} = \frac{a_1(\theta-\theta_s)}{(\theta-b_1)(b_1-\theta_s)} + \frac{a_2\theta}{b_2(\theta-b_2)}$	緩衝材に対する実験式	JNC TN8430 99-010	○		▲				○	ー
水	①	$D_\theta = D_{\theta v} + D_{\theta l} = \frac{a_1(\theta-\theta_s)}{(\theta-b_1)(b_1-\theta_s)} + \frac{a_2\theta}{b_2(\theta-b_2)}$	緩衝材に対する実験式	JNC TN8430 99-010	○		▲				○	ー
⑧応力→水	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	
	②	$D_\theta / D_{\theta 0} = K / K_0$	推定式	ー					○			ー
⑪化学→水	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	②	$D_\theta / D_{\theta 0} = K / K_0$	推定式	ー					○			ー
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	②	$D_\theta / D_{\theta 0} = K / K_0$	推定式	ー					○			ー
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	②	$D_\theta / D_{\theta 0} = K / K_0$	推定式	ー					○			ー

A：THAMES 内で整備済み，B：物性･連成モジュールで整備済み，C：物性･連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外

【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

2．8 温度勾配水分拡散係数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
①熱→水	①	$D_T = D_{T0}\exp\left\{\frac{\alpha_T(T-T_0)}{T_0}\right\}$	緩衝材に対する実験式	JNC TN8400 99-014	○		▲				○	ー
水	①	―	依存性考慮なし					○			○	ー
	②	$D_T = D_{Tb}\cdot\cos^a\left(\frac{S_r-0.7}{0.3}\frac{\pi}{2}\right)$ $D_T = D_{Tb}\cdot\sin^b\left(\frac{S_r}{0.3}\frac{\pi}{2}\right)$	緩衝材に対する実験式	MX-80			●					ー
⑧応力→水	①	―	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
⑪化学→水	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	―	依存性考慮なし	ー				○			○	ー

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

3. 力学物性

3.1 膨潤応力

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
②熱→応力	①	—	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	②	膨潤応力の温度依存性（参考レベル）	緩衝材に対する実験データ	JNC TN8400 99-038					○			ー
⑤水→応力	①	中野モデル	緩衝材に対する実験式	JNC TN8400 99-014	○		▲				○	ー
	②	小峰モデル	緩衝材に対する実験式	JNC TJ8400 2002-021			●					ー
応力	ー	ー	ー	ー	ー	ー	ー	ー	ー	ー	ー	ー
⑫化学→応力	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	—	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	②	人工海水に対するデータ	緩衝材に対する実験データ	JNC TN8400 99-038			◎					ー
	③	小峰モデル	緩衝材に対する実験式	JNC TJ8400 2002-021			●					ー
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	—	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	②	スメクタイト含有率による正規化	緩衝材に対する実験式	JNC TN8400 99-038			●					ー
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	—	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
	②	Ca 型化クニゲル V1 に対する実験データ（参考レベル）	緩衝材に対する実験データ	PNC TN8410 98-021					○			ー

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外

【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

3．2 弾性係数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
②熱→応力	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	②	弾性係数の温度依存性（参考レベル）	緩衝材に対する実験データ	JNC TN8400 99-038					○			
⑤水→応力	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	②	弾性係数の含水比依存性	緩衝材に対する実験式	JNC TN8400 99-014	○		▲					
応力	①	$E = const.$	ー	ー				○			○	○
⑫化学→応力	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	②	人工海水に対するデータ（取得予定）	緩衝材に対する実験データ						○			
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	②	Ca 型化クニゲル V1 に対する実験データ（参考レベル）	緩衝材に対する実験データ	PNC TN8410 98-021					○			

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

3．3 熱膨張係数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
②熱→応力	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
⑤水→応力	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
応力	①	$\alpha_s = const.$	ー	ー				○			○	○
⑫化学→応力	1）間隙水組成に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	2）沈殿など間隙率変化に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○
	3）鉱物の変質に起因するもの											
	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	○

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

4. 化学物性

4.1 平衡定数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
③熱→化学	①	ー	依存性考慮なし	ー				○				ー
	②	解析表現式 $\log K = A_1 + A_2 T + A_3 / T + A_4 \log T + A_5 / T^2$	実験式	phreeqe60 マニュアル				○				ー
	③	Van't Hoff の式 $\ln K - \ln K_0 = -\frac{\Delta_r H_m^0}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)$	理論式	phreeqe60 マニュアル				○			○	ー
⑥水→化学	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
⑨応力→化学	①	ー	依存性考慮なし	ー				○			○	ー
化学	①	$K = const.$	ー	ー				○			○	ー

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外

【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

4．2 分子拡散係数，実効拡散係数

	関係式／データ		種別	出典元	整備状況						採用の可否	
					A	B	C	D	E	F	緩衝材	岩盤
③熱→化学	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	―
	②	アレニウスの式 $De = \frac{\varepsilon\delta}{\tau^2} Do = \frac{\varepsilon\delta}{\tau^2} D \cdot \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$	理論式	PNC TN8410 98-097			●					―
⑥水→化学	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	―
⑨応力→化学	①	―	依存性考慮なし	―				○			○	―
	②	実効拡散係数の乾燥密度依存性（参考レベル）	緩衝材に対する実験データ	PNC TN8410 98-097					○			―
化学	①	$De = \frac{\varepsilon\delta}{\tau^2} Do = const.$	―	―				○			○	―

A：THAMES 内で整備済み，B：物性・連成モジュールで整備済み，C：物性・連成モジュールで整備予定，D：整備なしで採用可能，E：整備に当たって十分な情報なし，F：不適切であり整備から除外
【C欄注釈】 ◎：H14で新規整備予定，●：H15以降で新規整備予定，▲：H15以降でA→Cとして整備予定

4.1.2 THMC 連成物性モジュールの作成

本項では，連成物性モジュールとして，溶液組成に依存した膨潤応力のモジュール，溶解・沈殿にともなう空隙率，乾燥密度の変化モジュール，緩衝材の乾燥密度に依存した透水係数の変化モジュールならびに緩衝材間隙水のNaClに依存した透水係数の変化モジュールについて記載する。

(1) 膨潤応力

1) 膨潤評価式の概要

緩衝材および坑道の埋め戻し材に対する膨潤応力の推定モデルは、小峯により精力的に行われている。ここでは、小峯の膨潤評価式[1)、2)]の概要を示す。

ベントナイトは緩衝材の有力な候補材料であるが、経済的な観点等から、実際にはベントナイトのみではなく、比較的安価な砂や現地発生土をベントナイトに混合して利用されると考えられている[3)]。小峯の提案している膨潤評価式は、Gouy-Chapmanの拡散二重層理論およびvan der Waals力の考え方に、提案した最大膨潤率とモンモリロナイトの膨潤体積ひずみの関係式および膨潤体積ひずみと二粘土粒子間距離の関係式を導入したモデルで、ベントナイト配合比だけでなく、ベントナイトに含有される陽イオンの種類や組成を考慮することが可能である。また、この式の中には周辺環境条件の変化を考慮してベントナイト中のイオン濃度を補正する手法、およびベントナイトの比表面積の算定手法も含んでいる。ベントナイトの主要な交換性陽イオンであるNa^+、Ca^{2+}、K^+、Mg^{2+}に対して、それぞれの交換性陽イオンに起因する粘土結晶層間に作用する拡散二重層理論による反発力とvan der Waals力による引力を算出し、各イオンの交換容量を用いて加重平均し、緩衝材または埋め戻し材の膨潤応力を決定する。小峯による膨潤評価式は次のとおりである。

$$\sigma_{sw\max} = \frac{1}{CEC} \sum_{\substack{i=Na^+,Ca^{2+},\\ K^+,Mg^{2+}}} \left[EXC_i \left\{ \left(f_r\right)_i - \left(f_a\right)_i \right\} \right] \text{ [kPa] (ただし、} \sigma_{swmax} \text{は反発を正とする)} \quad (1)$$

ここに、σ_{swmax}はベントナイトを含有する緩衝材・埋め戻し材の発生する圧力（最大膨潤応力と定義する）[kPa]で、飽和時に最大の圧力を発生することから、下付で max と示している。また、*CEC* は陽イオン交換容量[mequiv./g]、*i* は Na^+、Ca^{2+}、K^+、Mg^{2+}のいずれかの交換性陽イオン、EXC_i は交換性陽イオン *i* の交換容量[mequiv./g]、$(f_r)_i$ は交換性陽イオン *i* に起因する反発力[kPa]、$(f_a)_i$ は交換性陽イオン *i* に起因する引力[kPa]である。反発力$(f_r)_i$ は拡散二重層理論より、以下のように求められる。

$$\left(f_r\right)_i = 2nkT\left(\cosh u_i - 1\right)\times 10^{-3} \quad \text{[kPa]} \tag{2}$$

ただし、

$$u_i = 8\tanh^{-1}\left[\exp\left(-\kappa_i d_i\right)\tanh\left(\frac{z_i}{4}\right)\right]$$

$$\kappa_i = \sqrt{\frac{2n\upsilon_i^{\,2}e'^{\,2}}{\varepsilon kT}}$$

$$z_i = 2\sinh^{-1}\left(96.5\times\frac{EXC_i}{S}\sqrt{\frac{1}{8\varepsilon nkT}}\right)$$

である。ここで、*n* は緩衝材・埋め戻し材中の間隙水の補正イオン濃度[個数/m^3]、*k* は Boltzmann 定数（=1.38×10^{-23}J/K）、*T* は絶対温度[K]である。u_i、κ_I、z_i は式の誘導過程で必要となるパラメータで、u_i は二粒子間中央部の、z_i は粒子表面部の電位に関するパラメータである。κ_i は Debye-Huckel のパラメータと呼ばれ、拡散二重層理論における静電ポテンシャル分布が影響する範囲に関する指標である。d_i は交換性陽イオン *i* に対する結晶層間距離の 1/2[m]、υ_i は交換性陽イオン *i* の価数、*e'*は電子電荷（=1.602×10^{-19}C）、εは間隙水の誘電率[$C^2J^{-1}m^{-1}$]、*S* はベントナイトの比表面積[m^2/g]である。

一方、引力$(f_a)_i$ は van der Waals 力であり、次式で与えられる。

$$(f_a)_i = \frac{A_h}{24\pi}\left[\frac{1}{{d_i}^3} + \frac{1}{(d_i + t)^3} - \frac{2}{(d_i + t/2)^3}\right] \times 10^{-3} \quad \text{[kPa]} \tag{3}$$

ここで、A_h は Hamaker 定数（モンモリロナイトの場合、2.2×10^{-20}J）、t は粘土結晶層厚（モンモリロナイトの場合、9.60×10^{-10}m）である。

さらに、モンモリロナイトの膨潤体積ひずみε_{sv}^{*}を導入すると、結晶層間距離に関するパラメータ d_i は以下のように表される。

$$d_i = \frac{\varepsilon_{sv}^{*}}{100}\{t + (R_{ion})_i\} + (R_{ion})_i \quad \text{[m]} \tag{4}$$

ここで、R_{ion} はモンモリロナイト結晶層間中の交換性陽イオン i の非水和半径[m]である。膨潤体積ひずみε_{sv}^{*}は以下のように与えられる。

$$\varepsilon_{sv}^{*} = \left\{e_0 + \frac{\varepsilon_{s\max}}{100}(e_0 + 1)\right\}\left\{1 + \left(\frac{100}{C_m} - 1\right)\frac{\rho_m}{\rho_{nm}} + \left(\frac{100}{\alpha} - 1\right)\frac{100}{C_m}\frac{\rho_m}{\rho_{sand}}\right\} \times 100 \quad \text{[\%]} \tag{5}$$

ただし、

$$e_0 = \frac{\rho_{solid}}{\rho_{d0}} - 1$$

$$\rho_{solid} = \frac{\dfrac{100}{C_m}\dfrac{100}{\alpha}\rho_m}{\left\{1 + \left(\dfrac{100}{C_m} - 1\right)\dfrac{\rho_m}{\rho_{nm}} + \left(\dfrac{100}{\alpha} - 1\right)\dfrac{100}{C_m}\dfrac{\rho_m}{\rho_{sand}}\right\}} \quad \text{[Mg/m}^3\text{]}$$

ここで、e_0 は緩衝材・埋め戻し材の初期間隙比、ε_{smax} は緩衝材・埋め戻し材の最大膨潤率[%]、C_m はベントナイトのモンモリロナイト含有率[%]、ρ_m はモンモリロナイトの土粒子密度[Mg/m^3]、ρ_{nm} はモンモリロナイト以外の土粒子密度

[Mg/m^3]、ρ_{sand} は砂粒子密度[Mg/m^3]、αはベントナイト配合率[%]である。

また、緩衝材・埋め戻し材中の補正イオン濃度 n は、以下のように表す。

$$n = \frac{n_0\left(mol/m^3\right)\times N_A}{1+\frac{\varepsilon_{sv}^{*}}{100}} \quad [個数/m^3] \tag{6}$$

ただし、n_0 は緩衝材・埋め戻し材中の間隙水のイオン濃度[mol/m^3]、N_A はアボガドロ数（=6.023×10^{23}）である。

ベントナイトの比表面積は、以下のように与える。

$$S = \frac{C_m}{100}S_m + \left(1-\frac{C_m}{100}\right)S_{nm} \quad [m^2/g] \tag{7}$$

ここで、S_m はモンモリロナイトの比表面積[m^2/g]、S_{nm} はモンモリロナイト以外の鉱物の比表面積[m^2/g]である。

膨潤評価式で必要となるパラメータ・物理定数は、材料固有のパラメータと周辺環境に係わるパラメータおよび物理定数に分類される。**表 4.1-11**～**表 4.1-13** に膨潤評価式に用いるパラメータの設定値を示す。ただし、各パラメータは山形県月布産のベントナイト（クニミネ工業製、クニゲル V1）と三河ケイ砂 6 号に対する値である。これらの値を用い、最大膨潤率ε_{smax}、初期乾燥密度ρ_{d0} およびベントナイト配合比αを与えることで、最大膨潤応力を算定することが可能となる。ところで、膨潤評価式を熱-水-応力連成モデルに適用する場合、これらのパラメータのうちで、連成モデルとの受け渡しが行われるものは、温度および初期乾燥密度となる。連成モデルの中で変形が生じるが、変形に伴う乾燥密度の変化を膨潤評価式に反映することで、膨潤評価式との相互作用を表現できる。

表 4.1-11 膨潤評価式における材料パラメータの設定（クニゲル V1 相当）[4)]

モンモリロナイトの土粒子密度 ρ_m	2.77 Mg/m^3
モンモリロナイト以外の鉱物の土粒子密度 ρ_{nm}	2.81 Mg/m^3
砂の土粒子密度 ρ_{sand}	2.66 Mg/m^3
モンモリロナイトの比表面積 S_m	810 m^2/g
モンモリロナイト以外の鉱物の比表面積 S_{nm}	0 m^2/g
ベントナイトのモンモリロナイト含有率 C_m	48 %
陽イオン交換容量 CEC	0.732 mequiv./g
交換性 Na イオン量 EXC_{Na}^{+}	0.405 mequiv./g
交換性 Ca イオン量 EXC_{Ca}^{2+}	0.287 mequiv./g
交換性 K イオン量 EXC_{K}^{+}	0.009 mequiv./g
交換性 Mg イオン量 EXC_{Mg}^{2+}	0.030 mequiv./g
交換性 Na イオンの非水和イオン半径 $(R_{ion})_{Na}$	0.098 nm
交換性 Ca イオンの非水和イオン半径 $(R_{ion})_{Ca}$	0.1115 nm
交換性 K イオンの非水和イオン半径 $(R_{ion})_{K}$	0.133 nm
交換性 Mg イオンの非水和イオン半径 $(R_{ion})_{Mg}$	0.0825 nm
交換性 Na イオンの価数 υ_{Na}	1
交換性 Ca イオンの価数 υ_{Ca}	2
交換性 K イオンの価数 υ_{K}	1
交換性 Mg イオンの価数 υ_{Mg}	2
モンモリロナイト結晶層厚 t	9.60×10^{-10} m

表 4.1-12 膨潤評価式における物理定数

電子電荷 e'	1.602×10^{-19} C
Boltzmann 定数 k	1.38×10^{-23} J/K
Hamaker 定数 A_h	2.2×10^{-20} J
Avogadro's 数 N_A	6.023×10^{23}

表 4.1-13 膨潤評価式における環境条件パラメータ

間隙水の誘電率 ε	$80\times8.8542\times10^{-12}$ C^2/(J･m)
温度 T	連成モデルに依存
緩衝材・埋め戻し材中の間隙水のイオン濃度 n_0	40～50 mol/m^3

2) 不飽和領域における膨潤応力

小峯の提案している膨潤評価式は、完全に飽和した状態を想定して、その時点での拘束条件、緩衝条件、材料条件を設定することにより、膨潤応力や膨潤変形を定量的に計算することができる。しかし、再冠水時の緩衝材や埋め戻し材の挙動を評価するためには、この膨潤評価式に対し、さらに飽和度の変化が考慮できるように拡張する必要がある。

不飽和領域における膨潤の扱いは、モンモリロナイトの層間のポテンシャルの低下量を膨潤圧とし、膨潤圧の一部が膨潤応力として外部に作用すると仮定される[5)]。

一般に、平衡状態にある土壌中の系に対して周囲から dw の仕事をされ、dq の熱量を吸収し、再び平衡状態に至った時、系の全エネルギー(内部エネルギー)の増加 du は、熱力学の第 1 法則より、

$$du = dq + dw \tag{8}$$

となる。周囲と成分 i の交換がある時、仕事 dw は、

$$dw = -Pdv + \sigma dA + \Sigma \mu_i dn_i \tag{9}$$

となる。ここで、P は外圧、dv は体積変化、σは水の表面張力、dA は水－空気界面の面積変化、μ_i は i 成分の化学ポテンシャル、dn_i は i 成分のモル変化である。

また、この変化が可逆的であると仮定すると、熱量 dq は熱力学第 2 法則から、以下のように表現することができる。

$$dq = Tds \tag{10}$$

ここで、T は絶対温度、ds はエントロピー変化量である。

式(9)、(10)を式(8)に代入すると、以下のようになる。

$$du = Tds - Pds - Pdv + \sigma dA + \Sigma \mu_i dn_i \tag{11}$$

ここで、次式で定義されるギブスの自由エネルギーGを導入する。

$$G = u - Ts + Pv \tag{12}$$

この微分を取ると、

$$dG = du - Tds - sdT + Pdv + vdp \tag{13}$$

となり、ここに、式(11)の du を代入すると、

$$dG = -sdT + vdp + \sigma dA + \Sigma \mu_i dn_i \tag{14}$$

となる。ここで、等温つまり dT=0、表面積も変化しない、つまり dA=0、さらに成分 i の出入りもないとき、次のようになる。

$$dG = vdp \tag{16}$$

通常、土中水は、間隙の中で水蒸気と平衡している。すなわち、水の化学ポテンシャルと水蒸気の化学ポテンシャルは等しい状態にある。そのため、水の化学ポテンシャルは、この水蒸気の化学ポテンシャルを測定することで知ることができる。すなわち、水 1 モル当たり、平衡している水蒸気の分圧から [6)]、

$$\Delta G = \int_{p_0}^{p} vdp = \int_{p_0}^{p} \frac{RT}{p} dp = -RT \ln \frac{p_0}{p} \tag{17}$$

ここで、ΔG は温度、表面積、成分 i の量を固定した条件でのギブスの自由エネルギー、p は水蒸気分圧、p_0 は飽和水蒸気圧、p/p_0 は相対湿度、R は水蒸気に

対する気体定数で R=47.06m/K である。

一方、地盤工学で一般的に用いられる、土の全ポテンシャルψは、以下のように表される。

$$\psi = \psi_m + \psi_o + \psi_g \tag{18}$$

ここで、ψ_mはマトリックポテンシャル（圧ポテンシャル）、ψ_oはオスモティックポテンシャル（浸透ポテンシャル）、ψ_gは重力ポテンシャルである。マトリックポテンシャルは、大気圧以上の静水圧下にある場合は正となり、大気圧以下にある場合は負となる。オスモティックポテンシャルは、溶質の存在に依存するポテンシャルであり、以下の式が成立する[7)]。

$$\psi_m + \psi_o = RT \ln \frac{p}{p_0} \tag{19}$$

蒸気圧法によるサクションの測定はこの原理を利用している。

ところで、マトリックポテンシャルと重力ポテンシャルが、土壌溶液全体すなわち土壌水とそれに溶解している物体を一体としたものに関係するのに対し、オスモティックポテンシャルは水だけにあてはまる量であることから、実際には互いに独立として単純に加えるべきではない。しかし、土壌溶液が十分希薄で、溶液内の溶質がマトリクスにそれほど影響しない限り、実際はこの違いは無視できる[7)]。

式(17)と式(18)、(19)より、ギブスの自由エネルギーと土の全ポテンシャルの関係は、

$$\Delta G = \psi \tag{20}$$

とすることができる。ベントナイトにおいては、重力ポテンシャルは他のポテンシャルに比べて非常に小さいことから、無視している。前述したように、膨潤圧はポテンシャルの低下量であるが、これをギブスの自由エネルギーの低

下量とし、すなわち式(20)より、全ポテンシャルの低下量と仮定することができる。

したがって、不飽和のベントナイトは、潜在的に非常に大きい膨潤圧を有していることとなる。しかし、飽和に至る過程で間隙の閉鎖や骨格構造の変化によって膨潤圧は低下し、実際に外力として作用する割合は数%にも満たない。全ポテンシャルの低下量に対し、実際に外力（膨潤応力）として働く割合を表す関数 F を用いて、膨潤応力の増分$\Delta\sigma_{sw}$[Pa]は以下のように表すこととする。

$$\Delta\sigma_{sw} = -F \cdot \rho_{w0} g \Delta\psi \tag{21}$$

ここで、S_r は飽和度、ψはサクション[m]、ρ_{w0} は水の基準密度、g は重力加速度である。本来、サクションはマトリックポテンシャルの絶対値を指すが、ここではマトリックポテンシャルとオスモティックポテンシャルの和とする。

関数 F に対しては、これまで各要素試験や原位置試験に合わせて同定が必要であった。例えば，Noorishad & Tsang[8] や Nguyen[9] は、式(8)の代わりに飽和度の変化量に定数を乗じることにより膨潤応力を評価しているが、その定数は試験とのフィッティングにより求めている。Chijimatsu et al.[10] は関数 F を定数とし、同様に試験とのフィッティングを行っているが、やはり物理的意味は不明確であった。

ここでは、式(8)に次式の拘束条件を与えることで、ある飽和度における膨潤応力を一意的に決定する。

$$\sigma_{sw} = -\int_0^{\psi} \rho_{w0} g F(S_r) d\psi = -\int_0^{S_r} \rho_{w0} g F(S_r) \frac{\partial \psi}{\partial S_r} dS_r \tag{22}$$

$$\sigma_{sw\max} = -\int_0^{\infty} \rho_{w0} g F(S_r) d\psi = -\int_0^{1} \rho_{w0} g F(S_r) \frac{\partial \psi}{\partial S_r} dS_r \tag{23}$$

ここで、σ_{sw} は飽和度 S_r（サクションψ）における膨潤応力である。最大膨潤応力はσ_{swmax} は小峯の膨潤評価式から算定される値である。この式の物理的意味は、ベントナイトが気乾状態から吸水することにより膨潤応力が飽和度に対し

て一意的に決定し、飽和に至ると最大膨潤応力σ_{swmax}を発揮することを表しており、また、逆に脱水すると可逆的に膨潤応力が減少することを意味する。図4.1-21 に飽和度と膨潤応力の関係の概念図を示す。気乾状態から吸水することにより膨潤圧は次第に上昇し、図中のⅠやⅡのような経路を辿ると考えられる。しかし、実際にはベントナイトは最適含水率付近で締固められた状態から吸水するため、初期飽和度S_{r0}からの膨潤応力は、III、IV、V のように初期状態で膨潤応力がゼロの点から発生する。既往のモデルは、III、IV のように、初期飽和度から飽和に至る過程を適当な関数を仮定して同定しているため、初期飽和度に依存してパラメータを求めなければならなかった。ここでは、飽和度と膨潤応力を一意的に決定する。まず経路Ⅰ（またはII）のように設定することで、初期飽和度からの経路をVのように捉えることとする。このようにモデル化すると、初期状態で膨潤応力が発生していることになるが、実際、後述の膨潤試験からも試験直後に膨潤応力が発生していることからも妥当性が確認できる。ただし、実際には経路 V から経路 I（または II）に滑らかに移行すると予想される。初期状態に対応する膨潤応力を初期膨潤応力σ_{sw0}と呼ぶこととする。

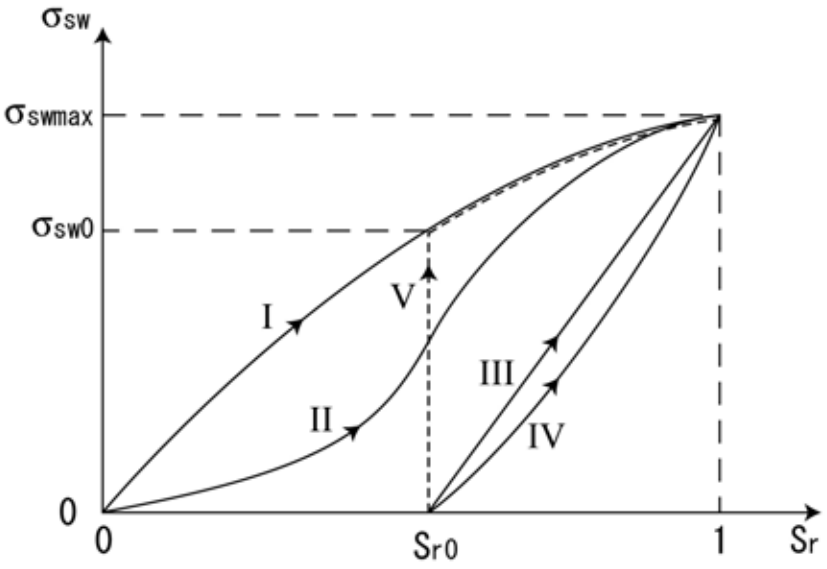


図 4.1-21　不飽和領域における膨潤応力の概念図

(2) 溶解・沈殿にともなう空隙率，体積，乾燥密度の変化

1) 目的

本資料は，地球化学計算（phreeqe60）と熱－水－応力連成計算（THAMES）の連成を対象として，連成物性モジュール“透水係数・空隙率の変化モジュール”の詳細について記述するものである。

2) 内容

①モジュールの定義

このモジュールは，地球化学の現象として取り扱っている溶解・沈殿挙動，地下水組成に伴い，緩衝材，岩体，コンクリート材領域での透水係数の変化や，空隙率の変化に係わる連成物性情報を熱－水－応力連成計算に受け渡すものである。

ただし，透水係数の変化については，データの取得状況から，緩衝材（ベントナイト 70%，ケイ砂 30%），温度 25℃を限定とした。空隙率の変化については，緩衝材，岩体，コンクリート材に適用することとする。

また，地下水組成の依存性については，純水，人工海水（NaCl：3.3%）のみの実験データしか整備されていないことから，NaCl 濃度のみを取り扱っている。

②モデル式

媒体（緩衝材，岩体，コンクリート材）の質量変化，空隙体積の変化は，式（1），式（2）とする。

$$\Delta m = \Delta \rho_d \times V \qquad \text{式（1）}$$

$$\Delta v = \Delta \varepsilon \times V \qquad \text{式（2）}$$

ここで，

Δ ：媒体中の構成鉱物の溶解・沈殿による微小変化を示す微分【－】

Δm ：媒体中の構成鉱物の溶解・沈殿による質量変化 【g】

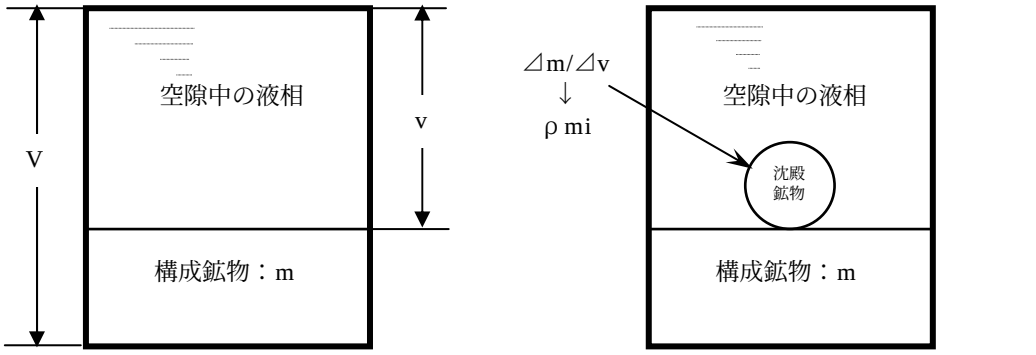
$\Delta \rho_d$ ：媒体中の構成鉱物の溶解・沈殿による乾燥密度変化 【g/cm^3】

V ：計算メッシュ（要素）の体積 【cm^3】

Δv ：媒体中の構成鉱物の溶解・沈殿による体積の変化 【cm^3】

$\Delta\varepsilon$　：媒体中の構成鉱物の溶解・沈殿による空隙率の変化　【－】

である。式（1），（2）の関係を模式的に示したものを図 4.1-22 に示す。



（1）前時間ステップ【1 要素】　　（2）現時間ステップ【1 要素】

図 4.1-22　溶解・沈殿にともなう固相，液相の関係

一方，媒体の質量変化 Δm は，地球化学計算 phreeqe60 で求まる Delta Phase に基づき計算される鉱物残存量（以後，式中では MIN と記載する）と空隙体積により，式（3）で示すことができる。

また，式（3）のファクター（1/1000）は，Delta Phase で採用している単位系 mol/l-H_2O（mol/dm^3-H_2O）において，mol/cm^3-H_2O に変換するためのものである。

$$\Delta m = \Delta\left\{\left(\sum_{i=1}^{n} M_i (MIN)_i \left(1/1000\right)\right) \times v\right\} \qquad \text{式（3）}$$

ここで，

Δm　：媒体中の構成鉱物の溶解・沈殿による質量変化　【mol】

i　：媒体中の構成鉱物の構成鉱物識別番号　【－】

n　：媒体中の構成鉱物の総数　【－】

v　：媒体中の空隙体積（現時間ステップ）　【cm^3】

M_i　：媒体中の構成鉱物 i の分子量　【g/mol】

$(MIN)_i$　：媒体中の溶解・沈殿に伴う，水 1（ﾘｯﾄﾙ）当たりの構成鉱物 i の質量（現時間ステップ）　【mol/l】

である。

式（３）を展開すると以下の様になる。

$$\Delta m = \Delta\left(\sum_{i=1}^{n} M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)\right) \times v + \left(\sum_{i=1}^{n} M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)\right) \times \Delta v$$

式（４）

ここで，

$\Delta\sum(MIN)_i$：媒体中の溶解・沈殿に伴う，水１（ﾘｯﾄﾙ）当たりの構成鉱物 i の質量（前時間ステップと現時間ステップの差）

【mol/l】

v　：現時間ステップでの空隙体積：$v = V \times \varepsilon$　【cm³】

ε　：現時間ステップでの空隙率　【cm³】

Δv　：媒体中の構成鉱物の溶解・沈殿による空隙体積の変化　【cm³】

である。

また，Δm に対応する体積（V－v）の微小増分，即ち⊿（V－v）は，構成鉱物の真密度と質量変化により，以下の関係式が成立する。

$$\Delta(V - v) = \Delta\left[\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\} \times v\right]$$

式（６）

$$-\Delta v = \Delta\left[\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\} \times v\right]$$

式（７）

ここで，

ρ_{mi}　：媒体中の構成鉱物 i の真密度　【g/cm³】

である。ここで，式（６）を展開すると以下の様になる。

$$-\Delta v = \Delta\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\} \times v + \sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\} \times \Delta v$$

式（８）

式（８）を整理すると下式となる。

$$\Delta v\left[1+\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\}\right]=-\Delta\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\}\times v$$

$$\Delta v=\left[-\Delta\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\}\times v\right]\Big/\left[1+\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{M_i(MIN)_i\left(1/1000\right)}{\rho_{mi}}\right\}\right]$$

式（9）

次に，式（9）で求まった Δv を式（5）に代入することにより Δm（溶解・沈殿にともなう全構成鉱物の質量変化）が求まる。全構成鉱物の真密度変化は，前記の Δv，Δm を式（1）に代入することにより，式（１０）により求めることができる。

$$\Delta m=\Delta\rho_d\times V$$ 式（1）

$$\Delta\rho_d=\Delta m\times Sa/V$$ 式（１０）

ここで，式（１０）により求められた媒体中の乾燥変化は，下式により，次の時間ステップで使われる乾燥密度となる。ただし，不飽和の効果を考慮するため，式（１０）に飽和度 Sa（―）を乗ずる。

$$\rho_{d\ (次時間ステップ)}=\rho_{d\ (現時間ステップ)}+\Delta\rho_d$$ 式（１１）

さらに，式（9）で求まった Δv を式（2）に代入することにより，間隙率の変化が求まり，この値を式（１２）に代入することにより，次の時間ステップでの間隙率が求まる。

$$\varepsilon_{(次時間ステップ)}=\varepsilon_{(現時間ステップ)}+\Delta\varepsilon$$ 式（１２）

緩衝材の透水係数を計算する場合は，前記の式（3）の次時間ステップでの乾燥密度を式（１３）に代入する。

$\log(k)=-14.11+4.89\rho_d-2.34\rho_d^2+0.42C$（B:S=7:3） 式（１３）

ここで，

k：透水係数（m/s）

ρ_d：乾燥密度（g/cm^3）

C：NaCl 濃度（%）

である。

式（１３）の濃度単位は，水 100(g)に対する質量分率となっていることから，下記の手順にて単位換算，補正を行うこととする。

- phreeqe60 の Na，Cl の溶液中トータル濃度を対象とする。この時の単位系は，mol/l-H_2O である。
- 前記の Na，Cl 濃度に対して，それぞれ分子量を乗じて，両者の和を計算し g 単位系とする。この時の単位系は，g-NaCl/ l-H_2O（g-NaCl/ 1000g-H_2O）である。
- 水 100(g)に対する質量分率に換算するため，前記の値に 0.1 を乗じる。単位系は，g/ 100g-H_2O となり，この値を式（９）の NaCl 濃度として代入する。

(3) 緩衝材の乾燥密度の変化にともなう透水係数の変化

透水係数は間隙形状と流体特性に関係した値である。間隙体積は構成材料の粒径分布と関連するために粒径分布と透水係数の関係については多く研究されている。均一粒径 d をもつガラスビーズを用いて、種々の動粘性と密度をもつ流体を同一動水勾配下で流した結果、以下のような関係が得られている。

$$q = \frac{Cd^2 \rho g}{\mu} \frac{dH}{dl} \tag{1}$$

ここで、C は比例定数、ρは密度、g は重力加速度、μは粘性係数である。この Cd^2 が間隙構造に関わる部分で、残りの（$\rho g/\mu$）は流体特性に関わるものである。実際の材料ではこの d に透水性に最も影響を与える代表的な粒径サイズを代入すれば、その推定は可能になる。

このような研究は Hazen によって最初に行われ、その結果は次式の通りである。

$$k = Ad_{10}^{\ 2} \tag{2}$$

ここで、d_{10} は粒径加積曲線の 10%質量の粒径である。本来、この式は非常に粒度が良い砂質土に関する結果であるが、砂から礫に至るまで良い近似を与える。

また、粒径加積曲線の分布形状が間隙構造を最も良く反映しているという立場からは、d_{50} を平均値とし、その分散の仕方が透水係数に関連することになる。Mash と Denny は標準偏差σを次のように表した。

$$\sigma = \frac{d_{16} - d_{64}}{4} + \frac{d_5 - d_{95}}{6.6} \tag{3}$$

(1)式の C は粒子の形状と詰め方に関連した定数である。間隙率 n はそのような粒子の配列構造を総合的に表す定数であるので、n と C の関係についても多くの研究がなされている。その代表的なものが Kozeny-Carman の式である。

$$k = \frac{\rho g}{\mu} \frac{n^3}{(1-n)^2} \frac{d_m^{\ 2}}{180} \tag{4}$$

この式の d_m の解釈は様々である。例えば、Fair-Hatch 式として知られている式は次のようである。

$$k = \frac{\rho g}{\mu} \frac{n^3}{(1-n)^2} \frac{1}{m\left(\frac{\bar{\theta}}{100} \sum \bar{P} / d_m\right)} \tag{5}$$

ここで、m は詰め方に関する係数で、実験的に約 5 である。$\bar{\theta}$ は粒子の形状関数で球形の 6.0 から角張った形の 7.7 まで変化する。$\sum$ はふるい試験の連続する二つのふるいの平均値を足し合わすが、$\bar{P}$ はその二つのふるいの間に残った砂の割合であり、d_m は二つのふるいの幾何平均である。

また、クリューゲルの式は以下に示す通りである。

$$k_{10} = 332\frac{n}{(1-n)^2}d_e{}^2 \tag{6}$$

ここで、k_{10}（m/day）は浸透水の温度が 10℃のときの透水係数を意味しており、d_e は有効粒径（mm）である。クリューゲルの式における有効粒径は以下の通りとなっている。

$$d_e = \frac{1000}{\sum_{i=1}^{N}\frac{g_i}{d_i}} \tag{7}$$

ここで、N は粒度分析における成分の数、g_i は i 番目の粒度成分の全体に占める割合(%)、d_i は i 番目の粒度成分の平均直径を表している。

また、ツンケルの式では透水係数 k（m/day）は以下の通りとなる。

$$k = C\left(\frac{n}{1-n}\right)^2\frac{1}{u^2}(1+0.034t) \tag{8}$$

ここで、C は粒子の形状と均等性に関する係数、t は浸透水の温度、u は比表面積であり、次式で得られる。

$$u = \frac{3}{2}\cdot\frac{g_1}{d_1} + \sum_{i=2}^{N} g\frac{\left(\frac{1}{d_{i-1}} - \frac{1}{d_i}\right)}{\ln d_i - \ln d_{i-1}} \tag{9}$$

以上の検討は土質地盤に関するものが主であるが、岩盤に関しても亀裂情報から透水係数を推定する手法が提案されており、それらは透水係数の大きさよりも、その異方性を亀裂の幾何学情報から推定することに重きがおかれている。岩盤中の地下水の流れに関しては、水理学的に関係のある間隙構造の把握が困難なことから、C に関しては良く分かっていない。多くの場合は以下に示す三乗則が適用されており、亀裂内の流れを平行平板流れと仮定している。

$$T = \frac{e^3}{12\mu} \tag{10}$$

ここで、T は透水量係数（透水係数に断面高さを乗じたもの）、e は間隙幅（亀裂幅）である。

また、緩衝材の透水係数に関しては、JNC により図 4.1-23 に示すように蒸留水を用いた場合と、人工海水を用いた場合それぞれについて有効粘土密度の関数として整理されている。

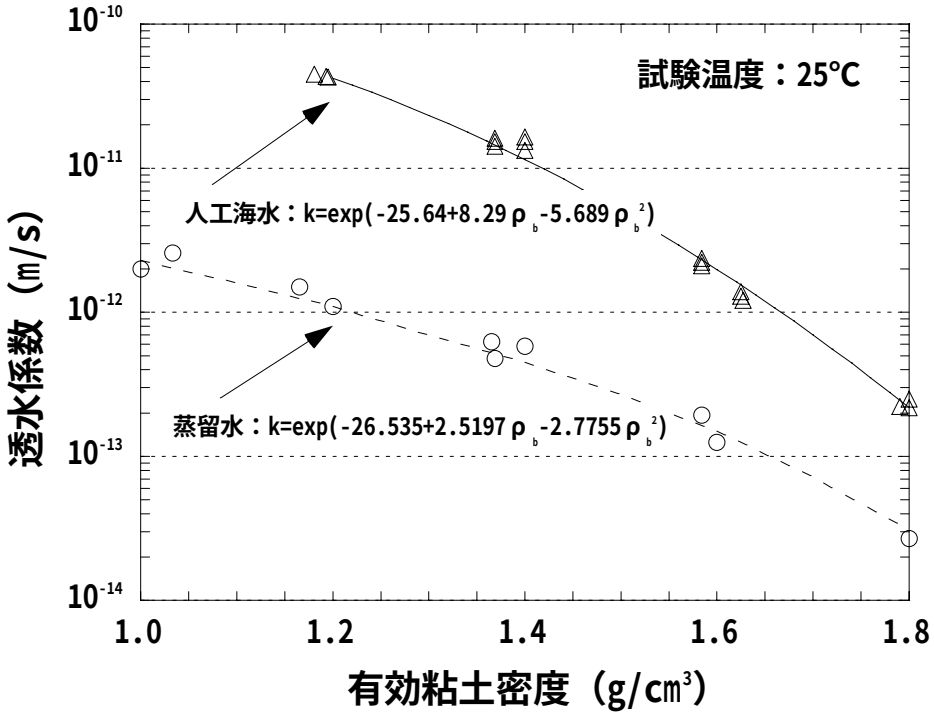


図 4.1-23　有効粘土密度と透水係数の関係

ここで、方解石等の沈殿による透水係数の変化について考えてみると、ベントナイト緩衝材の場合、方解石等が沈殿しても粘土の量が増すわけではないため、有効粘土密度は変化しないことになり、図 4.1-23 の関係を適用した場合、沈殿等が生じても透水係数は変化しないことになる。沈殿等による透水係数の変化についてのデータはないため、ここでは図 4.1-23 のように整理されたデータを乾燥密度と透水係数に関係に戻し用いることとする。図 4.1-24 にはベントナイトとケイ砂の混合比が７：３の場合の乾燥密度と透水係数の関係を示す。この関係を用い、沈殿等による

密度変化が生じた場合、透水係数を変化させる。図 4.1-24 のデータを用い、透水係数を乾燥密度および NaCl 濃度の関数として実験式を作成すると以下のようになる。ここで、蒸留水の NaCl 濃度は 0.0%、人工海水の NaCl 濃度は 3.3%とした。

$\log(k)=-14.11+4.89\rho_d-2.34\rho_d^2+0.42C$（B:S=7:3） (11)

ここで、

k：透水係数（m/s）

ρ_d：乾燥密度（g/cm^3）

C：NaCl 濃度（%）

である。

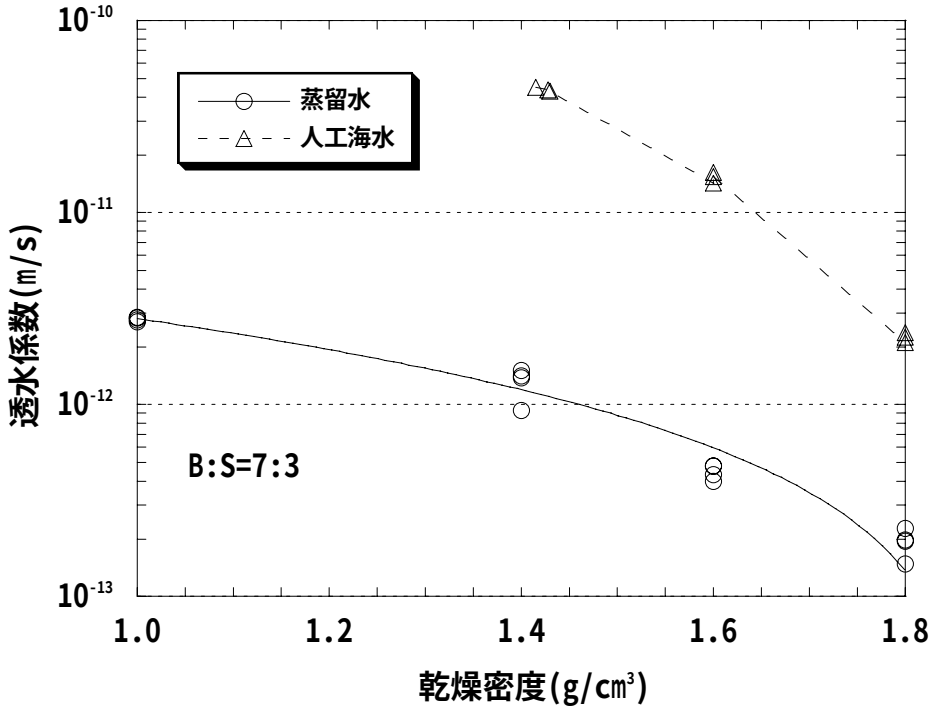


図 4.1-24　乾燥密度と透水係数の関係（B:S=7:3）

(4) 平衡定数の温度依存性

熱力学データ（平衡定数）の温度依存性は，phreeqe60 の基本機能として温度依存性の熱力学データベースを整備した後, 地球化学系の温度を入力することにより, 実現可能となる。本研究では，THAMES で計算された節点温度を要素中心温度に変換した後，phreeqe60 に温度データを受け渡す部分の一連の処理をモジュールとして作成した。

一連の処理モジュールを図 4.1-25 に示す。なお，本研究では，温度依存性の熱力学データベースとして，核燃料サイクル開発機構殿が公開文献に基づき整備してきた SPRON.JNC を採用した。

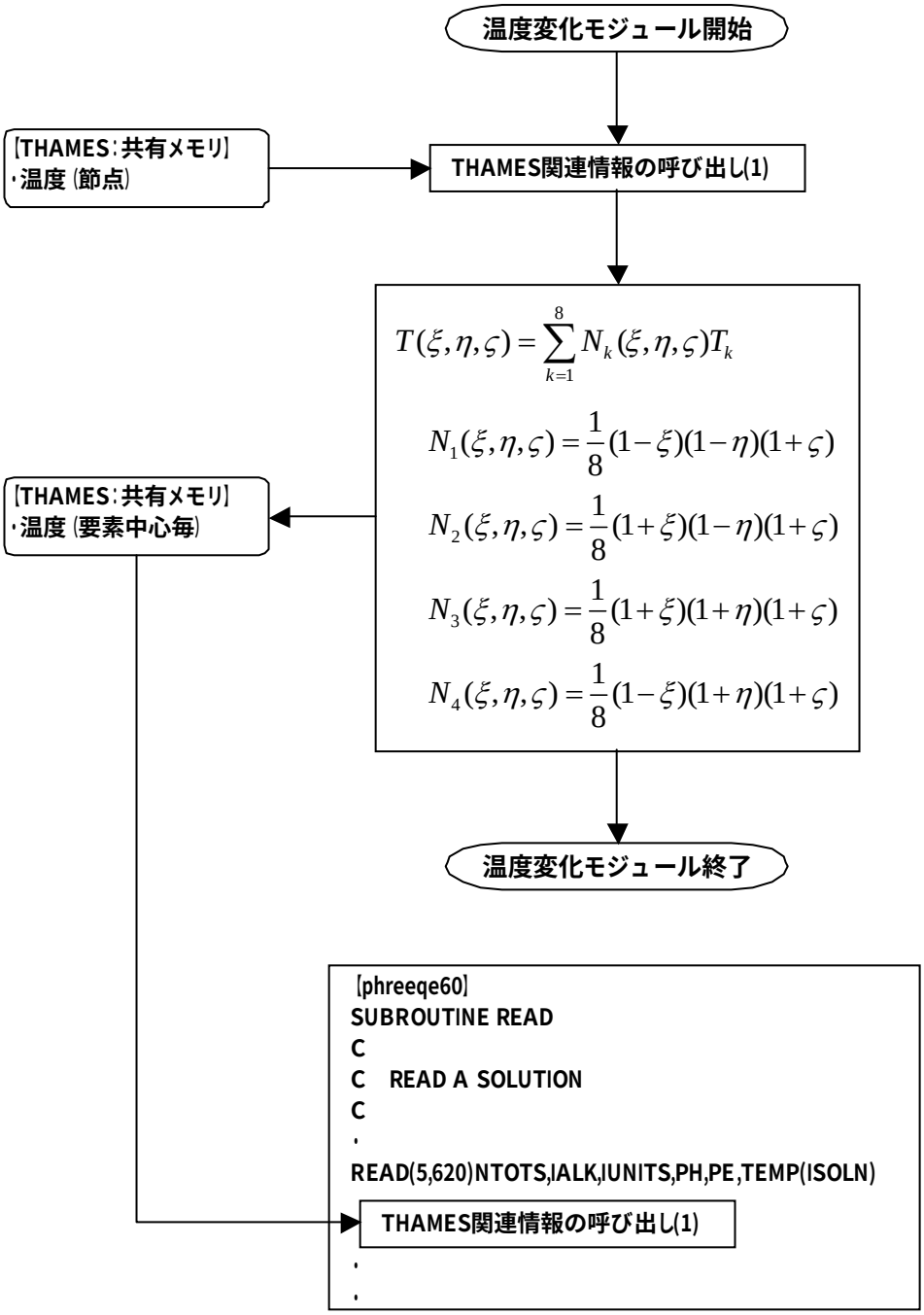


図 4.1-25　連成物性モジュール：熱力学データの温度依存性モジュール

4.1.3 THMC 連成物性モジュールの検証

(1) 溶解・沈殿にともなう空隙率，体積，乾燥密度の変化，透水係数の変化

1) 目的

地球化学計算（phreeqe60）と熱－水－応力連成計算（THAMES）の連成を対象として，連成物性モジュールの検証について記載したものである。

2) 内容

a. 検証テストケース

このモジュールは，物質移行にともない複数鉱物の溶解・沈殿により，媒体密度の変化や空隙率の変化を計算するものである。本モジュールの検証は，単一鉱物の溶解にともなうテストケース，事例解析を想定した複数鉱物を想定したテストケース（Na，Cl を含む化学系）の 2 種類の問題について，手計算での検算を行う。検証用テストケースの解析仕様を表 4.1-14 に示す。

表 4.1-14　検証用テストケースの解析仕様

No.	入力項目		単位		テストケース 1		テストケース 2	
1	初期鉱物 01 名称		―		Calcite		Calcite	
2	初期鉱物 01 真密度		g/cm^3		2.50（仮定）		2.50（仮定）	
3	初期鉱物 02 名称		―		―		Chalcedony	
4	初期鉱物 02 真密度		g/cm^3		―		2.50（仮定）	
5	初期鉱物 03 名称		―		―		Smectite	
6	初期鉱物 03 真密度		g/cm^3		―		2.50（仮定）	
7	初期空隙率		―		0.30（仮定）		0.30（仮定）	
8	1 要素当たりの体積		cm^3		1,000(10*10*10)		1,000(10*10*10)	
9	緩衝材の初期乾燥密度		g/cm^3		1.6		1.6	
10	Ca	カラム内初期濃度	-	mol/l	考慮	1.0×10^{-3}	考慮	1.0×10^{-2}
11	Mg	〃	-	〃	―	―	〃	〃
12	Na	〃	-	〃	―	―	〃	〃
13	K	〃	-	〃	―	―	〃	〃
14	Fe	〃	-	〃	―	―	〃	〃
15	Al	〃	-	〃	―	―	〃	1.0×10^{-2}
16	Cl	〃	-	〃	―	―	〃	1.0×10^{-1}
17	Si	〃	-	〃	―	―	〃	1.0×10^{-2}
18	C	〃	-	〃	考慮	1.0×10^{-3}	〃	〃
19	実効拡散係数		m^2/y		0.01		0.01	
20	片側境界条件		―		H13 年度の条件		FRHP	
21	片側境界条件		―		〃		FRHP	

上記の初期鉱物は，緩衝材構成鉱物と仮定する。

b. 検証

① テストケース 1

ここでは，先ず，手計算にて次の時間ステップで用いる乾燥密度，空隙率を求め，最後に本モジュールを用いた計算結果との比較を行った。

式（1）を用いて質量変化の計算を行うためには，表 4.1-14 の条件に基づき，THMC 解析において，前時間ステップと現時間ステップでの Delta phase の値が必要となる。

$$\Delta m = \Delta\left(\sum_{i=1}^{n} M_i(-DP)_i\left(1/1000\right)\right) \times v + \left(\sum_{i=1}^{n} M_i(-DP)_i\left(1/1000\right)\right) \times \Delta v$$

式(1)

THMC 解析（phreeqe60，SPRON.JNC）において求められた Delta phase を以下に示す。

DP(Calcite：前時間ステップ：要素 4) = －8.77793702×10^{-4} (mol/l)

DP(Calcite：現時間ステップ：要素 4) = －8.02613079×10^{-4} (mol/l)

また，Calcite の分子量 M は，熱力学データベース SPRON.JNC に登録されている値を引用し，以下の様に求めた。

$M_{calcite}$ = 40.078 + 44.0098 = 84.0878 (g / mol)

さらに，空隙の体積 v は以下の様になる。

v = 1 要素の体積 V×空隙率 = 1,000(cm^3) × 0.30(-) = 300(cm^3)

式（1）の右辺第 1 項の v を除いた部分(temp1)は，以下の様になる。

$$temp1 = 84.0878 \times \frac{(8.02613079 \times 10^{-4} - 8.77793702 \times 10^{-4})}{1,000}$$

$$temp1 = -6.3217732 \times 10^{-6}\,(\mathrm{g})$$

さらに，式（1）の右辺第 2 項の⊿v を除く部分(temp2)は，以下の様になる。⊿v は，この後で求めることとする。

$$temp2 = 84.0878 \times \frac{8.02613079 \times 10^{-4}}{1,000}$$

$$temp2 = 6.7489968 \times 10^{-5}\,(\mathrm{g})$$

次に⊿v は，下式に基づき求めた。

$$\Delta v = \left[-\Delta \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{M_i(\text{-}DP)_i \left(1/1000 \right)}{\rho_{mi}} \right\} \times v \right] \Big/ \left[1 + \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{M_i(\text{-}DP)_i \left(1/1000 \right)}{\rho_{mi}} \right\} \right]$$

式（２）

式（２）分子の v を除く部分(tempv1)は以下の様になる。

$$tempv1 = -\frac{temp1}{calciteの真密度} = -\frac{(-6.3217732 \times 10^{-6})}{2.5}$$

$$tempv1 = 2.5287093 \times 10^{-6}\ (\text{-})$$

また，分母の第 2 項(tempv2)は，以下の様になる。

式（２）分子の v を除く部分(tempv1)は以下の様になる。

$$tempv1 = -\frac{temp1}{calciteの真密度} = -\frac{(-6.3217732 \times 10^{-6})}{2.5}$$

$$tempv1 = 2.5287093 \times 10^{-6}\ (\text{-})$$

また，分母の第 2 項(tempv2)は，以下の様になる。

$$tempv2 = \frac{temp2}{calciteの真密度} = \frac{6.7489968 \times 10^{-5}}{2.5}$$

$$tempv2 = 2.6995987 \times 10^{-5}\ (\text{-})$$

前記の tempv1 と tempv2 を式（２）に代入すると以下の様になる。

$$\Delta v = \frac{tempv1 \times (1要素の空隙体積)}{(1 + tempv2)} = \frac{2.5287093 \times 10^{-6} \times 300}{(1 + 2.6995987 \times 10^{-5})}$$

$$\Delta v = 7.3867162 \times 10^{-4}\ (\text{cm}^3)$$

式（１）に上記の temp1，temp2，⊿v を代入すると⊿m が求まる。

$$\Delta m = temp1 \times v + temp2 \times \Delta v$$
$$\Delta m = -6.3217732 \times 10^{-6} \times 300 + 6.7489968 \times 10^{-5} \times 7.585923 \times 10^{-4}$$
$$\Delta m = -1.8964807 \times 10^{-6} (g)$$

緩衝材の乾燥密度の変化⊿ρdは，式（３）に１要素当たりの体積Ｖと前記⊿ｍを用いて以下の様に求まる。

$$\Delta \rho_d = \Delta m / V \qquad \text{式（３）}$$

$$\Delta \rho_d = \frac{-1.896480763 \times 10^{-3}}{1{,}000} = -1.896480763 \times 10^{-6} \ (\mathrm{g/cm^3})$$

一方，空隙率の変化⊿εは，式（４）に基づき前記⊿ｖと１要素当たりの体積Ｖを用いることにより求まる。

$$\Delta v = \Delta \varepsilon \times V \qquad \text{式（４）}$$

$$\Delta \varepsilon = \Delta v / V = \frac{7.585923 \times 10^{-4}}{1{,}000} = 7.585923 \times 10^{-7}$$

最後に，次時間ステップで用いる緩衝材の乾燥密度と空隙率は，式（５），式（６）にそれぞれ⊿ρdと⊿εを代入する。ここで求められた⊿ρdと⊿εを，THAMESへ受け渡す。

$$\rho_{d\ (\text{次時間ステップ})} = \rho_{d\ (\text{現時間ステップ})} + \Delta \rho_d \qquad \text{式（５）}$$

$$\varepsilon_{(\text{次時間ステップ})} = \varepsilon_{(\text{現時間ステップ})} + \Delta \varepsilon \qquad \text{式（６）}$$

【次時間ステップで用いる乾燥密度の計算】

$$\rho_{d\ (\text{次時間ステップ})} = 1.6(g/cm^3) - 1.8964809 \times 10^{-6}\ (g/cm^3)$$
$$\rho_{d\ (\text{次時間ステップ})} = 1.599998104(g/cm^3)$$

【次時間ステップで用いる空隙率の計算】

$$\varepsilon_{(\text{次時間ステップ})} = 0.3 + 7.585923 \times 10^{-7}$$
$$\varepsilon_{(\text{次時間ステップ})} = 0.300000758(-)$$

さらに，緩衝材の場合は，式（７）に基づき，次時間ステップでの透水係数を求める。

$$Log(k) = -14.11 + 4.89 \times \rho_d - 2.34 \times \rho_d^{\,2} + 0.42 \times C \qquad \text{式（７）}$$

ここで，

k　　：透水係数（次の時間ステップ）　　【m/s】

ρ_d　　：緩衝材の乾燥密度（次の時間ステップ）【g/cm³】

C　　：NaCl 濃度（現時間ステップ）　　【%】

である。

本テストケースでは，Ca，C 系であることから，前記 NaCl 濃度は 0 となる。式（5）で求まったρ_dを式（7）に代入すると下式となる。

$$Log(k) = -14.11 + 4.89 \times 1.599998104 - 2.34 \times (1.599998104)^2$$

$$Log(k) = -12.18095201$$

$$k = 10^{-12.27639507}$$

$$k = 5.291818375 \times 10^{-13} (m/s)$$

本モジュールを用いた計算結果と比較した結果を表 4.1-15 に示すが，両者は一致しており，本連成物性モジュールは，単一鉱物に対して正確であることが確認できた。

表 4.1-15　本モジュールを用いた計算結果と手計算の比較

比較項目	単位	本モジュールを用いた計算結果	手計算
次時間ステップで使用する乾燥密度	g / cm³	1.5999981	1.5999981
次時間ステップで使用する空隙率	―	0.300000759	0.300000758
次時間ステップで使用する透水係数	m/s	$5.29181833 \times 10^{-13}$	$5.29181838 \times 10^{-13}$

② テストケース 2

ここでは，テストケース 1 と同様に先ず手計算にて次ステップで用いる乾燥密度と空隙率を求め，最後に本モジュールを用いた計算結果との比較を行った。

式（8）を用いて質量変化の計算を行うためには，表 4.1-14 の条件に基づき，THMC 解析において，前時間ステップと現時間ステップでの Delta phase の値が必要となる。

$$\Delta m = \Delta\left(\sum_{i=1}^{n} M_i(-DP)_i\left(1/1000\right)\right) \times v + \left(\sum_{i=1}^{n} M_i(-DP)_i\left(1/1000\right)\right) \times \Delta v$$

式（8）

THMC 解析（phreeqe60，SPRON.JNC）において求められた，3 種類の鉱物の Delta phase を以下に示す。

DP(Calcite：前時間ステップ：要素 3) = －9.73632389×10^{-3} (mol/l)

DP(Calcite：現時間ステップ：要素 3) = －9.80842655×10^{-3} (mol/l)

DP(Chalcedony：前時間ステップ：要素 3) = －6.77462590×10^{-2} (mol/l)

DP(Chalcedony：現時間ステップ：要素 3) = －6.90554750×10^{-2} (mol/l)

DP(Smectite-high：前時間ステップ：要素 3) =－7.99999974×10^{-3} (mol/l)

DP(Smectite-high：現時間ステップ：要素 3) = －8.00053748×10^{-3} (mol/l)

また，Calcite，Chalsedony，Smectite の分子量 M は，熱力学データベース SPRON.JNC に登録されている値を引用し，それぞれ以下の様に求めた。

$M_{calcite}$ = 40.078 + 44.0098 = 84.0878 (g / mol)

$M_{chalcedony}$ = 60.0843 (g / mol)

$M_{smectite}$ = 0.700×55.847 + 12.000×15.9994 + 2.000×1.00797 + 3.500×28.086 + 1.2500×26.9815 + 1.150×24.305 + 0.100×22.9898 + 0.200×39.0983 + 0.025×40.078 = 404.2009 (g / mol)

さらに，空隙の体積 v は以下の様になる。

v = 1 要素の体積 V×空隙率 = 1,000(cm^3) × 0.30(-) = 300(cm^3)

式（１）の右辺第 1 項の v を除いた部分(temp1)は，各鉱物で以下の様になる。

$$temp1_{Calcite} = 84.0878 \times \frac{(9.80842655 \times 10^{-3} - 9.73632389 \times 10^{-3})}{1,000}$$

$$temp1_{Calcite} = 6.062954054 \times 10^{-6}(g)$$

$$temp1_{Chalcedony} = 60.0843 \times \frac{(6.90554750 \times 10^{-2} - 6.77462590 \times 10^{-2})}{1,000}$$

$$temp1_{Chalcedony} = 7.866332691 \times 10^{-5}(g)$$

$$temp1_{Smectite-high} = 404.2009 \times \frac{(8.00053748 \times 10^{-3} - 7.99999974 \times 10^{-3})}{1,000}$$

$$temp1_{Smectite-high} = 2.17354992 \times 10^{-7}(g)$$

さらに，式（１）の右辺第 2 項の⊿v を除く部分(temp2)は，各鉱物で以下の様になる。⊿v は，この後で求めることとする。

$$temp2_{Calcite} = 84.0878 \times \frac{9.80842655 \times 10^{-3}}{1,000}$$

$$temp2_{Calcite} = 8.247690101 \times 10^{-4}(g)$$

$$temp2_{Chalcedony} = 60.0843 \times \frac{6.90554750 \times 10^{-2}}{1,000}$$

$$temp2_{Chalcedony} = 4.149149877 \times 10^{-3}(g)$$

$$temp2_{Smectite-high} = 404.2009 \times \frac{8.00053748 \times 10^{-3}}{1,000}$$

$$temp2_{Smectite-high} = 3.23382445 \times 10^{-3}(g)$$

次に⊿v は，下式に基づき求めた。

$$\Delta v = \left[-\Delta \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{M_i(\text{-}DP)_i \left(1/1000 \right)}{\rho_{mi}} \right\} \times v \right] \Big/ \left[1 + \sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{M_i(\text{-}DP)_i \left(1/1000 \right)}{\rho_{mi}} \right\} \right]$$

式（９）

式(９)分子の v を除く部分(tempv1)は, 各鉱物でそれぞれ以下の様になる。各鉱物の密度は，図 4.1-26 の情報に基づき全鉱物 2.5（g/cm³）とした。

$$tempv1_{Calcite} = -\frac{temp1_{Calcite}}{calciteの真密度} = -\frac{(6.062954054\times10^{-6})}{2.5}$$
$$tempv1_{Calcite} = -2.425181622\times10^{-6}(-)$$

$$tempv1_{Chalcedony} = -\frac{temp1_{Chalcedony}}{chalcedonyの真密度} = -\frac{(7.866332691\times10^{-5})}{2.5}$$
$$tempv1_{Chalcedony} = -3.146533076\times10^{-5}(-)$$

$$tempv1_{Smectite-high} = -\frac{temp1_{Smectite-high}}{smectite-highの真密度} = -\frac{(2.17354992\times10^{-7})}{2.5}$$
$$tempv1_{Smectite-high} = -8.69419968\times10^{-8}(-)$$

また，分母の第 2 項(tempv2)は，各鉱物でそれぞれ以下の様になる。

$$tempv2_{Calcite} = \frac{temp2_{Calcite}}{calciteの真密度} = \frac{8.427690101\times10^{-4}}{2.5}$$
$$tempv2_{Calcite} = 3.29907604\times10^{-4}(-)$$

$$tempv2_{Chalcedony} = \frac{temp2_{Chalcedony}}{chalcedonyの真密度} = \frac{4.149149877\times10^{-3}}{2.5}$$
$$tempv2_{Chalcedony} = 1.659659951\times10^{-3}(-)$$

$$tempv2_{Smectite-high} = \frac{temp2_{Smectite-high}}{smectite-highの真密度} = \frac{3.23382445\times10^{-3}}{2.5}$$
$$tempv2_{Smectite-high} = 1.29352978\times10^{-3}(-)$$

前記の tempv1 と tempv2 を式（９）に代入すると以下の様になる。

$$\triangle v = \frac{tempv1_{Calcite}\times v + tempv1_{Chalcedony}\times v + tempv1_{Smectite-high}\times v}{(1 + tempv2_{Calcite} + tempv2_{Chalcedony} + tempv2_{Smectite-high})}$$
$$\triangle v = \frac{(-2.425181622\times10^{-6} - 3.146533076\times10^{-5} - 8.69419968\times10^{-8})\times300}{1 + 3.29907604\times10^{-4} + 1.659659951\times10^{-3} + 1.29352978\times10^{-3}}$$
$$\triangle v = \frac{(-1.0193236\times10^{-2})}{1.003283097}$$
$$\triangle v = -1.015988\times10^{-2}(cm^3)$$

式（８）に上記の temp1，temp2，⊿v を代入すると⊿m が求まる。

$$\begin{aligned}
\triangle m &= (temp1_{Calcite} + temp1_{Chalcedony} + temp1_{Smectite-high}) \times v \\
&\quad + (temp2_{Calcite} + temp2_{Chalcedony} + temp2_{Smectite-high}) \times \triangle v \\
\triangle m &= (6.062954054 \times 10^{-6} + 7.866332691 \times 10^{-5} + 2.17354992 \times 10^{-7}) \times 300 \\
&\quad + (8.247690101 \times 10^{-4} + 4.149149877 \times 10^{-3} + 3.23382445 \times 10^{-3}) \\
&\quad \times (-1.015988 \times 10^{-2}) \\
\triangle m &= 2.548309 \times 10^{-2} - 8.338968839 \times 10^{-5} \\
\triangle m &= 2.53997 \times 10^{-2} (g)
\end{aligned}$$

緩衝材の乾燥密度の変化⊿ρd は，式（１０）に 1 要素当たりの体積 V と前記⊿m を用いて以下の様に求まる。

$$\triangle \rho_d = \triangle m / V \qquad \text{式（１０）}$$

$$\triangle \rho_d = \frac{2.53997 \times 10^{-2}}{1{,}000} = 2.53997 \times 10^{-5} (g/cm^3)$$

一方，空隙率の変化⊿ε は，式（１１）に基づき前記⊿v と 1 要素当たりの体積 V を用いることにより求まる。

$$\triangle v = \triangle \varepsilon \times V \qquad \text{式（１１）}$$

$$\triangle \varepsilon = \triangle v / V = \frac{(-1.015988 \times 10^{-2})}{1{,}000} = -1.015988 \times 10^{-5}$$

最後に，次時間ステップで用いる緩衝材の乾燥密度と空隙率は，式（１２），式（１３）にそれぞれ⊿ρd と⊿ε を代入する。ここで求められた⊿ρd と⊿ε を，THAMES へ受け渡す。

$$\rho_{d\ (次時間ステップ)} = \rho_{d\ (現時間ステップ)} + \triangle \rho_d \qquad \text{式（１２）}$$

$$\varepsilon_{(次時間ステップ)} = \varepsilon_{(現時間ステップ)} + \triangle \varepsilon \qquad \text{式（１３）}$$

【次時間ステップで用いる乾燥密度の計算】

$$\rho_{d\ (次時間ステップ)} = 1.6(g/cm^3) + 2.53997 \times 10^{-5}\ (g/cm^3)$$

$$\rho_{d\ (次時間ステップ)} = 1.6000254(g/cm^3)$$

【次時間ステップで用いる空隙率の計算】

$$\varepsilon_{(次時間ステップ)} = 0.3 - 1.015988 \times 10^{-5}$$

$$\varepsilon_{(次時間ステップ)} = 0.29998984(-)$$

さらに，緩衝材の場合は，式（１４）に基づき，次時間ステップでの透水係数を求める。

$$Log(k) = -14.11 + 4.89 \times \rho_d - 2.34 \times \rho_d^{\,2} + 0.42 \times C$$ 式（１４）

ここで，

k ：透水係数（次の時間ステップ） 【m/s】

ρ_d ：緩衝材の乾燥密度（次の時間ステップ）【g/cm³】

C ：NaCl 濃度（現時間ステップ） 【%】

である。

本テストケースにおいて，Na，Cl 濃度は，現時間ステップで Dtransu で求められた溶液濃度に基づき以下の様に求めた。

$$Na_{(\text{現時間ステップ:要素3})} = 4.383060714 \times 10^{-3} (mol/l)$$

$$Cl_{(\text{現時間ステップ:要素3})} = 1.411265413 \times 10^{-3} (mol/l)$$

おのおの分子量を乗じて，単位換算すると以下の様になる。

$$\begin{aligned} Na_{(\text{現時間ステップ:要素3})} &= 4.383060714 \times 10^{-3} (mol/l) \times 23 (g/mol) \\ &= 1.008104 \times 10^{-1} (g/l) \\ &= 1.008104 \times 10^{-2} (\%) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Cl_{(\text{現時間ステップ:要素3})} &= 1.411265413 \times 10^{-3} (mol/l) \times 35 (g/mol) \\ &= 4.939429 \times 10^{-2} (g/l) \\ &= 4.939429 \times 10^{-3} (\%) \end{aligned}$$

$$C = NaCl = 1.008104 \times 10^{-2} + 4.939429 \times 10^{-3} = 1.5020469 \times 10^{-2} (\%)$$

式（１２）で求まったρd ならびに前記の C を式（１４）に代入すると下式となる。

$$Log(k) = -14.11 + 4.89 \times 1.6000254 - 2.34 \times (1.6000254)^2 + 0.42 \times 1.5020469 \times 10^{-2}$$

$$Log(k) = -12.27015739$$

$$k = 10^{-12.27015739}$$

$$k = 5.368372092 \times 10^{-13} (m/s)$$

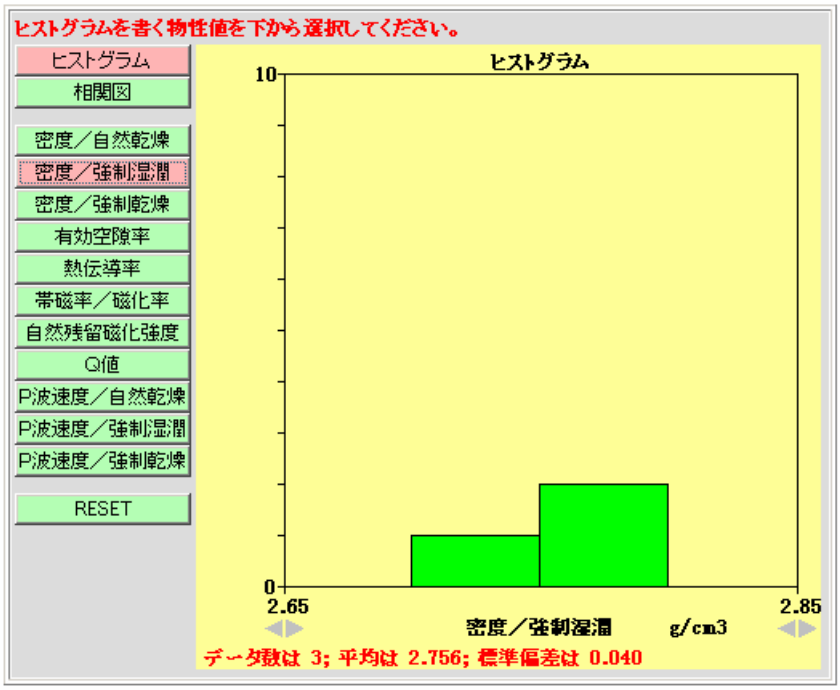
本モジュールを用いた計算結果と比較した結果を表 4.1-16 に示すが，両者

は一致しており，本連成物性モジュールは，複数鉱物に対して正確であることが確認できた。

表 4.1-16　本モジュールを用いた計算結果と手計算の比較

比較項目	単位	本モジュールを用いた計算結果	手計算
次時間ステップで使用する乾燥密度	g / cm^3	1.6000254	1.6000254
次時間ステップで使用する空隙率	―	0.29998984	0.29998984
次時間ステップで使用する透水係数	m/s	$5.368372054 \times 10^{-13}$	$5.368372092 \times 10^{-13}$

検索条件は 方解石



検索条件は 石英

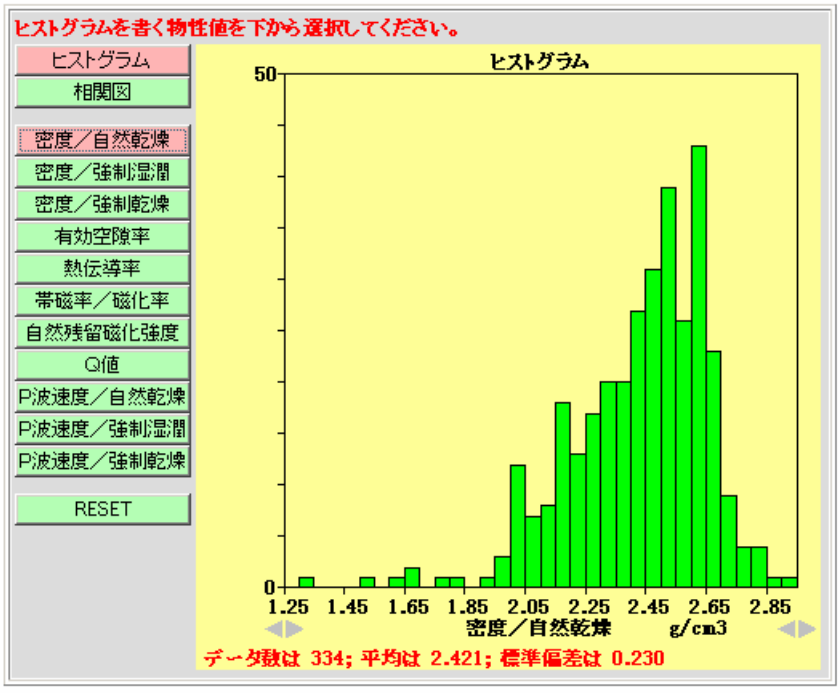


図 4.1-26　鉱物の密度（1/2）

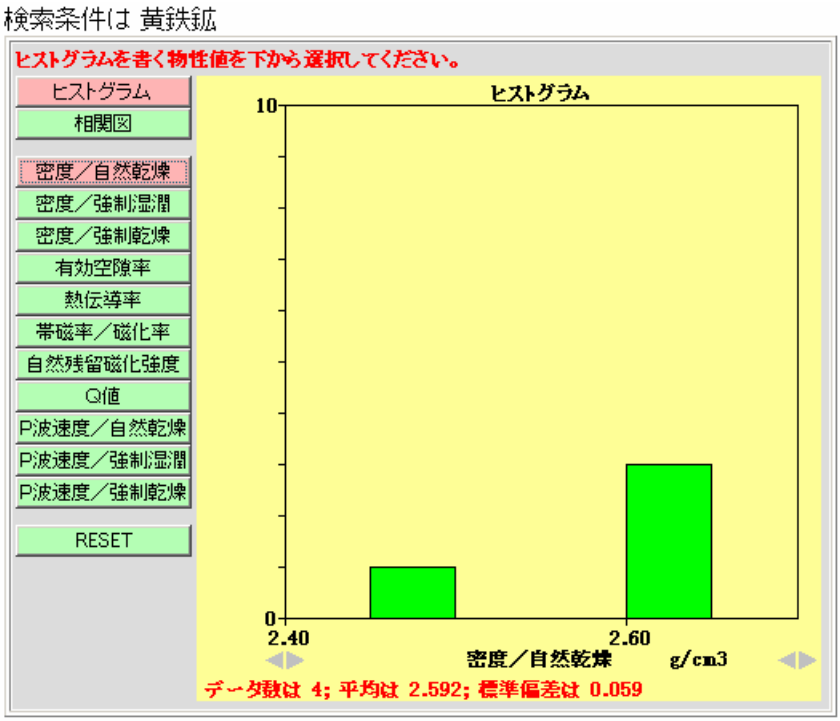


図 4.1-26　鉱物の密度（2/2）

http://www.aist.go.jp/RIODB/cgi-db037/searchj.cgi

4.1.4 THMC 連成のためのデータセット作成

本項では, 連成管理プログラム COUPLYS に既存の解析コード THAMES, Dtransu, phreeqe60，THMC 物性連成モジュールを搭載した。ここでは，THMC ベーシック版に THMC 物性連成モジュールを追加したものである。

連成用変数の受渡しデータは，全て共有メモリを経由していることから，共有メモリからのデータの受け取り，共有メモリへのデータの転送は，既存解析コードのプログラム内に連成コマンドとして設定している。従って，THAMES，Dtransu，phreeqe60 配下で設定している THMC 連成物性／支援モジュール（表 4.1-17，表 4.1-18 参照）へのデータの受渡しを行う場合は，全て連成コマンドを使用した。

図 4.1-27 に示す THMC 連成モジュール構成において，実線の矢印部分では，連成コマンドを使用していることを示している。

表 4.1-17　THAMES，Dtransu 配下の連成物性／支援モジュール一覧表

No.	モジュール名称	支援モジュール，連成物性モジュールの内訳
1	MESHCONV1	メッシュ（要素・節点）データコンバート
2	MESHCONV2	節点温度など THAMES 解析結果データの Dtransu 用への変換
3	CC_CONVT1	節点濃度から要素中心濃度への変換
4	CC_CONVT2	要素濃度から節点濃度への変換
5	CHECK_CONVG	濃度に関する収束のチェック
6	NTOE_CONVERT	節点温度等の要素中心値への変換

表 4.1-18　phreeqe60 配下の連成物性／支援モジュール一覧表

No.	モジュール名称	支援モジュール，連成物性モジュールの内訳
1	MKLREC	元素名を phreeqe60 用のインデックス番号に変換
2	MKMOLL	濃度の単位変換（mol/m^3－＞mol/l）
3	ADDINP	連成コードの追加入力の読み込み 入力ファイル名：addinp.dat
4	MKTMC0	追加入力による初期濃度の変更
5	SKIPINP	phreeqe60 入力のコントロール 入力ファイル名：ph60.dat
6	ADD_2MIN MOD_MIN	入力鉱物のコントロール
7	BERNER MKCASI	コンクリートモデル
8	CHKDRY	鉱物の枯渇判定
9	MKICHMIN1	２次鉱物の平衡鉱物への判定
10	MKDPMC	沈殿濃度、溶解濃度、吸着濃度計算
11	MKMOLM3	濃度の単位変換（mol/m^3＜－mol/l）
12	MKDD11 MKPARM	乾燥密度の変化⇒透水係数の変化，空隙率の変化

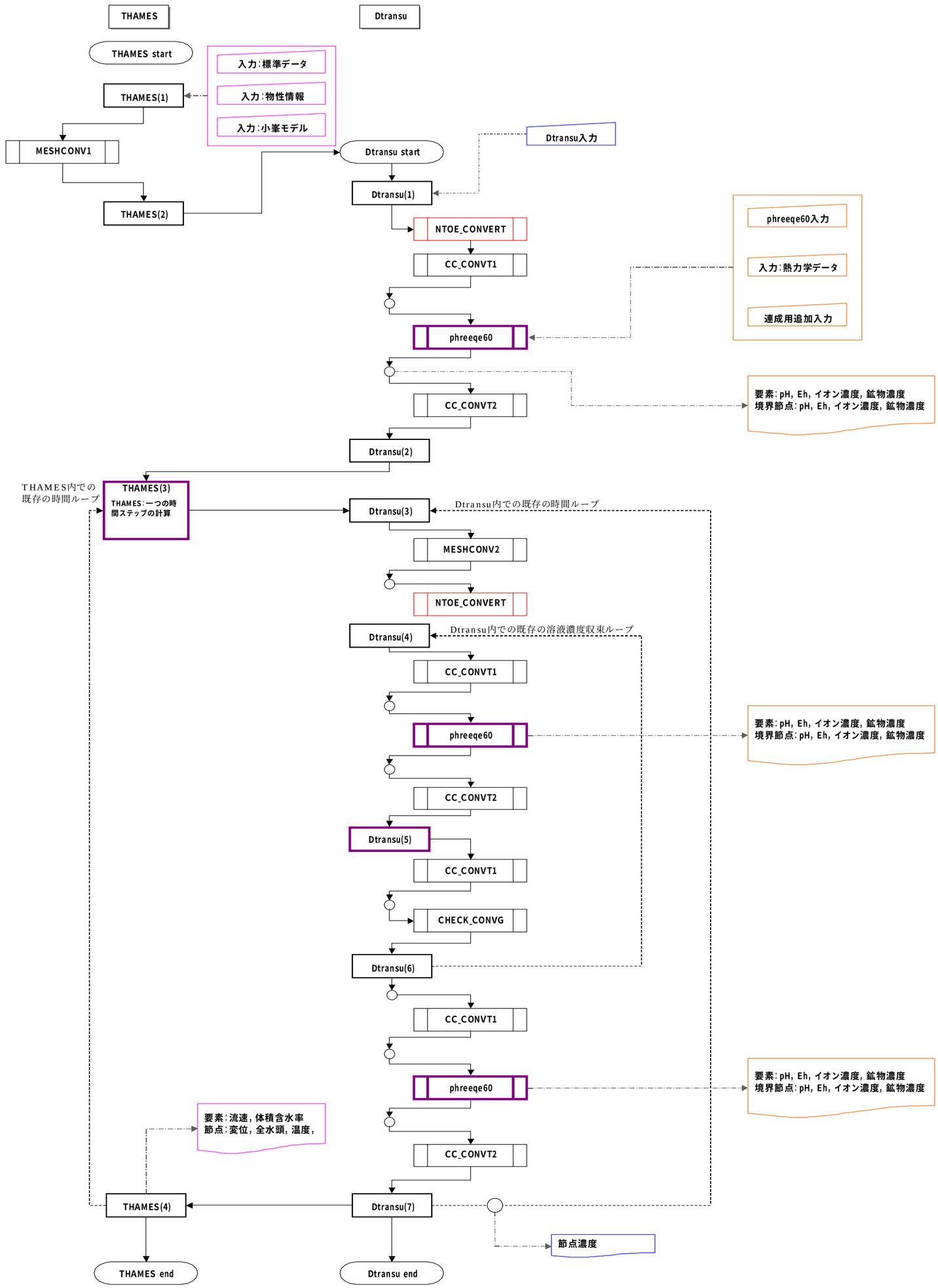


図 4.1-27　平成 14 年度 THMC（THAMES－Dtransu－phreeqe60）モジュール構成

4.2 検証

THMC 連成解析コードの検証は，ベンチマーク解析等が実施できない。本来，検証は現象を正確に模擬しているかを確認するのでは無く，数学モデル（経験式，単純な処理を含む）が正確にコーディングされているか否かを確認することである。検証の手法については，以下に示すようにいくつかの方法があるが，THMC 連成解析コードを対象とした検証は，以下の方法のうち，単純系での感度解析を行なうことにより，感度を考察することにより検証作業とするものである。

- ■ 理論解との比較。
- ■ 同一機能の解析コードとの比較。
- ■ 手計算との比較。
- ■ 机上検討により意図したコーディングが実施されているか否か。
- ■ 感度解析を行なう。

4.2.1 感度解析方針

本研究の感度解析では，昨年度の知見を有効に活用することとする。感度解析は，昨年度 THAMES－Dtransu を用いて実施した塩の蓄積に係る問題をケース 1 とした。また，昨年度 HYDROGEOCHEM－phreeqe60 を用いて実施したカラム内の方解石の沈殿・溶解に係わる問題をケース 2 とし，最後にケース 1 とケース 2 の条件を取り入れた問題をケース 3 とした。各ケース（1～3）ともサブケースを設定した。サブケースの目的・考察の視点は，表 4.2-1 に示すように，ケース 1 のサブケース（ケース 1_1）では，透水係数変化モジュールの効果を把握する。ここでは，NaCl の濃度によって，透水係数がどの程度変化するのかを手計算と比較する。ケース 2 のサブケース（ケース 2_2）では，温度の効果によって，溶解度の増減が及ぼす影響度について考察する。ケース 3 のサブケース（ケース 3_3）では，サブケース 1，2 の考察に加え，複数鉱物の動作確認を行なう。

各ケースの解析モデル図をそれぞれ図 4.2-1～図 4.2-5 に示す。

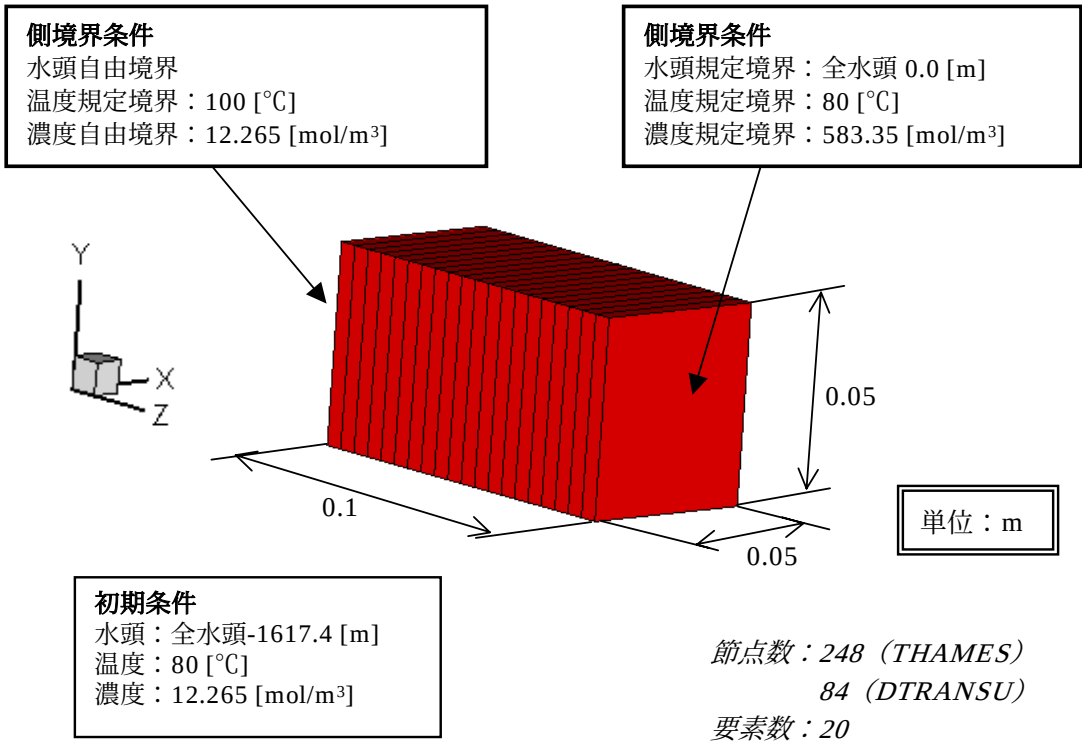


図 4.2-1　検証解析ケース 1-1，1-2 解析仕様

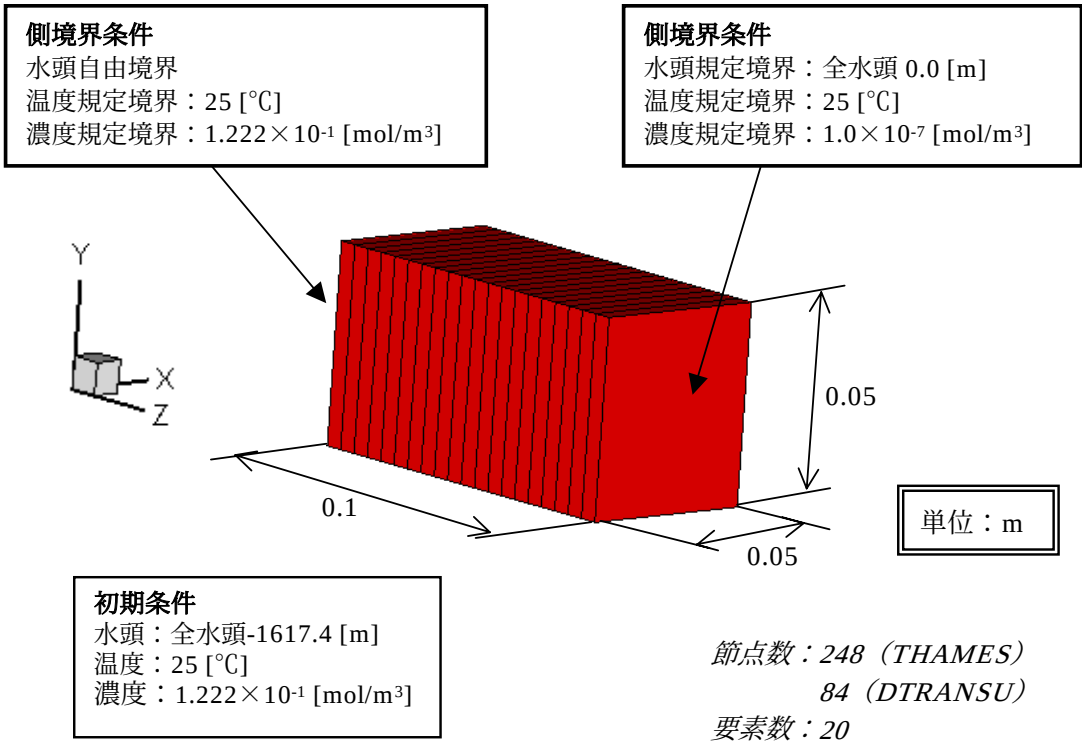


図 4.2-2　検証解析ケース 2-1 解析仕様

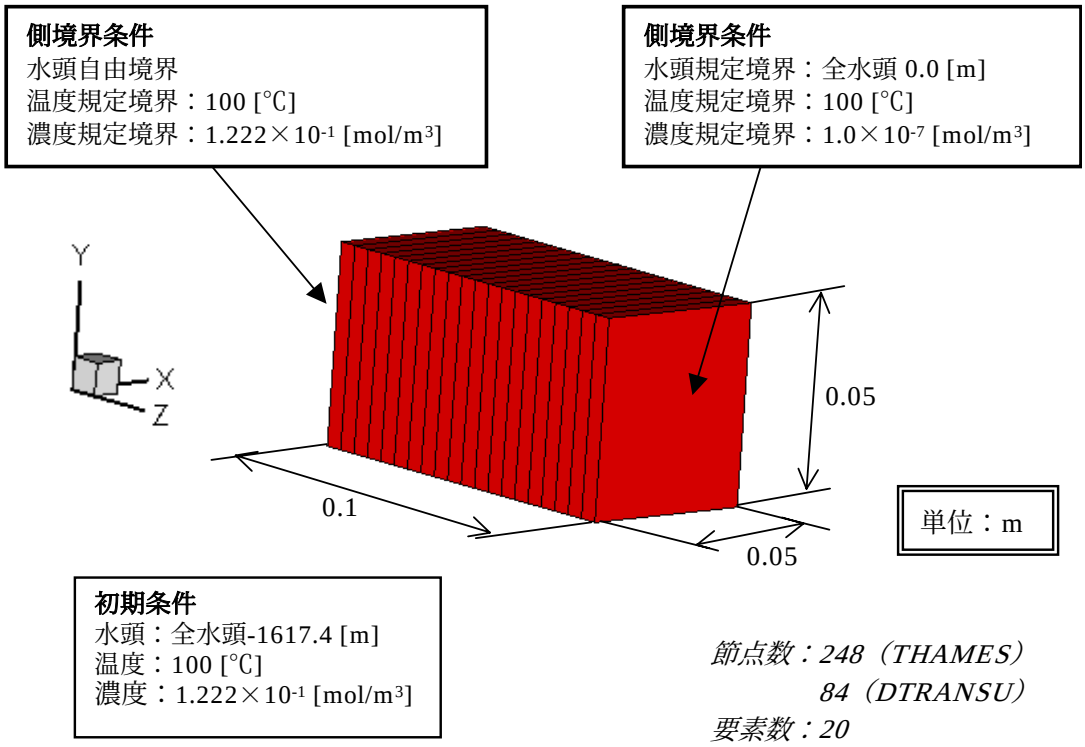


図 4.2-3　検証解析ケース 2-2 解析仕様

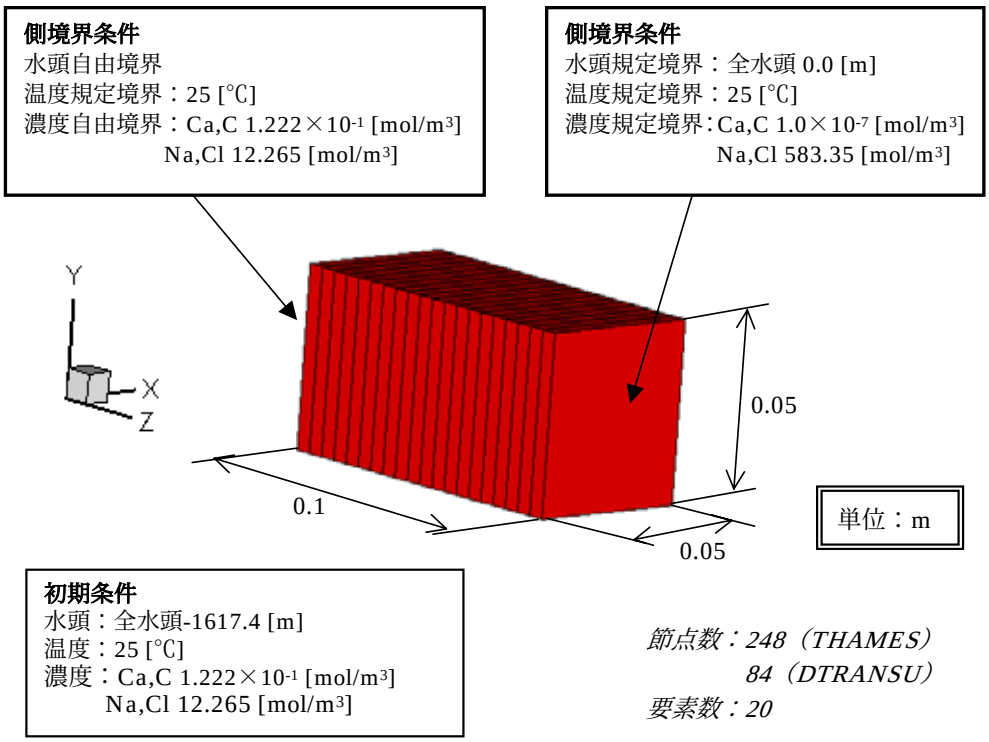


図 4.2-4　検証解析ケース 3-1 解析仕様

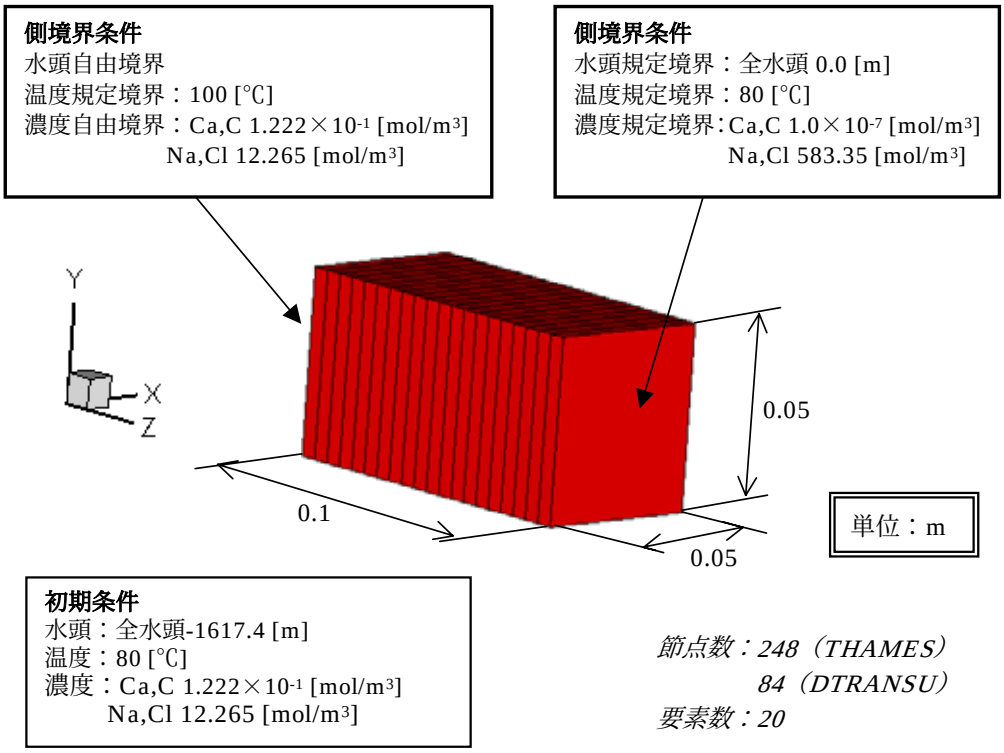


図 4.2-5　検証解析ケース 3-2 解析仕様

表 4.2-1　検証解析仕様一覧

解析ケース	THAMES				Dtransu				phreeqe60	THAMES Dtransu		THMC		考察の視点
	境界温度	温度勾配水分拡散係数	初期含水比	注水圧	分散長	拡散係数	境界濃度 1 境界濃度 2	初期濃度	初期鉱物 ( ) 2 次鉱物	時間ステップ	空間メッシュ	解析体系	連成物性モジュール	
	℃	$m^2/s/K$	%	MPa	m	m^2/s	mol/m^3	mol/m^3	―	s	m	―	―	
1-1	【高温】 100.0 【低温】 80.0	7×10^{-12}	5.25	0	1×10^{-4}	5.0×10^{-10}	【右側液】 583.35 【左側液】 12.265	12.265	(Halite) SPRON.JNC	6000	0.005 全長 10cm	H13 年度 NaCl Case1-2 同一体系 【～5 日】	(1) 小峯モデル (2) 温度(THM⇒C)	H13 年度 NaCl Case1-2
1-2	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	(1) 小峯モデル (2) 温度(THM⇒C) (3) 透水係数変化	透水係数変化の効果を確認
2-1	【高温】 25.0 【低温】 25.0	〃	〃	〃	〃	1.0×10^{-7}	【右側液】 1×10^{-7} 【左側液】 1.22×10^{-1}	1.22×10^{-1}	Calcite SPRON.JNC	6000	0.005 全長 10cm	H13 年度 $CaCO_3$ 同一体系 【～5 日】	(1) 小峯モデル (2) 温度(THM⇒C) (3) 透水係数変化	H13 年度 $CaCO_3$ 再現性確認用
2-2	【高温】 100.0 【低温】 100.0	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	H13 年度 $CaCO_3$ 同一体系 【～2 年】	〃	温度変化にともなう溶解・沈殿変化による効果の確認
3-1	【高温】 25.0 【低温】 25.0	〃	〃	〃	〃	3×10^{-10}	ケース１，ケース２と同仕様	ケース１，ケース２と同仕様	(Halite) Calcite SPRON.JNC	6000	0.005 全長 10cm	H13 年度 NaCl Case1-2 同一体系 【～８日】	〃	複数鉱物計算確認
3-2	【高温】 100.0 【低温】 80.0	〃	〃	〃	〃	〃	〃	〃	(Halite) Calcite SPRON.JNC	〃	〃	H13 年度 NaCl Case1-2 同一体系 【～８日】	〃	複数鉱物計算確認

表 4.2-2　検証解析入力データ（THAMES）

入力データ項目		Case1-1	Case1-2	Case2-1	Case2-2	Case3-1	Case3-1
空隙率 [-]		0.403	0.403	0.410	0.410	0.410	0.410
初期体積含水率 [-]		0.0862	0.0862	0.0862	0.0878	0.0867	0.0867
初期乾燥密度 [g/cm^3]		1.5745	1.5745	1.6007	1.5400	1.5862	1.5852
固有透過度 [m^2]		4.0×10^{-20}					
VG パラメータ	θs [-]	0.403					
	θr [-]	0					
	α[1/m]	8.0×10^{-3}					
	n [-]	1.6					
比透水係数 [-]		―					
水分拡散係数	a1	$2.99\times10^{-8}T-3.74\times10^{-7}$					
	a2	$-1.5\times10^{-8}T+1.49\times10^{-7}$					
	b1	-2.49×10^{-3}					
	b2	$5.59\times10^{-4}T+3.93\times10^{-1}$					
温度勾配水分拡散係数 [m^2/(sK)]		$Dt=D_{t0}\times\exp[(\alpha_t(T-T_0)/T_0]$					
熱伝導率 [W/(mK)]		$4.44\times10^{-1}+1.38\times10^{-2}w+6.14\times10^{-3}w^2-1.69\times10^{-4}w^3$					
比熱 [kJ/(kgK)]		(34.1+4.18w)/(100+w)					

w：含水比，T：温度

※初期乾燥密度は右端要素の値

表 4.2-3　検証解析入力データ（Dtransu）

入力データ項目	Case1-1	Case1-2	Case2-1	Case2-2	Case3-1	Case3-2
縦分散長 [m]	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}
横分散長 [m]	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}
拡散係数 [m^2/s]	5×10^{-10}	5×10^{-10}	1×10^{-7}	1×10^{-7}	3×10^{-10}	3×10^{-10}
遅延係数 [-]	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
減衰係数 [1/y]	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

表 4.2-4　検証解析入力データ（phreeqe60）

解析ケース	初期鉱物（2 次鉱物）	初期鉱物濃度 [mol/l_Cell]	真密度 [g/cm^3]	分子量 [g/mol]	pH [－]	pe [－]
Case1-1	(Halite)	―	―	―	7.0	5.0
Case 1-2	〃	―	―	―	〃	〃
Case 2-1	Calcite	4.0	2.712	100.0	〃	〃
Case 2-2	〃	400.0	〃	〃	〃	〃
Case3-1	Calcite	4.0	2.712	100.0	〃	〃
	(Halite)	0.0	―	―	〃	〃
Case 3-2	〃	〃	〃	〃	〃	〃

4.2.2 感度解析結果

本項では，前記各ケースにおけるサブケースの比較・解釈を行うことにより，開発した熱－水－応力－化学連成解析コードの適切性を判断するものである。

(1) 検証解析ケース 1

本解析ケースのうちサブケース 1_1 は，昨年度に実施した THAMES－Dtransu による塩の蓄積と同一条件の計算を行ない，本年度開発した THMC を用いて再現性の確認を目的としている。また，サブケース 1_2 は，サブケース 1_1 に基づき透水係数の変化モジュールを考慮した場合の動作確認を目的としている。サブケース 1_1 は，塩の蓄積が生じた場合に, 前年度の再現が出来ないと考え, 連成方式 1（図 3.5-9 参照：Dtransu の溶液濃度使用）で実施した。ただし，塩の蓄積が無い場合は，連成方式 1, 3 とも同一の解が得られる。

図 4.2-6 は，サブケース 1_1 の軸方向 NaCl 濃度の空間分布を示している。本図より，昨年度の結果と本年度 THMC による結果は，ほぼ一致しており，再現性について確認することができた。

図 4.2-7 は, NaCl 濃度の変化に応じて透水係数の変化モジュールを用いた場合の軸方向 NaCl 濃度分布を示す。透水係数を考慮していないケース（図 4.2-6）と比較した場合，カラム全領域にかけて NaCl の移行が促進している。これは，カラム内の NaCl の効果により，図 4.2-12 に示すように，透水係数が増加したことが起因していると考えられる。これにより, 温度上昇（図 4.2-8), 水分移動（図 4.2-9), 物質移行（図 4.2-11）が促進されるものと考える。

図 4.2-8 は，ケース 1_2 の温度の空間分布を示す。温度分布は，10 時間後にほぼ定常状態となっており，直線的な温度勾配を形成している。図 4.2-9 は，ケース 1_2 の飽和度の空間分布を示す。飽和度分布は，カラム内の初期全水頭が負であるため，右端固定境界から水が流入し，最終的には一様分布になる。

従って，COUPLYS 環境下において THMC の連成が正確に計算されていること，NaCl の濃度に応じた透水係数が計算され, 透水係数の変化に応じた物質移行の計算が行われていることが概ね確認できた。

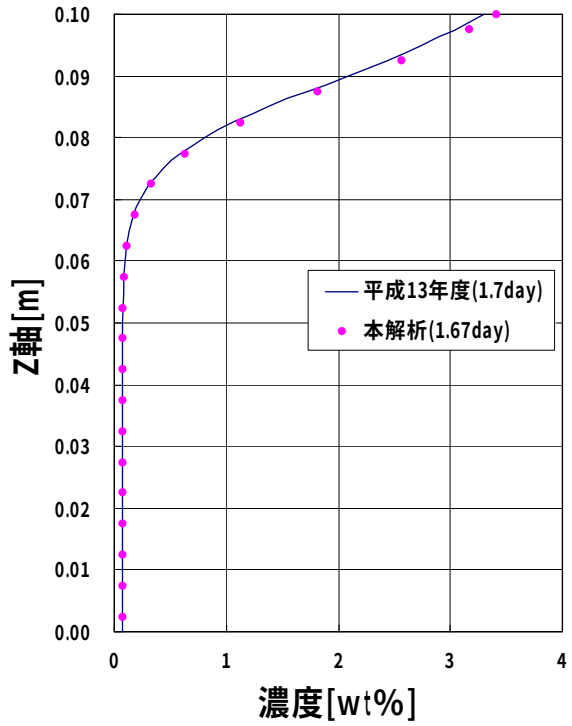


図 4.2-6 ケース 1_1：NaCl 濃度の空間分布

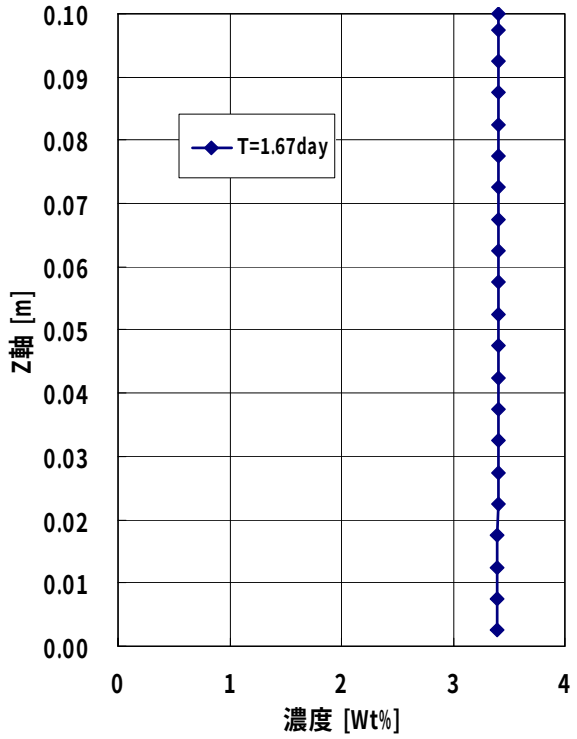


図 4.2-7　ケース 1_2：NaCl 濃度の空間分布

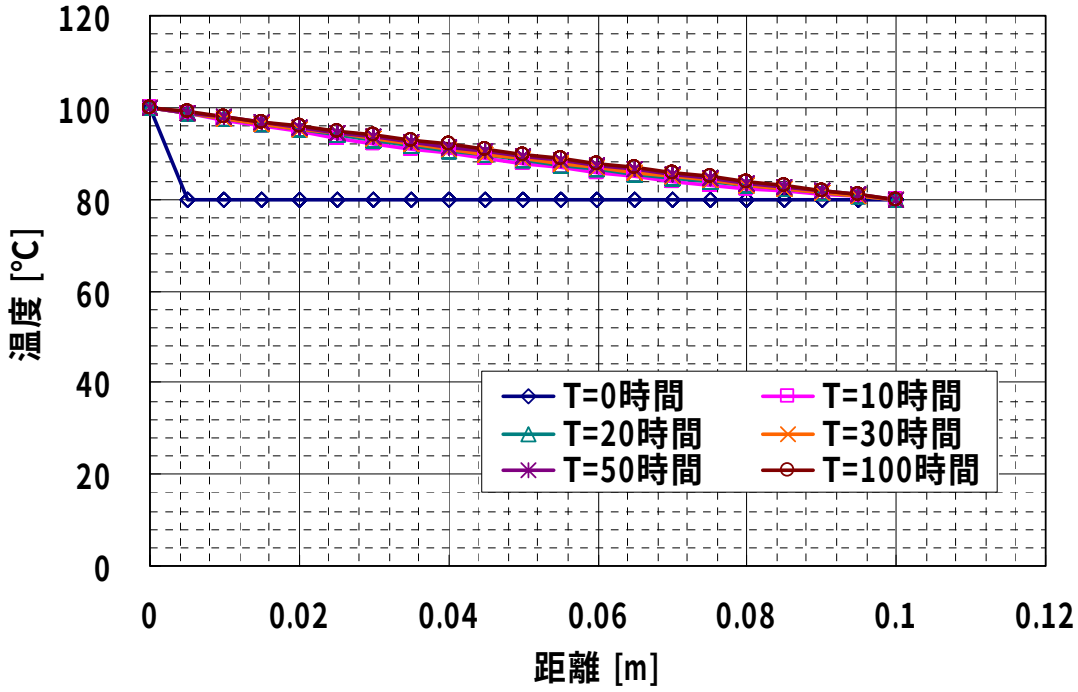


図 4.2-8 ケース 1_2：温度の空間分布

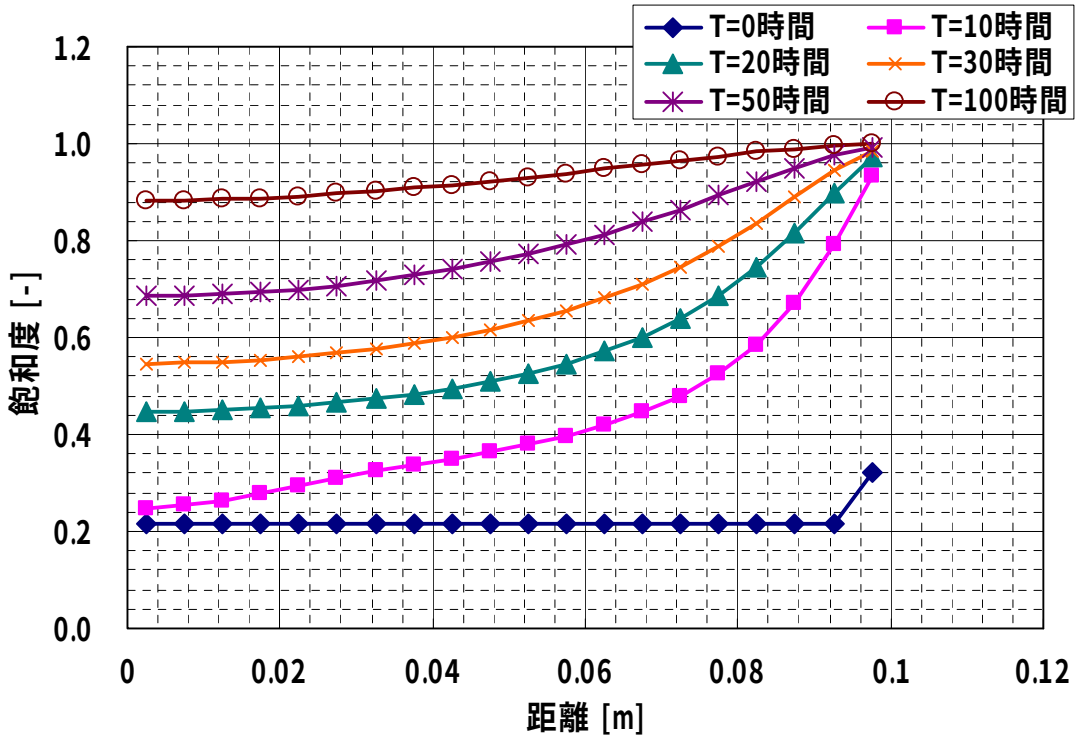


図 4.2-9 ケース 1_2：飽和度の空間分布

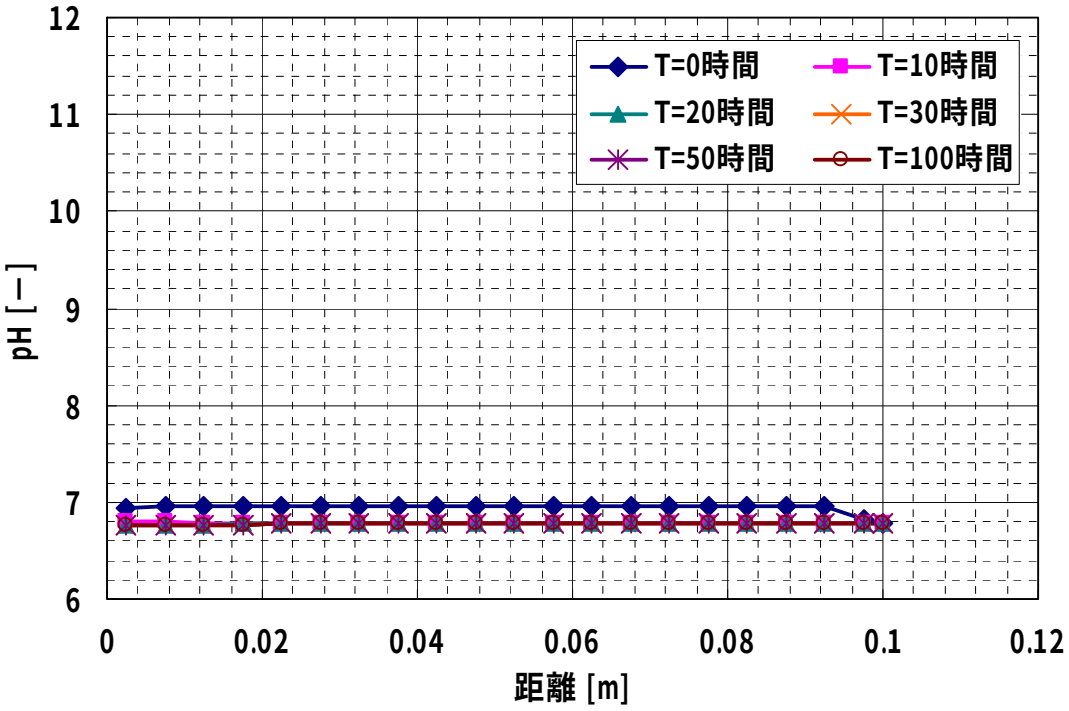


図 4.2-10 ケース 1_2：pH の空間分布

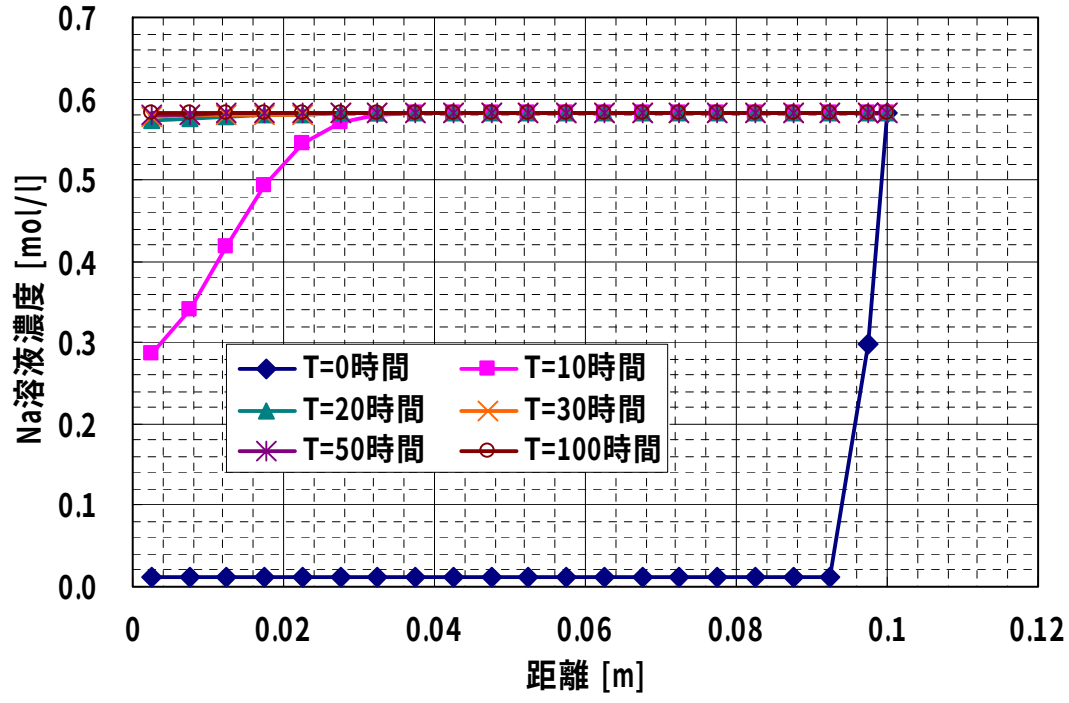


図 4.2-11 ケース 1_2：Na 溶液濃度の空間分布

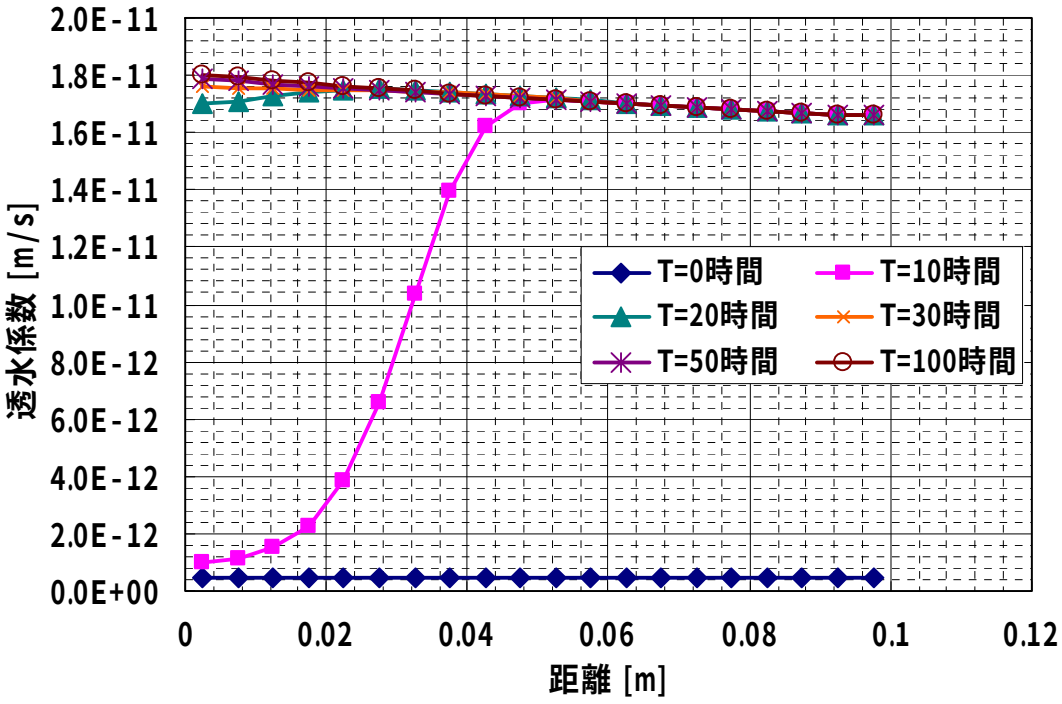


図 4.2-12 ケース 1_2：透水係数の空間分布

(2) 検証解析ケース 2

本検証ケースは，緩衝材の構成鉱物である方解石の溶解・沈殿現象の温度依存性に係る挙動について解釈することを目的としている。解析空間領域では，化学平衡を考慮する方解石と未反応を仮定した緩衝材を想定し，環境因子と地球化学因子の相互作用を考察するものである。本検証ケースでは，2 つのサブケースを設定しており，ケース 2_1 は，カラム内 25℃一定の場合，ケース 2_2 はカラム内 100℃一定の条件としている。

また，方解石が枯渇した場合（空隙水中への Ca，C の溶解現象）に未反応を仮定した緩衝材の乾燥密度が正確に計算されていることを確認することも，本検証解析ケースの目的としている。本検証解析では，下記の関係式(1)に基づき，緩衝材と方解石の初期乾燥密度が 1.6(g/cm^3)として, 方解石が枯渇した場合に 1.2(g/cm^3)となるような方解石の初期沈殿濃度(MIN)を設定することとした。

$$\rho_{t+\Delta t} = \sum_i \left(MIN^i_{t+\Delta t} \times \frac{A^i}{1000} \right) \qquad (1)$$

ここで，$\rho_{t+\Delta t}$ ：時刻 $t+\Delta t$ におけるセルの乾燥密度 [kg/m^3]

$MIN^i_{t+\Delta t}$ ：時刻 $t+\Delta t$ におけるセル内の鉱物 i の濃度 [mol/m^3_Cell]

A^i ：鉱物 i の分子量 [g/mol]

である。

式(1)に基づき 0.4(g/cm^3)すなわち 400(kg/m^3)の乾燥密度を設定するためには，設定すべき方解石の初期鉱物濃度を 4000(mol/m^3_Cell)とする必要がある。この初期鉱物濃度は，方解石が枯渇するまでの計算時間が膨大（約 3 週間）となることから，本検証ケース 2_1 では，4(mol/m^3_Cell)として初期乾燥密度から，枯渇時において 0.0004(g/cm^3)の微小減少分を確認することとした。また，検証ケース 2_2 は，環境温度がケース 2_1 よりも高いことから，方解石の溶解量が促進することが期待できること，並びに緩衝材乾燥密度のやや顕著な減少分を確認するため，方解石の初期鉱物濃度を 400(mol/m^3_Cell)とした。

図 4.2-13，図 4.2-14 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内での温度分布を示す。ケース 2_1 は低温（25℃），ケース 2_2（100℃）の一様分布となっている。

図 4.2-15，図 4.2-16 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内の飽和度分布を示す。両ケースとも同一の水頭条件を採用していることから, 右端から水が流入し，

カラム内部へ徐々に水が移行する現象となっている。100 時間の時点において，ケース 2_2 の方がわずかに飽和度のフロントが進展しているのは，高温による透水係数の増加（図 4.2-23, 図 4.2-24 参照）により，水の移動が促進していることを示している。

図 4.2-17，図 4.2-18 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内空隙水の pH 分布を示す。両解析ケースとも，右端境界隣接要素において方解石が枯渇するまでの計算を行っていることから，右端でわずかな変化に留まっている。高温環境下での方解石の溶解挙動を反映し，ケース 2_2 は低 pH となっている。

図 4.2-19，図 4.2-20 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内空隙水の Ca 溶液濃度分布（C 溶液濃度も同一の分布）を示す。Ca，C 溶液濃度の分布と pH の分布は，地球化学コード phreeqe で採用されている電気的中性の式や方解石の溶解平衡式により，これらが連動していることがわかる。[] は濃度を示す。

- 電気的中性の式　：$2[Ca^{2+}] + [H^{+}] = [HCO3^{-}] + 2[CO3^{-}] + [OH^{-}]$
- 溶解平衡式　：$CaCO_3$ (方解石)$+ H_2O \Rightarrow Ca^{2+} + HCO_3^{-} + OH^{-}$

図 4.2-21，図 4.2-22 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内に充填された緩衝材のうち，方解石を構成している Ca の沈殿濃度を（C の沈殿濃度も同一の分布）を示す。本図より，両ケースとも右端の境界が希薄濃度で規定されているため，方解石から Ca，C が空隙中に溶解し（沈殿濃度が減少する），右端境界に向って物質が移行する現象となり，時間の経過とともに右端境界の隣接要素の沈殿濃度が徐々に減少している。

図 4.2-23，図 4.2-24 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内に充填された緩衝材の透水係数分布を示す。ケース 2_1 は，初期の方解石沈殿濃度が微量であることから，右端境界に隣接する要素で方解石が枯渇した場合においても，緩衝材の乾燥密度の変化が微量であるため，透水係数への影響度も僅かである。一方，ケース 2_2 は，初期の方解石沈殿濃度が，ケース 2_1 よりも 100 倍大きいことから，透水係数の変化が見られる。

図 4.2-25，図 4.2-26 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内に充填された緩衝材の乾燥密度分布を示す。両ケースとも右端境界に隣接する要素において，方解石の質量が時間の経過とともに減少して枯渇することから，緩衝材の乾燥密度も方解石の質量挙動に連動（図 4.2-21，図 4.2-22 参照）して減少する傾向を示す。図 4.2-25 は，前述の「枯渇時において乾燥密度 0.0004(g/cm^3)【0.4(kg/m^3)】の微小減少分」に

ついて，右端境界の隣接要素の 0 時間と 108 時間（方解石が枯渇する時間）の差が 0.0004(g/cm^3)となっており，乾燥密度変化モジュールの正確性を確認することができた。また，図 4.2-26 は，右端境界の隣接要素の 0 時間と 8000 時間（方解石が枯渇する時間）の差が 40(g/cm^3)となっており，意図した乾燥密度の変化が得られていることが確認できた。

図 4.2-27，図 4.2-28 は，それぞれケース 2_1，ケース 2_2 のカラム内に充填された緩衝材の空隙率分布を示す。両ケースとも右端境界に隣接する要素において，方解石の質量が時間の経過とともに減少して枯渇することから，緩衝材の空隙率も方解石の質量挙動に連動（図 4.2-21，図 4.2-22 参照）して増加する傾向を示す。

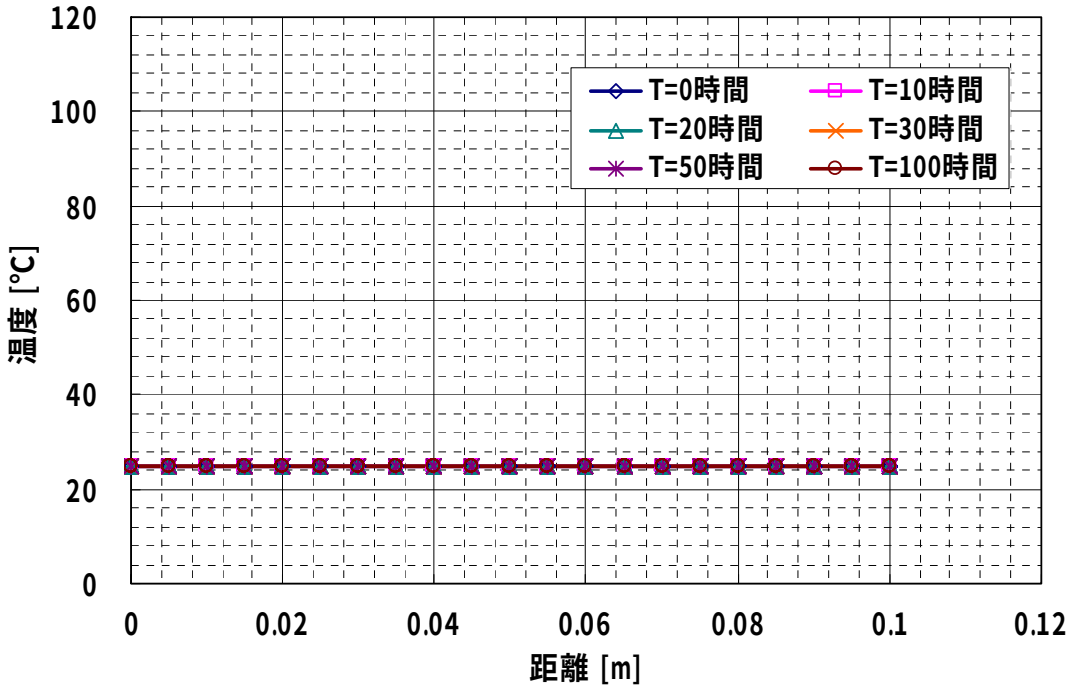


図 4.2-13　ケース 2_1：温度の空間分布

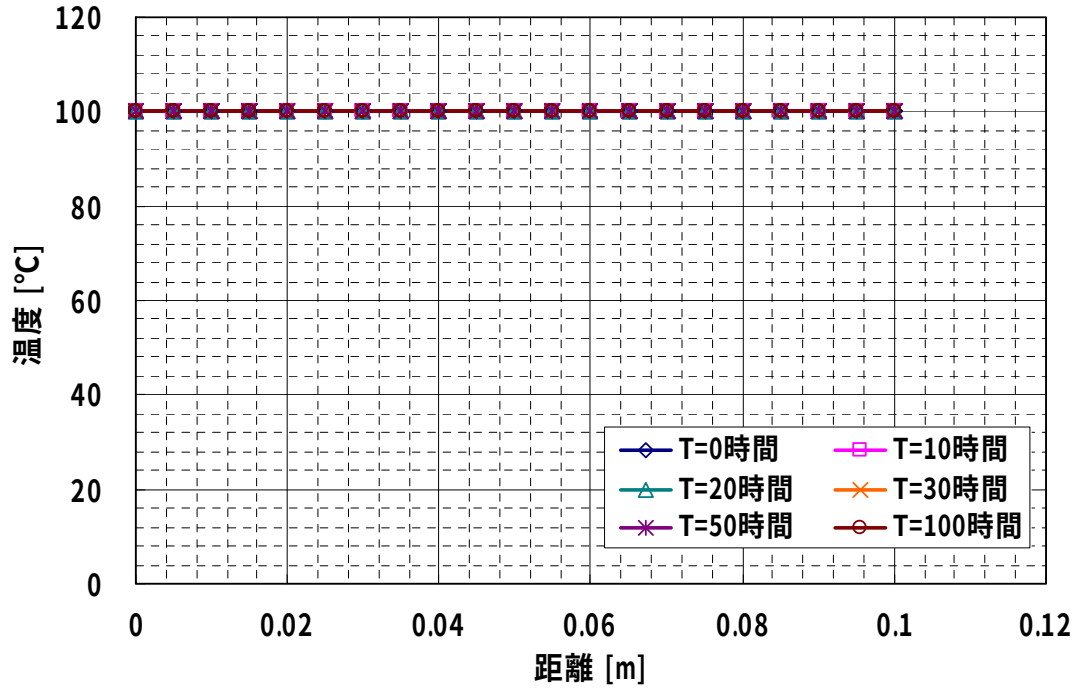


図 4.2-14　ケース 2_2：温度の空間分布

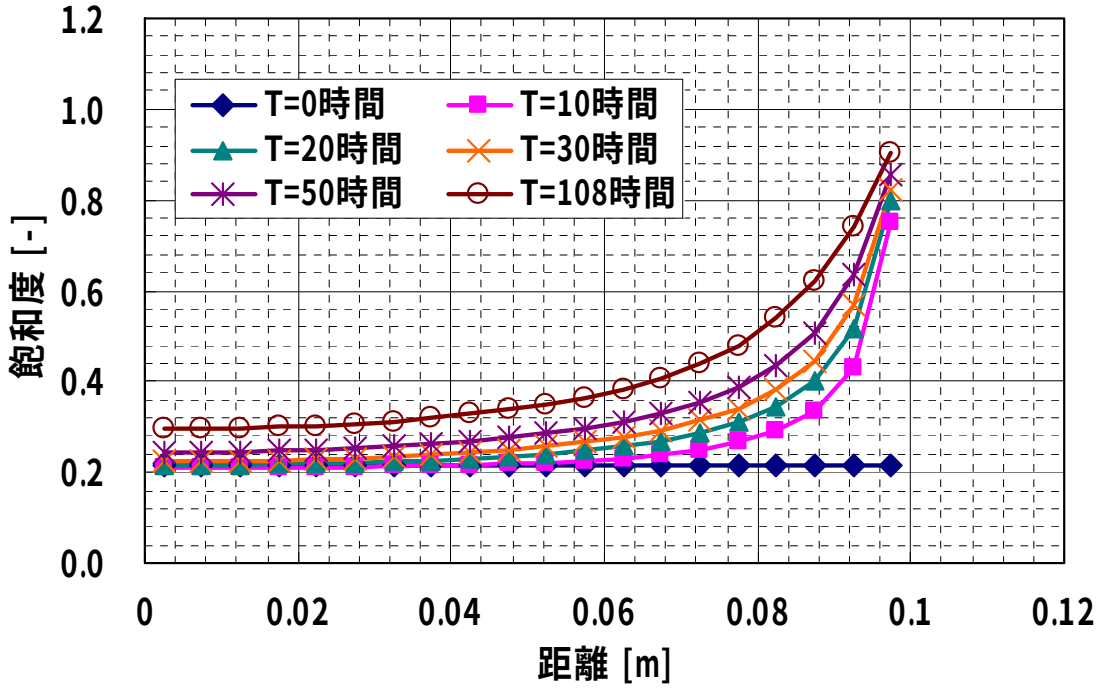


図 4.2-15　ケース 2_1：飽和度の空間分布

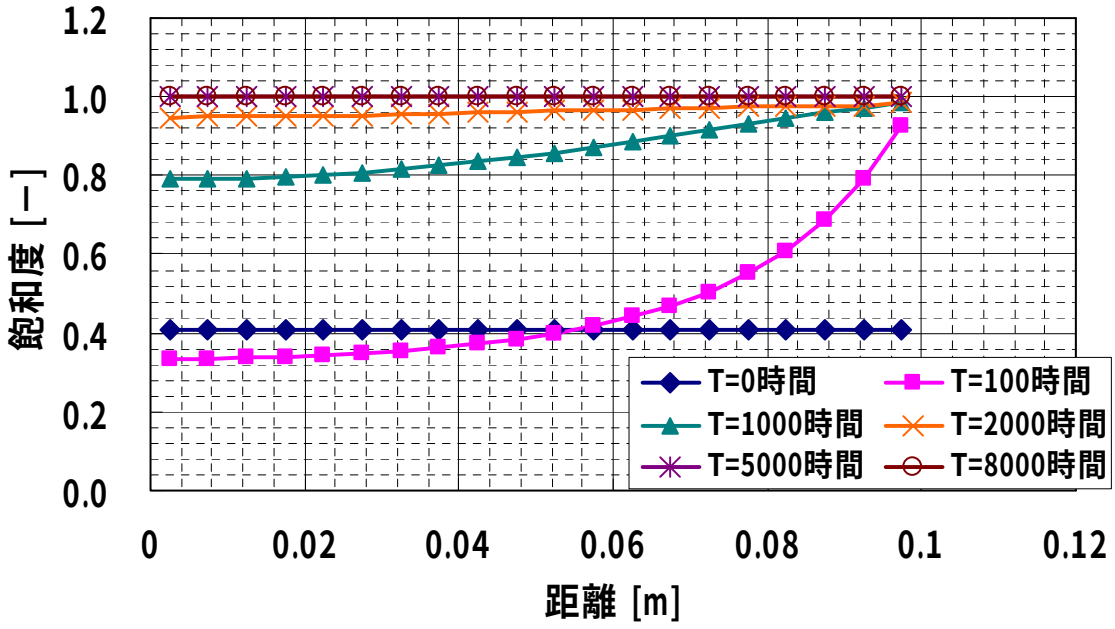


図 4.2-16　ケース 2_2：飽和度の空間分布

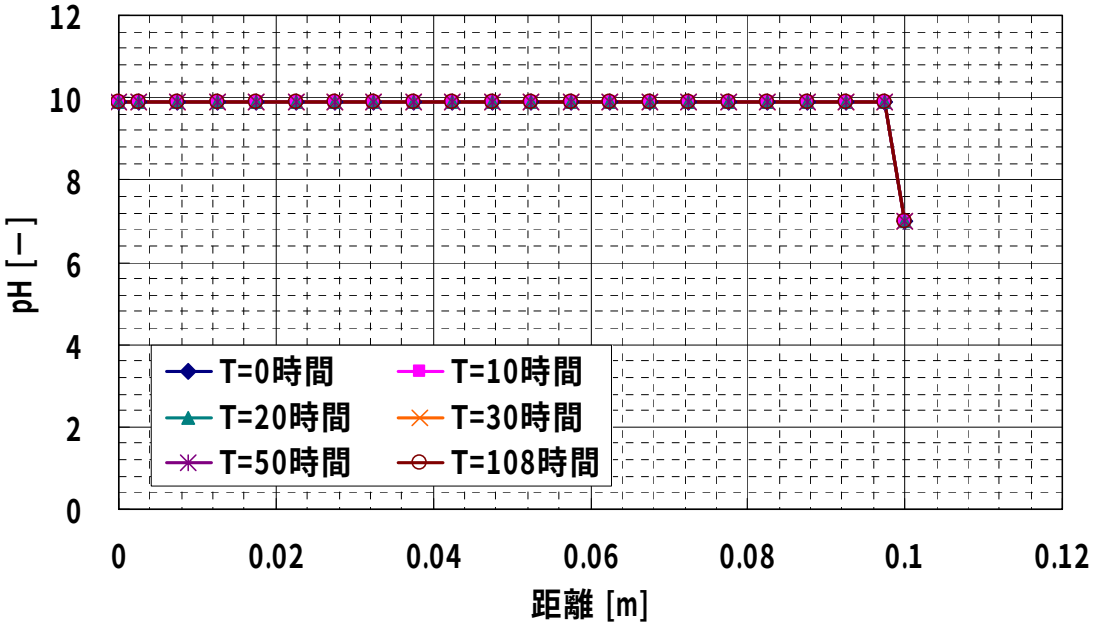


図 4.2-17　ケース 2_1：pH の空間分布

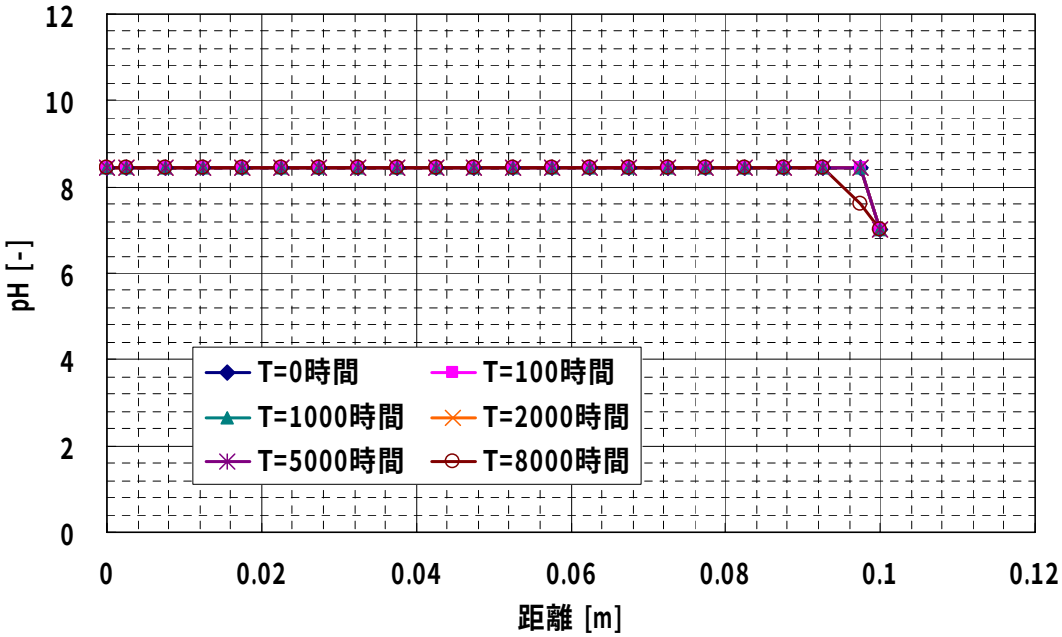


図 4.2-18　ケース 2_2：pH の空間分布

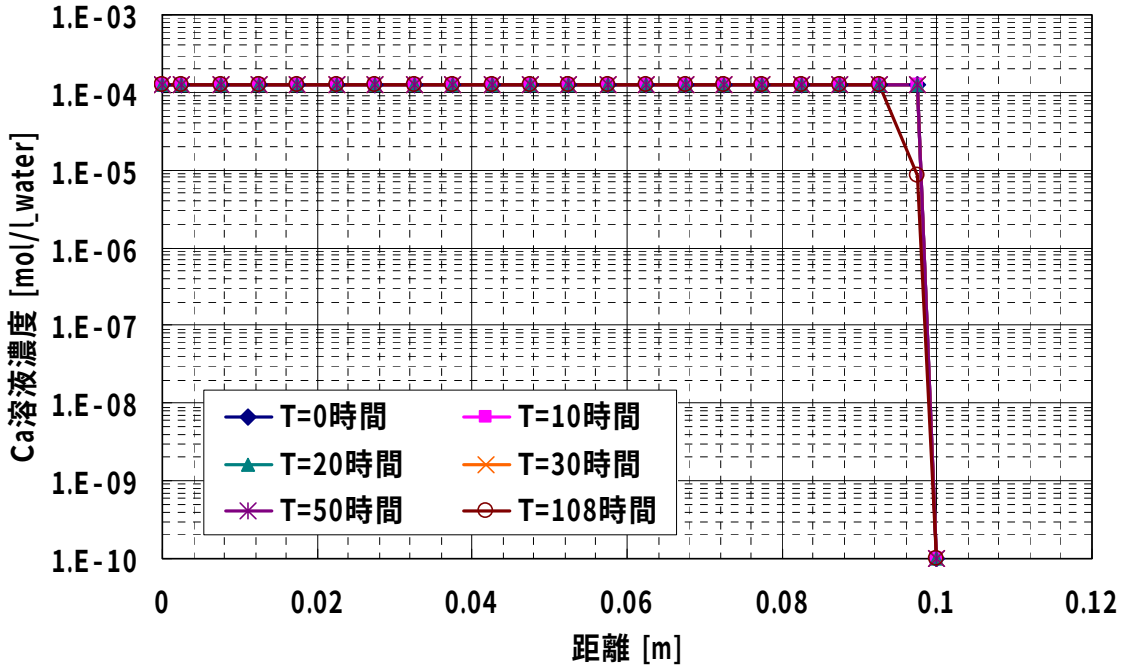


図 4.2-19　ケース 2_1：Ca 溶液濃度の空間分布

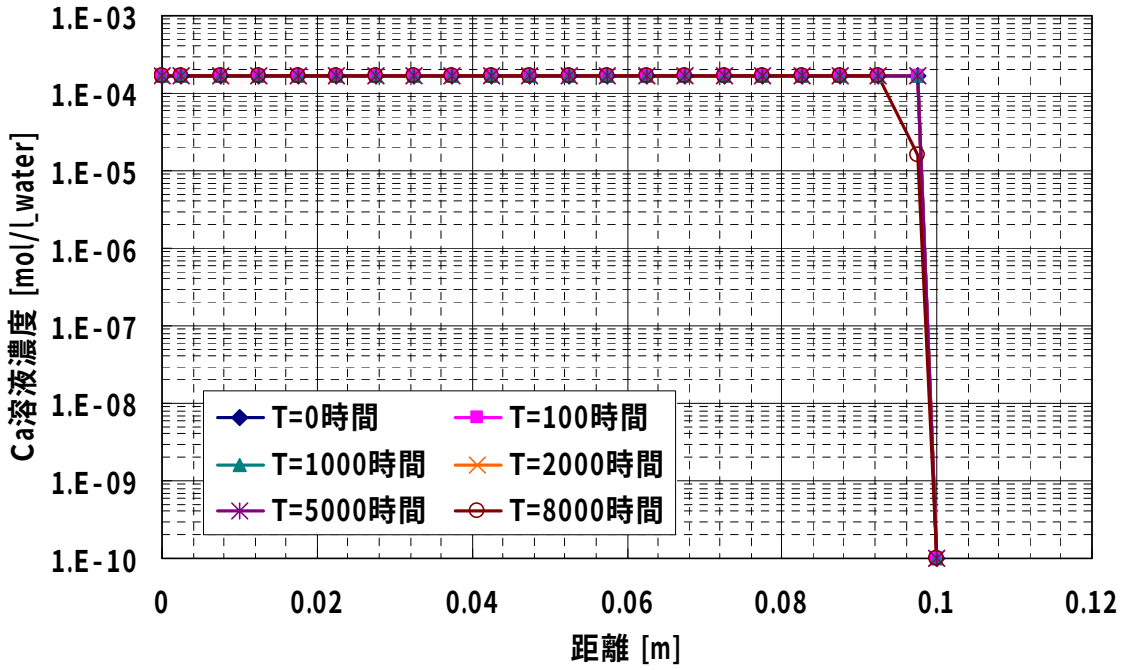


図 4.2-20　ケース 2_2：Ca 溶液濃度の空間分布

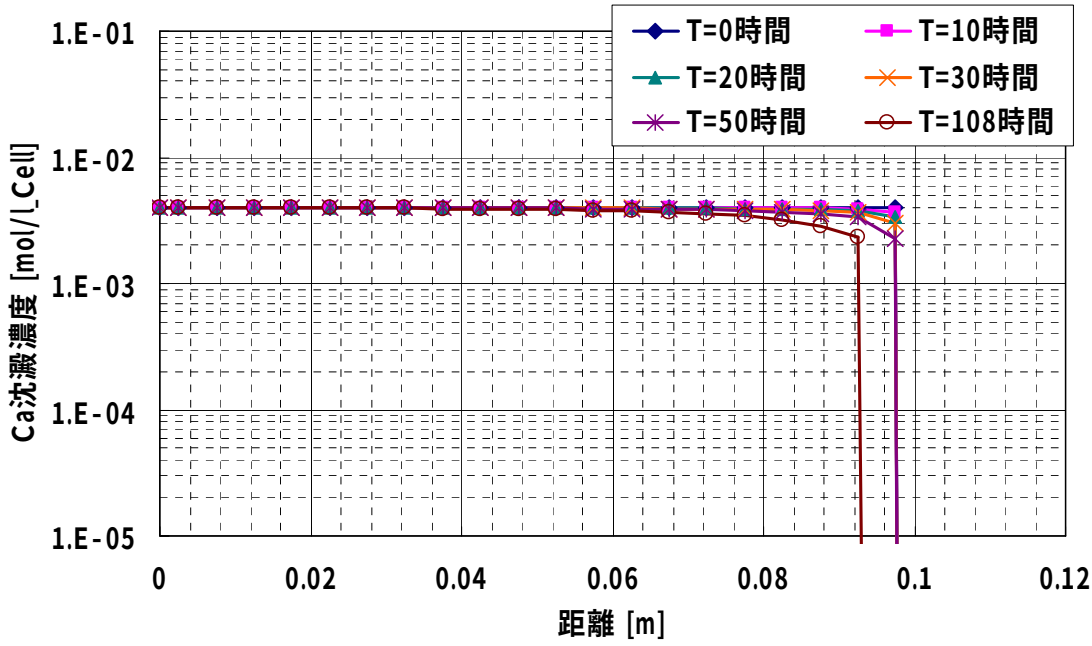


図 4.2-21　ケース 2_1：方解石沈殿濃度の空間分布

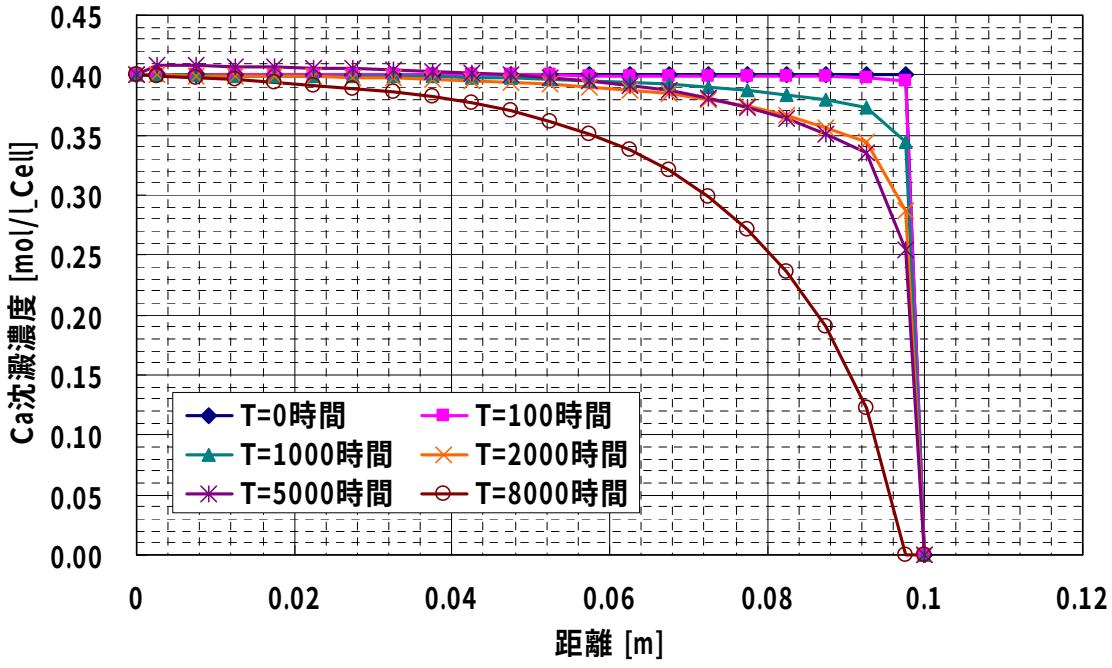


図 4.2-22　ケース 2_2：方解石沈殿濃度の空間分布

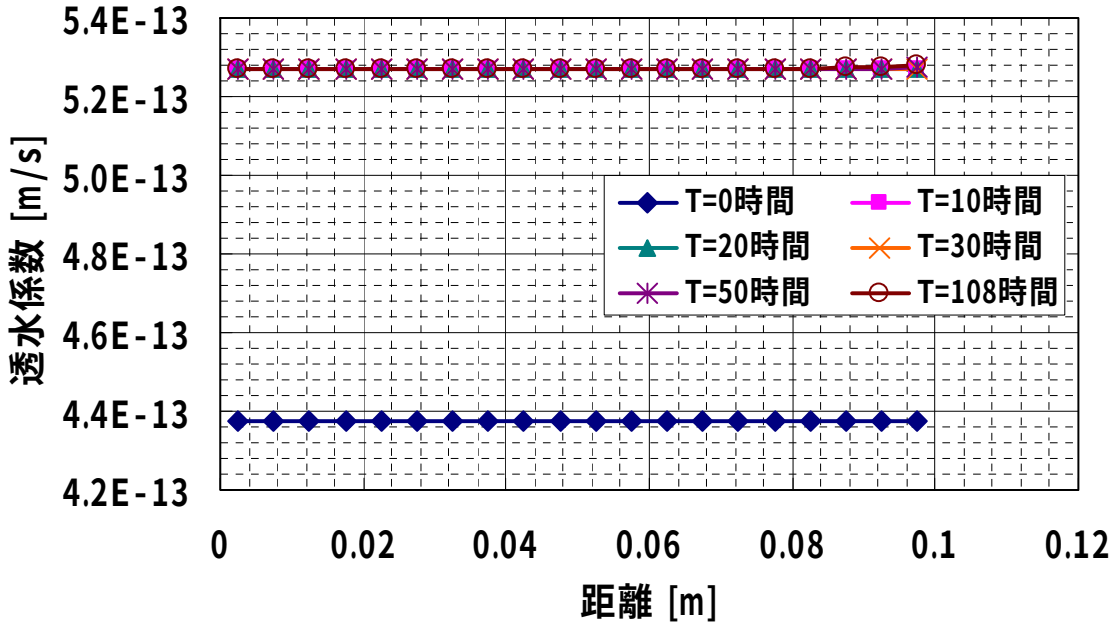


図 4.2-23　ケース 2_1：透水係数の空間分布

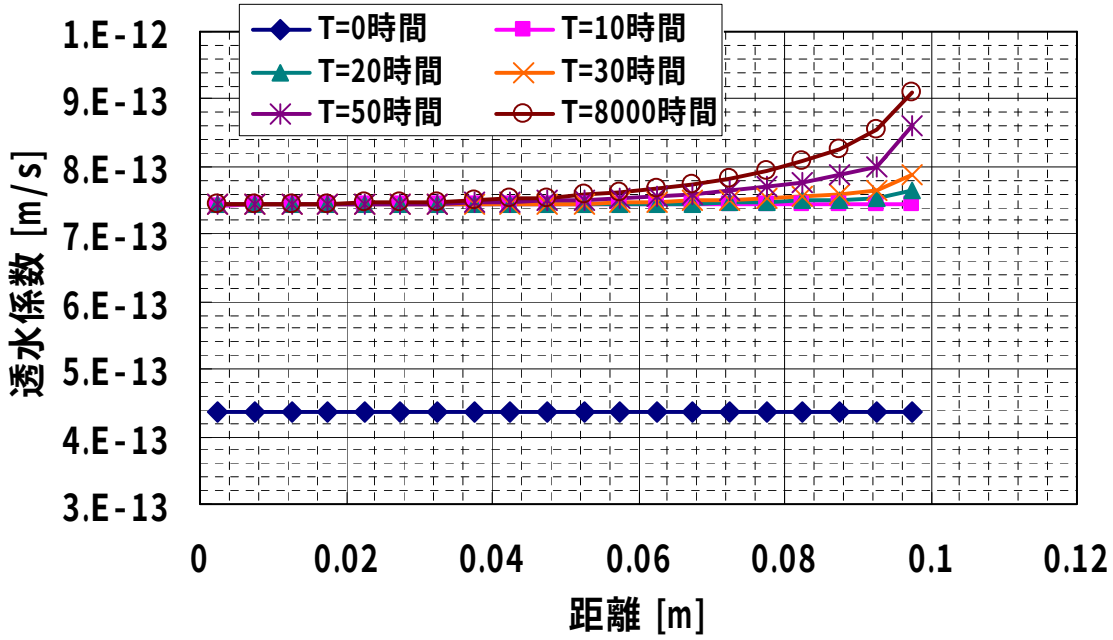


図 4.2-24　ケース 2_2：透水係数の空間分布

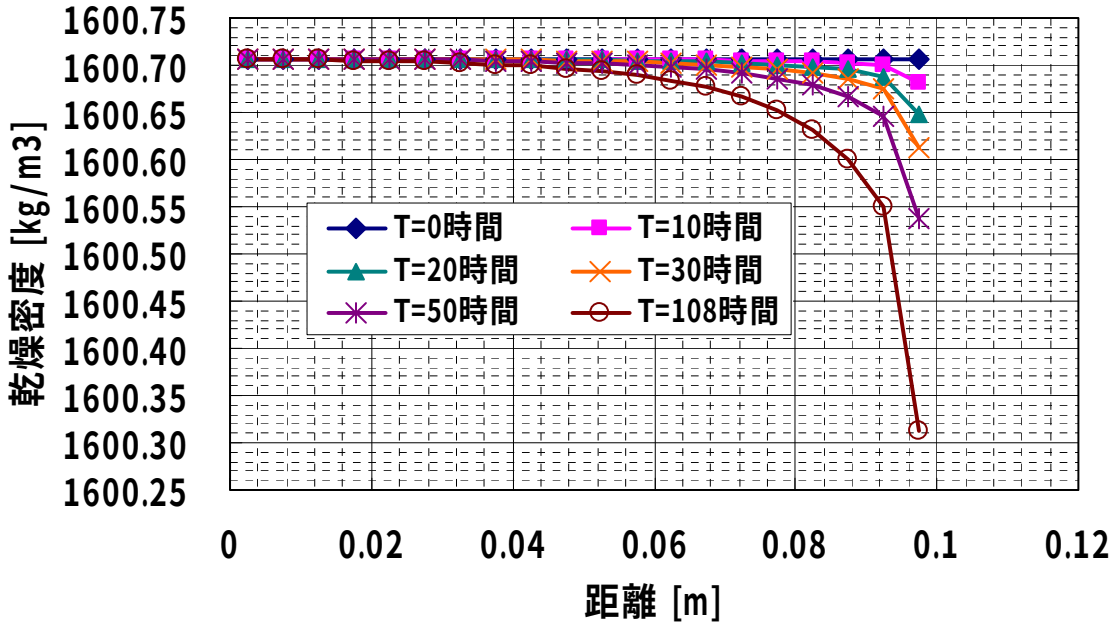


図 4.2-25　ケース 2_1：乾燥密度の空間分布

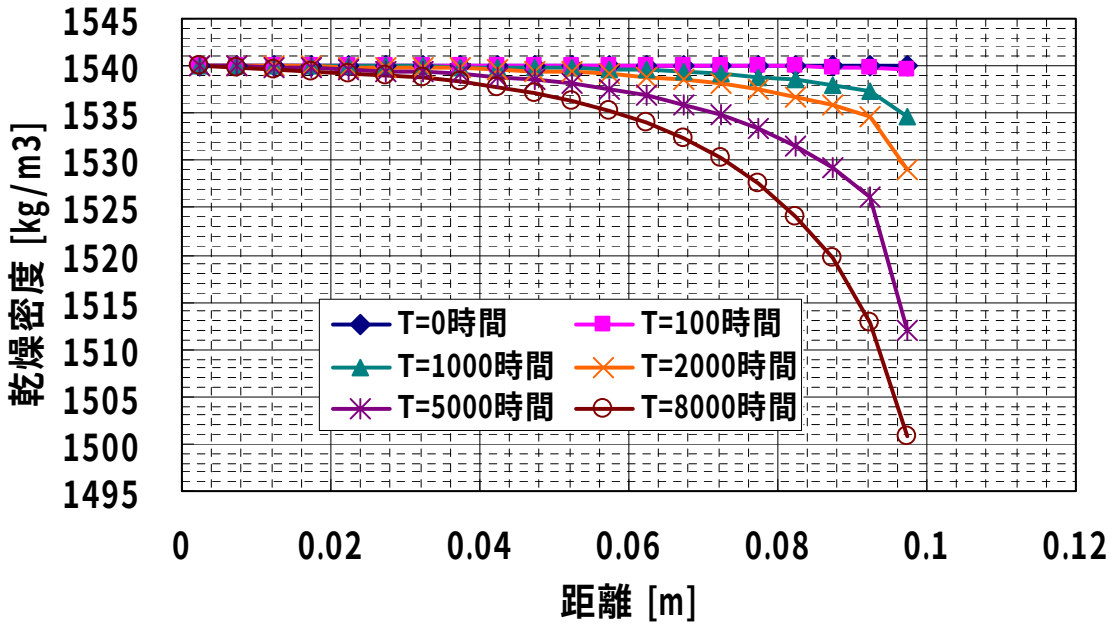


図 4.2-26　ケース 2_2：乾燥密度の空間分布

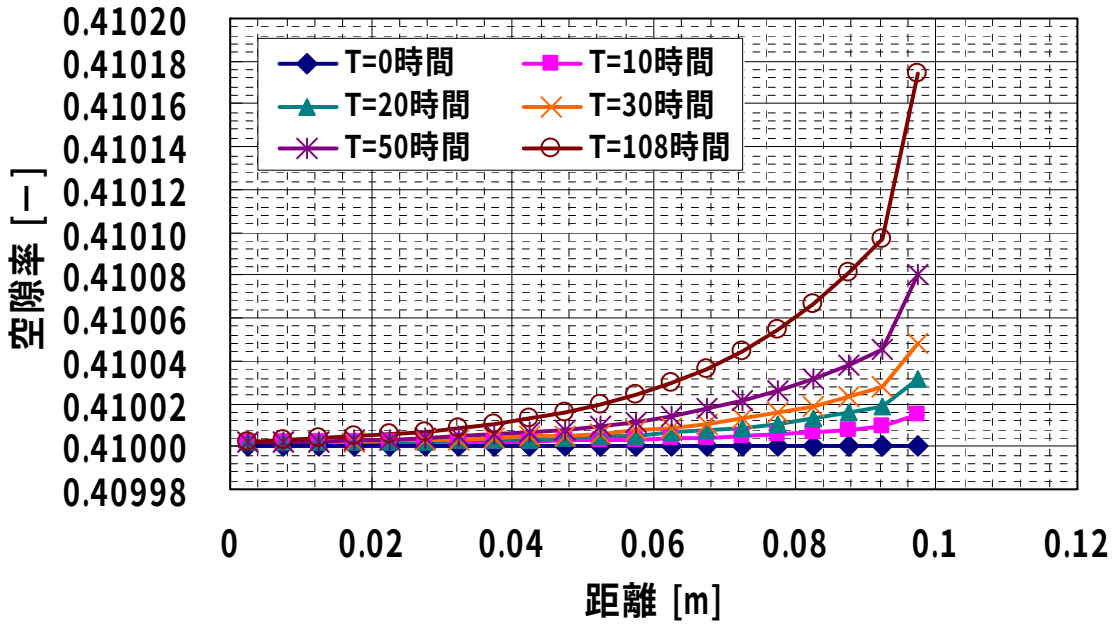


図 4.2-27　ケース 2_1：空隙率の空間分布

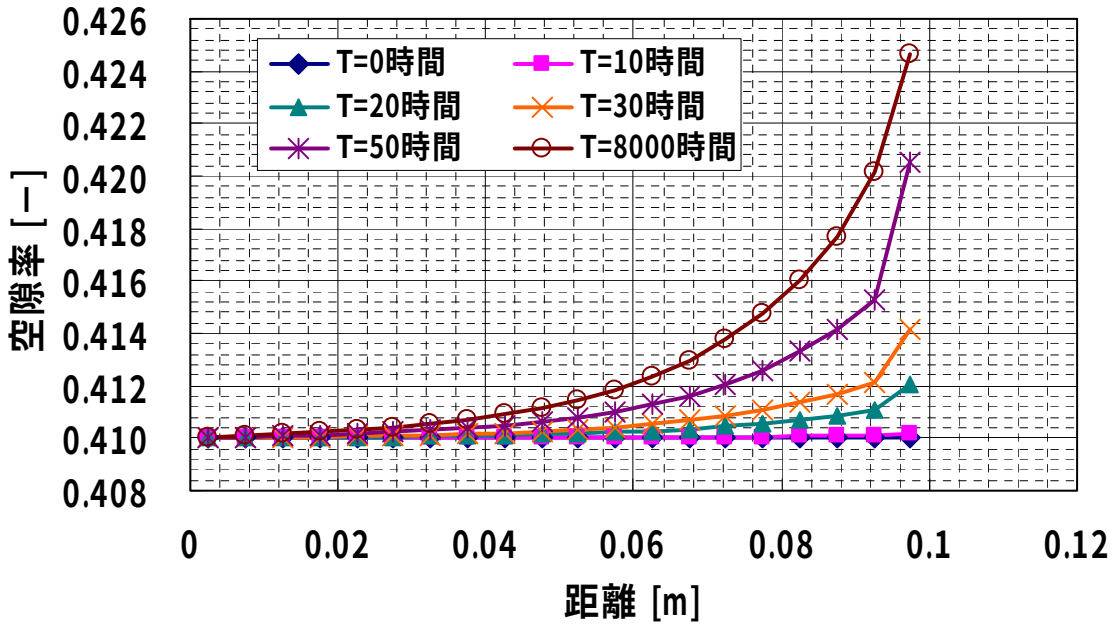


図 4.2-28　ケース 2_2：空隙率の空間分布

(3) 検証解析ケース 3

本検証ケースは，緩衝材の構成鉱物である方解石の溶解・沈殿現象の温度依存性並びに海水系地下水が浸透した場合の挙動についての解釈，元素数が増えた場合の動作確認を目的としている。解析空間領域では，化学平衡を考慮する方解石と未反応を仮定した緩衝材を想定し，環境因子と地球化学因子の相互作用を考察するものである。なお，空隙水中での海水濃度が食塩と平衡になった場合を想定し，2 次鉱物候補として食塩を設定した。本検証ケースでは，2 つのサブケースを設定しており，ケース 3_1 は，カラム内 25℃一定の場合，ケース 3_2 はカラム内 100℃／80℃の温度勾配を有する条件としている。

また，検証解析ケース 2 と同様に緩衝材中の方解石が枯渇した場合の乾燥密度の変化についても定量的に確認する。なお，方解石の初期沈殿濃度は，合理的に枯渇させるため，検証ケース 2_1 と同様に両ケースとも 4(mol/m^3_Cell)とした。

図 4.2-29，図 4.2-30 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内での温度分布を示す。ケース 3_1 は低温（25℃）一様分布となっており，ケース 3_2 は速やかに定常状態となっている。

図 4.2-31，図 4.2-32 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内の飽和度分布を示す。両ケースとも同一の水頭条件を採用していることから, 右端から水が流入し，カラム内部へ徐々に水が移行する現象となっている。

図 4.2-33，図 4.2-34 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内空隙水の pH 分布を示す。両解析ケースとも，右端境界隣接要素において方解石が枯渇するまでの計算を行っていることから，右端でわずかな変化に留まっている。高温環境下での方解石の溶解挙動を反映し，ケース 3_2 は低 pH となっている。

図 4.2-35，図 4.2-36 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内空隙水の Ca 溶液濃度分布（C 溶液濃度も同一の分布）を示す。Ca，C 溶液は，右端境界の低い固定濃度に従い, 右端境界へ移行する。両ケースとも右端境界に隣接する要素において，初期状態においてピークが現われているが，これは，初期状態で右端境界の NaCl 濃度が他の要素よりも高いため（図 4.2-37，図 4.2-38 参照），この部分でのみ高イオン強度に応じた方解石の高溶解度が原因となっている。時間の経過とともに，NaCl 濃度はカラム内で均一傾向となり（図 4.2-37，図 4.2-38 参照），NaCl の高濃度化傾向に応

じて，カラム内の方解石の溶解度も増加し，初期状態のピークレベルに達している。

図 4.2-37，図 4.2-38 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内空隙水の Na 溶液濃度分布（Cl 溶液濃度も同一の分布）を示す。両ケースとも，右端において高濃度を固定しており，NaCl は右端から左端に移行し，カラム内は速やかに均一化傾向を示す。なお，本検証ケースの NaCl 溶液濃度では，全時間・空間において食塩が溶液に対し不飽和であることから，食塩の析出は起こらなかった。

図 4.2-39，図 4.2-40 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内に充填された緩衝材のうち，方解石を構成している Ca の沈殿濃度を（C の沈殿濃度も同一の分布）を示す。本図より，両ケースとも右端の境界が希薄濃度で規定されているため，方解石から Ca，C が空隙中に溶解し（沈殿濃度が減少する），右端境界に向って物質が移行する現象となり，時間の経過とともに右端境界の隣接要素の沈殿濃度が徐々に減少している。

図 4.2-41，図 4.2-42 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内に充填された緩衝材の透水係数分布を示す。両ケースとも初期の方解石沈殿濃度が微量であることから，右端境界に隣接する要素で方解石が枯渇した場合においても，緩衝材の乾燥密度の変化が微量であるため，透水係数への影響度も僅かである。

図 4.2-43，図 4.2-44 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内に充填された緩衝材の乾燥密度分布を示す。両ケースとも右端境界に隣接する要素において，方解石の質量が時間の経過とともに減少して枯渇することから，緩衝材の乾燥密度も方解石の質量挙動に連動（図 4.2-39，図 4.2-40 参照）して減少する傾向を示す。図 4.2-43 は，前述の「枯渇時において乾燥密度 0.0004(g/cm^3)【0.4(kg/m^3)】の微小減少分」について，右端境界の隣接要素の 0 時間と 100 時間（方解石が枯渇する時間）の差が 0.4(kg/m^3)となっており，乾燥密度変化モジュールの正確性を確認することができた。一方，図 4.2-44 は乾燥密度の温度依存性の効果（80℃と 100℃）が，方解石が枯渇した際の変化分よりも大きい。ただし，右端境界に隣接する要素の初期状態の乾燥密度 1556.08139(kg/m^3)と，方解石枯渇時の乾燥密度 1555.68146(kg/m^3)の差は，0.39993(kg/m^3)であり，意図した乾燥密度の微小減少量を確認することができた。

図 4.2-45，図 4.2-46 は，それぞれケース 3_1，ケース 3_2 のカラム内に充填された緩衝材の空隙率分布を示す。両ケースとも右端境界に隣接する要素において，方解石の質量が時間の経過とともに減少して枯渇することから，緩衝材の空隙率も方解石の

質量挙動に連動（図 4.2-39，図 4.2-40 参照）して増加する傾向を示す。

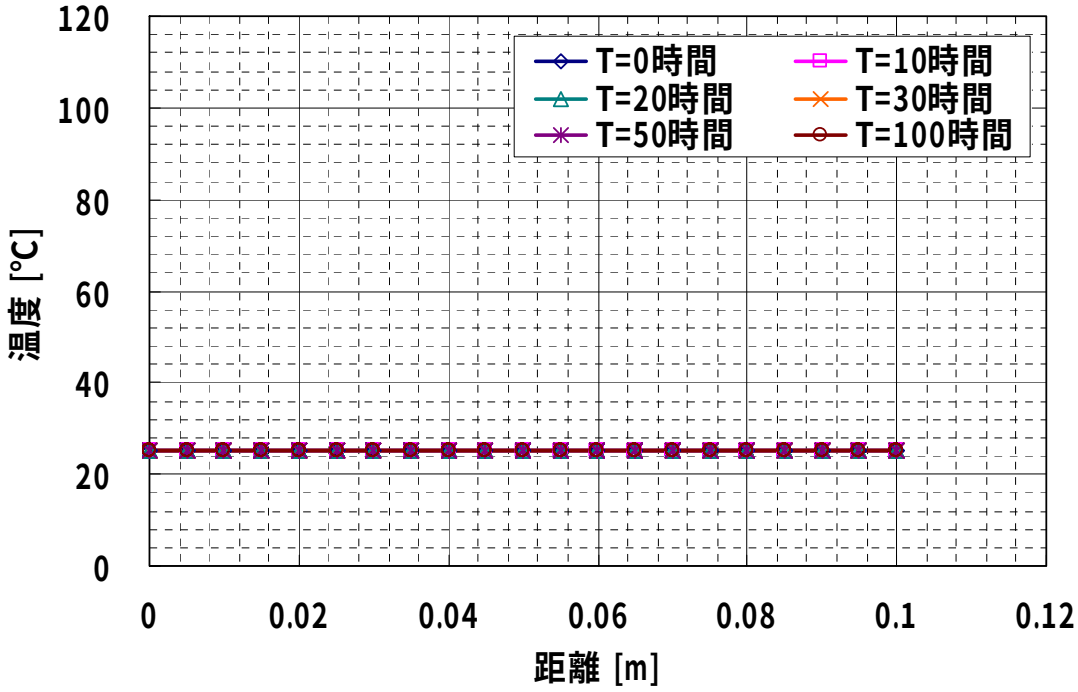


図 4.2-29　ケース 3_1：温度の空間分布

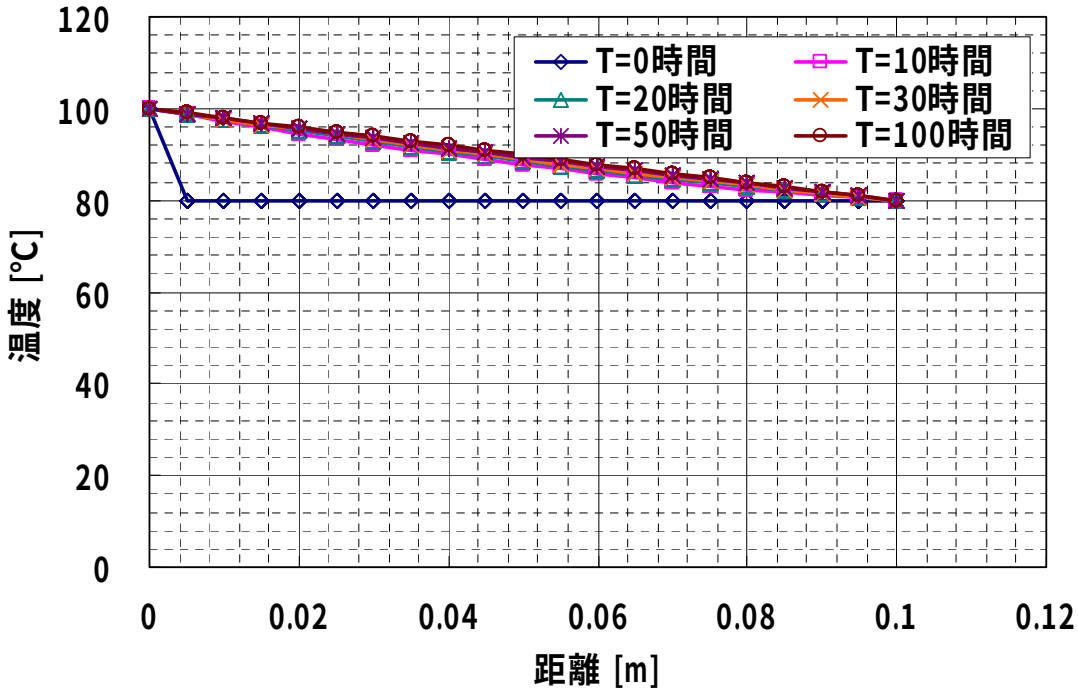


図 4.2-30　ケース 3_2：温度の空間分布

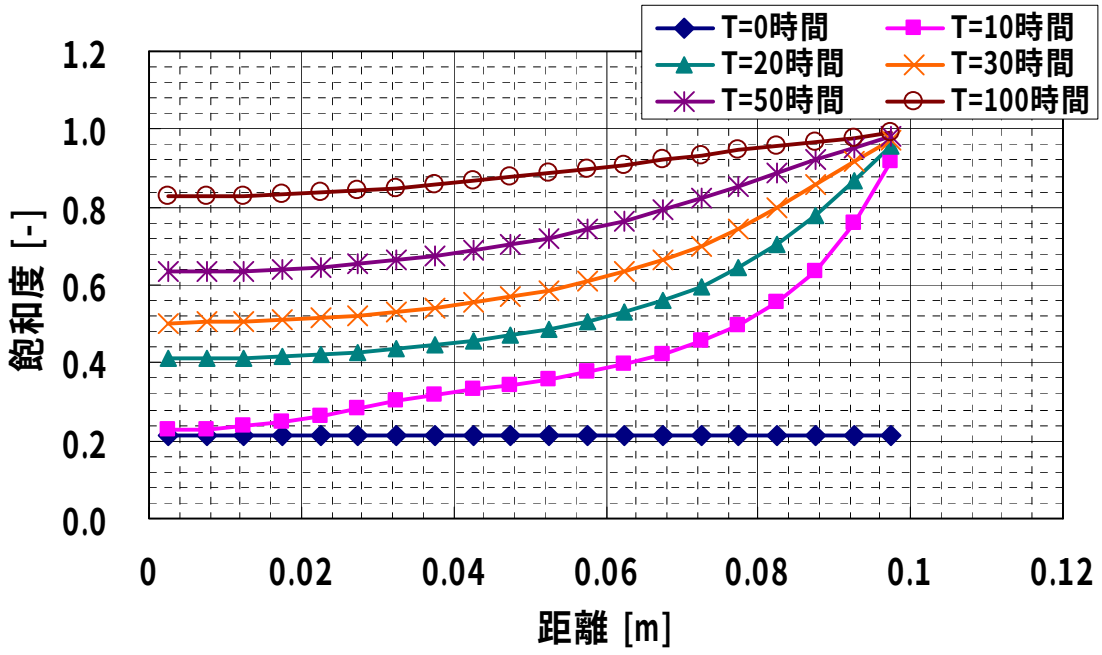


図 4.2-31　ケース 3_1：飽和度の空間分布

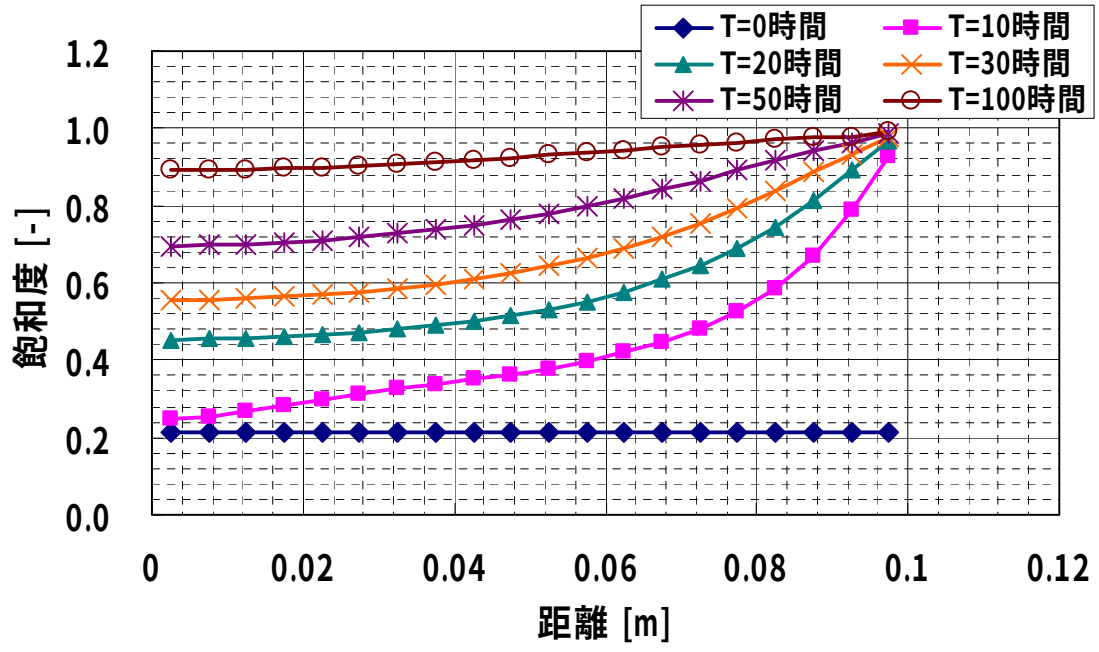


図 4.2-32　ケース 3_2：飽和度の空間分布

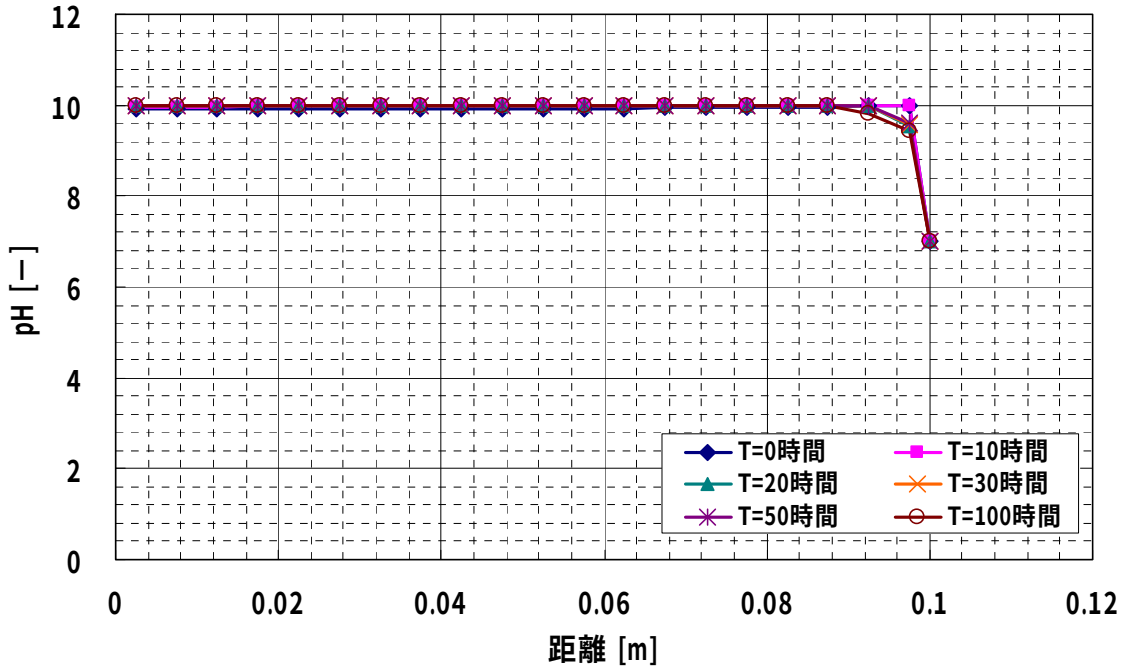


図 4.2-33　ケース 3_1：pH の空間分布

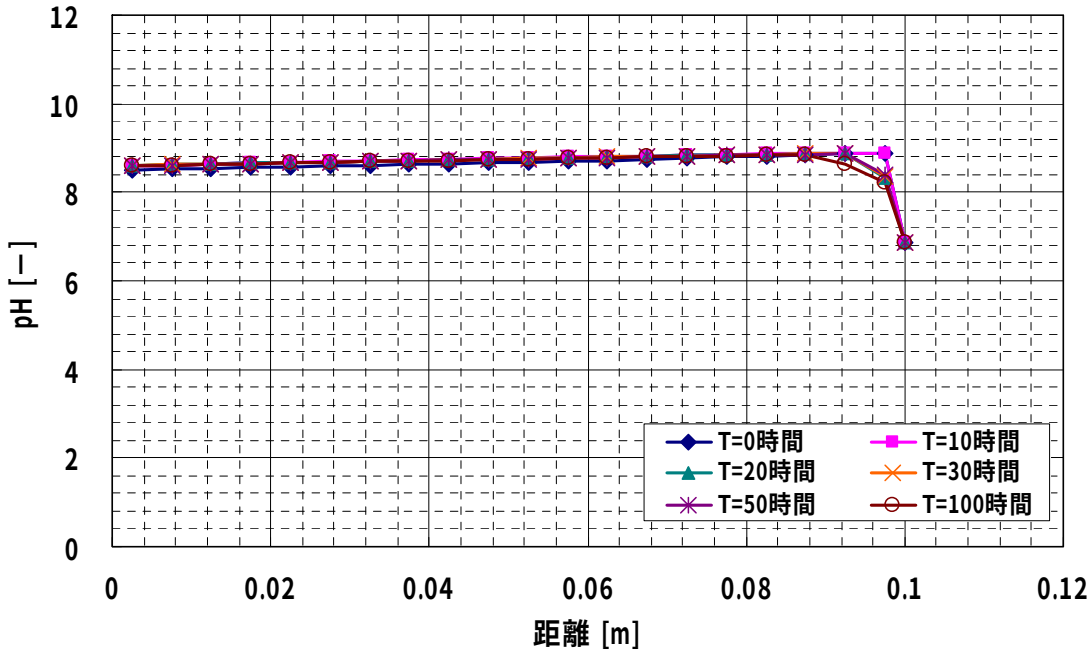


図 4.2-34　ケース 3_2：pH の空間分布

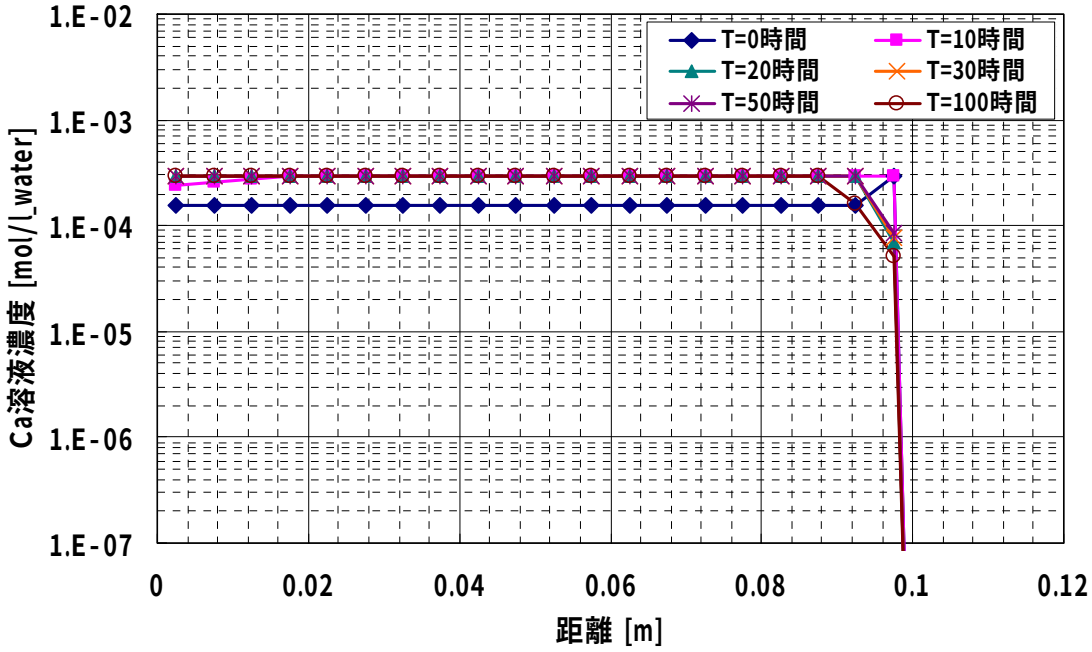


図 4.2-35　ケース 3_1：Ca 溶液濃度の空間分布

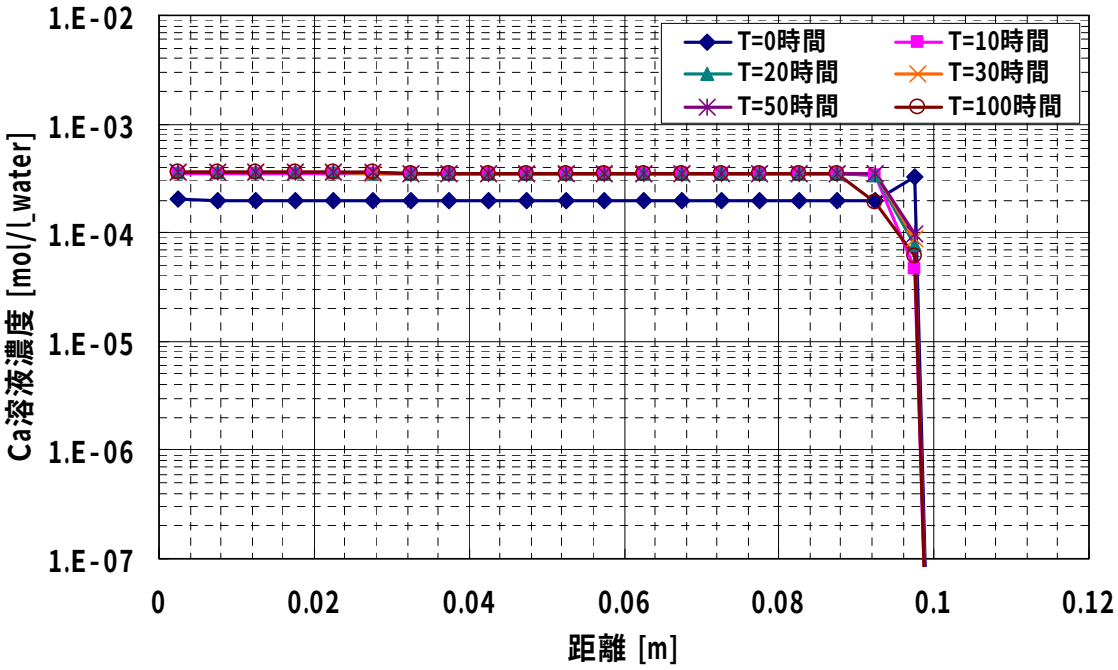


図 4.2-36　ケース 3_2：Ca 溶液濃度の空間分布

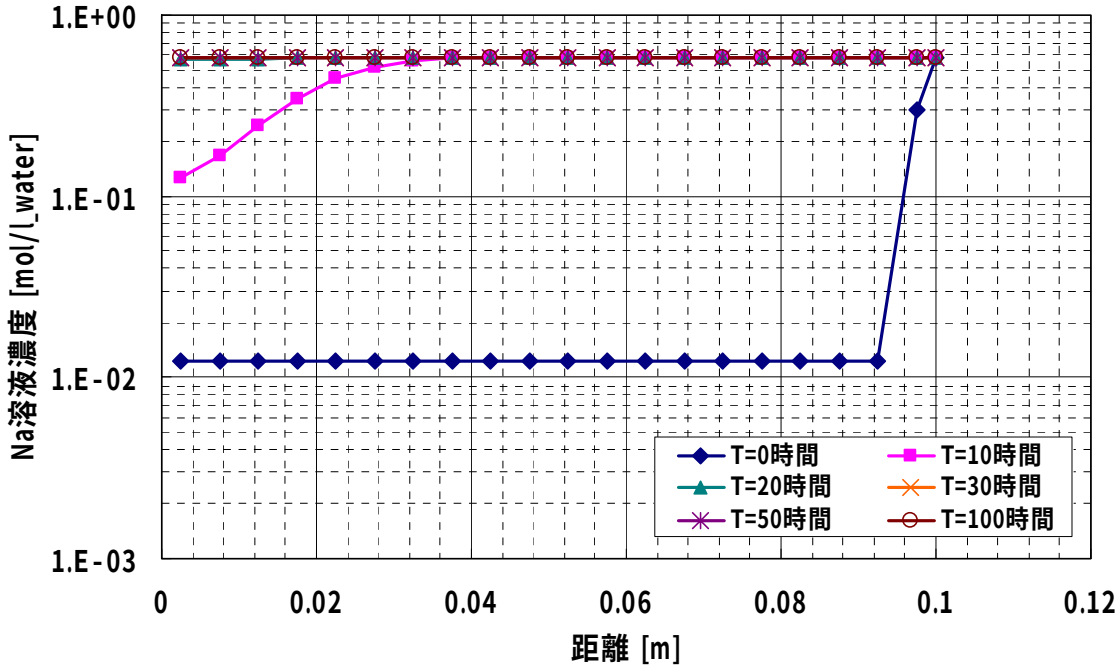


図 4.2-37　ケース 3_1：Na 溶液濃度の空間分布

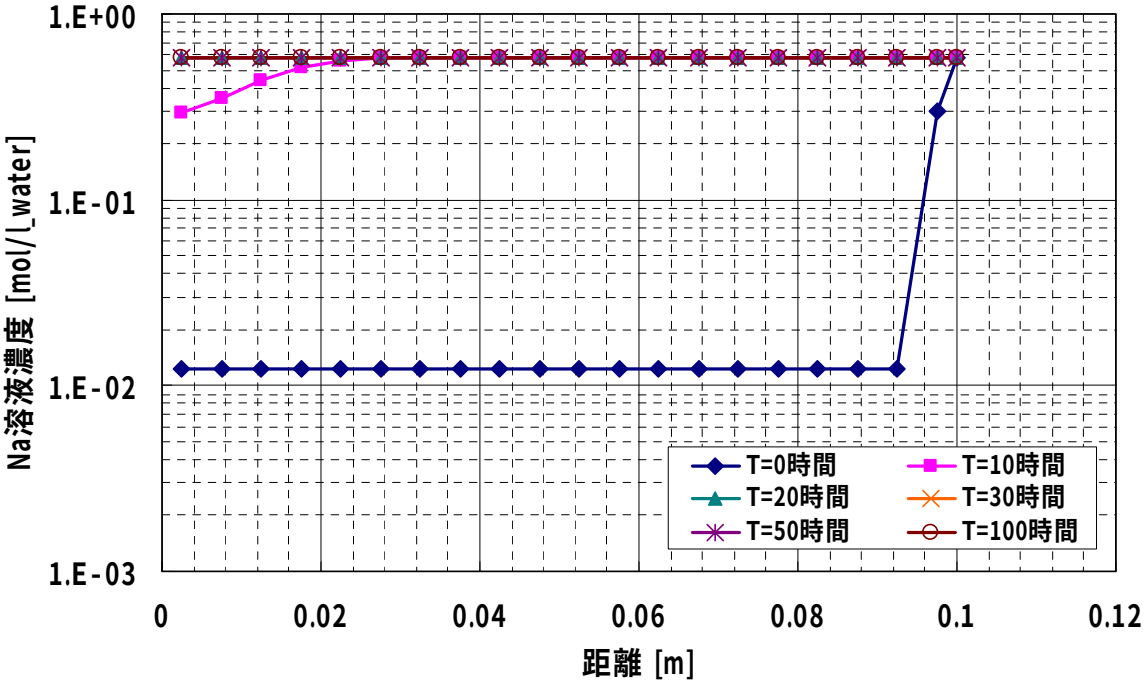


図 4.2-38　ケース 3_2：Na 溶液濃度の空間分布

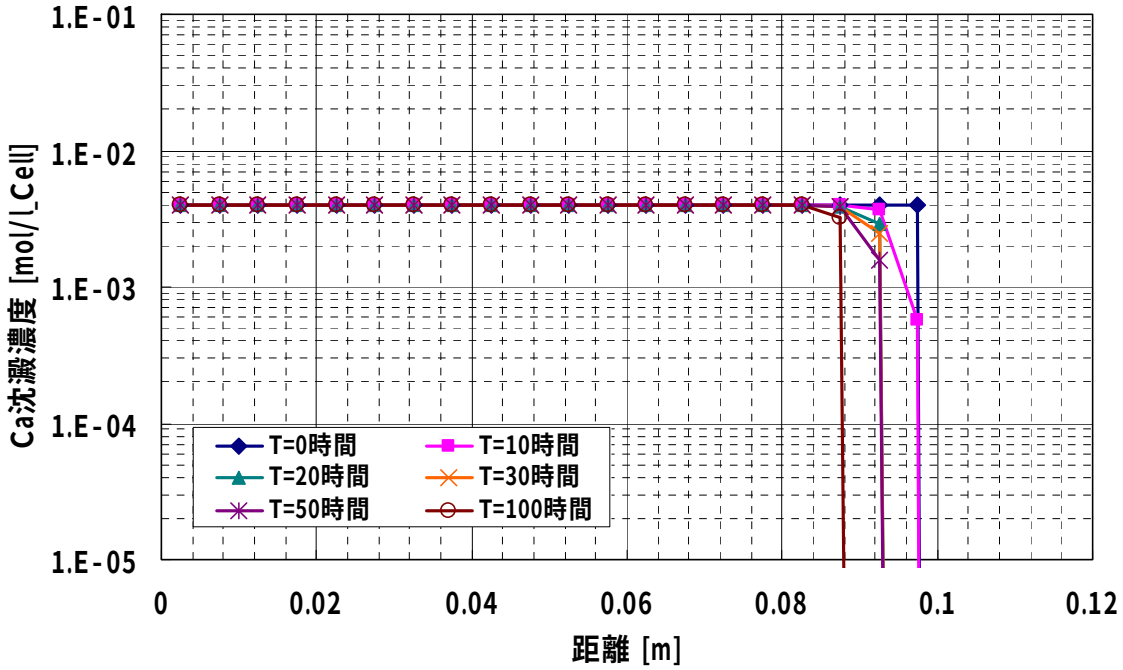


図 4.2-39　ケース 3_1：方解石沈殿濃度の空間分布

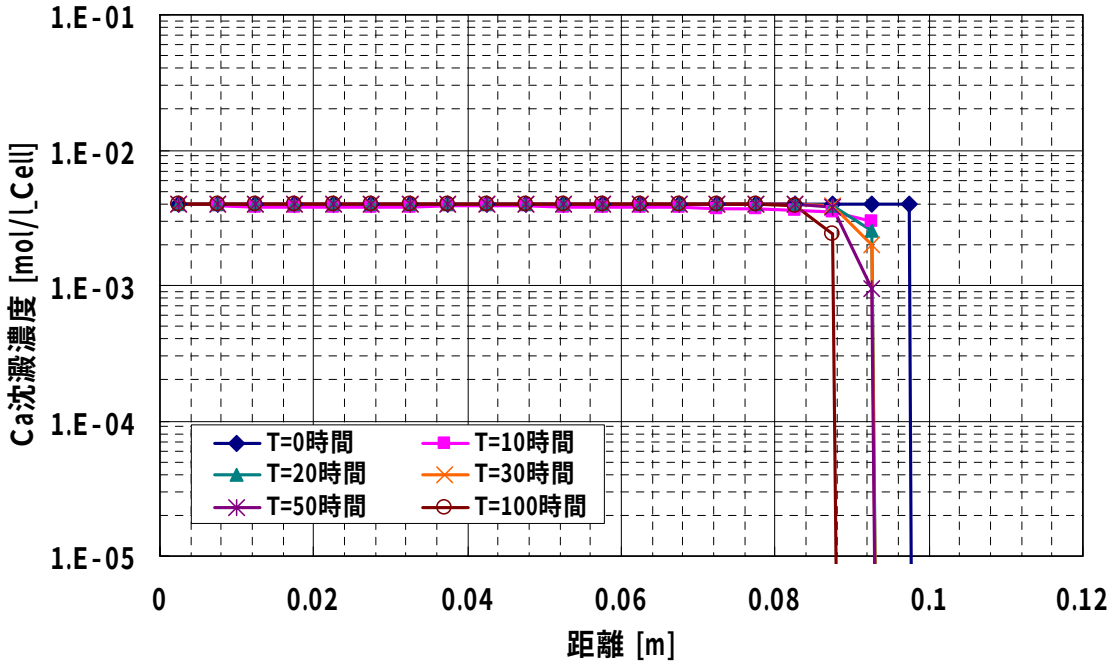


図 4.2-40　ケース 3_2：方解石沈殿濃度の空間分布

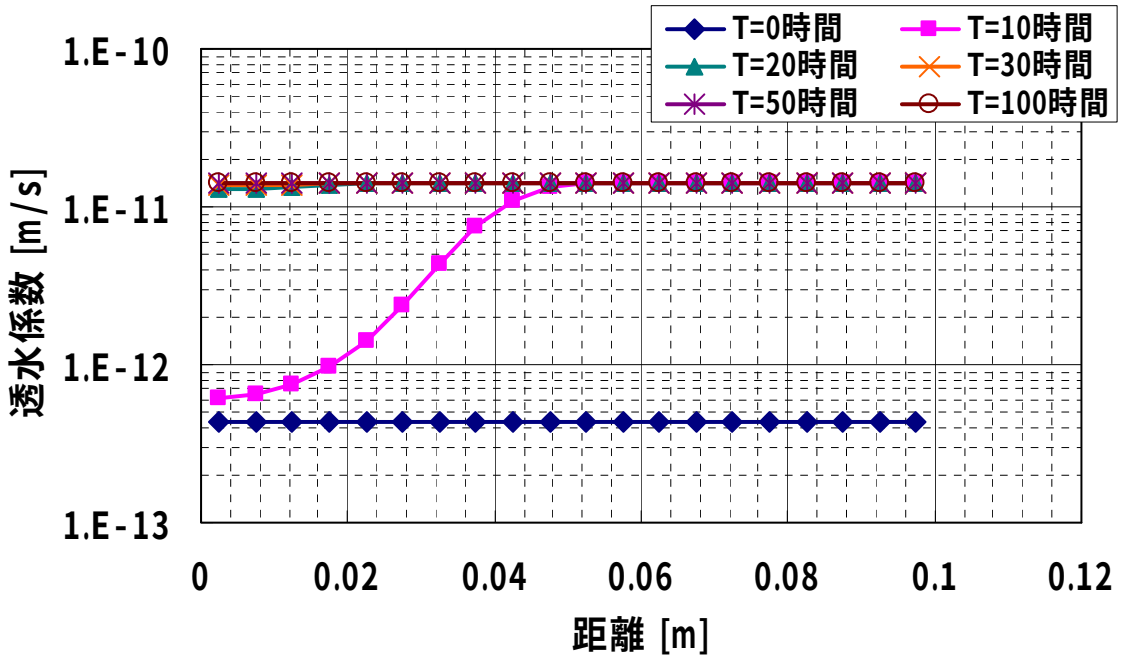


図 4.2-41　ケース 3_1：透水係数の空間分布

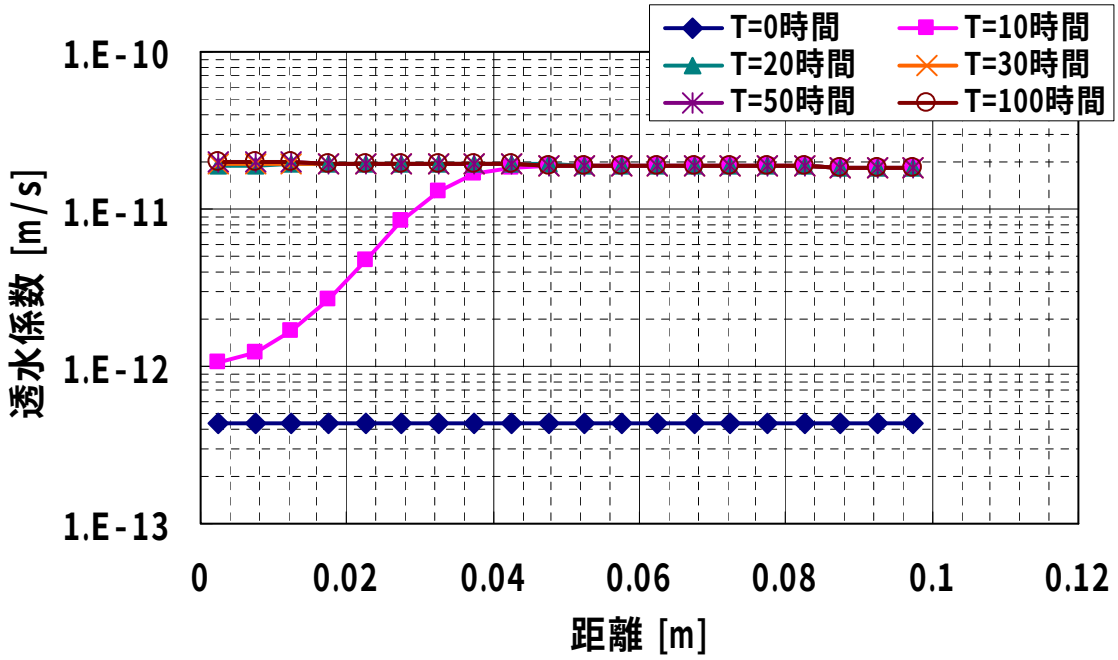


図 4.2-42　ケース 3_2：透水係数の空間分布

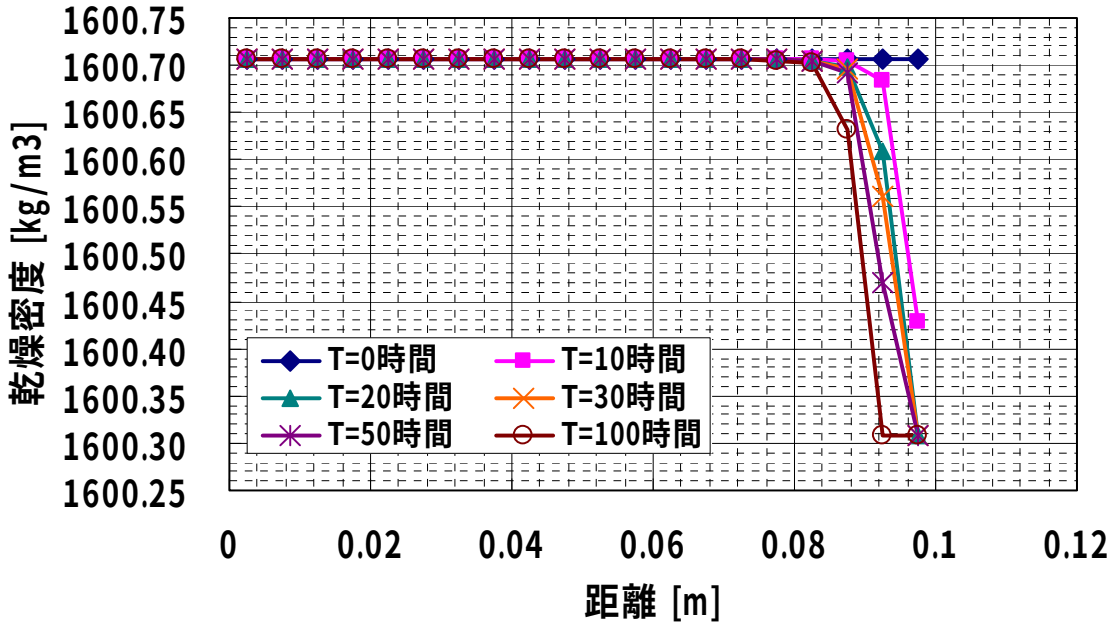


図 4.2-43　ケース 3_1：乾燥密度の空間分布

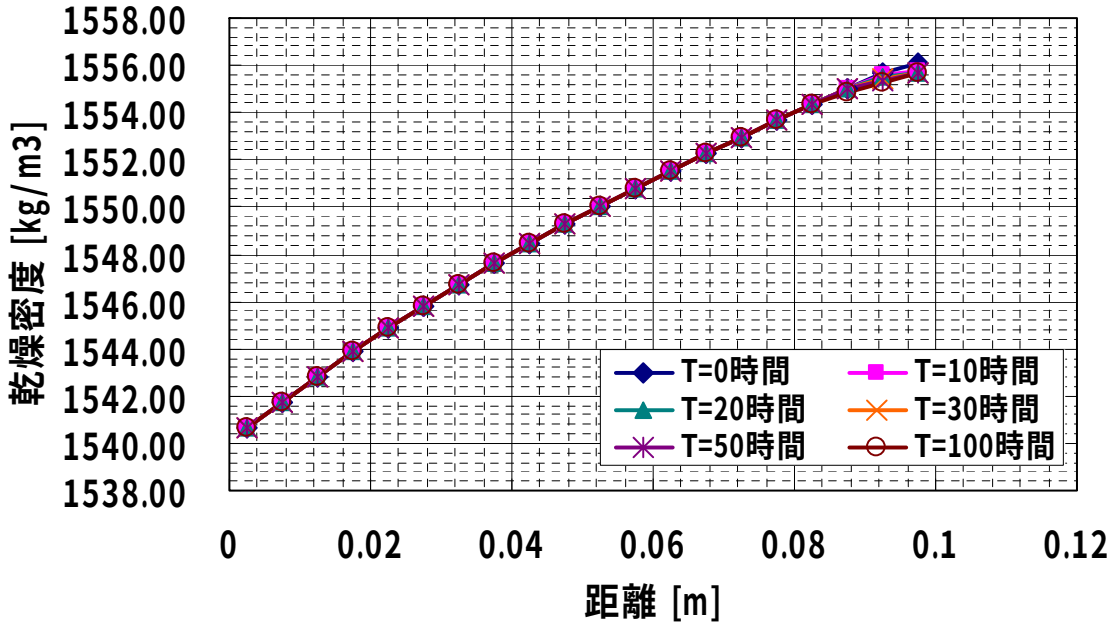


図 4.2-44　ケース 3_2：乾燥密度の空間分布

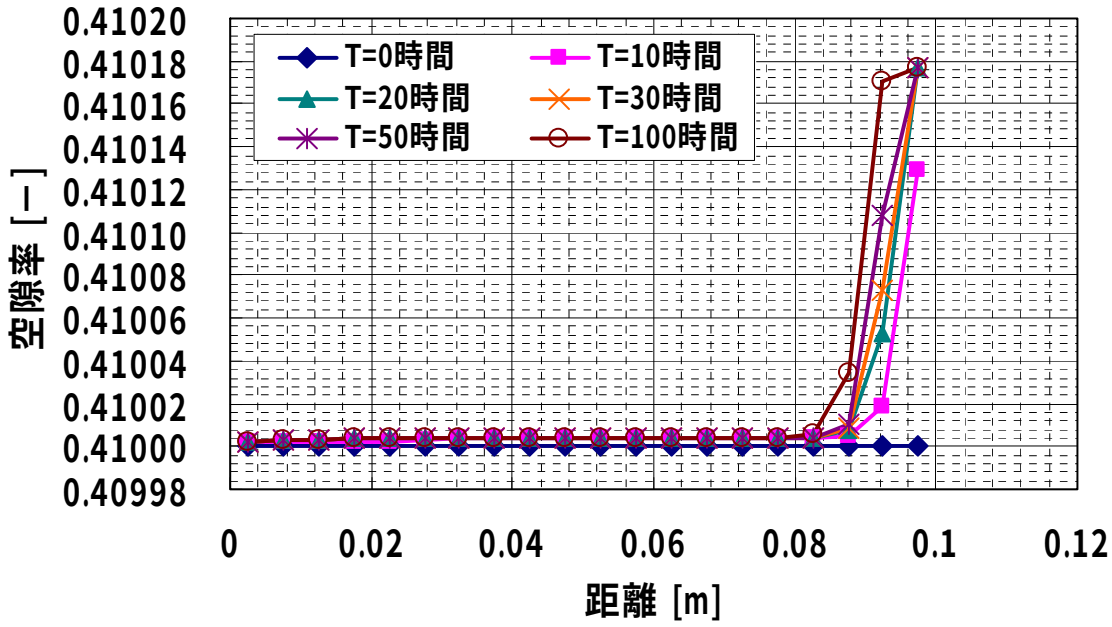


図 4.2-45　ケース 3_1：空隙率の空間分布

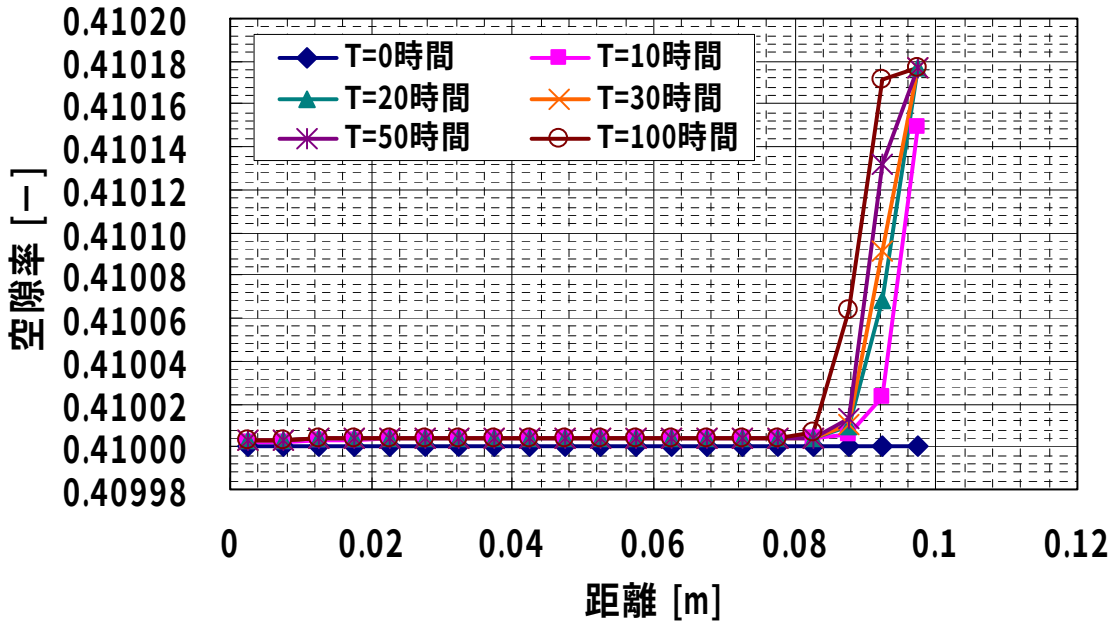


図 4.2-46　ケース 3_2：空隙率の空間分布

5．熱－水－応力－化学連成挙動の事例解析の実施

本章では，連成管理プログラム COUPLYS に THAMES，Dtransu，phreeqe60 さらに，THMC 物性・連成モジュール，連成支援モジュールを搭載した熱－水－応力－化学連成解析コードの適用性の確認，課題の摘出，１０００年程度の短期間でのニアフィールド環境の変化を把握する目的で，小規模 1 次元事例解析，大規模 3 次元事例解析を実施した。

5.1 事例解析の実施

本節では，短時間でニアフィールド環境の変遷を把握すること，ならびに課題の摘出を目的として，小規模 1 次元モデルによる計算を実施した。続いて，今後，処分場の設計や人工バリアの設計における実運用を想定し，大規模 3 次元モデル事例解析を実施した。

5.1.1 小規模 1 次元事例解析

本事例解析のモデル化領域は，短時間（数時間から数十時間）でニアフィールド環境の変遷を把握するため，高レベル放射性廃棄物処分ニアフィールド空間領域のうち，緩衝材領域，岩体領域を対象として 1 次元のカラム体系としている。

(1) 解析条件

本事例解析は，短時間での計算を目的としていることから，1 次元モデルの体系を採用した。空間メッシュ分割図を図 5.1-1 に示す。要素数は，緩衝材領域ならびに岩体領域を合わせて 40，節点数は 164（Dtransu），488（THAMES）とした。本モデルでは，計算時間制約の観点から，人工バリア内での過渡現象を短時間で表現することを目的として，岩体中で飽和している地下水ならびに緩衝材端部で固定している温度が，数十年間で緩衝材領域，岩体領域において一定となるような条件を設定した。また，温度による効果を把握することを目的として，解析ケース 1 では，初期条件・境界条件とも 25℃とした。さらに，ケース 2 は，緩衝材の境界温度を 80℃，緩衝材・岩体領域の初期温度を 45℃とした。

本事例解析において，THAMES，Dtransu，phreeqe60 で採用した物性条件をそれぞれ表 5.1-1～表 5.1-3 に示す。

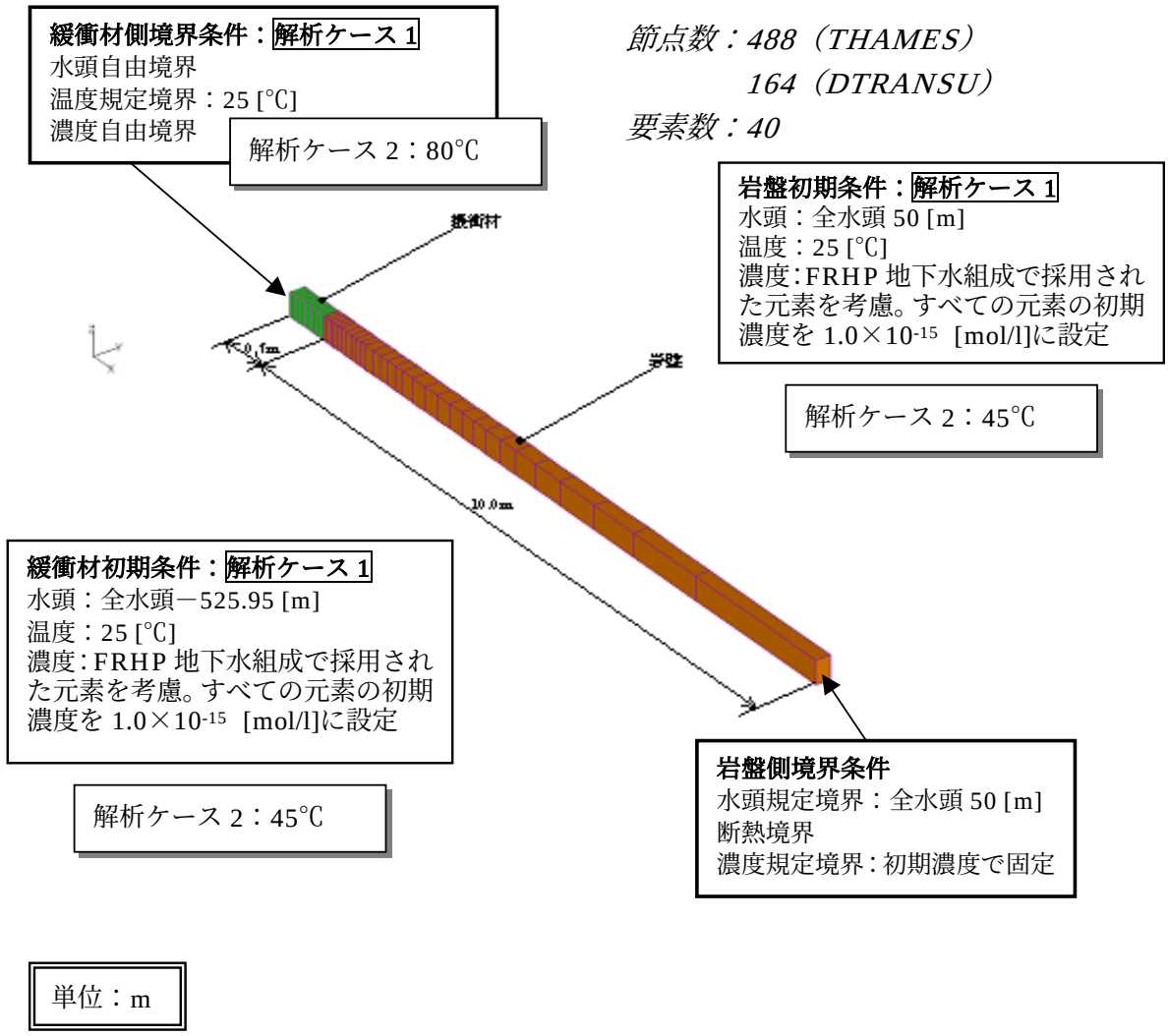


図 5.1-1　1 次元事例解析解析モデル図

表 5.1-1　1 次元事例解析入力データ（THAMES）

入力データ項目		緩衝材	岩盤
真密度 [g/cm^3]		2.75	2.67
弾性係数 [MPa]		64	3700
ポアソン比 [-]		0.3	0.25
固有透過度 [m^2]		4×10^{-20}	1×10^{-15}
空隙率 [－]		0.403	0.005
VG パラメータ	θ s [-]	0.403	5.0×10^{-3}
	θ r [-]	0	0
	α [1/m]	8.0×10^{-3}	8.0×10^{-3}
	n [-]	1.6	1.6
比透水係数 [-]		—	VG+Mualem モデル
水分拡散係数	a1	$2.99\times10^{-8}T-3.78\times10^{-7}$	—
	a2	$-1.5\times10^{-8}T+1.49\times10^{-7}$	
	b1	-2.49×10^{-3}	
	b2	$5.59\times10^{-4}T+3.93\times10^{-1}$	
温度勾配水分拡散係数 [m^2/(sK)]		$Dt=D_{t0}\times\exp[(\alpha_t(T-T_0)/T_0]$	—
熱伝導率 [W/(mK)]		$4.44\times10^{-1}+1.38\times10^{-2}w+6.14\times10^{-3}w^2-1.69\times10^{-4}w^3$	1.3
比熱 [kJ/(kgK)]		(34.1+4.18w)/(100+w)	1000

w：含水比，T：温度

表 5.1-2　1 次元事例解析入力データ（Dtransu）

入力データ項目	緩衝材	岩盤
縦分散長 [m]	2×10^{-2}	1×10^{-1}
横分散長 [m]	2×10^{-3}	1×10^{-2}
拡散係数 [m^2/s]	5×10^{-10}	5×10^{-10}
遅延係数 [-]	1.0	1.0
減衰係数 [1/y]	0	0

表 5.1-3　1 次元事例解析入力データ（phreeqe60）

	構成鉱物	初期濃度 [mol/l_要素体積]	密度 [g/cm^3]	分子量 [g/mol]	pH [－]	pe [－]
緩衝材	Calcite	10	2.5	84.0878	6.0	－5.0
	Chalcedy	10	2.5	60.0843		
	Smectite	10	2.5	404.2009		
岩盤	Calcite	10	2.5	84.0878	6.0	－4.42
	Chalcedy	10	2.5	60.0843		

(2) 解析結果

ケース 1 は，計算領域を全て 25℃としているため，地球化学計算の平衡定数が経過時間を通して一定となる（図 5.1-3 参照)。飽和度の分布は，図 5.1-4 に示すように，数十年後に岩体領域から緩衝材領域への地下水の移動により飽和している。本解析ケースでは，緩衝材中の溶液濃度を支配する化学種として Calcite，Chalcedony，Smectite の溶解・沈殿現象が支配している。これらの現象を表現する元素濃度や pH は，計算領域の境界濃度，初期濃度，平衡定数の温度に依存している。本ケースでは，これらの要因を全て一定としていることから，図 5.1-5，図 5.1-6 に示すように pH，元素濃度（Ca）は領域を通して一定傾向を示している。透水係数の分布は，図 5.1-7 に示すように，温度が低温であるため，初期値と同程度となっている。また，本解析では，溶液濃度を希薄溶液としており，NaCl 溶液濃度の変化が小さいため，透水係数の時間変化が極めて小さい。

ケース 2 は，緩衝材の境界部で 80℃，他の全領域で 45℃の初期温度を与えていることから，熱の移動は緩衝材側から岩体側に移動していく（図 5.1-8 参照)。飽和度の分布は，図 5.1-9 に示すようにケース 1 と同様に数十年後に岩体領域から緩衝材領域への地下水の移動により飽和している。ケース 1 よりも地下水の移動が速い傾向を示すのは，温度が上昇したことにより透水係数が増加したためと考えられる。図 5.1-10 に示すように pH の分布は，初期状態で全領域（緩衝材境界部を除く）において約 9 の値となっており，これは，低温条件での Calcite の溶解平衡が支配している。また，緩衝材中において温度が徐々に増加することにより，pH が減少している。さらに，岩体中の温度が増加するにつれて，岩体中においても Calcite の溶解平衡に基づき pH は減少している。図 5.1-11 は，Ca 溶液濃度の空間分布の変遷を示しており，温度の増加とともに Ca 濃度は増加する傾向を示し，系内が 80℃一定となった時点で Ca 溶液濃度も一定となっている。

緩衝材・岩体中の温度が増加することにより，Calcite の平衡定数は減少するため，Ca^{+2} 濃度が減少する様に思われるが，CO_3^{-2} 濃度とのバランスを考慮する必要がある。温度の増加により，C の支配化学種はほぼ 100%HCO_3^-となり，CO_3^{-2} 濃度は減少傾向を示す。この結果，温度の増加に伴い，Ca^{+2} 濃度が増加することになる。また，図 5.1-2 に示すように，炭酸塩化学種のモル分率の pH 依存性から HCO3-がほとんど支配する場合，pH は低下側に推移する。

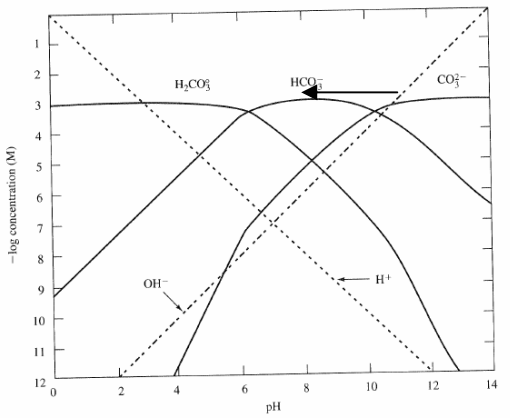
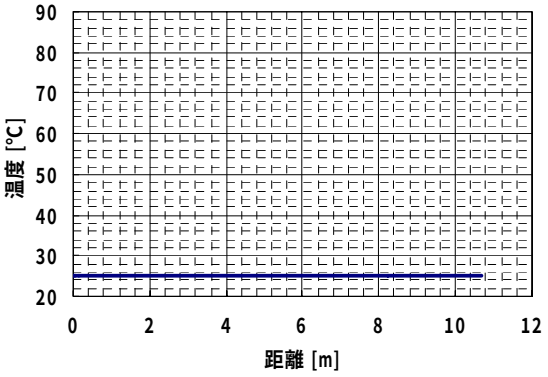


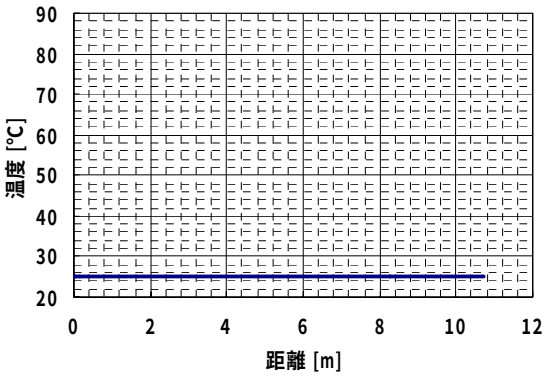
Figure 5.2 Distribution diagram for carbonate species as a function of pH, assuming $C_T = 10^{-3}$ M. Concentrations of H^+ and OH^-, which are independent of C_T, are shown as dashed straight lines.

図 5.1-2　pH の関数として異なった炭酸塩化学種種の濃度(Donald Langmuir)

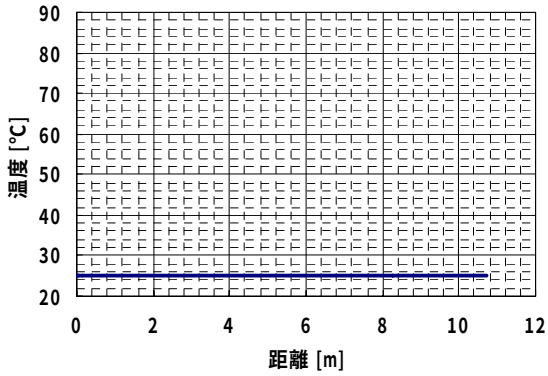
ケース２の透水係数の分布は，図 5.1-12 に示すように，ケース１よりやや高くなっている。これは，ケース２の方が温度が高いためである。緩衝材中の透水係数の時間変化は, NaCl が希薄なためケース１同様小さい。一方, 岩盤中の透水係数の時間変化は, 本プログラムでは緩衝材以外の領域において, 透水係数変化モジュールをスキップするようになっているため不変となっている。



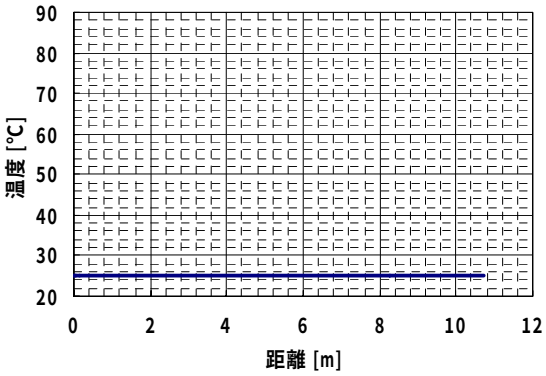
(a)0 年後



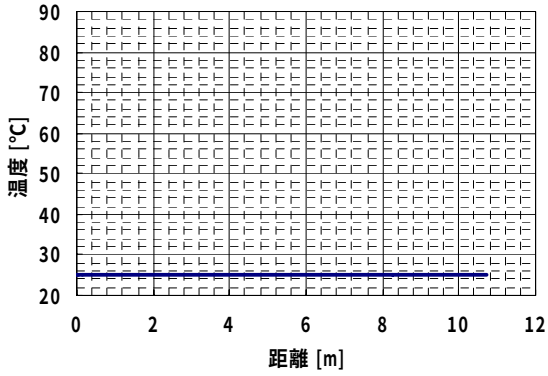
(b)0.1 年後



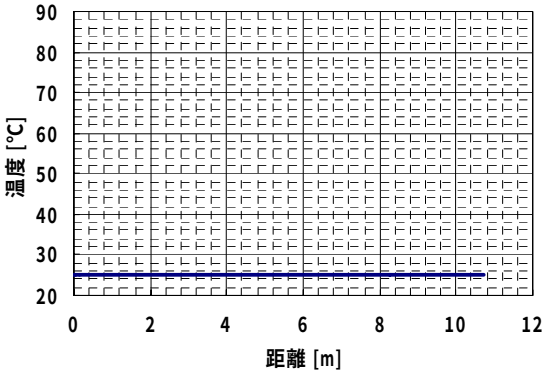
(c)1 年後



(d)10 年後

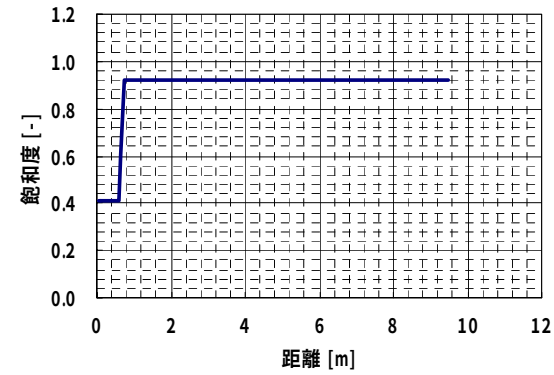


(e)100 年後

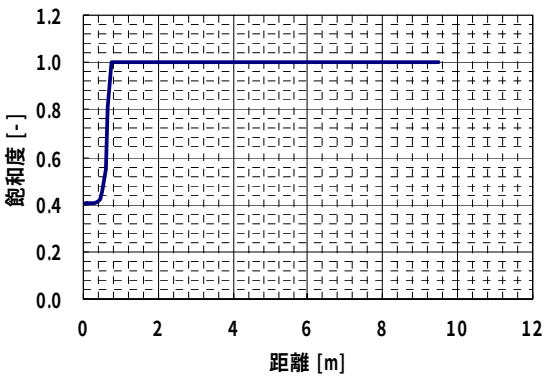


(f)1000 年後

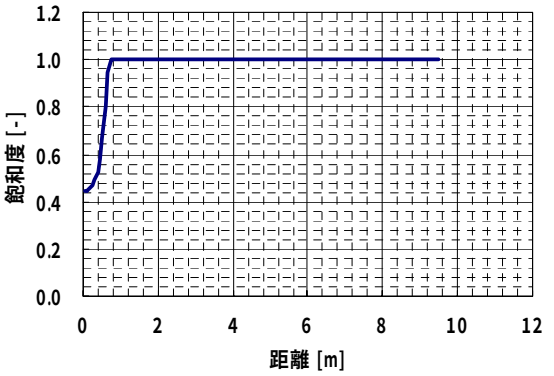
図 5.1-3　温度分布
（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃）



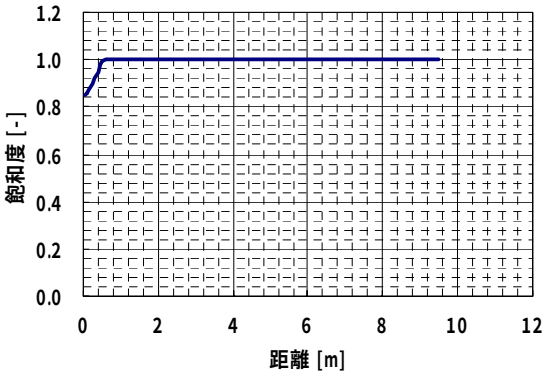
(a)0 年後



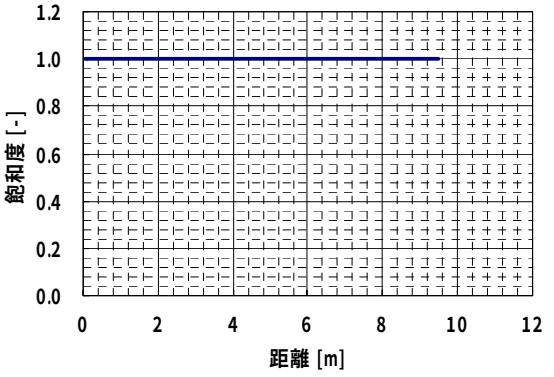
(b)0.1 年後



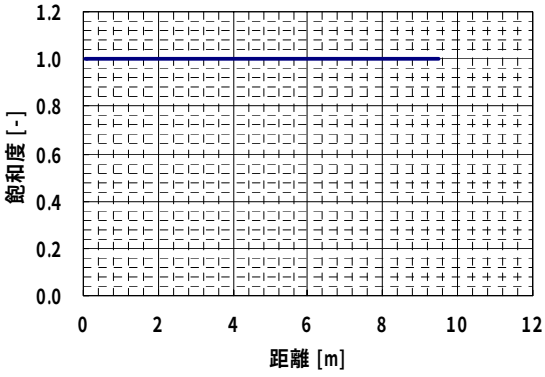
(c)1 年後



(d)10 年後

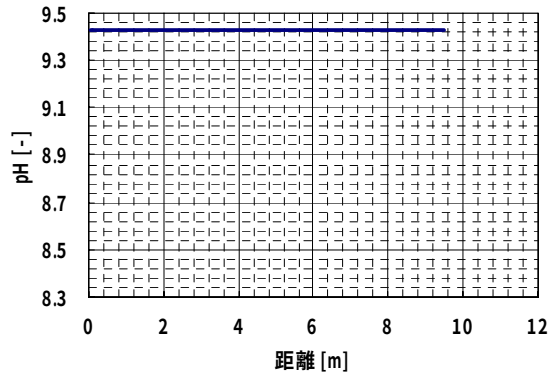


(e)100 年後

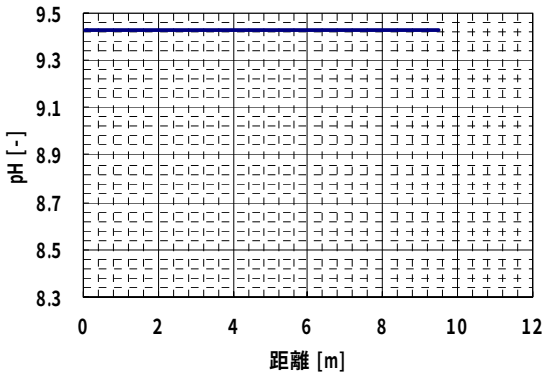


(f)1000 年後

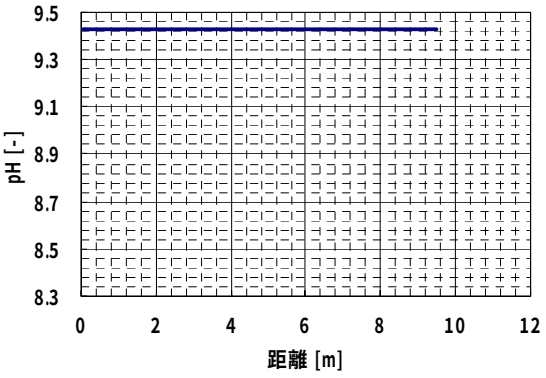
図 5.1-4　飽和度分布
（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃）



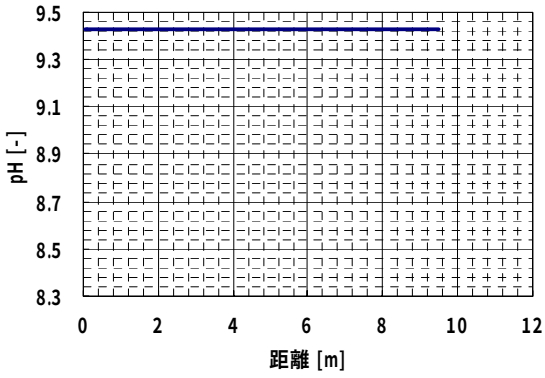
(a)0 年後



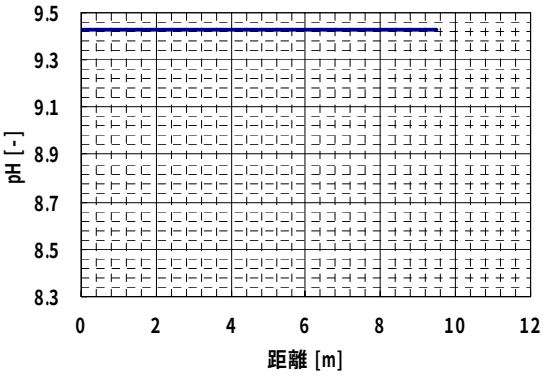
(b)0.1 年後



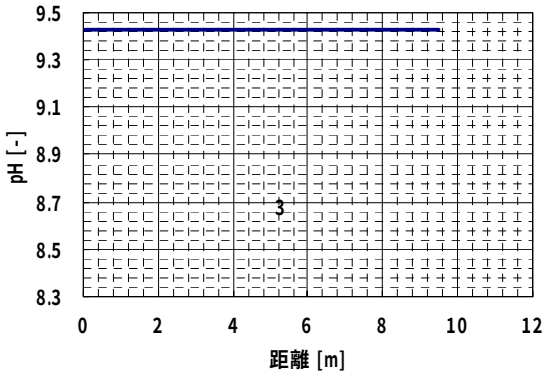
(c)1 年後



(d)10 年後

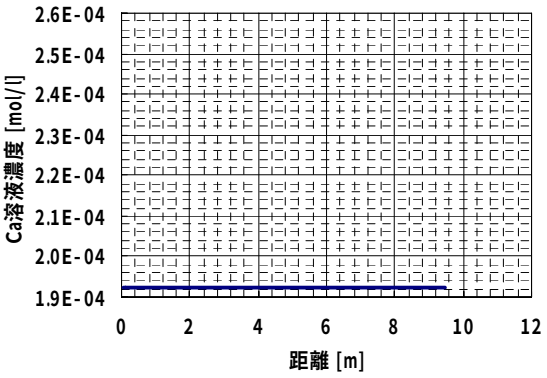


(e)100 年後

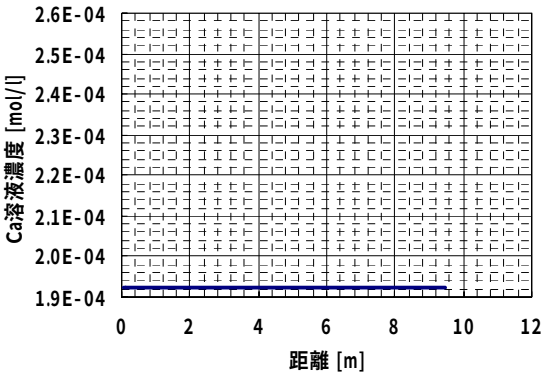


(f)1000 年後

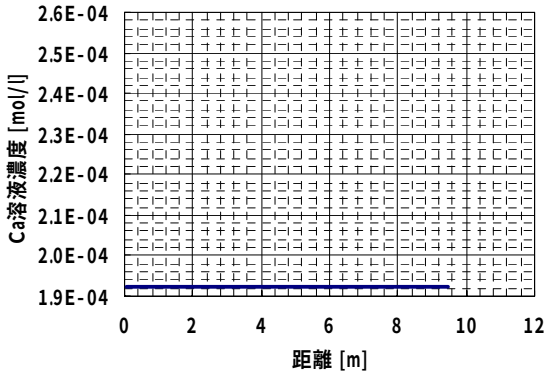
図 5.1-5　pH 分布
（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃）



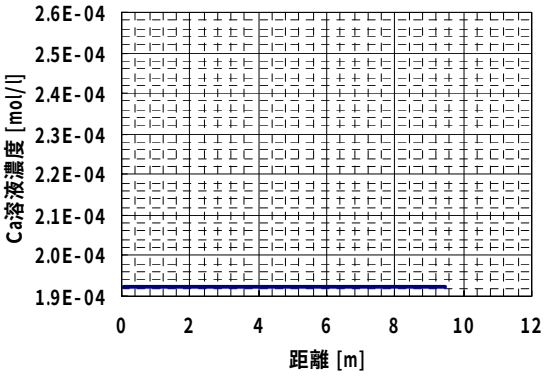
(a)0 年後



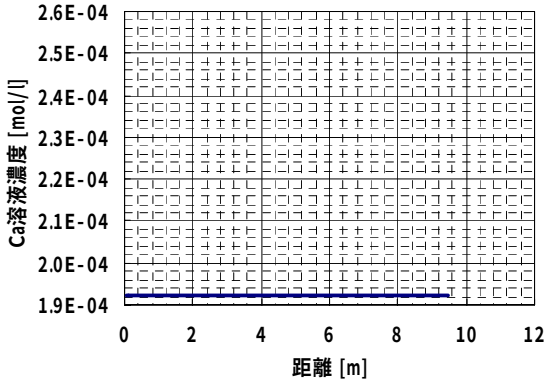
(b)0.1 年後



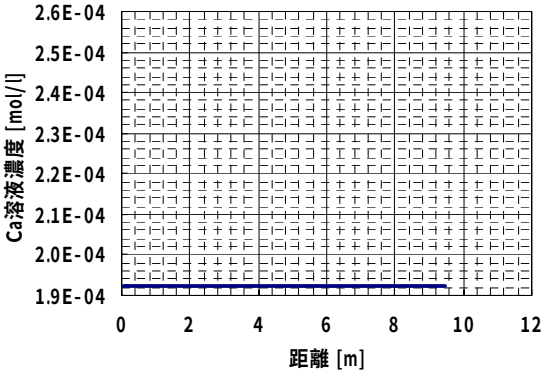
(c)1 年後



(d)10 年後

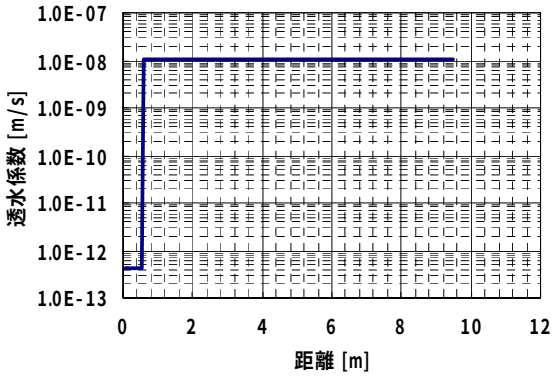


(e)100 年後

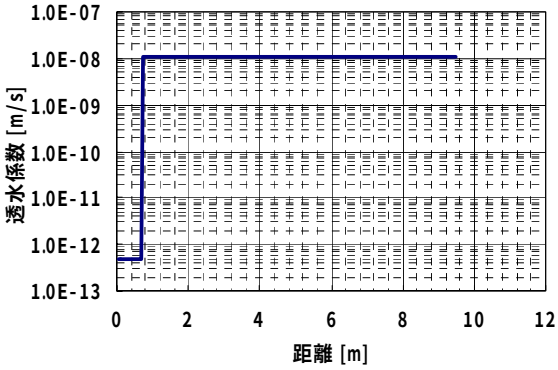


(f)1000 年後

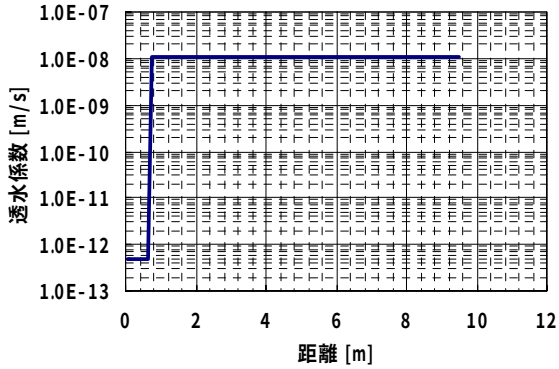
図 5.1-6　Ca 溶液濃度分布
（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃）



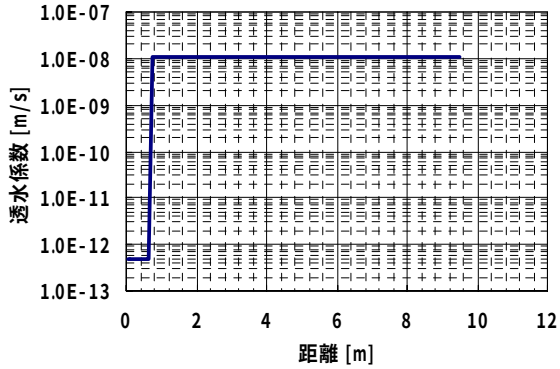
(a)0 年後



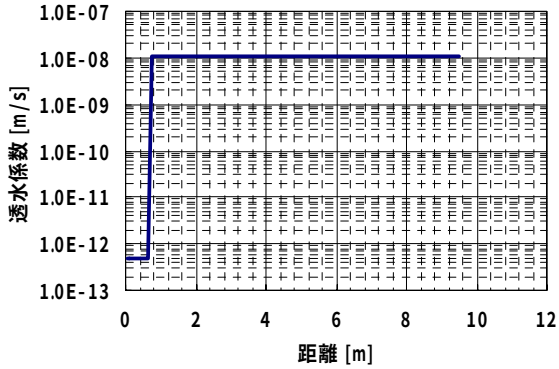
(b)0.1 年後



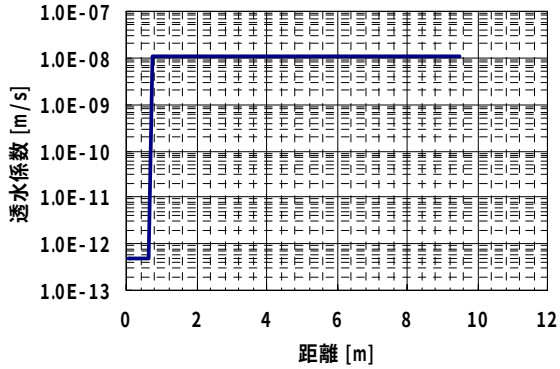
(c)1 年後



(d)10 年後

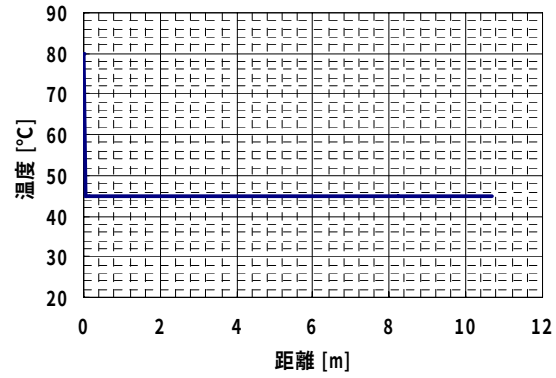


(e)100 年後

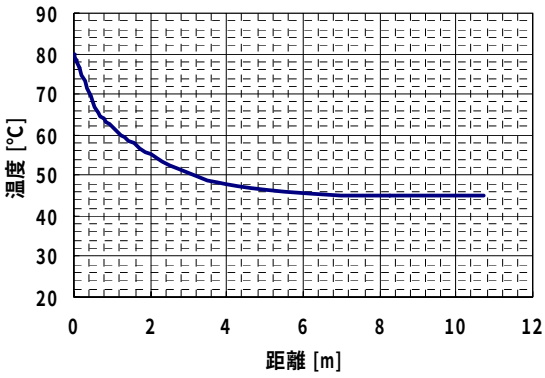


(f)1000 年後

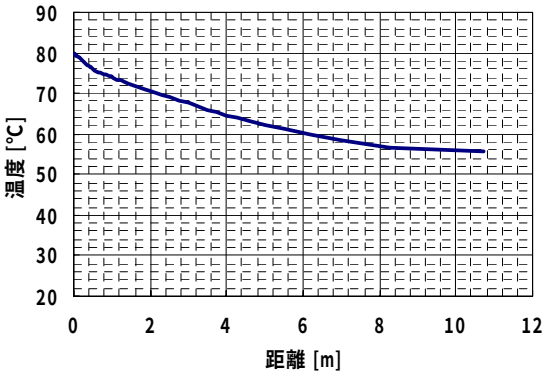
図 5.1-7　透水係数分布
（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 25℃）



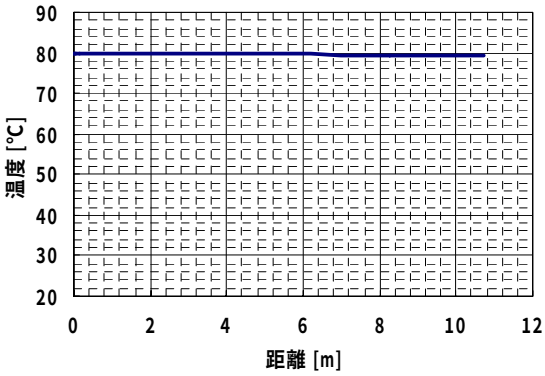
(a)0 年後



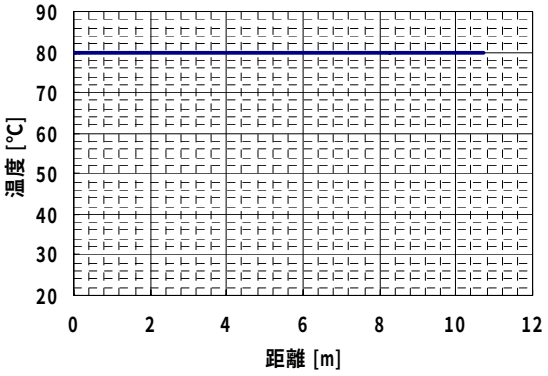
(b)0.1 年後



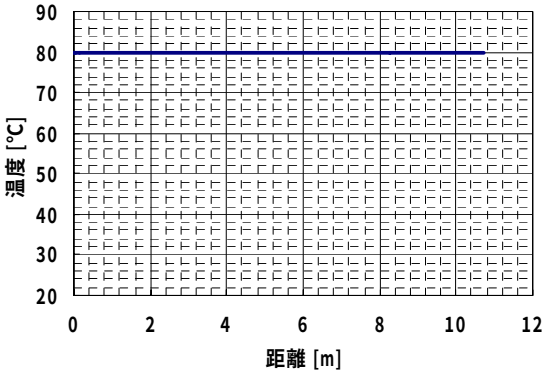
(c)1 年後



(d)10 年後

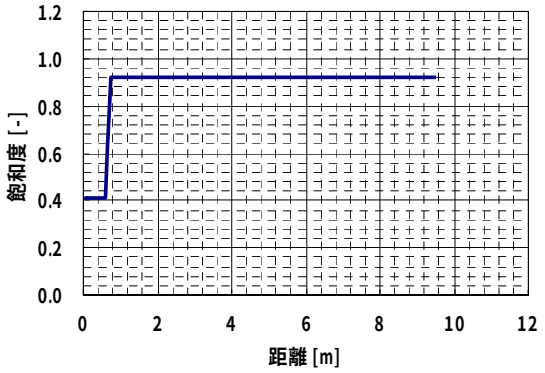


(e)100 年後

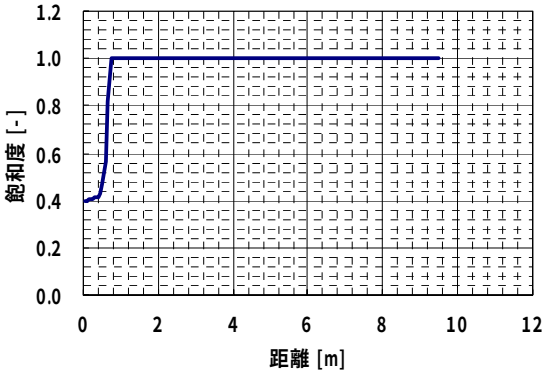


(f)1000 年後

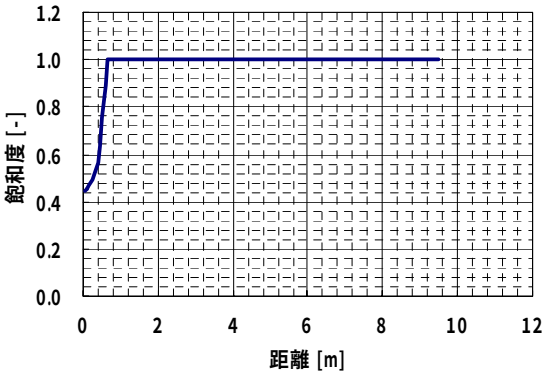
図 5.1-8　温度分布
（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃）



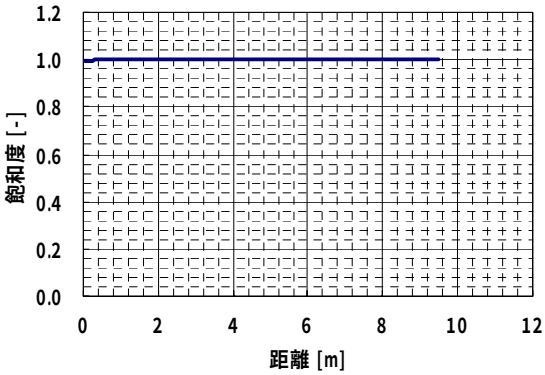
(a)0 年後



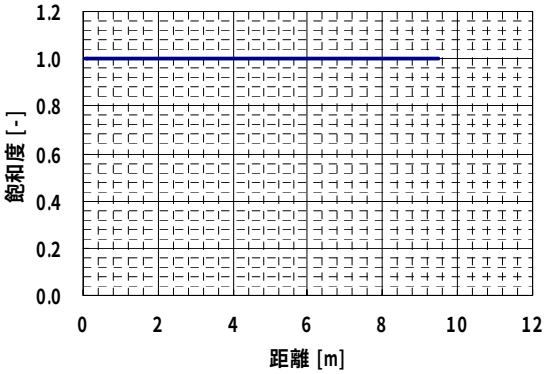
(b)0.1 年後



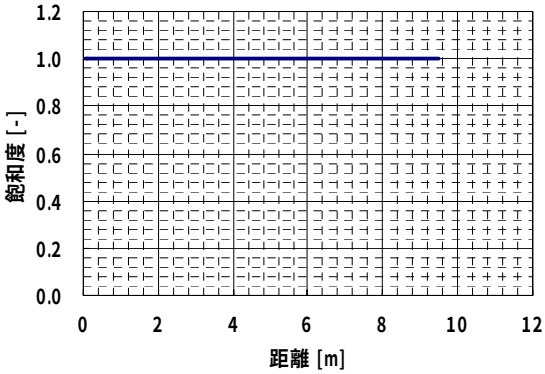
(c)1 年後



(d)10 年後

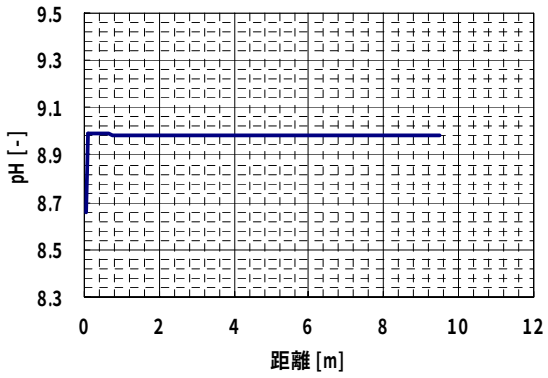


(e)100 年後

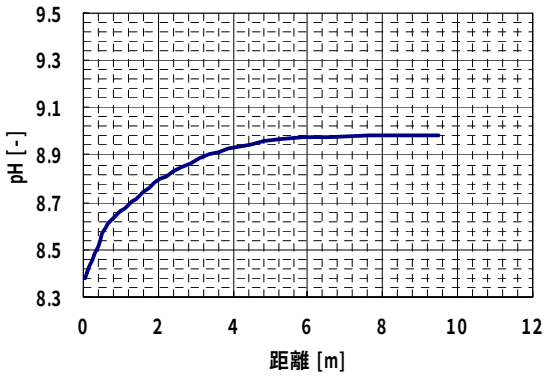


(f)1000 年後

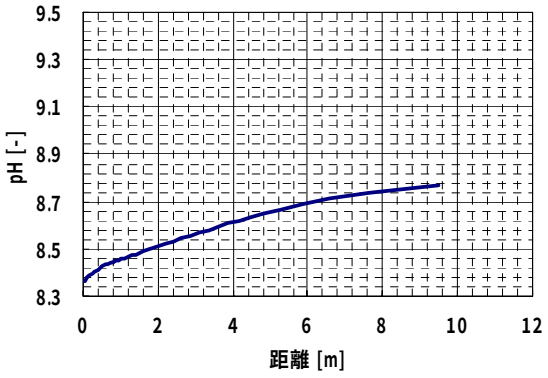
図 5.1-9　飽和度分布
（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃）



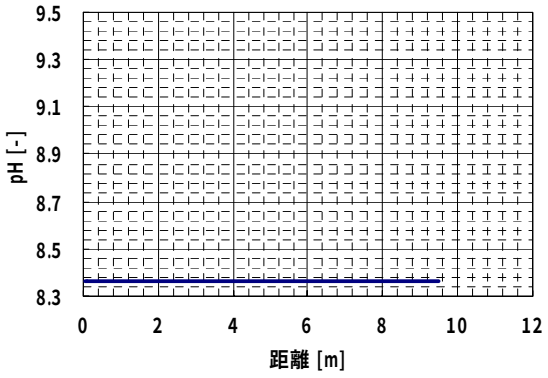
(a)0 年後



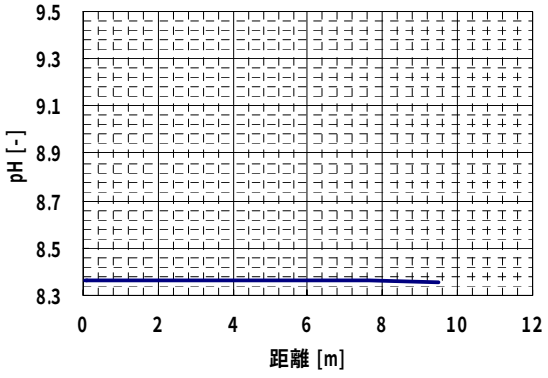
(b)0.1 年後



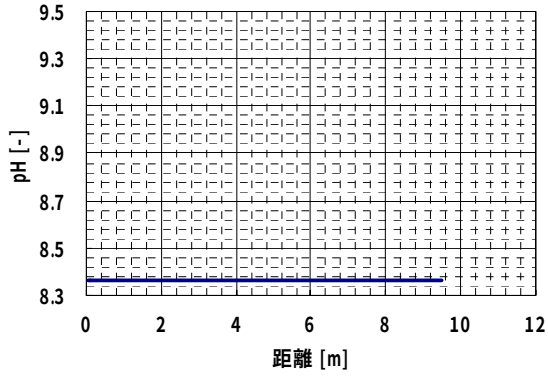
(c)1 年後



(d)10 年後

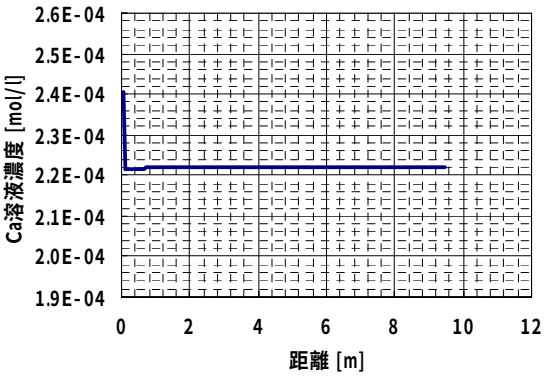


(e)100 年後

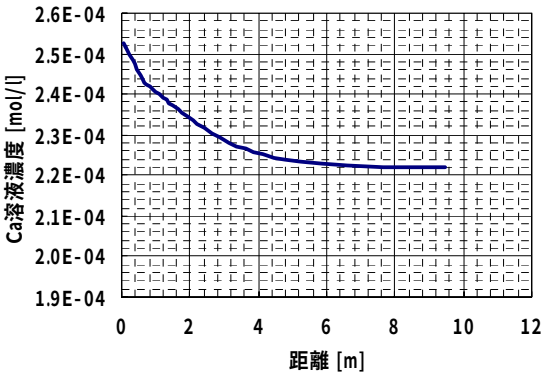


(f)1000 年後

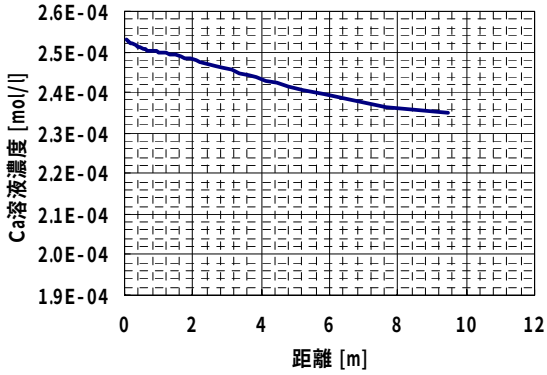
図 5.1-10　pH 分布
（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃）



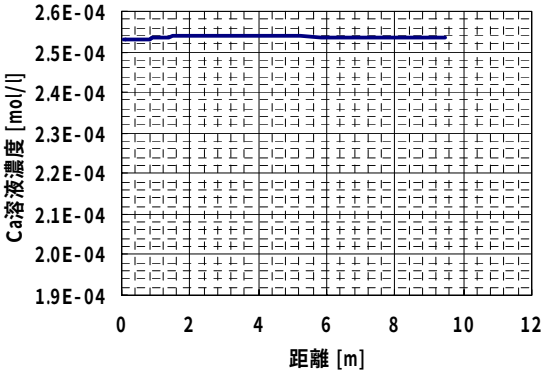
(a)0 年後



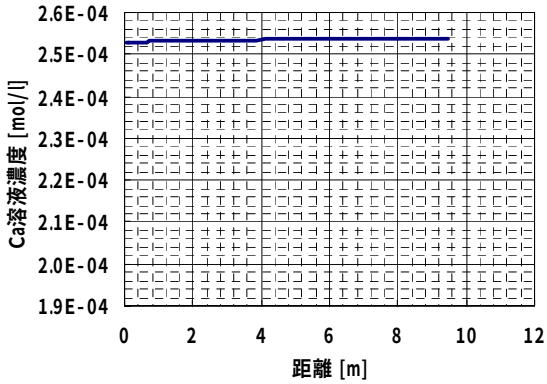
(b)0.1 年後



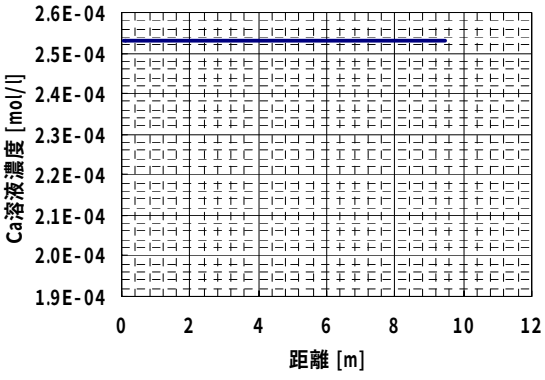
(c)1 年後



(d)10 年後

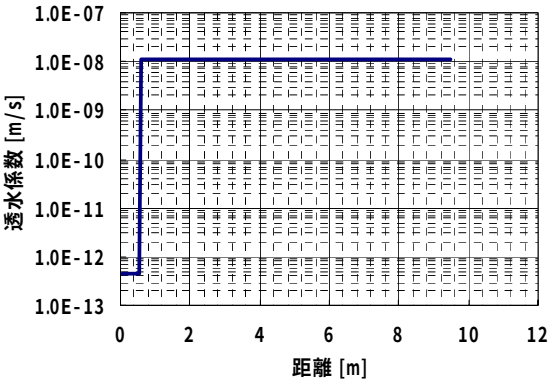


(e)100 年後

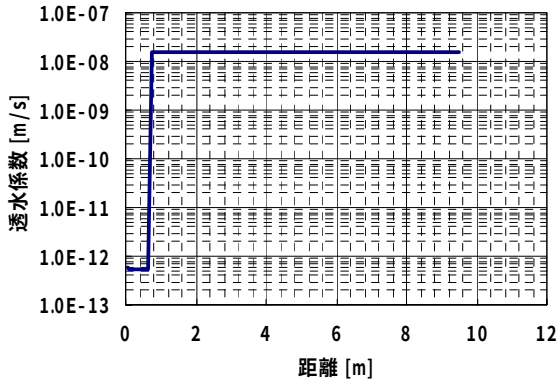


(f)1000 年後

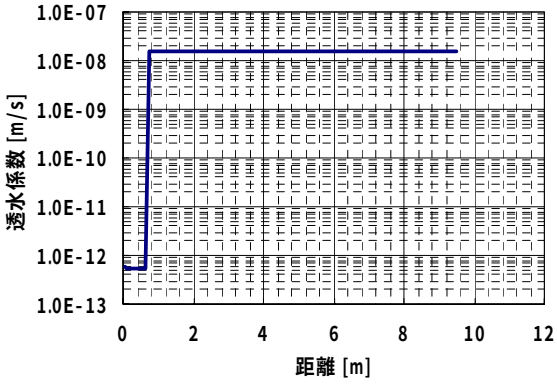
図 5.1-11　Ca 溶液濃度分布
（１次元事例解析，解析ケース 2：境界温度 80℃）



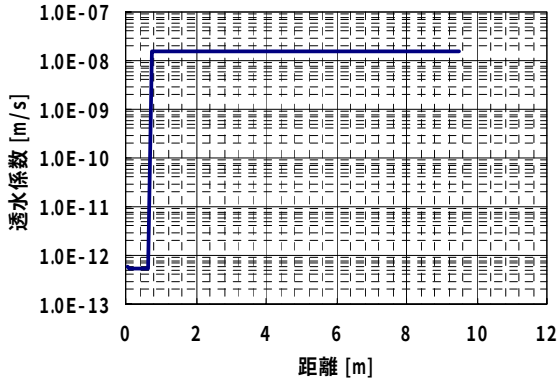
(a)0 年後



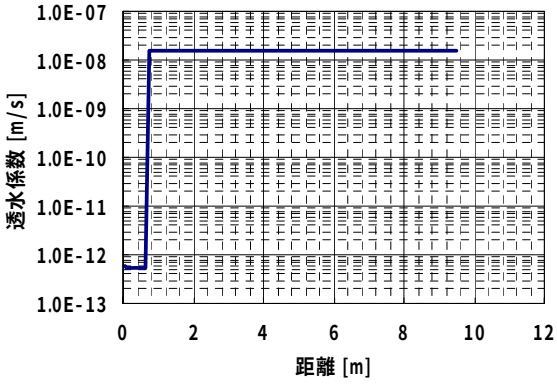
(b)0.1 年後



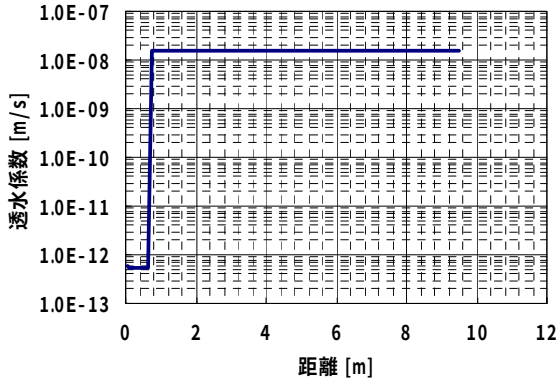
(c)1 年後



(d)10 年後



(e)100 年後



(f)1000 年後

図 5.1-12　透水係数分布
（１次元事例解析，解析ケース 1：境界温度 80℃）

5.1.2 大規模 3 次元事例解析

本事例解析のモデル化範囲は，実運用を想定し，早期の課題摘出ならびにニアフィールド環境の変遷を把握するため, 高レベル放射性廃棄物処分ニアフィールド空間領域として，ガラス固化体領域，オーバーパック領域、緩衝材領域，岩体領域を対象とした 3 次元モデルである。

(1) 解析条件

本事例解析は，大規模領域での計算を実施することから，3 次元モデルの体系を採用した。空間メッシュ分割図を図 5.1-13 に示す。本モデルの要素数は，ガラス固化体領域，オーバーパック領域，緩衝材領域，埋め戻し材領域ならびに岩体領域を合わせて 7,220，節点数は 8,580（Dtransu），32,891（THAMES）とした。温度条件は，本図に示すように上下面は固定温度とし，側面は断熱境界とした。水理条件も，本図に示すように上下面を水頭固定とし，側面は水頭自由境界とした。地下水濃度は，上下面において固定条件とし，側面は自由境界とした。

熱の初期条件は，全領域において 45℃とした。水理の初期条件は，各領域において全水頭で設定し，それぞれ岩盤 50(m)，埋め戻し材-50.602(m)，緩衝材，オーバーパック，ガラス固化体とも-525.95(m)とした。物質移行，地球化学の初期条件は，初期地下水組成と緩衝材・岩体中の構成鉱物との平衡により求まる値となる。本事例解析では，初期地下水組成を全元素 1.0×10^{-15}(mol/l)とした。

ガラス固化体領域の発熱特性は，第２次取りまとめの固化体仕様に基づき，固化体 1 本当たりの発熱量を単位体積当たりの発熱量に換算し, THAMES の入力データとした。なお，本解析メッシュではガラス固化体が直方体形状となっているため，本事例解析における固化体一本あたりの発熱量は図 5.1-14 に示すようになっている。

本事例解析において，THAMES，Dtransu，phreeqe60 で採用した物性条件をそれぞれ表 5.1-4～表 5.1-6 に示す。

なお, 3 次元事例解析は, 情報量が極めて膨大である。そのため, 本研究では, 図 5.1-15 に示すように，評価ライン（図 5.1-15(a)参照）での空間分布，ならびに評価点（図 5.1-15(b)参照）での時間変化に基づき，結果の整理を実施した。さらに，結果の整理では, ニアフィールド全体の分布傾向の把握を目的として，３次元のコンタ図を作成した。

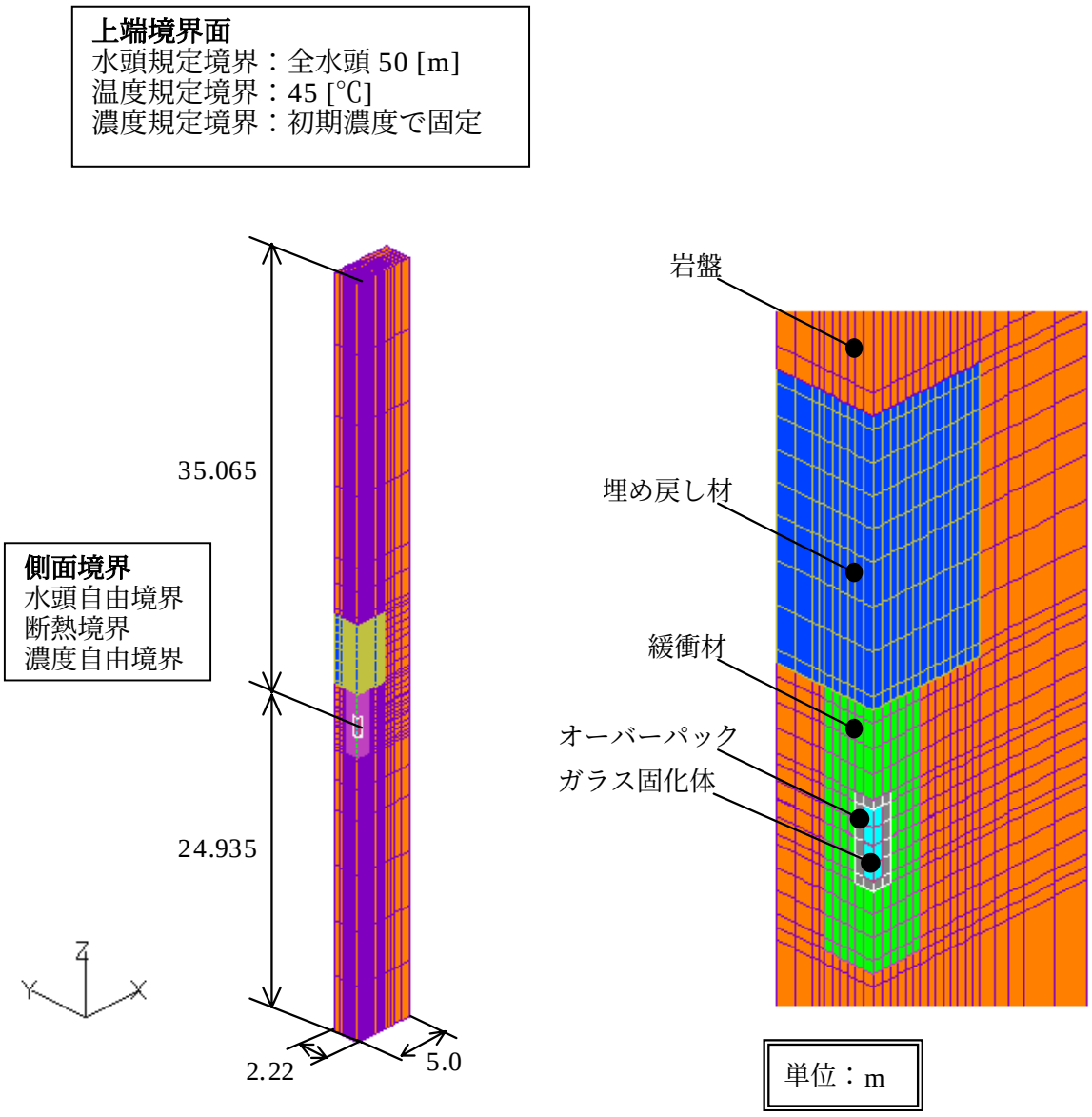


図 5.1-13　大規模 3 次元事例解析用モデル

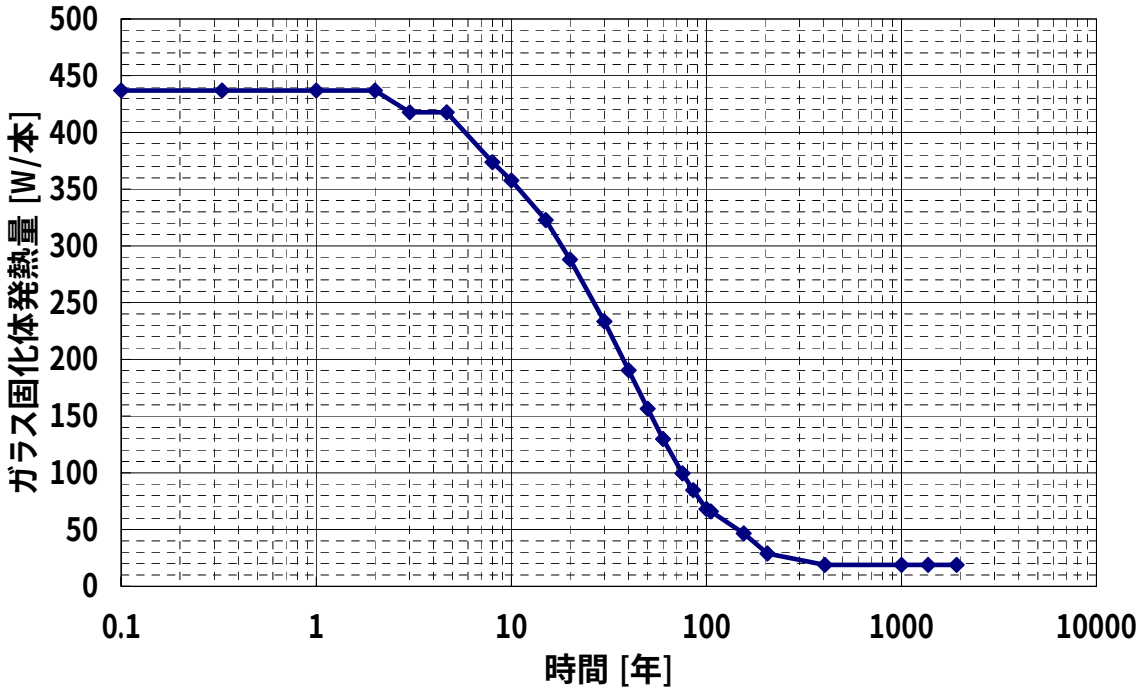
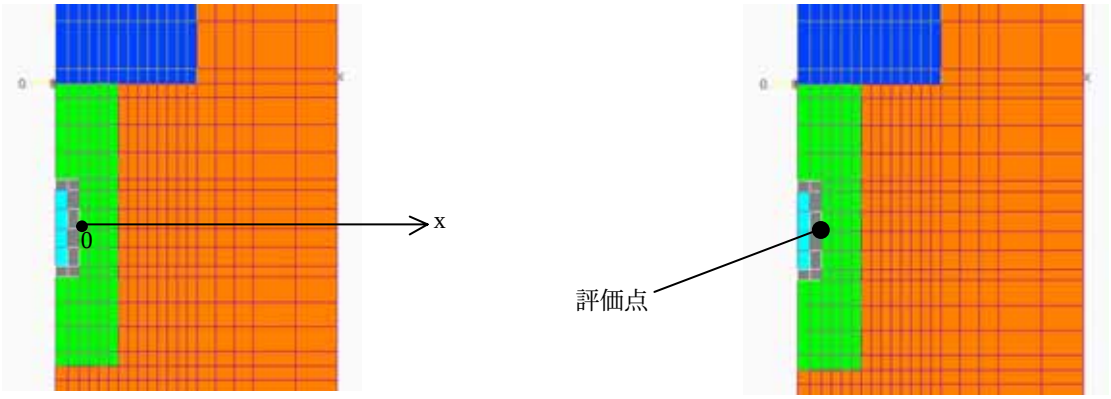


図 5.1-14　大規模 3 次元事例解析用ガラス固化体発熱特性



(a) 空間分布を示す評価ライン　　(b) 時間変化の対象とした評価点

図 5.1-15　大規模 3 次元事例解析評価ラインおよび評価点

表 5.1-4　３次元事例解析入力データ（THAMES）

入力パラメータ		ガラス固化体	オーバーパック	緩衝材	埋め戻し材	岩盤
真密度 [g/cm^3]		2.8	7.8	2.75	2.75	2.67
弾性係数 [MPa]		1000	1000	64	64	3700
ポアソン比 [-]		0.3	0.3	0.3	0.3	0.25
固有透過度 [m^2]		1×10^{-22}	1×10^{-22}	1×10^{-21}	4×10^{-20}	1×10^{-15}
空隙率		0.615	0.615	0.403	0.403	0.005
VG パラメータ	θs [-]	0.403	0.403	0.403	0.403	5.0×10^{-3}
	θr [-]	0	0	0	0	0
	α [1/m]	8.0×10^{-3}	8.0×10^{-3}	8.0×10^{-3}	8.0×10^{-3}	8.0×10^{-3}
	n [-]	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6
比透水係数 [-]		—	—	—	—	VG+Mualem モデル
水分拡散係数	a1	$1.76\times10^{-8}T-3.04\times10^{-7}$	$1.76\times10^{-8}T-3.04\times10^{-7}$	$2.99\times10^{-8}T-3.78\times10^{-7}$	$2.99\times10^{-8}T-3.78\times10^{-7}$	—
	a2	$-1.48\times10^{-7}T+2.98\times10^{-6}$	$-1.48\times10^{-7}T+2.98\times10^{-6}$	$-1.5\times10^{-8}T+1.49\times10^{-7}$	$-1.5\times10^{-8}T+1.49\times10^{-7}$	
	b1	-3.68×10^{-3}	-3.68×10^{-3}	-2.49×10^{-3}	-2.49×10^{-3}	
	b2	$5.22\times10^{-3}T+2.68\times10^{-1}$	$5.22\times10^{-3}T+2.68\times10^{-1}$	$5.59\times10^{-4}T+3.93\times10^{-1}$	$5.59\times10^{-4}T+3.93\times10^{-1}$	
温度勾配水分拡散係数 [m^2/(sK)]		—	—	$Dt=D_{t0}\times\exp[(\alpha_t(T-T_0)/T_0]$		—
熱伝導率 [W/(mK)]		1.2	53.0	$4.44\times10^{-1}+1.38\times10^{-2}w+6.14\times10^{-3}w^2-1.69\times10^{-4}w^3$		2.8
比熱 [kJ/(kgK)]		960	460	(34.1+4.18w)/(100+w)		1000

w：含水比，T：温度

表 5.1-5　３次元事例解析入力データ（Dtransu）

入力パラメータ		ガラス固化体	オーバーパック	緩衝材	埋め戻し材	岩盤
縦分散長	[m]	2×10^{-3}	2×10^{-3}	2×10^{-2}	5×10^{-2}	1×10^{-1}
横分散長	[m]	2×10^{-4}	2×10^{-4}	2×10^{-3}	5×10^{-3}	1×10^{-2}
拡散係数	[m^2/s]	1×10^{-20}	1×10^{-20}	5×10^{-10}	5×10^{-10}	5×10^{-10}
遅延係数	[-]	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
減衰係数	[1/y]	0	0	0	0	0

表 5.1-6　３次元事例解析入力データ（phreeqe60）

	構成鉱物	初期濃度 [mol/l_要素体積]	密度 [g/cm^3]	分子量 [g/mol]	pH [-]	pe [-]
ガラス固化体	－	－	－	－	6.0	5.0
オーバーパック	－	－	－	－	6.0	5.0
緩衝材	Calcite	10	2.5	84.0878	6.0	－5.0
	Chalcedy	10	2.5	60.0843		
	Smectite	10	2.5	404.2009		
埋め戻し材	Calcite	10	2.5	84.0878	6.0	－5.0
	Chalcedy	10	2.5	60.0843		
	Smectite	10	2.5	404.2009		
岩盤	Calcite	10	2.5	84.0878	6.0	－4.42
	Chalcedy	10	2.5	60.0843		

(2) 解析結果

ここでは，THMC3 次元解析結果のうち，先ず，熱－水に係る結果，続いて物質移行－地球化学に係る結果に関して，評価ラインでの空間分布，評価点での時間変化についてグラフに基づき傾向を述べた後，全体的な傾向については，3 次元コンタ図により考察する。

図 5.1-16 は，熱－水に係る結果のうち，前記の評価ラインにおける温度，飽和度，体積含水率，熱伝導率，空隙率，透水係数の空間分布を示している。図 5.1-17 は，熱－水に係る結果のうち，前記の評価点における温度，飽和度，体積含水率，熱伝導率，空隙率，透水係数の時間変化を示している。

温度の挙動は（図 5.1-16(a)），緩衝材領域・岩体領域とも時間の経過とともに温度の増加がみられ，発熱特性に応じて時間の経過とともに減少傾向となる。緩衝材内側における温度履歴（図 5.1-17(a)）は，第 2 次取りまとめの傾向とほぼ一致していることを確認した。

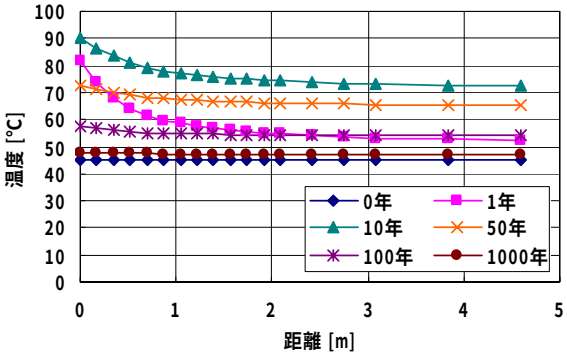
緩衝材中の再冠水は，図 5.1-16(b)，(c)に示すように数 10 年となっている。また，地下水の浸入により緩衝材中の熱伝導率は増加する傾向を示している（図 5.1-16(d)参照）。図 5.1-16(e)，(f)に示すように空隙率，透水係数の変化は，緩衝材構成鉱物，岩盤構成鉱物の変化が微量であることから，本事例解析の条件では，本パラメータに顕著な変化は見られなかった。また，図 5.1-17(f)に示すように，本解析では NaCl の溶液濃度が小さいため，緩衝材（内側）の透水係数の時間変化は極めて小さい。

pH の挙動は（図 5.1-18(a)），小規模事例解析ケース 2 の挙動と同様に，初期の低温状態では，Calcite の溶解平衡に基づき高 pH で一様に分布しているが，時間の経過とともに，緩衝材領域での温度増加が進むと低 pH へと変化する。発熱特性に応じて，系内の温度が地温レベルに戻ると，Calcite の溶解・平衡も初期の低温状態に戻り，高 pH となる。図 5.1-19(a)は，緩衝材内側における pH の時間変化を示しており，同様の傾向が確認できる。

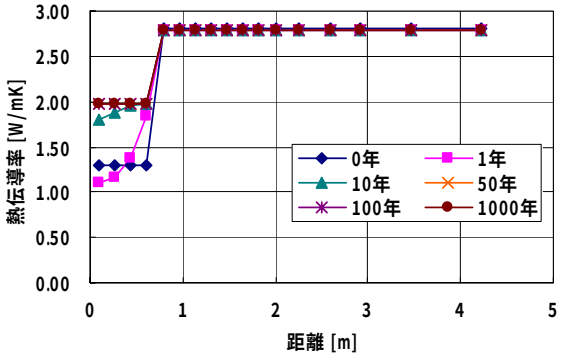
Ca，C 溶液濃度は，図 5.1-18(b)，(c)で示すように緩衝材，岩体中でほぼ同一の空間分布をしており，これらの溶液濃度が Calcite の溶解平衡で支配されていることが確認できる。両元素の溶液濃度は，温度の増加とともに増加し，時間の経過とともに初期状態に回復する。この傾向は，図 5.1-19(b)，(c)においても同じである。

図 5.1-18(d)～(f)は，主要元素の沈殿濃度の空間分布を示す。本事例解析における 1,000 年程度の経過時間では，緩衝材構成鉱物，岩盤構成鉱物の変化は極めて少ない結果となった。なお，沈殿濃度が時間の経過とともに減少する理由は，飽和度の変化（図 5.1-16(b)参照）により，空隙水１リットル当たりとして表されている濃度が見かけ上薄くなったためである。

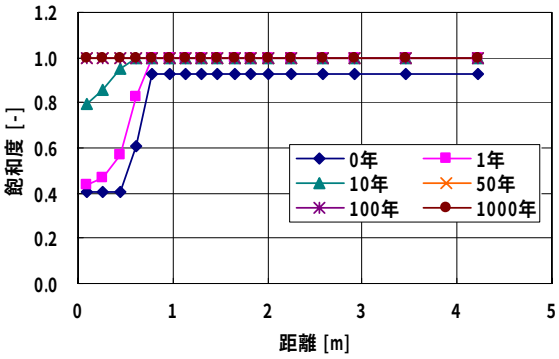
図 5.1-20 は，ニアフィールド全体の温度変化をコンタ図で表わしている。本図より，50 年以前で固化体周辺において温度増加（赤色）が見られるが，徐々に初期状態に回復する傾向（系全体が青色）を示している。図 5.1-21 は，ニアフィールドの飽和度の分布を示している。初期状態で岩盤は地下水で飽和（赤色）しており，時間の経過とともに緩衝材が飽和していくことを示している。図 5.1-22 は，ニアフィールドの pH の分布を示している。温度の増加とともにガラス固化体周辺の pH は減少し，最終的には初期状態に回復することを示している。図 5.1-23 は，ニアフィールドにおける空隙水中の Ca 溶液トータル濃度の分布を示している。本図より，ガラス固化体周辺での温度増加にともない，Ca 溶液トータル濃度は増加するが，温度の減少とともに濃度も減少する傾向を示している。



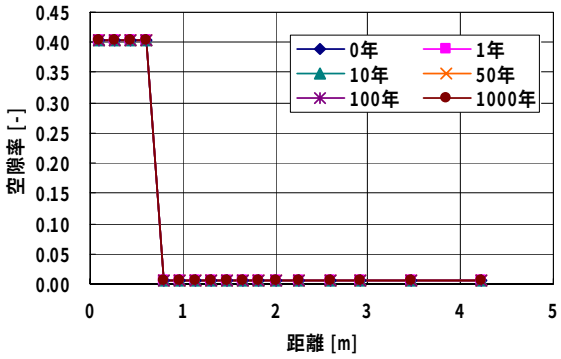
(a) 温度の空間分布



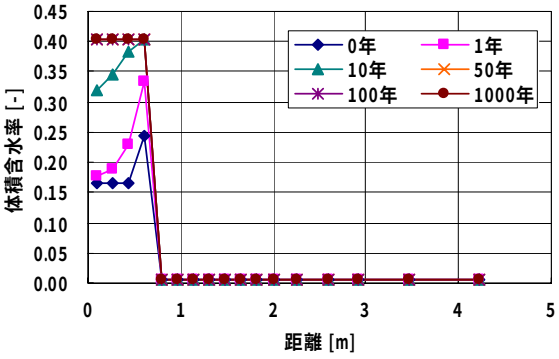
(d) 熱伝導率の空間分布



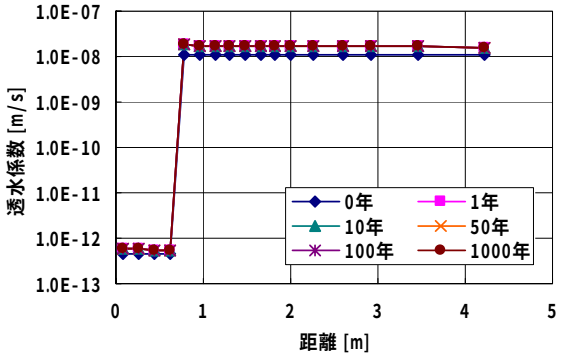
(b) 飽和度の空間分布



(e) 空隙率の空間分布

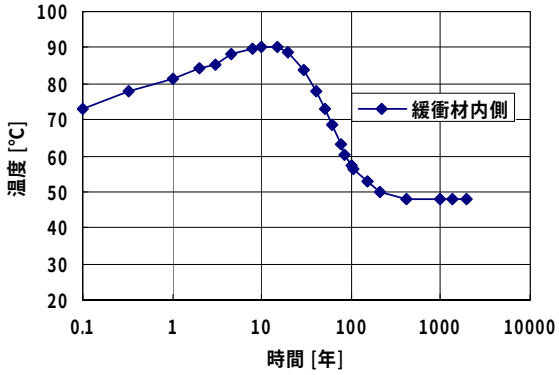


(c) 体積含水率の空間分布

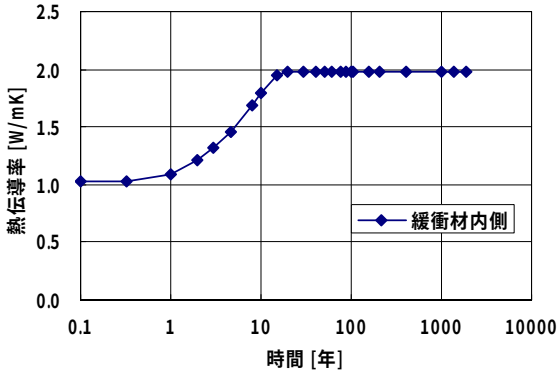


(f) 透水係数の空間分布

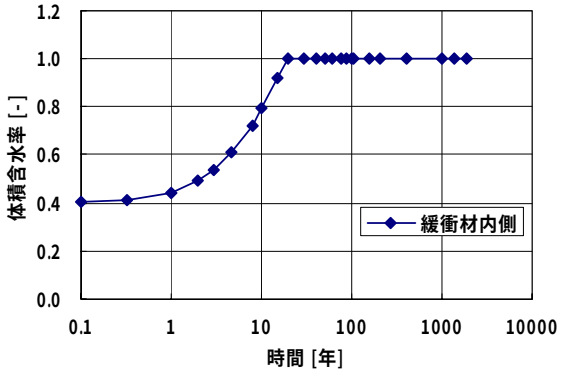
図 5.1-16　熱－水に係るパラメータの空間分布



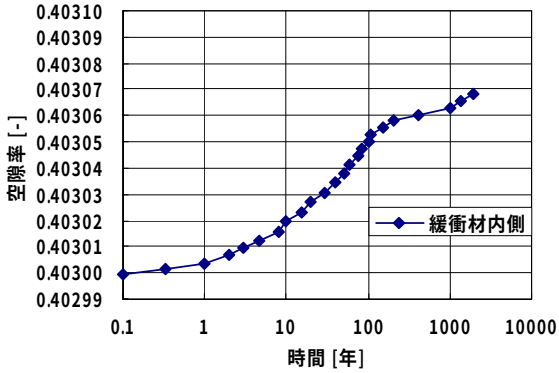
(a) 温度の時間変化



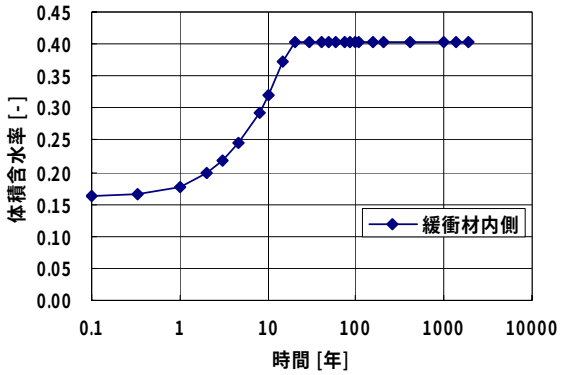
(d) 熱伝導率の時間変化



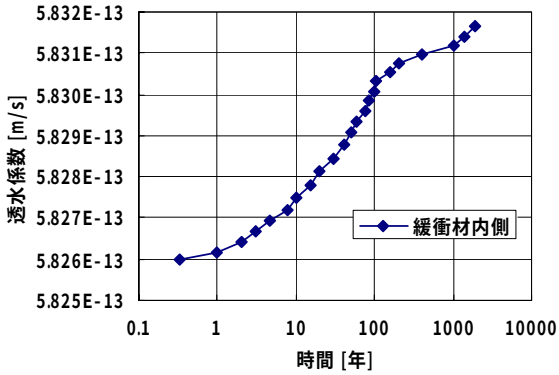
(b) 飽和度の時間変化



(e) 空隙率の時間変化

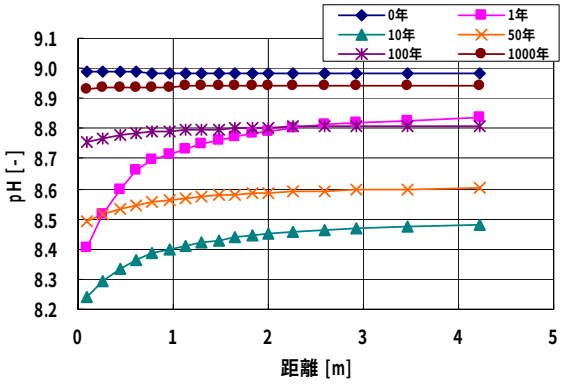


(c) 体積含水率の時間変化

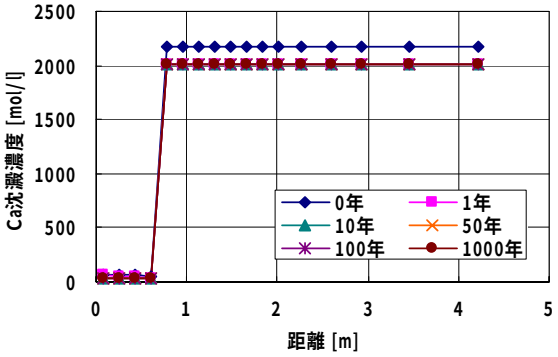


(f) 透水係数の時間変化

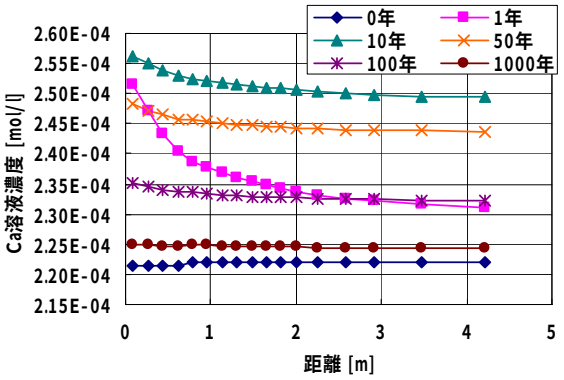
図 5.1-17　熱－水に係るパラメータの時間変化（緩衝材内側）



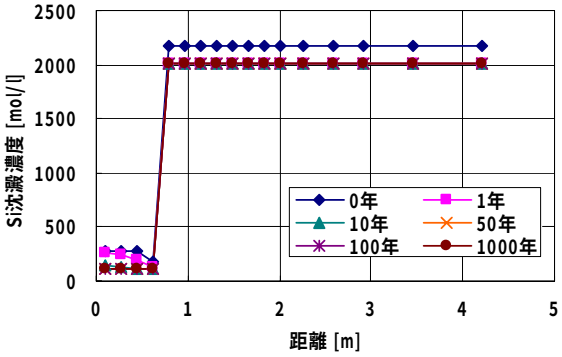
(a) pH の分布



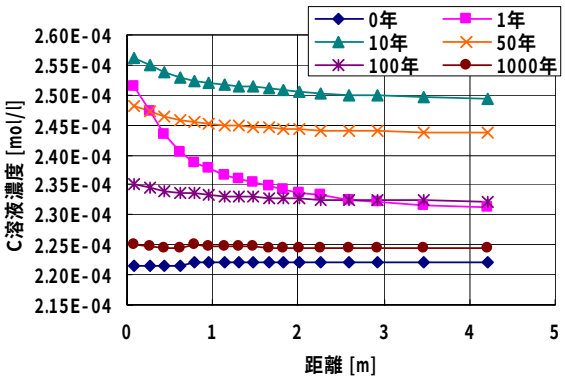
(d) Ca 沈殿濃度の分布



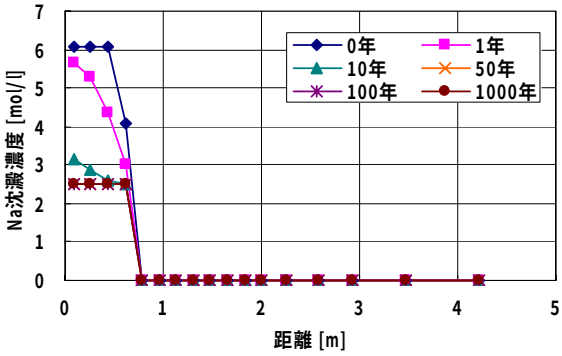
(b) Ca 溶液濃度の分布



(e) Si 沈殿濃度の分布

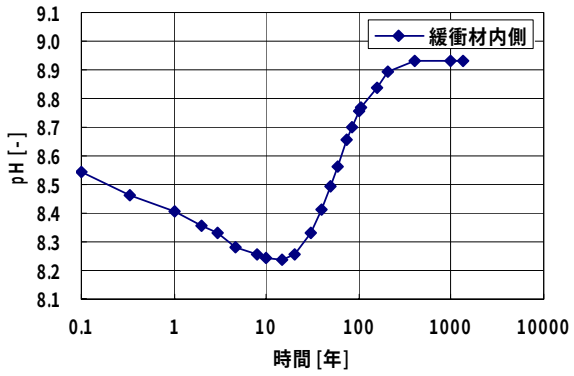


(c) C 溶液濃度の分布

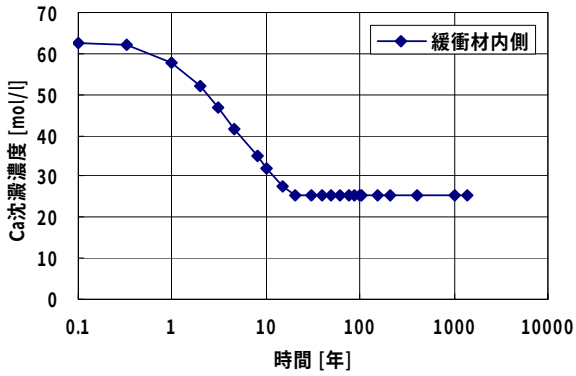


(f) Na 沈殿濃度の分布

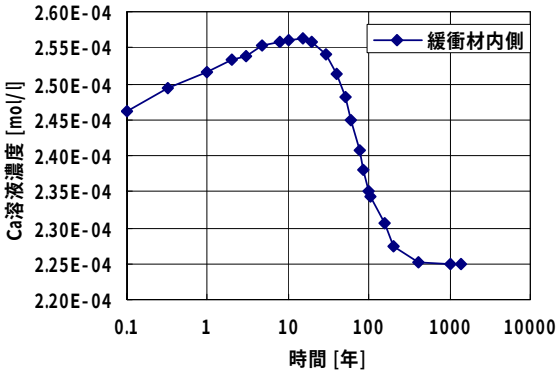
図 5.1-18　物質移行－地球化学に係るパラメータの空間分布



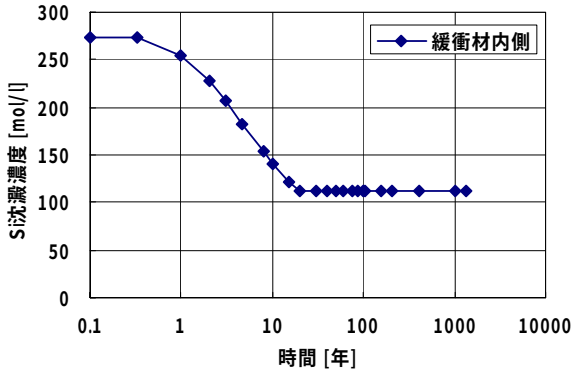
(a) pH の時間変化



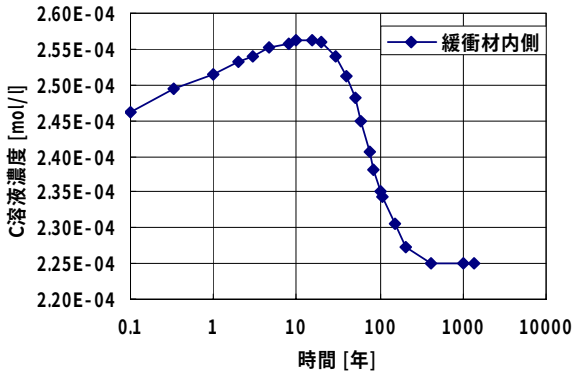
(d) Ca 沈殿濃度の時間変化



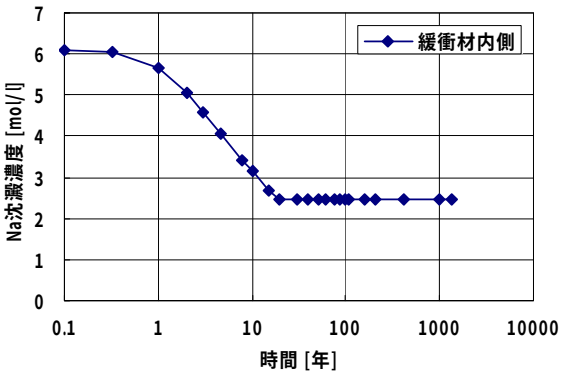
(b) Ca 溶液濃度の時間変化



(e) Si 沈殿濃度の時間変化

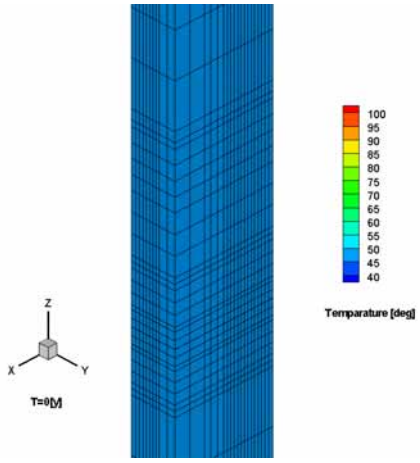


(c) C 溶液濃度の時間変化

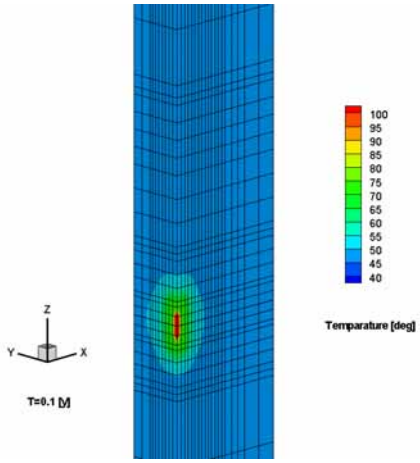


(f) Na 沈殿濃度の時間変化

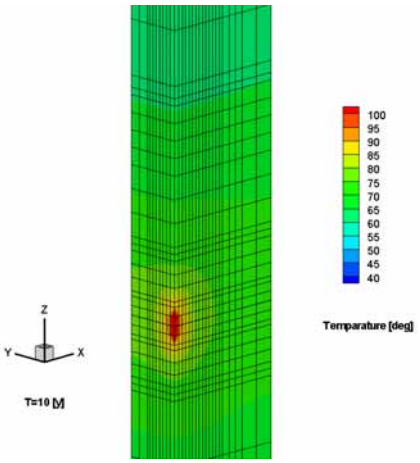
図 5.1-19　物質移行－地球化学に係るパラメータの時間変化（緩衝材内側）



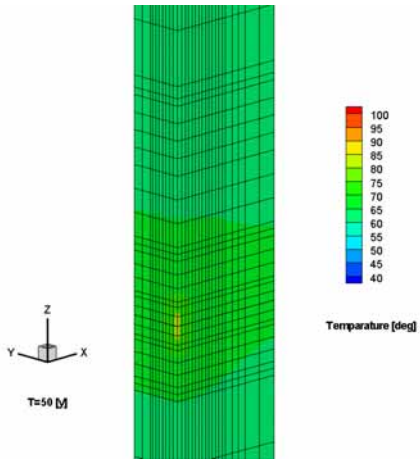
(a)0 年後



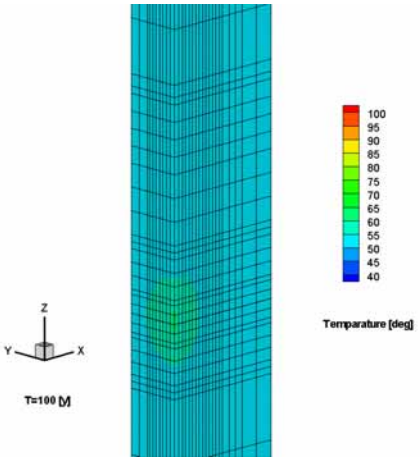
(b)1 年後



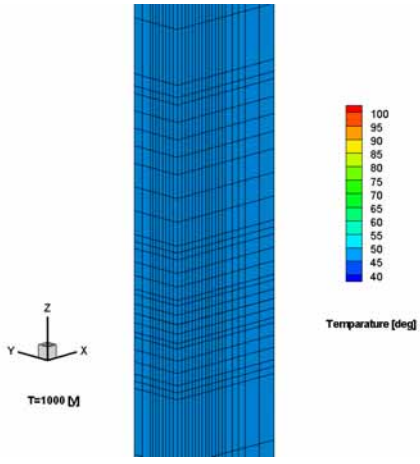
(c)10 年後



(d)50 年後

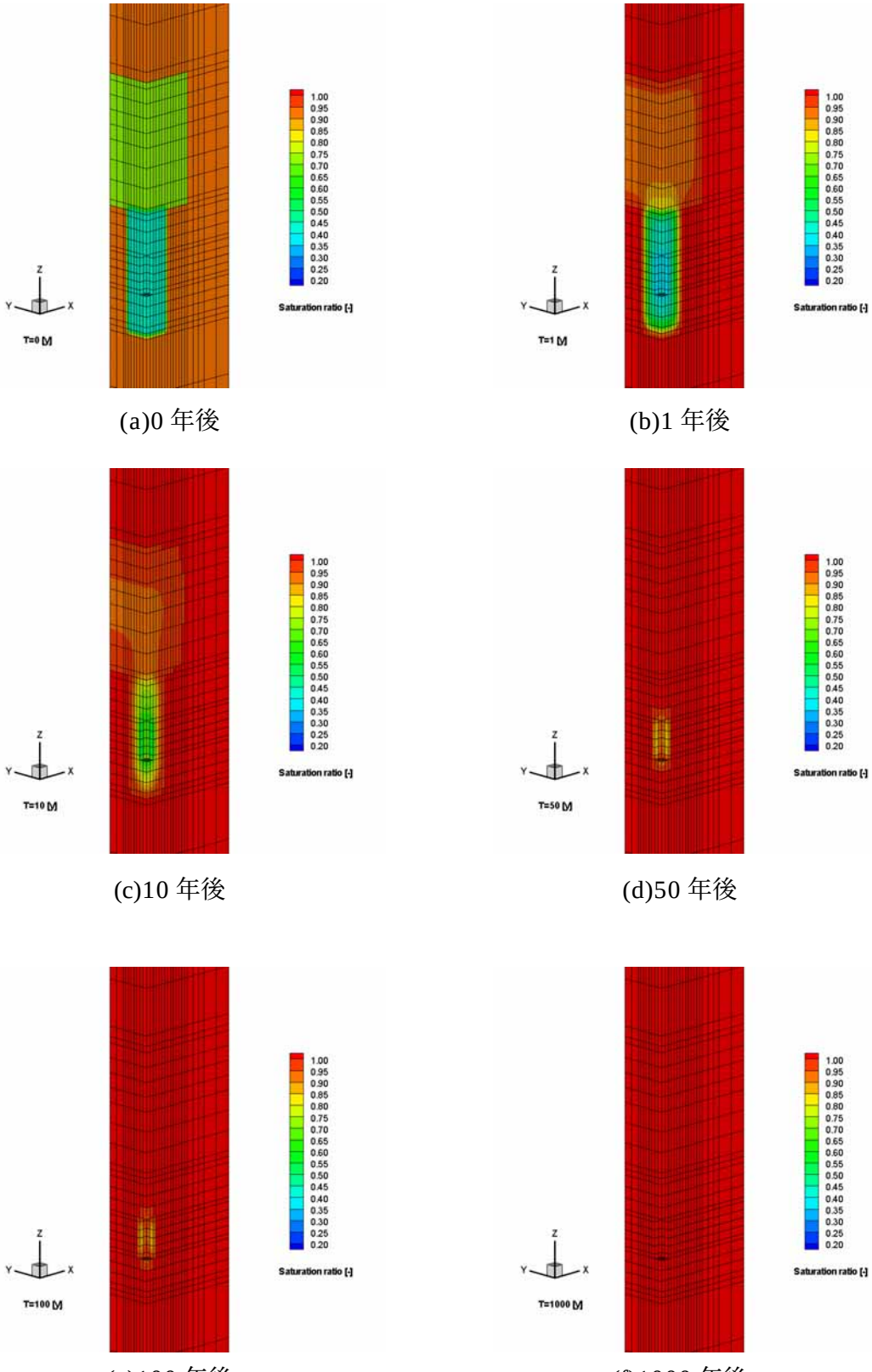


(e)100 年後



(f)1000 年後

図 5.1-20　温度分布

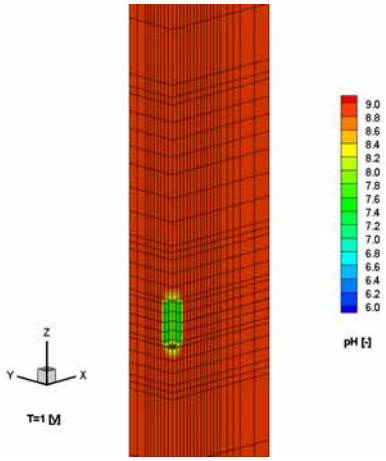


(a)0 年後　(b)1 年後

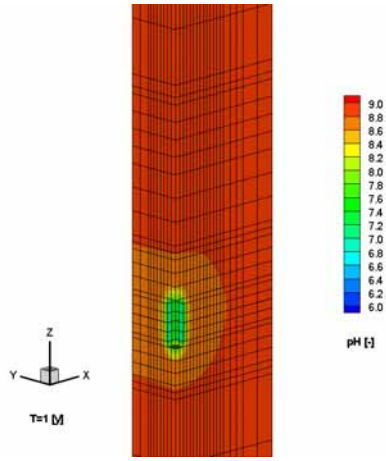
(c)10 年後　(d)50 年後

(e)100 年後　(f)1000 年後

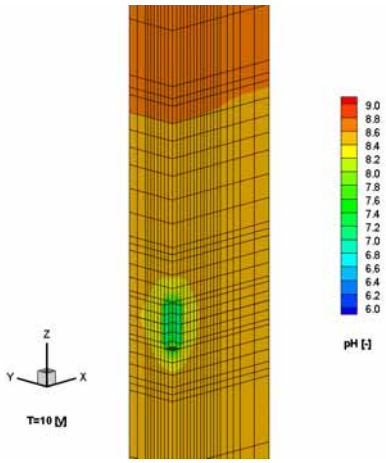
図 5.1-21　飽和度分布



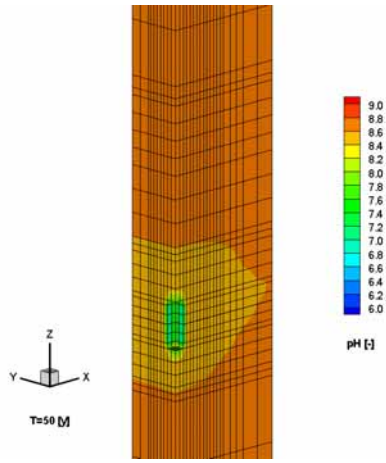
(a)0 年後



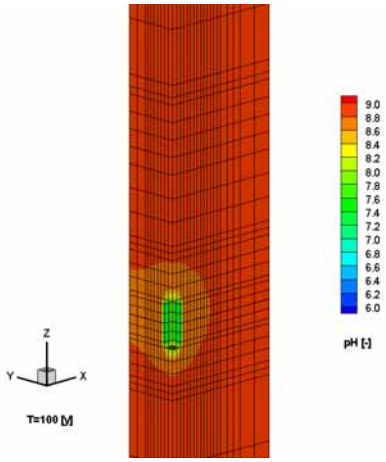
(b)1 年後



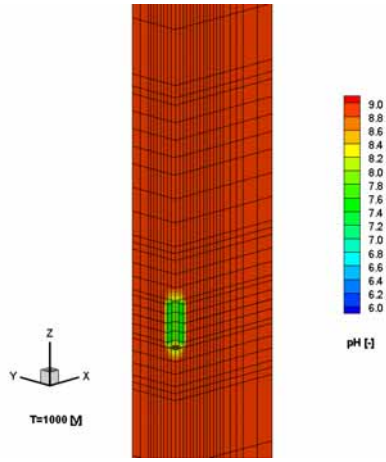
(c)10 年後



(d)50 年後

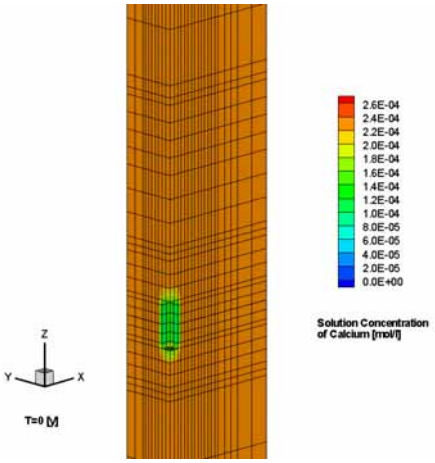


(e)100 年後

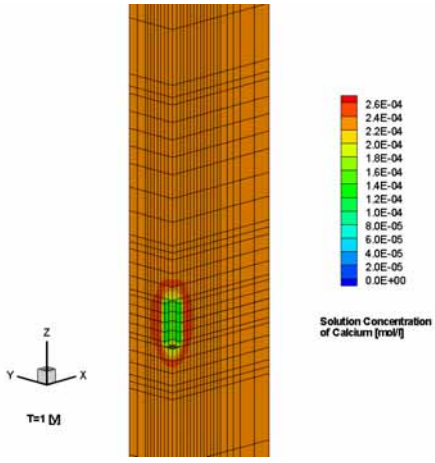


(f)1000 年後

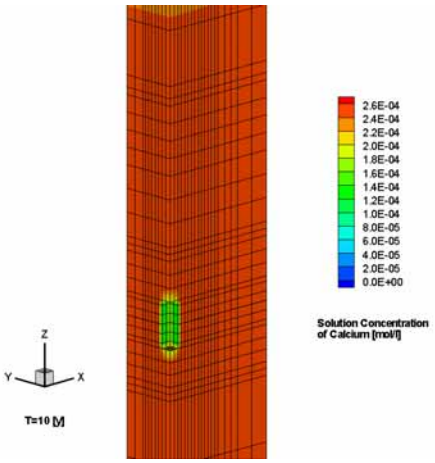
図 5.1-22　pH 分布



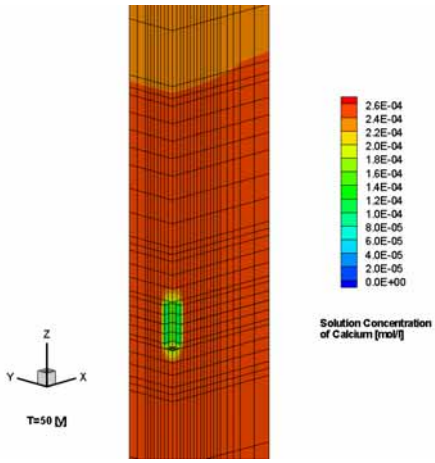
(a)0 年後



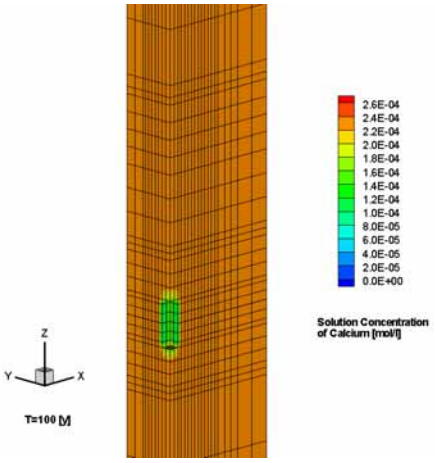
(b)1 年後



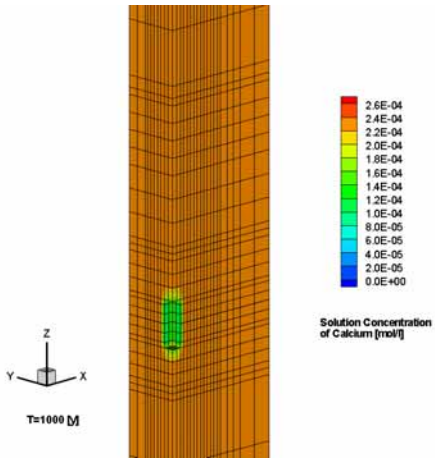
(c)10 年後



(d)50 年後



(e)100 年後



(f)1000 年後

図 5.1-23　Ca 溶液濃度分布

6．今後の課題

本章では，小規模 1 次元事例解析，大規模 3 次元事例解析を通じて，熱－水－応力－化学連成解析コードを実運用ベース（処分場の設計や性能評価サポートコード）とすることを念頭に置いた課題の摘出をならびに対応策について整理する。

6.1 事例解析の実施

熱－水－応力－化学連成解析コードを用いた解析作業を実施した場合, 取り扱う個別現象が，熱，水，応力，物質移行，地球化学と多岐にわたっていることから，解釈には膨大な出力情報から得られる図，デジタル値に基づく分析作業が必要となることから，かなりの時間を要する。解析結果の解釈を合理的に実施するためには，建設・操業・閉鎖後における種々のシナリオを考慮した事例解析を可能な限り実施し, その解釈を知識情報として蓄えておくことが肝要である。また，数多くの事例解析を実施することにより, THMC 解析コードの課題項目や改善項目, これら項目の優先度付けが明確となる。さらに, THMC 多くの事例解析を行ない, 連成効果による因子を摘出することにより，プロジェクトの意義を主張するための情報提供も可能となる。事例テスト解析ケース案を以下に示す。これらの解析は, 多くのテストケースを 1 次元レベルで行うこととする。

- ■ 地下水変遷解析
- ■ 地下施設建設期間中の場の変遷解析
- ■ 操業期間中の場の変遷解析
- ■ 処分場閉鎖後 1,000 年間の場の変遷解析

6.2 解釈支援ツールの作成

本年度開発した THMC 解析コードは，開発時間の制約もあり，簡便的な取り扱いを行っており，必ずしも厳密な処理となっていない（例えば，修正γ，節点濃度－要素濃度変換)。これら，簡便的な取り扱いが，種々のテストケースで，どの程度の精度が確保されているかについては，定量的な評価は実施していない。このことが，解析結果の解釈を行う上で，阻害要因とならないことを確保するためには，異なる手法にて，その影響度を把握しておくことが肝要である。平成 13 年度は，物質移行，地球化学連成解析ツールとして，HYDROGEOCHEM－phreeqe60 を作成した。本年度の THMC と大

きく異なる点は，以下に示す２点である。

- 物質移行（HYDROGEOCHEM）は，トータル濃度，溶液濃度を厳密に取り扱っている。
- phreeqe60 は節点にて化学平衡計算を行っている。

ここでは，THAMES－HYDROGEOCHEM－phreeqe60 の THMC を想定して，節点処理を行う際の検討計画について記載する。

（１）目的

THMC 連成解析システム（図 6.2-1 参照）における物質移行，地球化学連成解析では，緩衝材外側境界などにおける媒体の不連続性の取り扱いや，空間メッシュ内での溶解・沈殿にともなう空隙率，密度，透水係数の変化を考慮する場合が生じる。連成システムには，有限要素法に基づく物質移行モジュール（HYDROGEOCHEM）やビーカ系を対象とした化学平衡モジュール（phreeqe60）などの空間離散化手法の異なる解析コードが混在する。これらのモジュール間でのデータのやり取りには，空間離散化手法の相違に伴うデータの変換をその都度行う必要性が生じる。例えば，有限要素法を前提とした物質移行解析の要素データや材料物性データを，空間離散化手法の異なる他のモジュールでも利用できるよう, 節点値としても属性を受け持たせるケースなどに相当する。これは，通常の有限要素法で質量点を定義することと等価になる。ここでは，図 6.2-1 に示した THAMES-HYDROGEOCHEM-phreeqe60 連成解析系において，上記データ連携の手法と問題点を具体化し，システムに導入するためのソフトウェアモジュールについて概略検討する。

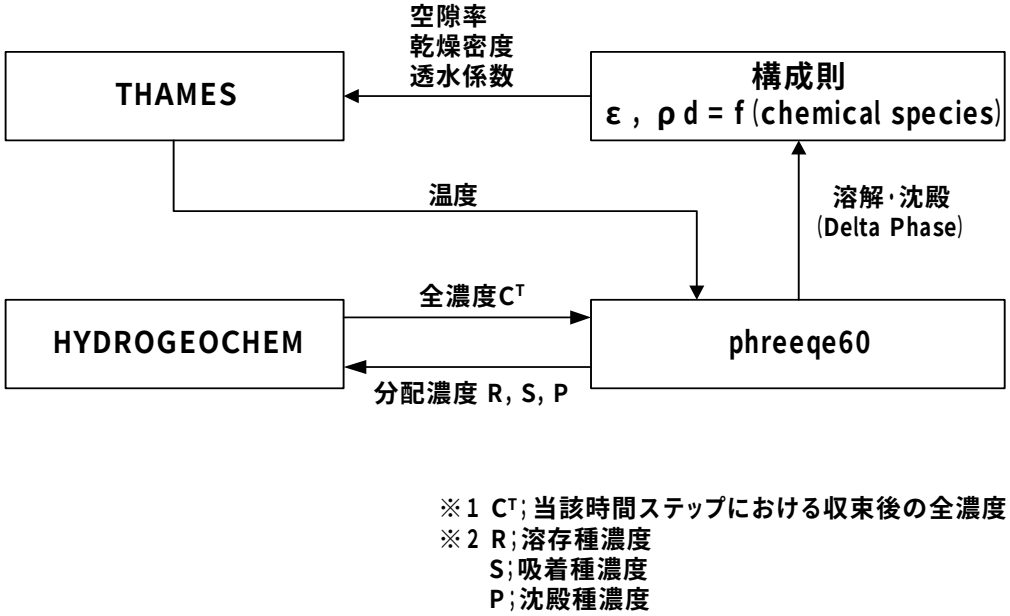


図 6.2-1 THAMES-HYDROGEOCHEM-phreeqe60 連成解析系の概要

（2）実施内容

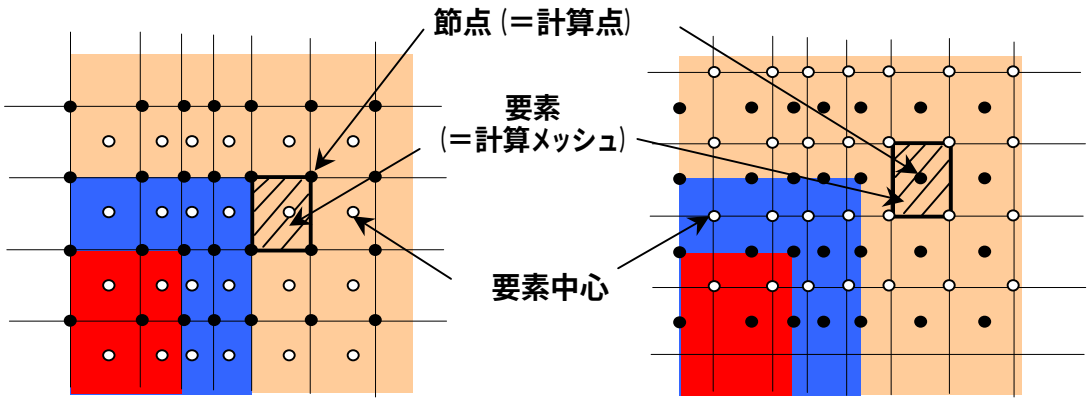
1) モジュール仕様

①「構成則」モジュールにおける計算メッシュと体積の取り扱い

図 6.2-1 に示した各解析モデルにおける主変数（Primary Value）は温度，水相飽和率，濃度等であり，これらを一貫して節点変数として扱うことを考える。「構成則」モジュールでは，化学平衡計算で得られた固相の状態（構成鉱物の質量）に連動して，空隙率，乾燥密度および透水係数を時々刻々と変化させ，TAHMES へ受け渡す。固相の状態に応じた空隙率，乾燥密度の計算には，計算メッシュの体積が必要となる。すなわち，「構成則」モジュールでは空間離散化概念の導入が必要となる。この計算メッシュは，有限要素法により空間離散化を行っている「HYDROGEOCHEM（物質移動解析）」や「THAMES（熱・水・応力解析）」のものとは形式上一致しない（図 6.2-2 参照）。

上記２とおりの計算メッシュについて，ここでは，便宜上図 6.2-2（a）を「タイプ A の体積要素」，図 6.2-2（b）を「タイプ B の体積要素」と呼ぶことにする。

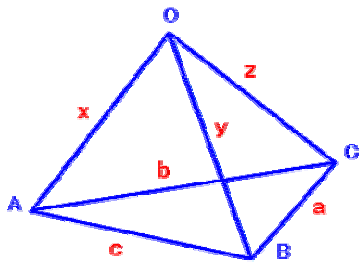
「構成則」モジュールにおける計算メッシュは，図 6.2-2（a）における要素中心を節点とした四辺形格子（２次元の場合）ないし六面体格子（３次元の場合）に対応する。任意形状の六面体の体積は，１２個の四面体に分割することができ，この四面体の体積は以下に示す Heron 公式で求めることができる。



(a) TAHMES, HYDROGEOCHEM　　(b)「構成則」モジュール

図 6.2-2　空間離散化概念の相違による「計算メッシュ」の違い

「構成則」モジュールにおける計算メッシュは、図 6.2-2 (a) に示す要素中心を節点とした四辺形格子 (2次元の場合) ないし六面体格子 (3次元の場合) に対応する。任意形状の六面体の体積は、12個の四面体に分割することができ、この四面体の体積は以下に示す Heron 公式で求めることができる。



$$144V^2=a^2x^2(b^2+c^2-a^2+y^2+z^2-x^2)+b^2y^2(c^2+a^2-b^2+z^2+x^2-y^2)+c^2z^2(a^2+b^2-c^2+x^2+y^2-z^2)$$
$$-a^2y^2z^2-b^2z^2x^2-c^2x^2y^2-a^2b^2c^2$$

図 6.2-3　四面体の体積 (Heron 公式)

② 材料不連続面の取り扱い

上記のとおり，本連成解析系においては，空間離散化の考え方の相違に伴う２とおりの体積要素が存在することになる。

１つは，熱・水・応力連成解析，物質移動解析における有限要素法に基づいた一般的な体積要素（有限要素）に該当するものである（タイプ A の体積要素)。もう１つは，化学平衡計算とその結果に基づく空隙率，密度および透水係数の計算に用いる体積要素である（タイプ B の体積要素)。

前者は，THAMES や HYDROGEOCHEM の有限要素解析モデル作成時に，その体積要素毎に透水係数，熱伝導率および空隙率などの物性情報が割り当てることが前提とされるものである。後者は，前者の体積要素重心をコーナーポイントとした体積要素となる。この場合，緩衝材－岩盤間などの材料不連続領域においては，同一の体積要素内に緩衝材と岩石の双方が存在する状態となり，上記の物性情報を単純に体積要素毎に割り当てることができない。そのため，①phreeqe60 による化学平衡計算に用いる固相条件や②「構成則」モジュールにおける密度，空隙体積として，いずれの物性情報を用いればよいかが重要な位置付けとなる。

本連成解析では，以下に示す考え方に基づき対処することとする。

緩衝材－岩盤間などの材料不連続面に位置する節点（＝計算点）については，化学平衡計算に用いる固相条件として，いずれを前提とすれば良いか判然としない。当該節点における地下水中の元素濃度（＝全濃度）は，物質移動計算により時々刻々と追跡されている。材料不連続面における平衡時の空隙水組成は，タイプ B の体積要素内において空隙水が接している固相領域に依存し，その接触面積が大きい固相により支配されると考えるのが自然である。

空隙水と固相との接触面積の割合がタイプ B の体積要素内における固相の存在割合として代表できるものと仮定すれば，当該節点における空隙水組成（溶解・沈殿反応）は，例えば，以下に示す幾つかの方法によりより見積もることができる。

① 比例分配型　；それぞれの固相条件下で計算した空隙水組成を両者の存在割合で分配させた値として代表させる

② 格子代表型　；体積要素（タイプ B）内の存在割合の大きい固相条件で計算した空隙水組成で代表させる

③ ユーザ指定型；材料不連続部のメッシュ分割を十分精緻に作成し，該当する体積要素の固相条件を入力条件としてユーザが直接指定する。

いずれの方法で固相を設定するかは，着目する系の特性と解析結果や数値的安定性などの精度へ及ぼす影響を把握の上見極める必要がある。これについて，現段階では十分な知見が得られていないため，今後，感度解析等を通じて整備していく必要がある。

当面は，ユーザが直接条件を指定できる上記③の方法で対処するのが適当と考える。

なお, タイプ B の体積要素には, タイプ A の有限要素とは区別した空隙率, 密度等の材料物性データが割り当てられなければならない。タイプ A の体積要素に割り当てられた材料物性データから節点値に割り振る場合は，上記の Heron 公式で見積もられる体積や材料不連続面における支配固相との不整合が生じないよう設定する点に注意を要する。

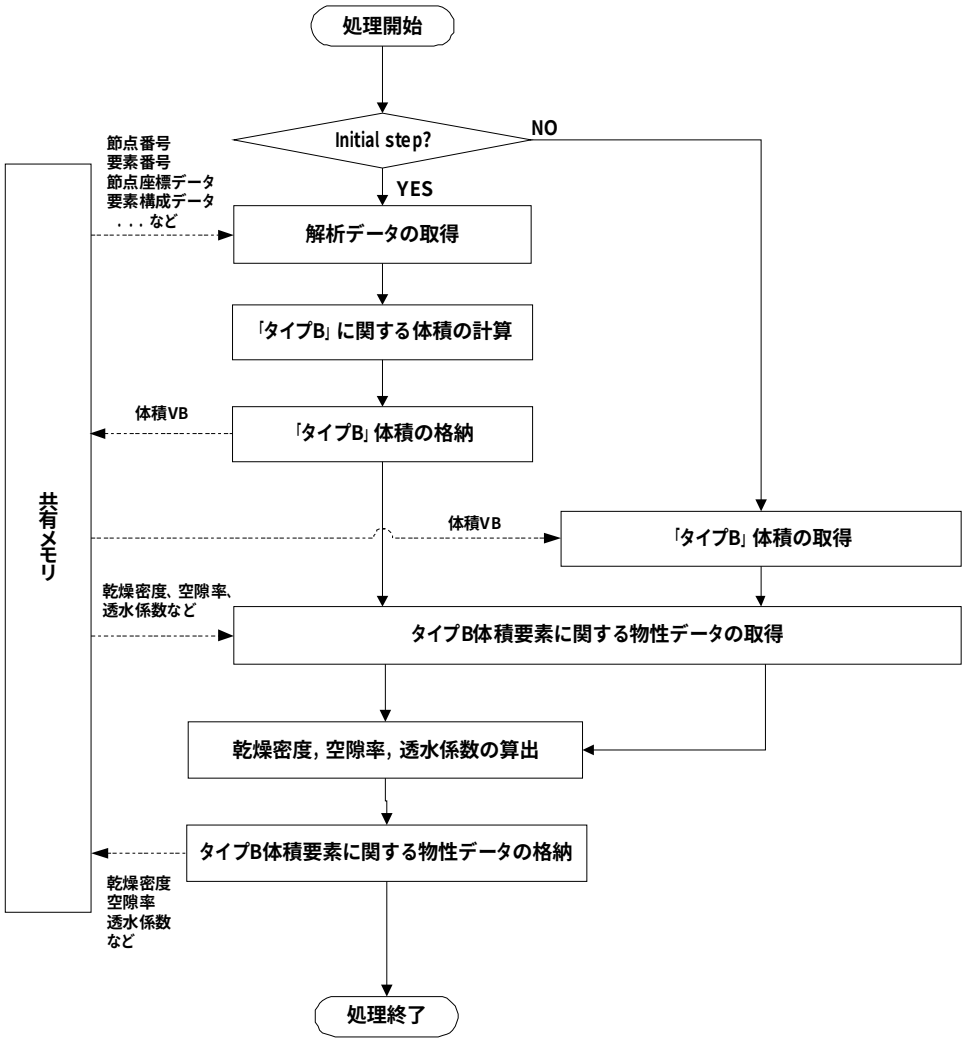


図 6.2-4 節点処理に基づく空間領域の処理モジュール概略フロー

2) モジュールの作成

前記の仕様に基づき，現バージョンの HYDROGEOCHEM－phreeqe60 にモジュールを COUPLYS 環境下に追加し，動作確認として各節点の体積，質量が適切に分配されていることを確認する。

6.3 解析作業の効率化

6.3.1 地球化学計算の並列処理

熱－水－応力－化学連成解析コードにおける地球化学計算は，各時間ステップ毎に全要素に対して行われる。例えば，本年度の解析例では，7220 要素に対して計算が行われおり，全体の計算時間の中で多くの割合を占めている。このため，計算時間短縮のためには，地球化学計算の並列化が有効である。ここで，地球化学計算は，要素毎に独立して行われるため，比較的容易に並列化が可能である。具体的には，主に連成管理プログラムのプロセス制御を，並列化対応とすることで実現することができる。

なお，並列計算に際しては，一つの計算機に複数の CPU を搭載したマルチ CPU 計算機，または，ネットワークに接続された複数の計算機の利用が考えられる（ここでは，導入が困難な並列計算機やクラスター計算機は除外する。）。

前者は，2 から 4 個程度の CPU を搭載したワークステーションであれば，比較的安価であることから容易に導入することができる。後者は，現状の計算機が利用可能であるが，データ授受がネットワーク経由となるため，熱－水－応力－化学連成解析コードにおける地球化学計算のように，計算時間の短い処理を多くの回数，実行するケースでは，ネットワークのトラフィックが増加するため並列化のメリットが少なくなる。このため，並列化に際しては，前者のマルチ CPU 計算機の利用が考えられる。

6.3.2 グラフィカルユーザインタフェース

本年度の連成管理プログラムでは，解析実行中は，コマンドラインに，解析コードの実行状況等のメッセージが出力される。しかしながら，熱－水－応力－化学連成解析コードのように複数の解析コードを，複雑なシーケンスで実行する場合には，解析の実行状況を把握することが困難となっている。このため，今後は，全体の解析に対して，どの部分が実行されているかをリアルタイムに表示するグラフィカルユーザインタフェース（GUI）の開発が望まれる。また，現行，コントロールファイルやデータファイルは，テキストエディタを用いて作成しているが，作業効率化や誤り防止の観点から，これらファイルも GUI を用いて作成することが理想的である。

7. おわりに

高レベル放射性廃棄物地層処分における処分場閉鎖後のニアフィールドの挙動は，廃棄体からの放熱，周辺岩盤から人工バリアへの地下水浸潤，地下水浸潤による緩衝材の膨潤圧の発生，緩衝材／間隙水組成の変化など，熱的，水理学的，力学的，化学的なプロセスが相互に影響することが予想される。

本研究は，地層処分システムにおいて想定される熱－水－応力－化学連成挙動の時間的・空間的な変遷を予測するために，現象理解に基づく数値解析システムの構築を目指すものである。本年度は，緩衝材／間隙水組成の変化といった挙動を捉えるために，熱－水－応力連成モデル，物質移行モデル，地球化学モデルの連成を実現する熱－水－応力－化学連成解析コードを構築し，熱－水－応力－化学連成挙動の事例解析を実施した。主な成果を以下に示す。

（1） 連成管理プログラムの作成

熱－水－応力－化学連成解析コードの汎用性を確保するためは，柔軟な連成解析体系を実現することが肝要である。平成 13 年度にはメモリ管理プログラムを活用した手法で，柔軟な連成解析体系を短期的に実現可能とする見込みが得られた。本年度は，熱-水-応力連成解析，物質移行解析，地球化学解析のプロセスを自動制御し，連成解析全体を管理する連成管理プログラムを開発した。

（2） 物質移行解析コードの機能拡張

地球化学解析コードとの連成を実現するため，平成 13 年度に熱－水－応力連成解析コード THAMES に追加した物質移行解析コードの機能を拡張した。物質移行解析コードは，地球化学解析コードとの連成にあたって必要となる機能を拡張した後に，物質移行-地球化学の連成解析コードを構築，さらに検証解析を行い，機能拡張の適切性を確認した。

（3） 熱－水－応力－化学連成解析コードの構築

熱－水－応力－化学連成解析を実施するためには，各個別現象間の関係を定義

する構成式（THMC 物性・連成モジュール）の導入が必須となる。本年度は，化学反応にともなう密度変化（鉱物の溶解・沈殿による場の変化）や，空隙中の NaCl 溶液濃度の変化にともなう緩衝材の透水変化モジュールについて，調査・検討を実施し，熱－水－応力－化学連成解析コードに導入し，動作確認を行った。

（4） 熱－水－応力－化学連成挙動の事例解析の実施

本年度開発した熱－水－応力－化学連成解析コードの適用性を確認すること，ならびに今後の課題を摘出するため，HLW ニアフィールドを対象として，小規模 1 次元モデル，大規模 3 次元モデルによる事例解析を実施した。

今後の課題としては，連成解析コードを用いた結果の解釈に時間を要することから（現段階では，熱，水，応力，物質移行，地球化学を担当する複数人での共同作業が必須），出きる限り多くの事例解析を実施し，解釈のための知識情報の蓄積を行うとともに，解析コードの改善項目を摘出していく必要がある。これらの作業とは並行に，THMC 物性・連成モジュールを完備するための試験が望まれる。

また，THMC 連成解析を実施し，解釈支援ツールとして例えば，THAMES－HYDROGEOCHEM－phreeqe60 などを準備することにより，本研究で開発した THMC の信頼性や解釈を支援することが可能となる。

さらに，大規模領域の解析を行う際の計算時間の高速化として，地球化学計算の並列分散処理が挙げられる。また，解析結果の解釈を支援するための情報を可能な限り残す必要があるが，既存の解析コードの出力が膨大となることから，出力項目の合理化に加え，再解析実行機能（通称，リスタート機能）を備えておく必要がある。

8．謝辞

本研究の実施にあたり，核燃料サイクル開発機構の関係各位に多大のご指導，ご教示を頂きました。ここに記して感謝致します。

9．参考文献

1) 小峯秀雄：“高レベル放射性廃棄物処分におけるベントナイト粘土の役割と技術開発動向”、粘土科学、第 41 巻、第 4 号、pp.182-189、(2002)
2) Komine, H. :“Evaluation of swelling the exchangeablecations compositions of bentonite and its applicability”, Proc. of the 15th Int. Conf. on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering, Vol. 3, pp.1981-1984, (2001)
3) 動力炉・核燃料開発事業団:“地層処分研究開発の現状”、PNC TN1410 94-094、(1994)
4) 小峯秀雄、緒方信英：“高レベル放射性廃棄物処分のための緩衝材・埋戻し材の膨潤評価式の提案－砂とベントナイトの配合割合およびベントナイト中の陽イオンの種類・組成の影響－”、電力中央研究所研究報告 U99013、(1999)
5) 中野政詩：土の物質移動学、東京大学出版会、(1991)
6) 八幡敏雄：土壌の物理、東京大学出版会、(1975)
7) Hillel, D.：Environmental soil physics, Academic Press, (1998)
8) Noorishad, J. and Tsang, C-F.：“Coupled thermohydro-elasticity phenomena in variable saturated fractured porous rocks – Formulation and numerical solution” In: Stephansson, O., Jing, L. and Tsang, C-F. editors, Coupled thermo-hydro-mechanical processes of fractured media, Developments in Geotechnical Engineering., Vol.79, pp. 93-134, (1996)
9) Nguyen, T.S.：“DECOVALEX II T-H-M in-situ experiment at the Kamaishi Mine, Japan. Report on Task 2C: Prediction of T-H-M response of bentonite and rock mass”, Technical Report Atomic Energy Control Board, Canada, (1999)
10) Chijimatsu, M., Fujita, T., Kobayashi, A. and Nakano, M.：“Experiment and validation of numerical simulation of coupled thermal, hydraulic and mechanical behaviour in the engineered buffer materials”, Int. J. Num. Anal. Meth. Geomech., Vol.24, pp. 403-424, (2000)
11) Donald Langmuir, Aqueous Environmental Geochemistry, Prentice Hall. (1997)