熱-水-応力-化学連成挙動に関する研究()

成果報告書

(核燃料サイクル開発機構 業務委託報告書)

2004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・転載する場合は、下記にお問い合わせください。 〒319-1184 茨城県那珂郡東海村大字村松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 電話:029-282-1122(代表) ファックス:029-282-7980 電子メール:jserv@jnc.go.jp 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) 2004

JNC TJ8400 2004-004 2004 年 2 月

熱-水-応力-化学連成挙動に関する研究()

- 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},雨宮清^{*2}, 塩﨑功^{*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, phreeqc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,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,収束ア ルゴリズムの改良,脱ガス・ガス拡散,濃縮・希釈現象を取り扱うため,物質移行解 析コードの改良を実施した。
- (2) 本研究では,地球化学-物質移行モジュールにおいてイオン交換反応,表面錯体反応, 反応速度モデルを取り扱えるようにした。
- (3)本研究では,緩衝材中での透水係数の変化がCa型化の度合い,緩衝材構成鉱物の溶解・沈殿による密度の変化,塩濃度などの関数として与えられるようにするため,既存の試験データを整理し,連成・物性モジュールを作成し,連成解析コードに導入した。また,物質移行-地球化学の高度化にともない検証解析を実施した。
- (4)本研究では,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。これらの成果を踏まえ,今後の課題についてまとめた。

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

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

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

Yoshinao Ishihara^{*1}, Masakazu Chijimatsu^{*2}, Kiyoshi Ame miya^{*2}, Isao Shiozaki^{*2}, and Takaya Ito^{*1}

Abstract

In order to realize a coupling analysis in the near field of the geological disposal system, the coupling analysis code "COUPLYS(Coupling analysis system)" on the Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) phenomena by THAMES, Dtransu and phreeqc, which are existing analysis code, is developed in this study. And some case analyses on THMC phenomena are carried out by this code.

- (1) Some supporting modules, which include the transfer of dissolution concentration and total concentration (dissolution + precipitation concentration), were prepared as a functional expansion. And in order to add on the function of treat de-gases and gases diffusion, accumulation and dilution phenomena, the mass transport analysis code was modified.
- (2) We have modified reactive transport module to treat ionic exchange, surface reaction and kinetic reaction in the each barrier.
- (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), degradation of buffer material such as Ca-type bentonite and change of concentration of NaCl solutions. After THAMES, Dtransu, phreeqc and the hydraulic conductivity module were installed in COUPLYS(Coupling Analysis), verification study was carried out to check basic function. And we have modified COUPLYS to control coupling process.
- (4) In order to confirm the applicability of the developed THMC analysis code (existing analysis code and COUPLYS), we have carried out case analyses on 1-dimensional and 3-dimensional model which are 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

目

次

1. はじめに1
2. 物質移行モデルの高度化
2.1 脱ガス・ガス拡散を考慮したモデルの検討
2.1.1 モデル化検討2
2.1.2 ガス拡散係数に関する調査5
2.2 濃縮・希釈に関する検討6
2.2.1 モデル化に関する検討6
2.2.2 計算方法
2.3 収束アルゴリズムに関する検討10
2.3.1 離散化方程式10
2.3.2 計算方法11
2.3.3 連成方法16
2.4 物質移行解析コードの整備24
2.4.1 追加変数およびコモンブロック24
2.4.2 境界条件,初期条件25
2.4.3 修正サブルーチン
3. 地球化学モデルの高度化
3.1 脱ガス・ガス拡散を考慮したモデルの検討
3.2 考慮鉱物 , 速度モデル導入に関する検討28
3.2.1 セメント系材料28
3.2.2 速度論モデル
3.3 地球化学解析コードの整備40
4. 熱 - 水 - 応力 - 化学連成解析コードの構築43
4.1 連成解析システムの高度化43
4.1.1 目的および概要43
4.1.2 Multi_PHREEQC の内容43
4.1.3 Multi_PHREEQC の使用方法47
4.2 物性/連成モジュールの拡張48
4.2.1 空隙率変化モジュール48
4.2.2 緩衝材透水係数変化モジュール(飽和状態)53
4.2.3 緩衝材透水係数変化モジュール(不飽和状態)62
4.3 連成解析コードの構築65
4.4 物質移行 - 地球化学モデルの高度化に関する検証
4.4.1 収束アルゴリズムの検証75

4.4.2 脱ガス・ガス拡散機能に関する検証	80
4.4.3 濃縮・希釈に関する検証	101
4.4.4 速度モデルに係る検証	109
5. 熱 - 水 - 応力 - 化学連成挙動の事例解析の実施	118
5.1 解析ケースの設定	118
5.2 事例解析(1 次元)	118
5.2.1 解析条件	118
5.2.2 解析結果および考察	121
5.2.3 事例解析(1 次元)の総括	154
5.3 事例解析(3 次元)	404
5.3.1 解析条件	404
5.3.2 解析結果および考察	405
5.3.3 事例解析(3 次元)の総括	410
6. 今後の課題	543
6.1 連成解析に関する知識ベースの集約	543
6.2 現象モデルに関する課題	543
6.3 リスタート機能の追加	544
6.4 連成解析支援機能の導入	544
6.5 計算時間の高速化	545
7. おわりに	546
8. 謝辞	548
9. 参考文献	549
付録:THMC 平成 15 年度版入力データマニュアル	付-(1)

図目次

🗷 2.2 - 1	THAMES 微小要素での水の変化	9
🕱 2.3 - 1	HGC の計算フロー(サブルーチン GM2DXZ)	13
🕱 2.3 - 2	PHREEQC-Dtransu の計算処理フロー(案)	21
🕱 3.2 - 1	BERNER モデル文献値(C/S -Ca 液濃度)と事例解析用条件の比較	ξ 30
⊠ 3.2-2	BERNER モデル文献値(Si 液濃度-Ca 液濃度)と事例解析用条件の	D
	比較	30
⊠ 3.2-3	BERNER モデル文献値(pH-Ca 液濃度)と事例解析用条件の比較	31
⊠ 3.2-4	速度モデル予備計算結果(バッチ系・未飽和側/方解石)	35
図 3.2-5	速度モデル予備計算結果(バッチ系・過飽和側/方解石)	36
図 3.2-6	速度モデル予備計算結果(バッチ系・過飽和側/方解石・枯渇ケース)	37
図 3.2-7	速度モデル予備計算結果(バッチ系・過飽和側/方解石・黄鉄鉱共存)	38
図 3.2-8	速度モデルを考慮した検証用データセット	39
図 4.1-1	Multi_PHREEQC の概念	44
⊠ 4.1-2	Multi_PHREEQCの処理フロー	45
⊠ 4.1-3	Multi_PHREEQC ディレクトリ構成	47
⊠ 4.2-1	各種ベントナイトの乾燥密度と平衡膨潤圧の関係	58
⊠ 4.2-2	各種ベントナイトの有効粘土密度と平衡膨潤圧の関係	58
⊠ 4.2-3	各種ベントナイトの有効モンモリロナイト密度と平衡膨潤圧の関係	59
× 4.2-4	各種ベントナイトの乾燥密度と透水係数の関係	59
⊠ 4.2-5	各種ベントナイトの有効粘土密度と透水係数の関係	60
⊠ 4.2-6	クニゲル V1 を用いたケイ砂混合体の有効モンモリロナイト密度と	
	透水係数の関係	60
2 4.2-7	透水係数と有効粘土密度の関係(蒸留水および人工海水)	61
⊠ 4.2-8	透水係数の実測値と計算値の比較	61
⊠ 4.2-9	ケイ砂混合体の水分拡散係数(ケイ砂混合率 30%,乾燥密度 1.6Mg/	m ³) 62
⊠ 4.2-10	ケイ砂混合体の水分特性曲線(ケイ砂混合率 30%,乾燥密度 1.6Mg/	m ³)63
⊠ 4.2-11	不飽和透水係数の比較	64
¥ 4.3•1	熱 - 水 - 応力 - 化学連成解析コードの処理フロー	66
⊠ 4.4-1	PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する)
	検証解析条件(初期・境界条件)	76
2 4.4-2	PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する)
	検証解析条件(時間ステップ)	77
⊠ 4.4-3	PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する)

	検証解析結果(pH 分布)	78
図 4.4-4	PHREEQC 導入 , 貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する	
	検証解析結果(溶液濃度分布)	78
図 4.4-5	PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する	
	検証解析結果(沈殿鉱物濃度分布)	79
🛛 4.4-6	脱ガスモデルに関する検証解析条件(初期・境界条件)	81
図 4.4-7	脱ガスモデルに関する検証解析条件(時間ステップ	82
図 4.4-8	脱ガスモデルに関する検証解析結果(0.5年後)	84
🛛 4.4-9	脱ガスモデルに関する検証解析結果(1.0年後)	85
⊠ 4.4-10	ガス拡散モデルに関する検証解析条件(初期・境界条件)	87
⊠ 4.4-11	ガス拡散モデルに関する検証解析条件(時間ステップ)	88
⊠ 4.4-12	ガス拡散モデルに関する検証解析条件	
	(THMC 連成解析コードの処理フロー)	89
⊠ 4.4-13	ガス拡散モデルに関する検証解析結果(ケース1:2年後)	90
⊠ 4.4-14	ガス拡散モデルに関する検証解析結果(ケース 1・ケース 2:2 年後)	90
⊠ 4.4-15	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件(初期・境界条件)	92
⊠ 4.4-16	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件(時間ステップ)	93
🛛 4.4-17	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果	
	(ケース 1・ケース 2:0 日後)	95
⊠ 4.4-18	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果	
	(ケース 1・ケース 2:25 日後)	96
⊠ 4.4-19	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果	
	(ケース 1・ケース 2:50 日後)	97
⊠ 4.4-20	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果	
	(ケース 1・ケース 2・ケース 3:0 日後)	98
⊠ 4.4-21	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果	
	(ケース 1・ケース 2・ケース 3:25 日後)	99
⊠ 4.4-22	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果	
	(ケース1・ケース2・ケース3:50日後)1	.00
⊠ 4.4-23	濃縮/希釈モデルに関する検証解析条件(初期・境界条件)1	.02
⊠ 4.4-24	濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件(時間ステップ)1	.04
⊠ 4.4-25	濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件	
	(THMC連成解析コードの処理フロー)1	.04
¥ 4.4-26	濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析結果 (ケース1)1	.06
⊠ 4.4-27	濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析結果 (ケース2)1	.08
⊠ 4.4-28	速度論モデルに関する検証解析条件(初期・境界条件)1	10

2 4.4-29	速度論モデルに関する検証解析条件(時間ステップ)111
図 4.4-30	速度論モデルに関する検証解析条件
	(THMC連成解析コードの処理フロー)112
⊠ 4.4-31	速度論モデルに関する検証解析結果(ケース1)114
⊠ 4.4-32	速度論モデルに関する検証解析結果(ケース1-メッシュ細分割,
	THMC 連成解析コード:メッシュ 109 分割 ,
	PHREEQC:メッシュ 29 分割) 115
⊠ 4.4-33	速度論モデルに関する検証解析結果(ケース2) 117
図 5.2-1(1)	解析メッシュ分割(空間メッシュ:支保工無しのケース)156
図 5.2-1(2)	解析メッシュ分割(時間メッシュ)157
⊠ 5.2-2	[1 次元ケース 1] 温度分布165
⊠ 5.2-3	[1 次元ケース 1] 体積含水率分布
⊠ 5.2-4	[1 次元ケース 1] 飽和度分布 167
図 5.2-5	[1 次元ケース 1] 乾燥密度分布(全領域)
図 5.2-6	[1 次元ケース 1] 乾燥密度分布 (緩衝材領域) 169
図 5.2-7	[1 次元ケース 1] 乾燥密度分布(岩盤領域)
図 5.2-8	[1 次元ケース 1] 空隙率分布(全領域) 171
図 5.2-9	[1 次元ケース 1] 空隙率分布 (緩衝材領域) 172
図 5.2-10	[1 次元ケース 1] 空隙率分布 (岩盤領域) 173
図 5.2-11	[1 次元ケース 1] 透水係数分布(全領域)
⊠ 5.2-12	[1 次元ケース 1] 透水係数分布 (緩衝材領域)175
⊠ 5.2-13	[1 次元ケース 1] pH 分布176
⊠ 5.2-14	[1 次元ケース 1] pe 分布 177
⊠ 5.2-15	[1 次元ケース 1] Al 溶液濃度分布 178
図 5.2-16	[1 次元ケース 1] C 溶液濃度分布179
図 5.2-17	[1 次元ケース 1] Ca 溶液濃度分布
図 5.2-18	[1 次元ケース 1] Cl 溶液濃度分布181
図 5.2-19	[1 次元ケース 1] Fe 溶液濃度分布 182
図 5.2-20	[1 次元ケース 1] K 溶液濃度分布183
⊠ 5.2-21	[1 次元ケース 1] Mg 溶液濃度分布
⊠ 5.2-22	[1 次元ケース 1] Na 溶液濃度分布185
🛛 5.2-23	[1 次元ケース 1] S 溶液濃度分布
⊠ 5.2-24	[1 次元ケース 1] Si 溶液濃度分布 187
図 5.2-25	[1 次元ケース 1] CO2 ガス濃度分布 188
図 5.2-26	[1 次元ケース 1] Calcite 濃度分布(全領域)189
⊠ 5.2-27	[1 次元ケース 1] Calcite 濃度分布 (緩衝材領域) 190

図 5.2-28	[1 次元ケース 1] Calcite 濃度分布(石盛領域)
図 5.2-29	[1 次元クース 1] Chalcedony 濃度分布(宝領域)
図 5.2-30	[1 次元ケース 1] Chalcedony 濃度分布(綾餌材領域)
図 5.2-31	[1 次元ケース 1] Chalcedony 濃度分布(石盛領域)
図 5.2-32	[1 次元ケース 1] Pyrite 濃度分布(全領域)
図 5.2-33	[1 次元ケース 1] Pyrite 濃度分布(緩衝材領域)
⊠ 5.2-34	[1 次元ケース 1] Pyrite 濃度分布(若盤領域)
⊠ 5.2-35	[1 次元ケース 1] Albite 濃度分布
⊠ 5.2-36	[1 次元ケース 1] Kaolinite 濃度分布
図 5.2·37	[1 次元ケース 1] Magnetite 濃度分布
⊠ 5.2-38	[1 次元ケース 1] Microcline 濃度分布
⊠ 5.2-39	[1 次元ケース 1] NaZ 濃度分布
⊠ 5.2-40	[1 次元ケース 1] CaZ2 濃度分布
⊠ 5.2-41	[1 次元ケース 1] KZ 濃度分布
⊠ 5.2-42	[1 次元ケース 1] MgZ2 濃度分布 208
⊠ 5.2-43 —	[1 次元ケース 1] ZH 濃度分布
⊠ 5.2-44 —	[1 次元ケース 1] Surf_sOH 濃度分布
⊠ 5.2-45	[1 次元ケース 1] Surf_sO-濃度分布208
図 5.2-46	[1 次元ケース 1] Surf_sOH2+濃度分布
図 5.2-47	[1 次元ケース 1] 熱・水に係わるパラメータの経時変化
	(緩衝材内側,1/4)210
図 5.2-48	[1 次元ケース 1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化
	(緩衝材内側,2/4)21
⊠ 5.2-49	[1 次元ケース 1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化
	(緩衝材内側,3/4)212
図 5.2-50	[1 次元ケース 1]イオン交換反応,表面錯体反応に係わる
	パラメータの経時変化(緩衝材内側 , 4/4)
⊠ 5.2-51	[1 次元ケース 1] 熱・水に係わるパラメータの経時変化
	(緩衝材外側,1/4)214
🛛 5.2-52	[1 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化
	(緩衝材外側,2/4)218
🛛 5.2-53	[1 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化
	(緩衝材外側,3/4)216
図 5.2-54	[1 次元ケース 1]イオン交換反応,表面錯体反応に係わる
	パラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4)217
🛛 5.2-55	[1 次元ケース 1] 熱・水に係わるパラメータの経時変化

	(岩盤内側,1/4)	218
図 5.2-56	[1 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変	化
	(岩盤内側,2/4)	219
図 5.2-57	[1 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変	化
	(岩盤内側,3/4)	220
図 5.2-58	[1 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変	化
	(岩盤内側,4/4)	221
⊠ 5.2-59	[1 次元ケース 2] 温度分布	222
図 5.2-60	[1 次元ケース 2] 体積含水率分布	223
⊠ 5.2-61	[1 次元ケース 2] 飽和度分布	224
⊠ 5.2-62	[1 次元ケース 2] 乾燥密度分布(全領域)	225
図 5.2-63	[1 次元ケース 2] 乾燥密度分布(緩衝材領域)	226
⊠ 5.2-64	[1 次元ケース 2] 乾燥密度分布(岩盤領域)	227
図 5.2-65	[1 次元ケース 2] 空隙率分布(全領域)	228
図 5.2-66	[1 次元ケース 2] 空隙率分布(緩衝材領域)	229
図 5.2-67	[1 次元ケース 2] 空隙率分布(岩盤領域)	230
図 5.2-68	[1 次元ケース 2] 透水係数分布(全領域)	231
図 5.2-69	[1 次元ケース 2] 透水係数分布(緩衝材領域)	232
図 5.2-70	[1 次元ケース 2] pH 分布	233
図 5.2-71	[1 次元ケース 2] pe 分布	234
図 5.2-72	[1 次元ケース 2] Al 溶液濃度分布	235
図 5.2-73	[1 次元ケース 2] C 溶液濃度分布	236
⊠ 5.2-74	[1 次元ケース 2] Ca 溶液濃度分布	237
図 5.2-75	[1 次元ケース 2] Cl 溶液濃度分布	238
図 5.2-76	[1 次元ケース 2] Fe 溶液濃度分布	239
図 5.2-77	[1 次元ケース 2] K 溶液濃度分布	240
⊠ 5.2-78	[1 次元ケース 2] Mg 溶液濃度分布	241
⊠ 5.2-79	[1 次元ケース 2] Na 溶液濃度分布	242
⊠ 5.2-80	[1 次元ケース 2] S 溶液濃度分布	243
⊠ 5.2-81	[1 次元ケース 2] Si 溶液濃度分布	244
⊠ 5.2-82	[1 次元ケース 2] CO2 ガス濃度分布	245
⊠ 5.2-83	[1 次元ケース 2] Calcite 濃度分布(全領域)	246
⊠ 5.2-84	[1 次元ケース 2] Calcite 濃度分布(緩衝材領域)	247
図 5.2-85	[1 次元ケース 2] Calcite 濃度分布(岩盤領域)	248
⊠ 5.2-86	[1 次元ケース 2] Chalcedony 濃度分布(全領域)	249
図 5.2-87	[1 次元ケース 2] Chalcedony 濃度分布 (緩衝材領域)	250

义	5.2-88	[1 次元ケース 2] Chalcedony 濃度分布(岩盤領域)	251
义	5.2-89	[1 次元ケース 2] Pyrite 濃度分布(全領域)	252
义	5.2-90	[1 次元ケース 2] Pyrite 濃度分布 (緩衝材領域)	253
义	5.2-91	[1 次元ケース 2] Pyrite 濃度分布(岩盤領域)	254
义	5.2-92	[1 次元ケース 2] Albite 濃度分布	255
义	5.2 - 93	[1 次元ケース 2] Kaolinite 濃度分布	256
义	5.2-94	[1 次元ケース 2] Magnetite 濃度分布	257
义	5.2 - 95	[1 次元ケース 2] Microcline 濃度分布	258
义	5.2-96	[1 次元ケース 2] NaZ 濃度分布	259
义	5.2 - 97	[1 次元ケース 2] CaZ2 濃度分布	260
义	5.2-98	[1 次元ケース 2] KZ 濃度分布	261
义	5.2 - 99	[1 次元ケース 2] MgZ2 濃度分布	262
义	5.2 - 100	[1 次元ケース 2] ZH 濃度分布	263
义	5.2 - 101	[1 次元ケース 2] Surf_sOH 濃度分布	264
义	5.2 - 102	[1 次元ケース 2] Surf_sO-濃度分布	265
义	5.2 - 103	[1 次元ケース 2] Surf_sOH2+濃度分布	266
义	5.2 - 104	[1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
		(緩衝材内側,1/4)	267
义	5.2 - 105	[1次元ケース 2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
		(緩衝材内側,2/4)	268
义	5 2-106		
	0.2 100	[1 八儿ソース 2] 初貝移1] - 地球化子に協力るハノメータの経時支化	
	5.2 100	(緩衝材内側,3/4)	269
义	5.2-100	(1 次元ケース 2) 初員移行 - 地球化子にほわるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる	269
叉	5.2-107	 [1 次元ケース 2] 初員移行 - 地球化子にほわるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) 	269 270
义	5.2-107 5.2-108	 [1 次元ケース 2] 初員移行 - 地球化子に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側, 3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側, 4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 	269 270
図 図	5.2-107 5.2-108	 [1 次元ケース 2] 初員移门 - 地球化子に除わるパワメータの経時変化 (緩衝材内側, 3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側, 4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 1/4) 	269 270 271
义 义	 5.2-100 5.2-107 5.2-108 5.2-109 	 [1 次元ケース 2] 初員移门 - 地球化子に除わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 	269 270 271
図 図 図	5.2-107 5.2-108 5.2-108 5.2-109	 [1 次元ケース 2] 初員移门 - 地球化子にほわるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,2/4) 	269 270 271 272
図 図 図 図	5.2-107 5.2-108 5.2-108 5.2-109 5.2-110	 [1 次元ケース 2] 初賀移门 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,2/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 	 269 270 271 272
図 図 図 図	5.2-107 5.2-108 5.2-109 5.2-110	 [1 次元ケース 2] 初賀移1] - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側, 3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側, 4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 2/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 3/4) 	 269 270 271 272 273
	 5.2-107 5.2-107 5.2-108 5.2-109 5.2-110 5.2-111 	 [1 次元ケース 2] 初賀移1] - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,2/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる 	 269 270 271 272 273
図 図 図 図 図	 5.2-100 5.2-107 5.2-108 5.2-109 5.2-110 5.2-111 	 [1 次元ケース 2] 初賀移1] - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,2/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4) 	 269 270 271 272 273 274
	 5.2 100 5.2 107 5.2 108 5.2 109 5.2 109 5.2 110 5.2 111 5.2 112 	 (1 次元ケース 2) 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,2/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 	 269 270 271 272 273 274
図 図 図 図	 5.2-107 5.2-107 5.2-108 5.2-109 5.2-110 5.2-111 5.2-112 	 [1 次元ケース 2] 初貢移行 - 地球化子に係わるパワメータの経時変化 (緩衝材内側, 3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側, 4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 1/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 2/4) [1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 3/4) [1 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材外側, 4/4) [1 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側, 1/4) 	 269 270 271 272 273 274 275
	 5.2-107 5.2-107 5.2-108 5.2-109 5.2-110 5.2-111 5.2-112 5.2-113 	 (1) 次元ケース 2] 物質移(1) - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,3/4) [1) 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4) [1) 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,1/4) [1) 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,2/4) [1) 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材外側,3/4) [1) 次元ケース 2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4) [1) 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化 (岩盤内側,1/4) [1) 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化 	 269 270 271 272 273 274 275

⊠ 5.2-114	[1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,3/4)	277
⊠ 5.2-115	[1 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,4/4)	278
⊠ 5.2-116	[1 次元ケース 3] 温度分布	279
⊠ 5.2-117	[1 次元ケース 3] 体積含水率分布	280
⊠ 5.2-118	[1 次元ケース 3] 飽和度分布	281
⊠ 5.2-119	[1 次元ケース 3] 乾燥密度分布(全領域)	282
⊠ 5.2-120	[1 次元ケース 3] 乾燥密度分布(緩衝材領域)	283
⊠ 5.2-121	[1 次元ケース 3] 乾燥密度分布(岩盤領域)	284
⊠ 5.2-122	[1 次元ケース 3] 空隙率分布(全領域)	285
⊠ 5.2-123	[1 次元ケース 3] 空隙率分布(緩衝材領域)	286
⊠ 5.2-124	[1 次元ケース 3] 空隙率分布(岩盤領域)	287
⊠ 5.2-125	[1 次元ケース 3] 透水係数分布(全領域)	288
⊠ 5.2-126	[1 次元ケース 3] 透水係数分布(緩衝材領域)	289
図 5.2-127	[1 次元ケース 3] pH 分布	290
⊠ 5.2-128	[1 次元ケース 3] pe 分布	291
⊠ 5.2-129	[1 次元ケース 3] Al 溶液濃度分布	292
⊠ 5.2-130	[1 次元ケース 3] C 溶液濃度分布	293
⊠ 5.2-131	[1 次元ケース 3] Ca 溶液濃度分布	294
⊠ 5.2-132	[1 次元ケース 3] Cl 溶液濃度分布	295
⊠ 5.2-133	[1 次元ケース 3] Fe 溶液濃度分布	296
⊠ 5.2-134	[1 次元ケース 3] K 溶液濃度分布	297
⊠ 5.2-135	[1 次元ケース 3] Mg 溶液濃度分布	298
⊠ 5.2-136	[1 次元ケース 3] Na 溶液濃度分布	299
⊠ 5.2-137	[1 次元ケース 3] S 溶液濃度分布	300
⊠ 5.2-138	[1 次元ケース 3] Si 溶液濃度分布	301
⊠ 5.2-139	[1 次元ケース 3] CO2 ガス濃度分布	302
⊠ 5.2-140	[1 次元ケース 3] Calcite 濃度分布(全領域)	303
⊠ 5.2-141	[1 次元ケース 3] Calcite 濃度分布(緩衝材領域)	304
⊠ 5.2-142	[1 次元ケース 3] Calcite 濃度分布(岩盤領域)	305
⊠ 5.2-143	[1 次元ケース 3] Chalcedony 濃度分布(全領域)	306
⊠ 5.2-144	[1 次元ケース 3] Chalcedony 濃度分布(緩衝材領域)	307
⊠ 5.2-145	[1 次元ケース 3] Chalcedony 濃度分布(岩盤領域)	308
⊠ 5.2-146	[1 次元ケース 3] Pyrite 濃度分布(全領域)	309
⊠ 5.2-147	[1 次元ケース 3] Pyrite 濃度分布(緩衝材領域)	310

⊠ 5.2-148	[1 次元ケース 3] Pyrite 濃度分布(岩盤領域)	311
⊠ 5.2-149	[1 次元ケース 3] NA-MONT(支保工領域)	312
⊠ 5.2-150	[1 次元ケース 3] Albite 濃度分布	313
⊠ 5.2-151	[1 次元ケース 3] Kaolinite 濃度分布	314
⊠ 5.2-152	[1 次元ケース 3] Magnetite 濃度分布	315
⊠ 5.2-153	[1 次元ケース 3] Microcline 濃度分布	316
⊠ 5.2-154	[1 次元ケース 3] CaH2SiO4 濃度分布(支保工領域)	317
図 5.2-155	[1 次元ケース 3] SiO2 濃度分布(支保工領域)	318
図 5.2-156	[1 次元ケース 3] NaZ 濃度分布	319
図 5.2-157	[1 次元ケース 3] CaZ2 濃度分布	320
図 5.2-158	[1 次元ケース 3] KZ 濃度分布	321
図 5.2-159	[1 次元ケース 3] MgZ2 濃度分布	322
⊠ 5.2-160	[1 次元ケース 3] ZH 濃度分布	323
⊠ 5.2-161	[1 次元ケース 3] Surf_sOH 濃度分布	324
⊠ 5.2-162	[1 次元ケース 3] Surf_sO-濃度分布	325
⊠ 5.2-163	[1 次元ケース 3] Surf_sOH2+濃度分布	326
⊠ 5.2-164	[1 次元ケース 3] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,1/5)	327
⊠ 5.2-165	[1 次元ケース 3] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	Ľ
	(緩衝材内側,2/5)	328
⊠ 5.2-166	[1 次元ケース 3] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	Ľ
	(緩衝材内側,3/5)	329
⊠ 5.2-167	[1 次元ケース 3] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	Ľ
	(緩衝材内側,4/5)	330
⊠ 5.2-168	[1 次元ケース 3] イオン交換反応 , 表面錯体反応に係わる	
	パラメータの経時変化(緩衝材内側,5/5)	331
⊠ 5.2-169	[1 次元ケース 3] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材外側,1/5)	332
図 5.2-170	[1 次元ケース 3] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	Ł
	(緩衝材外側,2/5)	333
図 5.2-171	[1 次元ケース 3] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	Ł
	(緩衝材外側,3/5)	334
図 5.2-172	[1 次元ケース 3] イオン交換反応 , 表面錯体反応に係わる	
	パラメータの経時変化(緩衝材外側,5/5)	335
⊠ 5.2-173	[1 次元ケース 3] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,1/4)	336

⊠ 5.2-174	[1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,2/4)	337
図 5.2-175	[1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,3/4)	338
⊠ 5.2-176	[1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,4/4)	339
図 5.2-177	[1 次元ケース 4] 温度分布	340
図 5.2-178	[1 次元ケース 4] 体積含水率分布	341
図 5.2-179	[1 次元ケース 4] 飽和度分布	342
図 5.2-180	[1 次元ケース 4] 乾燥密度分布(全領域)	343
⊠ 5.2-181	[1 次元ケース 4] 乾燥密度分布(緩衝材領域)	344
⊠ 5.2-182	[1 次元ケース 4] 乾燥密度分布(岩盤領域)	345
⊠ 5.2-183	[1 次元ケース 4] 空隙率分布(全領域)	346
図 5.2-184	[1 次元ケース 4] 空隙率分布(緩衝材領域)	347
⊠ 5.2-185	[1 次元ケース 4] 空隙率分布(岩盤領域)	348
⊠ 5.2-186	[1 次元ケース 4] 透水係数分布(全領域)	349
⊠ 5.2-187	[1 次元ケース 4] 透水係数分布(緩衝材領域)	350
図 5.2-188	[1 次元ケース 4] pH 分布	351
⊠ 5.2-189	[1 次元ケース 4] pe 分布	352
図 5.2-190	[1 次元ケース 4] Al 溶液濃度分布	353
図 5.2-191	[1 次元ケース 4] C 溶液濃度分布	354
⊠ 5.2-192	[1 次元ケース 4] Ca 溶液濃度分布	355
⊠ 5.2-193	[1 次元ケース 4] Cl 溶液濃度分布	356
⊠ 5.2-194	[1 次元ケース 4] Fe 溶液濃度分布	357
図 5.2-195	[1 次元ケース 4] K 溶液濃度分布	358
⊠ 5.2-196	[1 次元ケース 4] Mg 溶液濃度分布	359
図 5.2-197	[1 次元ケース 4] Na 溶液濃度分布	360
⊠ 5.2-198	[1 次元ケース 4] S 溶液濃度分布	361
⊠ 5.2-199	[1 次元ケース 4] Si 溶液濃度分布	362
図 5.2-200	[1 次元ケース 4] CO2 ガス濃度分布	363
⊠ 5.2-201	[1 次元ケース 4] Calcite 濃度分布(全領域)	364
⊠ 5.2-202	[1 次元ケース 4] Calcite 濃度分布(緩衝材領域)	365
図 5.2-203	[1 次元ケース 4] Calcite 濃度分布(岩盤領域)	366
⊠ 5.2-204	[1 次元ケース 4] Chalcedony 濃度分布(全領域)	367
図 5.2-205	[1 次元ケース 4] Chalcedony 濃度分布(緩衝材領域)	368
図 5.2-206	[1 次元ケース 4] Chalcedony 濃度分布(岩盤領域)	369

図 5.2-207	[1 次元ケース 4] Pyrite 濃度分布(全領域)	370
⊠ 5.2-208	[1 次元ケース 4] Pyrite 濃度分布(緩衝材領域)	371
⊠ 5.2-209	[1 次元ケース 4] Pyrite 濃度分布(岩盤領域)	372
⊠ 5.2-210	[1 次元ケース 4] NA-MONT(支保工領域)	373
⊠ 5.2-211	[1 次元ケース 4] Albite 濃度分布 5	374
⊠ 5.2-212	[1 次元ケース 4] Kaolinite 濃度分布	375
⊠ 5.2-213	[1 次元ケース 4] Magnetite 濃度分布	376
⊠ 5.2-214	[1 次元ケース 4] Microcline 濃度分布	377
⊠ 5.2-215	[1 次元ケース 4] CaH2SiO4 濃度分布(支保工領域)	378
⊠ 5.2-216	[1 次元ケース 4] SiO2 濃度分布(支保工領域)	379
🛛 5.2-217	[1 次元ケース 4] NaZ 濃度分布	380
⊠ 5.2-218	[1 次元ケース 4] CaZ2 濃度分布 5	381
⊠ 5.2-219	[1 次元ケース 4] KZ 濃度分布	382
⊠ 5.2-220	[1 次元ケース 4] MgZ2 濃度分布	383
⊠ 5.2-221	[1 次元ケース 4] ZH 濃度分布	384
⊠ 5.2-222	[1 次元ケース 4] Surf_sOH 濃度分布	385
⊠ 5.2-223	[1 次元ケース 4] Surf_sO-濃度分布	386
⊠ 5.2-224	[1 次元ケース 4] Surf_sOH2+濃度分布	387
⊠ 5.2-225	[1 次元ケース 4] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,1/5)5	388
⊠ 5.2-226	[1 次元ケース 4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,2/5)	389
🛛 5.2-227	[1 次元ケース 4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,3/5)	390
⊠ 5.2-228	[1 次元ケース 4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,4/5)	391
⊠ 5.2-229	[1 次元ケース 4] イオン交換反応 , 表面錯体反応に係わる	
	パラメータの経時変化(緩衝材内側,5/5)	392
⊠ 5.2-230	[1 次元ケース 4] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材外側,1/5)	393
⊠ 5.2-231	[1 次元ケース 4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材外側,2/5)	394
⊠ 5.2-232	[1 次元ケース 4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材外側,3/5)	395
⊠ 5.2-233	[1 次元ケース 4] イオン交換反応 , 表面錯体反応に係わる	
	パラメータの経時変化(緩衝材外側,5/5)	396

⊠ 5.2-234	[1 次元ケース 4] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,1/4)	397
⊠ 5.2-235	[1次元ケース4]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,2/4)	398
⊠ 5.2-236	[1次元ケース 4]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側 , 3/4)	399
⊠ 5.2-237	[1次元ケース4]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,4/4)	400
図 5.2-238	pH の比較(ケース 3:平衡モデル,ケース 5:速度モデル,1/2)	401
⊠ 5.2-238	pH の比較(ケース 3:平衡モデル , ケース 5:速度モデル , 2/2)	402
⊠ 5.2-239	pH の比較(ケース 4:平衡モデル , ケース 6:速度モデル)	403
⊠ 5.3-1	解析メッシュ分割図	411
⊠ 5.3-2	大規模 3 次元事例解析用ガラス固化体発熱特性	412
⊠ 5.3-3	大規模 3 次元事例解析評価ラインおよび評価点	412
⊠ 5.3-4	[3 次元ケース 1] 温度分布	419
⊠ 5.3-5	[3 次元ケース 1] 体積含水率分布	420
図 5.3-6	[3 次元ケース 1] 飽和度分布	421
⊠ 5.3-7	[3 次元ケース 1] 乾燥密度分布(全領域)	422
図 5.3-8	[3 次元ケース 1] 乾燥密度分布(緩衝材領域)	423
図 5.3-9	[3 次元ケース 1] 乾燥密度分布(岩盤領域)	424
⊠ 5.3-10	[3 次元ケース 1] 空隙率分布(全領域)	425
⊠ 5.3-11	[3 次元ケース 1] 空隙率分布(緩衝材領域)	426
⊠ 5.3-12	[3 次元ケース 1] 空隙率分布(岩盤領域)	427
⊠ 5.3-13	[3 次元ケース 1] 透水係数分布(全領域)	428
⊠ 5.3-14	[3 次元ケース 1] 透水係数分布(緩衝材領域)	429
⊠ 5.3-15	[3 次元ケース 1] pH 分布	430
⊠ 5.3-16	[3 次元ケース 1] pe 分布	431
⊠ 5.3-17	[3 次元ケース 1] Al 溶液濃度分布	432
⊠ 5.3-18	[3 次元ケース 1] C 溶液濃度分布	433
⊠ 5.3-19	[3 次元ケース 1] Ca 溶液濃度分布	434
🛛 5.3-20	[3 次元ケース 1] Cl 溶液濃度分布	435
⊠ 5.3-21	[3 次元ケース 1] Fe 溶液濃度分布	436
⊠ 5.3-22	[3 次元ケース 1] K 溶液濃度分布	437
⊠ 5.3-23	[3 次元ケース 1] Mg 溶液濃度分布	438
⊠ 5.3-24	[3 次元ケース 1] Na 溶液濃度分布	439
⊠ 5.3-25	[3 次元ケース 1] S 溶液濃度分布	440

🛛 5.3-26	[3 次元ケース 1] Si 溶液濃度分布	441
🛛 5.3-27	[3 次元ケース 1] CO2 ガス濃度分布	442
⊠ 5.3-28	[3 次元ケース 1] Calcite 濃度分布(全領域)	443
⊠ 5.3-29	[3 次元ケース 1] Calcite 濃度分布(緩衝材領域)	444
図 5.3-30	[3 次元ケース 1] Calcite 濃度分布(岩盤領域)	445
⊠ 5.3-31	[3 次元ケース 1] Chalcedony 濃度分布(全領域)	446
⊠ 5.3-32	[3 次元ケース 1] Chalcedony 濃度分布(緩衝材領域)	447
⊠ 5.3-33	[3 次元ケース 1] Chalcedony 濃度分布(岩盤領域)	448
⊠ 5.3-34	[3 次元ケース 1] Pyrite 濃度分布(全領域)	449
⊠ 5.3-35	[3 次元ケース 1] Pyrite 濃度分布(緩衝材領域)	450
⊠ 5.3-36	[3 次元ケース 1] Pyrite 濃度分布(岩盤領域)	451
⊠ 5.3-37	[3 次元ケース 1] Albite 濃度分布	452
図 5.3-38	[3 次元ケース 1] Kaolinite 濃度分布	453
図 5.3-39	[3 次元ケース 1] Magnetite 濃度分布	454
⊠ 5.3-40	[3 次元ケース 1] Microcline 濃度分布	455
⊠ 5.3-41	[3 次元ケース 1] NaZ 濃度分布	456
⊠ 5.3-42	[3 次元ケース 1] CaZ2 濃度分布	457
⊠ 5.3-43	[3 次元ケース 1] KZ 濃度分布	458
⊠ 5.3-44	[3 次元ケース 1] MgZ2 濃度分布	459
⊠ 5.3-45	[3 次元ケース 1] ZH 濃度分布	460
⊠ 5.3-46	[3 次元ケース 1] Surf_sOH 濃度分布	461
⊠ 5.3-47	[3 次元ケース 1] Surf_sO-濃度分布	462
図 5.3-48	[3 次元ケース 1] Surf_sOH2+濃度分布	463
图 5.3-49	[3 次元ケース 1] 熱・水に係わるハラメータの経時変化	
		464
図 5.3-50		40.
		465
¥ 5.3•51		100
W	(綾御材内側, 3/4)	466
X 0.3 ⁻ 02	[3 从儿グース 1] イオノ文換反心、衣面頭体反心に添わるパニメータの経時亦化(經衝対中側 4/4)	467
図 5 9-59	ハノスークの経時支化(緩倒が内側,4/4)	407
⊠ 9.9-99		168
₩ 5 9-5 <i>1</i>	し酸国物/1間, 14)	400
四 0.0 04		160
፟፟፟፟፟ \$ 3-55	(減回1971円,4/4) · ·································	409
<u>n</u> 0.0 00	し ハルノーハ 1 17 貝 12 1 2 2 3 10 丁に 11 1 2 ハノハーノ い 社 时 久 化	

	(緩衝材外側,3/4)4	70
図 5.3-56	[3 次元ケース 1] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる	
	パラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4)4	71
図 5.3-57	[3 次元ケース 1] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,1/4)4	72
図 5.3-58	[3 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,2/4)4	73
図 5.3-59	[3 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,3/4)4	74
図 5.3-60	[3 次元ケース 1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(岩盤内側,4/4)4	75
⊠ 5.3-61	[3 次元ケース 2] 温度分布4	76
図 5.3-62	[3 次元ケース 2] 体積含水率分布4	77
図 5.3-63	[3 次元ケース 2] 飽和度分布 4	78
図 5.3-64	[3 次元ケース 2] 乾燥密度分布(全領域)4	79
図 5.3-65	[3 次元ケース 2] 乾燥密度分布(緩衝材領域) 4	80
図 5.3-66	[3 次元ケース 2] 乾燥密度分布(岩盤領域)4	81
図 5.3-67	[3 次元ケース 2] 空隙率分布(全領域)4	82
図 5.3-68	[3 次元ケース 2] 空隙率分布(緩衝材領域)4	83
図 5.3-69	[3 次元ケース 2] 空隙率分布(岩盤領域)4	84
図 5.3-70	[3 次元ケース 2] 透水係数分布(全領域)4	85
図 5.3-71	[3 次元ケース 2] 透水係数分布(緩衝材領域) 4	86
図 5.3-72	[3 次元ケース 2] pH 分布 4	87
図 5.3-73	[3 次元ケース 2] pe 分布4	88
図 5.3-74	[3 次元ケース 2] Al 溶液濃度分布 4	89
図 5.3-75	[3 次元ケース 2] C 溶液濃度分布 4	90
図 5.3-76	[3 次元ケース 2] Ca 溶液濃度分布 4	91
🛛 5.3-77	[3 次元ケース 2] Cl 溶液濃度分布4	92
🛛 5.3-78	[3 次元ケース 2] Fe 溶液濃度分布4	93
🛛 5.3-79	[3 次元ケース 2] K 溶液濃度分布4	94
図 5.3-80	[3 次元ケース 2] Mg 溶液濃度分布 4	95
⊠ 5.3-81	[3 次元ケース 2] Na 溶液濃度分布4	96
⊠ 5.3-82	[3 次元ケース 2] S 溶液濃度分布4	97
図 5.3-83	[3 次元ケース 2] Si 溶液濃度分布4	98
図 5.3-84	[3 次元ケース 2] CO2 ガス濃度分布4	99
🛛 5.3-85	[3 次元ケース 2] Calcite 濃度分布(全領域)5	00

図 5.3-86	[3 次元ケース 2] Calcite 濃度分布(緩衝材領域)	01
⊠ 5.3-87	[3 次元ケース 2] Calcite 濃度分布(岩盤領域)	02
図 5.3-88	[3次元ケース 2] Chalcedony 濃度分布(全領域)	03
図 5.3-89	[3 次元ケース 2] Chalcedony 濃度分布(緩衝材領域)	04
図 5.3-90	[3 次元ケース 2] Chalcedony 濃度分布(岩盤領域)	05
⊠ 5.3-91	[3 次元ケース 2] Pyrite 濃度分布(全領域)	06
⊠ 5.3-92	[3 次元ケース 2] Pyrite 濃度分布(緩衝材領域)	07
図 5.3-93	[3 次元ケース 2] Pyrite 濃度分布(岩盤領域)5	08
⊠ 5.3-94	[3 次元ケース 2] Albite 濃度分布	09
🗵 5.3-95	[3 次元ケース 2] Kaolinite 濃度分布5	10
🗵 5.3-96	[3 次元ケース 2] Magnetite 濃度分布5	11
⊠ 5.3-97	[3 次元ケース 2] Microcline 濃度分布5	12
⊠ 5.3-98	[3 次元ケース 2] NaZ 濃度分布5	13
⊠ 5.3-99	[3 次元ケース 2] CaZ2 濃度分布 5	14
図 5.3-100	[3 次元ケース 2] KZ 濃度分布5	15
⊠ 5.3-101	[3 次元ケース 2] MgZ2 濃度分布5	16
⊠ 5.3-102	[3 次元ケース 2] ZH 濃度分布5	17
🕱 5.3-103	[3 次元ケース 2] Surf_sOH 濃度分布 5	18
⊠ 5.3-104	[3 次元ケース 2] Surf_sO-濃度分布5	19
⊠ 5.3-105	[3 次元ケース 2] Surf_sOH2+濃度分布	20
⊠ 5.3-106	[3 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,1/4)5	21
図 5.3-107	[3 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,2/4)5	22
図 5.3-108	[3 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材内側,3/4)5	23
図 5.3-109	[3 次元ケース 2] イオン交換反応 , 表面錯体反応に係わる	
	パラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4)5	24
図 5.3-110	[3 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材外側,1/4)5	25
🗵 5.3-111	[3 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材外側,2/4)5	26
⊠ 5.3-112	[3 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化	
	(緩衝材外側,3/4)5	27
⊠ 5.3-113	[3 次元ケース 2] イオン交換反応 , 表面錯体反応に係わる	
	パラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4)5	28

⊠ 5.3-114	[3 次元ケース 2] 熱・水に係わるパラメータの経時変化
	(岩盤内側,1/4)
⊠ 5.3-115	[3 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化
	(岩盤内側,2/4)
⊠ 5.3-116	[3 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化
	(岩盤内側,3/4)
🛛 5.3-117	[3 次元ケース 2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化
	(岩盤内側,4/4)
⊠ 5.3-118	[3 次元ケース 1] 温度分布533
⊠ 5.3-119	[3 次元ケース 1] 体積含水率分布 534
⊠ 5.3-120	[3 次元ケース 1] 空隙率分布 535
⊠ 5.3-121	[3 次元ケース 1] pH 分布
⊠ 5.3-122	[3 次元ケース 1] pe 分布 537
⊠ 5.3-123	[3 次元ケース 2] 温度分布
⊠ 5.3-124	[3 次元ケース 2] 体積含水率分布 539
⊠ 5.3-125	[3 次元ケース 2] 空隙率分布
⊠ 5.3-126	[3 次元ケース 2] pH 分布
⊠ 5.3-127	[3 次元ケース 2] pe 分布

表目次

表 2.1-1	ガス成分の移行特性5
表 2.3-1	サブルーチン GM2DXZ の処理概要14
表 2.3-2	PHREEQC-Dtransu の繰り返し計算の概要
表 2.4-1	ブロックコモンの内容 24
表 2.4-2	変数一覧表24
表 2.4-3	境界条件,初期濃度分布ファイルフォーマット25
表 2.4-4	修正 γ , ε ファイルフォーマット25
表 3.2-1	BERNER モデル CSH の熱力学データ29
表 3.3-1	地球化学モジュール PHREEQC 改良項目一覧 (2/1)
表 3.3-1	地球化学モジュール PHREEQC 改良項目一覧 (2/2)
表 4.1-1	Multi_PHREEQC の入力仕様並びに入力例
表 4.2-1	緩衝材構成鉱物51
表 4.2-2	緩衝材構成鉱物濃度の設定方法52
表 4.2-3	緩衝材構成鉱物濃度の設定方法53
表 4.2-4	クニゲル V1 および Ca 型化したクニゲル V1 の成分分析結果57
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧(1/8)67
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧(2/8)
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧(3/8)
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧(4/8)
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧 (5/8)
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧(6/8)
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧 (7/8)
表 4.3-1	各モジュールにおける入出力情報一覧 (8/8)
表 4.4-1	PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する
	検証解析条件(THAMES 入力データ) 76
表 4.4-2	PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する
	検証解析条件 (Dtransu 入力データ)
表 4.4-3	PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する
	検証解析条件(PHREEQC 入力データ)
表 4.4-4	脱ガスモデルに関する検証解析条件(THAMES 入力データ)81
表 4.4-5	脱ガスモデルに関する検証解析条件 (Dtransu 入力データ)
表 4.4-6	脱ガスモデルに関する検証解析条件(PHREEQC 入力データ82
表 4.4-7	ガス拡散モデルに関する検証解析条件(THAMES 入力データ) 87

表 4.4-8	ガス拡散モデルに関する検証解析条件(Dtransu 入力データ)
表 4.4-9	ガス拡散モデルに関する検証解析条件(PHREEQC 入力データ) 88
表 4.4-10	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件
	(THAMES 入力データ)
表 4.4-11	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件
	(Dtransu 入力データ
表 4.4-12	脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件
	(PHREEQC 入力データ)
表 4.4-13	濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件(THAMES 入力データ) 102
表 4.4-14	濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件 (Dtransu 入力データ 103
表 4.4-15	濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件(PHREEQC 入力データ) 103
表 4.4-16	速度論モデルに関する検証解析条件111
表 5.1-1	1次元事例解析に係る解析ケース158
表 5.2-1	岩盤領域の材料物性値(THAMES 入力条件) 159
表 5.2-2	オーバーパック・緩衝材領域の材料物性値(THAMES 入力条件) 160
表 5.2-3	Dtransu 入力条件161
表 5.2-4	初期溶液濃度条件 161
表 5.2-5	緩衝材構成鉱物の初期濃度条件162
表 5.2-6	岩体構成鉱物の初期濃度条件163
表 5.2-7	緩衝材中の地球化学計算条件164
表 5.2-8	スメクタイトの 反応速度関連情報164
表 5.3-1	3次元事例解析に係る解析ケース413
表 5.3-2	3 次元事例解析入力情報(THAMES)414
表 5.3-3	3 次元事例解析入力情報 (Dtransu)414
表 5.3-4	初期溶液濃度条件 415
表 5.3-5	緩衝材,埋め戻し材構成鉱物の初期濃度条件
表 5.3-6	岩体構成鉱物の初期濃度条件417
表 5.3-7	緩衝材中の地球化学計算条件

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物(High-Level-Waste, HLW)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 (Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical, THMC)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 COUPLYS(Coupling System)を作成し, 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。平成 14 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。

本年度は,平成14年度に開発した熱-水-応力-化学連成解析コードについて,物質移 行モデルの高度化,地球化学モデルの高度化,連成解析システムの高度化,物性/連成モジ ュールの拡張を実施した。並びに開発コードを用いて,第2次取りまとめ環境条件での熱-水-応力-化学連成挙動の事例解析を実施した。

- 1 -

JNC TJ8400 2004-004

2. 物質移行モデルの高度化

本章では,高レベル放射性廃棄物地下施設周辺で想定される現象として,脱ガス・ガス 拡散,濃縮・希釈現象に着目し,これらの現象モデルについて検討した。更に検討したモ デルを昨年度導入した物質移行モデルに導入した。

2.1 脱ガス・ガス拡散を考慮したモデルの検討

平成 14 年度の物質移行モデルは,鉱物の溶解/沈殿と水溶性化学種の液相中の移行のみ を取り扱うもので,液相-気相間の脱ガスを考えない「閉鎖系」の取り扱いであった。本 年度は,鉱物の溶解/沈殿と水溶性化学種の液相中の移行に加えて,O₂,CO₂等の化学反 応・脱ガスと気相中のガス拡散を考慮した物質移行モデルを構築した。並びに開発モデル に必要となるガスの拡散係数について調査を行った。

2.1.1 モデル化検討

脱ガス・ガス拡散を考慮した THMC (Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical)連成モデ ルにおける物質移行方程式は,重量濃度を用いて次式で表される。

$$\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho_{l} q_{l} C_{\langle n \rangle} \right) - \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho_{l} \theta D_{ij} \frac{\partial C_{\langle n \rangle}}{\partial x_{j}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(D_{g,\langle n \rangle} \frac{\partial \rho_{g,\langle n \rangle}}{\partial x_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_{l} \theta T_{\langle n \rangle} \right) = 0 \quad (1)$$

ただし, θ : 体積含水率(=nS)

 $\rho_{g,\leq n>}$:成分 n のガス密度 [kg/m³]

(1)式中の分散係数テンソル D_{ii} およびガス拡散係数 $D_{p,<n>}$ は次式で表される。

$$D_{ij} = \alpha_T \left\| V \right\| \delta_{ij} + \left(\alpha_L - \alpha_T \right) \frac{V_i V_j}{\left\| V \right\|} + \alpha_m \tau \delta_{ij}$$
⁽²⁾

$$D_{g,} = \tau n (1-S) D_{g,}^0 \frac{P_0}{P} \left(\frac{T}{T_0}\right)^l$$
(3)

ここで, $D_{q,<n>}^0$: 成分 n の標準状態での大気中のガス拡散係数 $[m^{2/s}]$

- τ: 屈曲度[-]
- n: 空隙率[-]
- S: 飽和度[-]
- *P*₀: 標準状態圧力(1 atom = 101,325 Pa)

- *P*: 圧力 [Pa]
- *T*₀: 標準状態温度(273.15 K)
- *T*: 温度 [K]
- 1: 温度依存係数 [-]

一方,(1)式中のトータル濃度 Tは,対象とする微小セル内の溶液相,収着相,沈殿相, 気相に存在する元素のマスバランスから,次式で表される。(ここでは,収着も含めている。)

$$VT = \theta V C + (1-n)VS + VP + (n-\theta)VG$$

$$\therefore T = \theta C + (1-n)S + P + (n-\theta)G$$
(4)

- ここで, V: 微小セルの体積 [m³_Cell]
 - θ: 微小セルの体積含水率 [-]
 - *n*: 微小セルの間隙率 [-]
 - T: 微小セル内の全元素濃度 [mol/m³_Cell] (<u>分母はセル体積</u>)
 - C: 微小セル内の溶液相中の元素濃度 [mol/m³_Water](分母は液相体積)
 - S: 微小セル内の収着相中の元素濃度 [mol/m³_Solid] (分母は固相体積)
 - P: 微小セル内の沈殿相中の元素濃度 [mol/m³_Cell] (分母はセル体積)
 - G: 微小セル内の気相中の元素濃度 [mol/m³_Air] (分母は気相体積)

ここで,(4)式の単位系(体積濃度)を用いて(1)式を書き直す。(1)式中のガス密度 ρ_a [kg/m³] は,気相中の元素濃度から次式で計算できる。

$$\rho_{g, } = G_{} \bullet A_{} \bullet 10^{-3}$$
(5)

ここで, A: ガス成分の分子量 [g/mol]

これを(1)式に代入すると、体積濃度を用いた物質移行方程式は次式となる*)。

$$\frac{\partial}{\partial x_{i}} (q_{l} C_{}) - \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C_{}}{\partial x_{j}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(D_{g,} \frac{A_{}}{1000} \frac{\partial G_{}}{\partial x_{i}} \right) + \frac{\partial T_{}}{\partial t} = 0$$
(6)

(6)式中のトータル濃度 *T*は,補正係数 γ を用いて,液相濃度で線型近似する。 $T_{<n>} = \gamma_{<n>} (\theta C_{<n>})$ (7)

さらに,(6)式中の気相濃度 G を液相濃度で線型近似する。ここでは,気相中の元素量 [mol] を液相中の元素量 [mol] から次式で線型近似する。

^{*)} ただし q_l はダルシー流速とする。また,ガス濃度 Gは気相体積に対する濃度であり, $(n - \theta)G$ を代入しないと,セル体積に対する濃度にならないが,ガス拡散係数の定義式(3)にn(1-S)があるため,(6)式の第3項はセル体積に対する(気相中の成分の)濃度変化となる。

$$(n-\theta)VG_{} = \varepsilon_{}(\theta VC_{})$$

$$\therefore G_{} = \varepsilon_{}\frac{\theta C_{}}{(n-\theta)}$$
(8)

ここで, ε: 気相中の元素濃度に対する近似係数 [-]

(7)式および(8)式を(6)式に代入すると,液相濃度を用いた物質移行方程式は次式となる (ただし,成分を表す添字 n は省略)。

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(q_l C) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_g \frac{A}{1000} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\varepsilon \frac{\theta C}{(n-\theta)}\right)\right) + \frac{\partial}{\partial t}(\gamma \theta C) = 0$$
(9)

ここで,(9)式中のガス成分の拡散項は以下のように変形できる。

$$-\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(D_{g}\frac{A}{1000}\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\varepsilon\frac{\theta C}{(n-\theta)}\right)\right)$$

$$=-\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\tau n(1-S)D_{g}^{0}\frac{P_{0}}{P}\left(\frac{T}{T_{0}}\right)^{l}\frac{A}{1000}\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\varepsilon\frac{\theta C}{(n-\theta)}\right)\right)$$

$$=-\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\tau \theta D_{g}^{0}\frac{P_{0}}{P}\left(\frac{T}{T_{0}}\right)^{l}\varepsilon\frac{A}{1000}\frac{\partial C}{\partial x_{i}}\right)$$
(10)

(10)式の関係を用いて分散係数テンソルの修正を行えば,(9)式は以下のように書き直す ことができる。これを Dtransu で解析する。

$$\frac{\partial}{\partial x_{i}} (q_{l} C_{}) - \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\theta D_{ij}^{\text{mod}} \frac{\partial C_{}}{\partial x_{j}} \right) + \frac{\partial}{\partial t} (\gamma_{} \theta C_{}) = 0$$
(11)

ただし,

$$D_{ij}^{\text{mod}} = \alpha_T \quad \left\| V \right\| \quad \delta_{ij} + \left(\alpha_L - \alpha_T \right) \frac{V_i \quad V_j}{\left\| V \right\|} + \alpha_m \quad \tau \quad \delta_{ij} + \tau \quad D_{g, < n>}^0 \frac{P_0}{P} \left(\frac{T}{T_0} \right)^l \quad \varepsilon_{< n>} \quad \delta_{ij}$$
(12)

また, PHREEQC で気相(ガス成分)との平衡計算を行う際は,ガス成分の分圧を用いて行う。分圧はガス密度から次式で求める。

$$P_{p,} = \frac{\rho_{g,}}{\sum_{n} \rho_{g,}} \cdot P$$
(13)
ここで, $P_{p,}$: ガス成分 *n* の分圧 [1 atm = 101,325 Pa]
 $\rho_{g,}$: ガス成分 *n* のガス密度 [kg/m³]

JNC TJ8400 2004-004

P: 圧力 [Pa]

以上が,脱ガス・ガス拡散を考慮した場合の PHREEQC - Dtransu で解析する方程式群 となる。

2.1.2 ガス拡散係数に関する調査

脱ガス・ガス拡散を考慮したモデルでは、式(3)に示すようにガス拡散係数を必要とする。 経験式(3)で通常用いられている数値は(中野 1991 年),表 2.1-1 に示す値となっている。 本研究の事例解析では、気相成分に応じてこれらの物性を参考とした。

パラメータ項目	標準状態での分子拡散係数	温度依存係数1
ガス化学種	(cm ² / s)	(-)
酸素	0.180	1.67
二酸化炭素	0.135	1.71
窒素	0.178	1.67

表 2.1-1 ガス成分の移行特性

ここで,標準状態とは,273.15K,1気圧(1.013×105Pa)としている。

2.2 濃縮・希釈に関する検討

ここでは,熱と間隙水の相互作用によって生じる間隙水中濃度の濃縮・希釈に関する現 象のモデル化並びに計算方法について検討し,平成14年度のTHMCコードの高度化を行 った。

2.2.1 モデル化に関する検討

本検討では 熱 - 水 - 応力解析コード THAMES の水分移動に関するモデル式を整理し, 水分移動にともなう濃縮・希釈のモデル式について示す。なお,本研究で対象とする濃縮・ 希釈現象は,水理的な水の移動による溶質の濃縮・希釈を取り扱うのでは無く,熱による 水分の移動をドライビングフォースとした現象に着目するものである。

従って,水理学的な水の移動によって発生する濃縮・希釈現象については,物質移行 Dtransuの計算直後に下記の処理を施している。

まず,溶液相濃度については,体積含水率の変化による濃度変化を考慮する。すなわち, 時刻 *t*において溶液相に存在した元素量 [mol]を時刻 *t+*∆*t* における溶液相中の元素量の初 期量 [mol] とし,体積含水率の変化に応じた濃度を初期値として設定する。

$$\theta_{t} \bullet V \bullet (C)_{t} = \theta_{t+1} \bullet V \bullet (C_{Dtr<0>})_{t+\Delta t}$$

$$\therefore (C_{Dtr<0>})_{t+\Delta t} = \frac{\theta_{t} \bullet (C)_{t}}{\theta_{t+\Delta t}}$$
(1)

 $(C_{Dtr<0>})_{t+\Delta t}$: 時刻 $t+\Delta t$ のイタレーション 0 回目における Dtransu の溶液相濃度 [mol/m³ Water] (分母は液相体積)

 $(C)_{t}$: 時刻 tにおける溶液相中の元素濃度 $[mol/m^{3}]$ Water](分母は液相体積)

- θ_t : 時刻 tにおける体積含水率 [-]
- $\theta_{t+\Lambda t}$: 時刻 $t+\Delta t$ における体積含水率 [-]

濃縮・希釈現象のモデル化は,以下の観点から検討を行った。

THAMES において液状水と水蒸気の質量を分離した場合のモデル化

THAMES において液状水の微小変化を考慮した場合のモデル化

THAMES で取り扱われている水分移動は,図2.2-1 に示すような微小変化の概念で示す ことができる。本検討では,先ず,前記のモデル化に際しては,微小要素内での液状水並 びに水蒸気の質量に着目した検討を行った。また,前記のモデル化に際しては,液状水の体積を微小変化理論で表わし,濃縮・希釈に係る溶質濃度の変化を式で表わしている。

本図より,微小立方体の全表面において通過する水のフラックスを考え,微小要素に存 在する液状水,水蒸気の質量収支を計算すると式(2)となる。

$$\begin{bmatrix} -\left\{\left(\rho_{l}q_{l}\right)_{x+\Delta x}+\left(\rho_{l}q_{v}\right)_{x+\Delta x}\right\}+\left\{\left(\rho_{l}q_{l}\right)_{x}+\left(\rho_{l}q_{v}\right)_{x}\right\}\end{bmatrix}\times\Delta y\Delta z\times\Delta t$$
$$+\left[-\left\{\left(\rho_{l}q_{l}\right)_{y+\Delta y}+\left(\rho_{l}q_{v}\right)_{y+\Delta y}\right\}+\left\{\left(\rho_{l}q_{l}\right)_{y}+\left(\rho_{l}q_{v}\right)_{y}\right\}\right]\times\Delta z\Delta x\times\Delta t$$
$$+\left[-\left\{\left(\rho_{l}q_{l}\right)_{z+\Delta z}+\left(\rho_{l}q_{v}\right)_{z+\Delta z}\right\}+\left\{\left(\rho_{l}q_{l}\right)_{z}+\left(\rho_{l}q_{v}\right)_{z}\right\}\right]\times\Delta x\Delta y\times\Delta t$$

=-	$\left\{\frac{\partial(\rho_l q_l)_x}{\partial x}\right\}$	$+\frac{\partial(\rho_l q_v)_x}{\partial x}\bigg]$	$\rightarrow \times \Delta x \times \Delta y \Delta z \times \Delta t$
	$\begin{cases} \frac{\partial (\rho_l q_l)_y}{\partial y} \end{cases}$	$+\frac{\partial(\rho_l q_v)_y}{\partial y}\bigg\}$	$\times \Delta y \times \Delta z \Delta x \times \Delta t$
	$\begin{cases} \frac{\partial (\rho_l q_l)_z}{\partial z} + \end{cases}$	$-\frac{\partial(\rho_l q_v)_z}{\partial z}\bigg\}$	$\times \Delta z \times \Delta x \Delta y \times \Delta t$

$$= -\left\{\nabla \cdot \left(\rho_l q_l\right) + \nabla \cdot \left(\rho_l q_v\right)\right\} \times \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$$

(2)

微小要素内での飽和度 θ の変化を考えた場合,微小要素内の水の質量は式(3)で表わすことができる。

$$\Delta x \Delta y \Delta z \times \left\{ \left(\rho_l \theta \right)_{t+\Delta t} - \left(\rho_l \theta \right)_t \right\}$$
(3)

式(2)と式(3)は等しいので,微小要素内での水の収支は,式(4)のようにまとめることができる。

$$-\left\{\nabla\cdot\left(\rho_{l}q_{l}\right)+\nabla\cdot\left(\rho_{l}q_{v}\right)\right\}=\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_{l}\theta\right)$$
(4)

液状水と水蒸気の質量を分離した場合は,式(4)に基づき,両者のダルシー流速を求める 必要がある。

微小要素内に存在する液状水の体積は,図2.2-1の全表面での流速と断面積から示す流量の変化を考慮することにより求めることができる。式(5)は,微小要素内の体積を示す。

$$\left\{ -(q_{l})_{x+\Delta x} + (q_{l})_{x} \right\} \times \Delta y \Delta z \times \Delta t$$

$$+ \left\{ -(q_{l})_{y+\Delta y} + (q_{l})_{y} \right\} \times \Delta z \Delta x \times \Delta t$$

$$+ \left\{ -(q_{l})_{z+\Delta z} + (q_{l})_{z} \right\} \times \Delta x \Delta y \times \Delta t$$

$$= -\frac{\partial (q_{l})_{x}}{\partial x} \times \Delta x \times \Delta y \Delta z \times \Delta t$$

$$-\frac{\partial (q_{l})_{y}}{\partial y} \times \Delta y \times \Delta z \Delta x \times \Delta t$$

$$-\frac{\partial (q_{l})_{z}}{\partial z} \times \Delta z \times \Delta x \Delta y \times \Delta t$$

$$(5)$$

 $= -\nabla \cdot (q_l) \times \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$

微小要素内での飽和度 θ の変化を考えた場合,微小要素内の水の体積は式(6)で表わすことができる。

 $\Delta x \Delta y \Delta z \times (\theta_l)_{l+\Delta l} \tag{6}$

以上の検討から,前時間ステップで求まっている溶質濃度を用いて,濃縮・希釈の効果 を表わすモデル式(陽解法的な手法)と現時間ステップで求まっている溶質濃度を用いて, 濃縮・希釈の効果を表わすモデル式(陰解法的な手法)の2種類について示す。

陽解法的な手法による濃縮・希釈モデル式を式(7)に示す。また,陰解法的な手法による 濃縮・希釈モデル式を式(8),(9)に示す。

$$\begin{pmatrix} C_{\langle n \rangle} \end{pmatrix}_{t+\Delta t} = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z \times (\theta_l)_t \times (C_{\langle n \rangle})_t + \{ -\nabla \cdot (q_l) \times \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \} \times (C_{\langle n \rangle})_t}{\Delta x \Delta y \Delta z \times (\theta_l)_{t+\Delta t}}$$

$$(7)$$

$$=\frac{\left\{\left(\theta_{l}\right)_{t}-\nabla\cdot\left(q_{l}\right)\times\Delta t\right\}\times\left(C_{\langle n\rangle}\right)_{t}}{\left(\theta_{l}\right)_{t+\Delta t}}$$

式(8)を整理すると式(9)となる。

$$\left(C_{\langle n \rangle}\right)_{t+\Delta t} = \frac{\left(\theta_{l}\right)_{t} \times \left(C_{\langle n \rangle}\right)_{t}}{\left(\theta_{l}\right)_{t+\Delta t} - \left\{-\nabla \cdot \left(q_{l}\right) \times \Delta t\right\}}$$
(9)

本研究では,濃縮濃度が極めて高くなる可能性を持つ陰解法的な手法は,地球化学モジュールで収束しなくなる可能性があることから,陽解法的な手法を採用することとした。



図 2.2-1 THAMES 微小要素での水の変化

2.2.2 計算方法

前記式(7)のモデル式をモジュール化し, このモジュールを THAMES 計算直後で実行さ せるようにする。これらの計算に際しては, 共有メモリに格納されている前ステップでの 溶質濃度, THAMES で計算された現ステップでの体積含水率, ダルシー流速を用いて計算 し,計算された溶質濃度(濃縮・希釈現象を考慮した溶質濃度)を地球化学モジュール PHREEQC に受け渡すこととする。 2.3 収束アルゴリズムに関する検討

本検討は,従来の熱-水-応力-化学連成挙動解析コードを用いた場合,特定の元素が 収束しない状況が発生する可能性があることから,物質移行-地球化学連成挙動に関する 精度向上を目的として,収束アルゴリズムに関する検討を実施した。本研究では,他の連 成解析コードにおいて収束アルゴリズムの状況を把握する観点から,HYDROGEOCHEM (以後 HGC という。本解析コードはサイクル機構殿からの貸与品)の内容について調査し, これらの成果に基づき,熱-水-応力-化学連成挙動解析コードの改良事項を明確にした。

2.3.1 離散化方程式

まず, HGC で解析している移行方程式(陰解法形式)は以下のとおり(ただし,崩壊項は除く)。

$$\theta \frac{\partial T_j}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} T_j - \Gamma(T_j) = -\Gamma(S_j + P_j) + QC_j^*$$
(1)

ここで, j は化学成分を表す添字であり, Γ は演算子で次式で表される。

$$\Gamma(!) = \left(-V \cdot \nabla + \nabla \cdot \theta D \cdot \nabla - Q + \frac{\partial \theta}{\partial t}\right)(!)$$
(2)

(1)式および(2)式を書き直すと次式が得られる。

$$\theta \frac{\partial T}{\partial t} + V \bullet \nabla T + K(T) + \frac{\partial \theta}{\partial t} T = V \bullet \nabla (S + P) + K(S + P) + QC^*$$
(3)

$$K(!) = \left(-\nabla \cdot \theta D \cdot \nabla + Q - \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) (!) \tag{4}$$

(3)式および(4)式の空間微分項を有限要素法に基づいて離散化すると、次の行列式が得られる。

$$\begin{bmatrix} M \end{bmatrix} \left\{ \frac{dT}{dt} \right\} + \left[[A] + [K] \right] + [E] \right\} \left\{ T \right\} = \left[[A] + [K] \right] \left\{ \{S\} + \{P\} \right\} + \left\{ Q \right\} + \left\{ B \right\}$$
(5)
$$\{ \} : 未知変数ベクトル (dT/dt, T, S, P) [M] : 貯留に基づく mass matrix$$

- [A]: 速度項に基づく advection matrix
- [K]:分散項, water source, 含水率変化に基づく modified stiff matrix
- [E]: 含水率変化を反映した growth matrix

- {Q}:初期条件に基づく荷重ベクトル
- {B}: 境界条件に基づく荷重ベクトル

(5)式の時間微分項を差分近似すると,次の離散化方程式が得られる。

$$[G] \{T\}_{t+\Delta t} = [H](\{S\}_{t+\Delta t} + \{P\}_{t+\Delta t}) + \{L\} + \{B\}$$

$$\{T\}_{t+\Delta t}, \{S\}_{t+\Delta t}, \{P\}_{t+\Delta t} :$$

$$[G], [H]:$$

$$[G] = [H]:$$

$$[H]:$$

{L}: 荷重ベクトル

(6)式中の係数マトリクスおよび荷重ベクトルは次式で表される。

$$\begin{bmatrix} G \end{bmatrix} = \frac{\lfloor M \rfloor}{\Delta t} + w_{V} [A] + w(\llbracket K \rrbracket + \llbracket E])$$

$$\begin{bmatrix} H \end{bmatrix} = w_{V} [A] + w[K]$$
(7)

$$\{L\} = \{Q\} + \left(\frac{\llbracket M \rfloor}{\Delta t} - (1 - w)\llbracket E \rrbracket\right) \{T\}_{t} - ((1 - w_{V})\llbracket A \rrbracket + (1 - w)\llbracket K \rrbracket) \{C\}_{t}$$

ここで, w_v は移流項に関する重み係数,wはその他の項に対する重み係数で, $w_v = w = 0.0$ の時は陽解法, $w_v = w = 0.5$ の時はクランク - ニコルソン法, $w_v = w = 1.0$ の時は陰解法となる。(6)式の離散化方程式に対して境界条件を適用すると,最終的に解くべき行列式として次式が得られる。

$$\begin{bmatrix} U \end{bmatrix} \{T\}_{t+\Delta t} = \begin{bmatrix} W \end{bmatrix} (\{S\}_{t+\Delta t} + \{P\}_{t+\Delta t}) + \{R\}$$

$$\Xi \Xi \overline{C}, \qquad (8)$$

$$\begin{bmatrix} U \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G \end{bmatrix} - w_V \begin{bmatrix} V \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} W \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H \end{bmatrix} - w_V \begin{bmatrix} V \end{bmatrix}$$

$$\{R\} = \{L\} + \{q\} + (1 - w_V) \{C\}_t$$
(9)

以上,簡単に示したが,HGC は (8)式で表される離散化方程式(行列式)を解いて,地 球化学-物質移行の連成解を求めている。

2.3.2 計算方法

(8)式に示した最終的な離散化方程式では,係数マトリクス [U] および [W] は全濃度 {T} に依存しないが,吸着濃度 {S} および沈殿濃度 {P} は全濃度 {T} の関数である(非線 型方程式)。このため,HGC では以下の手順で反復計算を行い,全濃度 {T} を求めている。

 $\{T\}$ の初期値を評価(プログラムを見ると, と同じ式)。

得られた $\{T\}$ を用いて,地球化学計算により $\{S\}, \{P\}$ を算出。 得られた $\{S\}, \{P\}$ を用いて行列式(8)を計算し, $\{T\}$ を算出。 得られた $\{T\}$ が全化学成分,全節点において許容値以下であれば収束。 $\left|\frac{T-T^k}{T^k}\right| < \varepsilon$ 収束していなければ, $\{T^{k+1}\} = \omega\{T\} + (1-\omega)\{T^k\}$ で更新し,から再計算。

なお,の式に含まれる ω は反復計算に関する重み因子で, ω =0.0~1.0の場合は under relaxation, ω =1.0の場合は exact relaxation, ω =1.0~2.0の場合は over relaxationの取り扱いとなる。

HGC の実際の計算手順を確認するため,ソースプログラムを調査した。HGC ではサブ ルーチン GM2DXZ が計算全体を制御しており,本サブルーチン内の非定常計算の部分を調 べた。GM2DXZ における計算フローを図 2.3-1 に示し,各ブロックにおける処理内容(計 算内容)を表 2.3-1 にまとめる。



図 2.3-1 HGC の計算フロー (サブルーチン GM2DXZ)
No.	サブルーチン	処理内容	備考
	INTERP	・ソース / シンク,境界濃度,流入濃	・(5)式の荷重ベクトル{Q}
		度の計算。	の計算(推定)。
	- (GM2DXZ 内)	・含水率,流速ベクトルの読込み(非	
		定常水理場の場合)。	
		・上流重み因子の計算(サブルーチン	
		AFABTA で処理)。	
		・物性値の更新(∂θ/∂tも含む)。	
	TACADC	・前タイムステップの全濃度(<i>TP</i>)を	・THN:前タイムステッ
		用いて,含水率の変化に応じて全濃	プの含水率 $ heta$
		度 (<i>T</i>) を計算。	• DELT : Δt
		T=THN*TP/(THN+DELT*DTHN)	• DTHN : <i>∂θ/∂t</i>
		・戻り値: <i>T</i> , <i>TW</i> (<i>=T</i>)	
	ASEMBL	・行列式のマトリクスの計算。	・(5)式のマトリクス[M],
			[A] , [K] , [E]を計算。
	HYDROT	・INDC=0 の化学成分 (Conservative	・HYDROT 内で行列式(8)
		Component) に対して , 行列式を計	を完成させて , 計算。
		算し溶液濃度(C)を算出。	
		・戻り値:C , T(=C) , TW(=C) , S=0 ,	
		<i>P=0</i>	
		・全化学成分が INDC=0 の場合は,ブ	
		ロック に飛ぶ。	
	OCSPIT	・INDC=0 の化学成分が存在しない場	・サブルーチンへの引数は
		合は , 本ブロックはスキップ。	全濃度 T
		・全化学成分に対して,地球化学(平	
		衡)の計算。	
		・戻り値: <i>C</i> , <i>S</i> , <i>P</i>	
	HYTRNI	・INDC=0 の化学成分が存在しない場	・HYTRNI 内で行列式(8)
		合は , 本ブロックはスキップ。	を完成させて , 計算。
		・ INDC=1 の化学成分 (Non	
		Conservative Mobile Component)	
		に対して,行列式を計算し,全濃度	
		(<i>TW</i>)を算出。	
		・戻り値: <i>TW</i> , <i>T</i> (<i>=TW</i>)	
	- (GM2DXZ 内)	・ INDC=1 の化学成分 (Non	・イタレーションの最初は
		Conservative Mobile Component)	<i>T=TW</i> の状態(ブロック
		に対して,全濃度(<i>TW</i>)を更新。	あるいは の出力)か
		$TW = W^*T + (1 - W)^*TW$	ら , <i>TW</i> を更新。
		・TW=0の場合は,TW=TW/2で更新。	

表 2.3-1 サブルーチン GM2DXZ の処理概要

OCSPIT	・全化学成分に対して,地球化学(平	・サブルーチンへの引数は
	衡)の計算。	全濃度 <i>TW</i> (ブロック
	・戻り値: <i>C</i> , <i>S</i> , <i>P</i>	の値)
HYTRNC	・ INDC=1 の化学成分(Non	・HYTRNC 内で行列式(8)
	Conservative Mobile Component)	を完成させて , 計算。
	に対して,行列式を計算し,全濃度	
	(<i>T</i>)を算出。	
	・戻り値: <i>T</i>	
- (GM2DXZ 内)	・全化学成分,全節点に対して,最大	・TW:ブロック の値
	相対誤差(絶対値)を計算。	・T:ブロック の値
	DIFMAX=ABS((T - TW)/TW)	
	・最大相対誤差が許容値以下,あるい	
	は最大反復回数に到達した場合,反	
	復ループを抜ける。	
OCSPIT	・全化学成分に対して,地球化学(平	・サブルーチンへの引数は
	衡)の計算。	全濃度 <i>T</i> (ブロック の
	・戻り値: <i>C</i> , <i>S</i> , <i>P</i>	值)
SFLOW	・開境界節点で移行フラックスを計算	
PRINTT	・本タイムステップの結果出力	
- (GM2DXZ 内)	・タイムステップ(⊿t), 時刻の更新	・ $\varDelta t$ は可変設定が可能。
	・濃度の保存(<i>CP=C</i> , <i>TP=T</i>)	

2.3.3 連成方法

(1) 一般的な連成手法

個別現象モデルの連成を行う場合,離散化された数値モデルの解法の観点から,以下の3 つのアプローチが考えられる(P.C. Lichtner et al., 1996)

- ・ 連成系全体を陰解法で解く手法 (One Step/Global Implicit Approach; GI)
- ・ 個別現象モデルを陽解法で順次解く手法 (Sequential Non-iterative Approach; SNIA)
- ・ 個別現象モデルを陰解法で順次解く手法 (Sequential Iterative Approach; SIA)

連成系全体を陰解法で解くアプローチ(GI法)は,有限差分法や有限要素法で離散化さ れた節点毎の化学種濃度などを未知数とした連立方程式を解く手法であり,特に化学種間 の相互作用や3次元系を考慮する場合は大規模な係数行列を扱うことになる。また,時間 変化する反応項を含む非線型系を対象とする場合は,ニュートン・ラプソン法などの収束 計算を行う必要がある。

個別現象モデルを陽解法で順次解くアプローチ(SNIA法)は,例えば1つの時間刻み幅 で物質移行と化学反応を逐次計算するもので,Time Splitting Approach とも呼ばれる。物 理的には,移行経路に沿って置かれた各々のビーカー内(つまり離散化された節点)で化 学反応が生じた後,下流側の別のビーカーに化学種が加えられる(移動する)と考えるこ とができる。

個別現象モデルを陰解法で順次解くアプローチ(SIA法)は,上記のGI法における大規 模行列の操作を回避しつつも,SNIA法における誤差(Splitting error)を低減する手法で あり,1つの時間刻み幅で個別現象モデルを交互に繰り返し解くことにより連成効果を取り 込むものである。例えば,化学反応による湧き出し項を含む物質移行方程式と物資移行に よる湧き出し項を含む化学反応を交互に解き,双方の解が収束誤差内に収まるまで繰り返 し計算が行われる。

HGC は前章に示したように,物質移行と地球化学を連成させた移行方程式(1)を解析している。これは,微小セル内の全濃度の時間変化量 $(\partial(\theta T)/\partial t)$ が,移流・分散や含水率変

化等による全濃度の変化量 $\Gamma(T)$ から,移流・分散や含水率変化等による吸着・沈殿濃度の 変化量 $\Gamma(S+P)$ を減じた量に等しくなると考えた式に相当する。また,最終的な離散化方 程式(8)には化学反応による項(吸着濃度および沈殿濃度)が含まれており,変数を受け渡 す項が明示的であり,SIA法に相当する反復計算が行われていると考えることができる。

一方, PHREEQC - Dtransu の連成では,概念的には,移行経路に沿って置かれた各々 のビーカー内(離散化された節点)で化学反応が生じた後(PHREEQC の計算),下流側の 別のビーカーに化学種が移動する(Dtransu の計算)と考えることができる。したがって, SNIA 法に基づく(タイムステップ分割)繰り返し計算が必要になると想定される。

(1) PHREEQC - Dtransu 連成方法

PHREEQC - Dtransu の連成計算アルゴリズムを検討するため,離散化方程式を簡略的 に示す。ただし,地球化学計算に関しては,HGC と同様に平衡計算であり,空間・時間に 依存しないため,省略する。PHREEQC - Dtransu の連成方程式は次式で表される(湧き 出し項と崩壊項は省略)。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\theta v C \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$
(10)

これを,補正係数 γ を用いて線形近似した次式が基本方程式となる。

$$\gamma \theta \frac{\partial C}{\partial t} = -\theta v \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$
(11)

ただし, $T \equiv \gamma(\theta C) = \theta C + P$

(11)式の中には,沈殿の項は直接的には含まれず,補正係数 γ にその効果(地球化学の 効果)を反映した形式となっている。(11)式を HGC と同様の手順で離散化する。(HGC の ベースとなった FEMWASTE (USGS 公開コード)を参照した。)

(12)

(11)式の空間微分項を有限要素法に基づいて離散化すると行列式は次式となる。

$$\begin{bmatrix} M \end{bmatrix} \left\{ \frac{dC}{dt} \right\} + \begin{bmatrix} S \end{bmatrix} \{C\} + \begin{bmatrix} Q \end{bmatrix} \{C\} = 0$$
(13)

$$\begin{bmatrix} M \end{bmatrix} : 質量マトリクス (mass matrix))$$

$$\begin{bmatrix} S \end{bmatrix} : 剛性マトリクス (stiff matrix))$$

$$\begin{bmatrix} Q \end{bmatrix} : フラックス・マトリクス$$

(13)式の時間微分項を差分近似すると,次の離散化方程式が得られる。(14)式中の係数マトリクスおよび荷重ベクトルは次式で表される。

$$\begin{bmatrix} G \end{bmatrix} = \frac{\begin{bmatrix} M \end{bmatrix}}{\Delta t} + w \begin{bmatrix} S \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} H \end{bmatrix} = \frac{\begin{bmatrix} M \end{bmatrix}}{\Delta t} + (1 - w) \begin{bmatrix} S \end{bmatrix}$$

$$\{Q\} = \begin{bmatrix} Q \end{bmatrix} \{C\}_t$$
(15)

ここで,wは重み係数で,w=0.0の時は陽解法,w=0.5の時はクランク-ニコルソン 法,w=1.0の時は陰解法である。(HGCでは,wvとwの2つの重み係数を使用している が,ここでは wのみで表した。)なお,(13)式および(15)式中の剛性マトリクス[S]は, HGCの記号(マトリクス)とは以下の関係と推定される。

[S] = [A] + [K] + [E]

(16)

(14)式に境界条件を適用して最終的な行列式を求める必要があるが,式の形が変化しないため,ここでは(14)式を解くべき離散化方程式の形とする。

(15)式に含まれる質量マトリクス [M] は,遅延係数 Rd(補正係数 γ)に基づいて算出されるため,(12)式から明らかなように, $\{C\}_{t+\Delta t}$ の関数である。したがって,(14)式で表される行列式の係数マトリクス [G] および [H] は,未知変数 $\{C\}_{t+\Delta t}$ の関数となる*)。一方,HGC の離散化方程式(8)の係数マトリクス [U] および [W] は未知変数 $\{T\}$ に依存せず,この点が大きく異なる。すなわち,HGCの反復計算では係数マトリクスが変化しないのに対し,PHREEQC - Dtransuの繰り返し計算では係数マトリクスが変化する。

現状の PHREEQC - Dtransu の計算では, PHREEQC で得られた溶液濃度 *C*と沈殿濃 度 *P*から補正係数 γ を求め, C と γ を用いて Dtransu の計算を行っている(陽的解法)。 すなわち, Dtransu の計算においては,係数マトリクスと荷重ベクトル(既知変量)を常 に更新して行列式(離散化方程式)が解かれている。一般に,非定常の数値解析において 行列式の係数マトリクスの更新はタイムステップが更新された時に行われる。HGC におい ても,図-1 に示したように,ブロック でマトリクスの設定を行っており,これは1つのタ イムステップの中で 1 回だけ計算され,マトリクスが変化するのはタイムステップが更新 された場合である。

^{*)} Dtransuの離散化は EL 法に基づいており,ここで示した式とは異なると思うが,質量マトリクスは遅 延係数 R を用いて評価していると考えられる。このため,離散化方程式の係数マトリクスが未知変数 {C}++Atの関数になる点は変わらないと考えられる。

JNC TJ8400 2004-004

以上のことから, PHREEQC と Dtransu を用いて(11)式および(12)式で表される基礎方 程式(連成方程式)を解く場合は,タイムステップを分割して繰り返し計算を行うことが 妥当と考えられる(SNIA 法に基づく計算アプローチ)*)。

(3) PHREEQC - Dtransu の繰り返し計算(アルゴリズム)

前記(2)項で述べたように, PHREEQC - Dtransu の計算において, ユーザが定義したタ イムステップを細分化したサブタイムステップを用いて繰り返し計算を行うアルゴリズム について検討する。

・全体のタイムステップ(時刻)はTHAMESが制御する。

- ・PHREEQC Dtransuの計算では、サブ・タイムステップを用いて繰り返し計算を行い、 THAMESのタイムステップ(時刻)の解を出力する。
- ・繰り返し計算においては,物性値(温度,含水率等)は THAMES の出力値で一定とす る。(不飽和移行の場合,整合性に問題があるかもしれないが,細分化したタイムステッ プで全体を解くことは計算時間的に困難と思われる。)
- ・繰り返し計算の収束判定としては,沈殿が存在する場合はPHREEQCの溶液濃度が常に 溶解平衡濃度となり,Dtransuの溶液濃度とは一致しない。連成方程式(10)式は全濃度の 時間変化について定式化したものであり,全濃度の相対変化で判定することが適切と考 えられる。
- ・全濃度の変化は沈殿の溶解量に依存するため, Dtransu 計算後に PHREEQC を計算し, 移行(溶液濃度減少)に伴う沈殿量の変化から,全濃度の変化を求める。
- ・全濃度で判定すると沈殿(鉱物)量の相違により元素毎に精度に差が現れるが、タイム ステップを自動細分することにより、全元素に対して同一の判定値を用いることが可能 と考えられる(ただし、最大細分数を入力できるようにした方が現実的。この場合、最 小サブ・タイムステップでも判定を満たさない元素では誤差となる)。
- ・細分化したサブ・タイムステップで判定を満たした場合は,そのサブ・タイムステップ を用いて,全体(THAMES)のタイムステップまで繰り返し計算を行う(サブ・タイム

^{*)} 沈殿の生成・溶解を伴う核種移行が解析可能な MESHNOTE や GoldSim においても,沈殿の生成・溶 解は瞬時平衡反応として扱っており,沈殿濃度の変化項は基礎方程式や離散化方程式に含まれない。こ のため, MESHNOTE や GoldSim では,タイムステップの自動細分割を行っており,計算アルゴリズ ムとしては SNIA 法に分類されると考えられる(付録参照)。

ステップの自動増分機能は処理が過度に複雑になる恐れがあり,採用しない)。

以上の基本的な考え方に基づく計算の処理フローを図 2.3-2 に示し,各ブロックの処理の 概要を表 2.3-2 にまとめる。



図 2.3-2 PHREEQC - Dtransu の計算処理フロー(案)

No.	ブロック	処理内容	備考
	PHREEQC (初	・初期 / 境界条件に基づき, 系の初期	
	期条件)	の地球化学状態を設定。	
	溶液濃度 / 補正	・含水率の変化に応じて溶液濃度を設	
	係数設定	定(濃縮/希釈の効果も含む)。	
		・前タイムステップの沈殿濃度あるい	
		は全濃度を用いて,補正係数を設定。	
	サブ・タイムス	・タイムステップ <i>∆t</i> を細分し,サブ・	・ <i>∆</i> τ∶サブ・タイムステッ
	テップ設定	タイムステップを設定。	プ
		$\Delta \tau = \Delta t / 2^{(n-1)}$	・n:イタレーション回数
			(初期値は⊿ <i>t</i> と同じ)
	Dtransu 計算	・ の溶液濃度および補正係数を用い	
		て移行計算を実施。	
	PHREEQC 計算	・ で用いた沈殿濃度と の溶液濃度	
		を用いて地球化学計算を実施。	
	全濃度 / 補正係	・ の溶液濃度および沈殿濃度を用い	
	数更新	て全濃度および補正係数を更新。	
	収束判定	・ の全濃度と で用いた全濃度の相	 <i>T</i>: で得られた全濃度
		対誤差を許容値と比較。	・ T_t : 全タイムステップの
		$abs(T - T_t) / T_t) < \varepsilon$	全濃度(と同じ)
		・判定を満たなければ , に戻りサブ・	・ε∶許容値(全濃度の変
		タイムステップを細分し再度計算。	化割合)
		・判定を満たせば,サブタイムを設定	・τ:サブタイム
		し,に進む。	・⊿τ:判定を満たした時の
		$\tau = \Delta \tau$	サブ・タイムステップ
	サブタイム更新	・移行 - 地球化学の繰り返し計算の時	・サブ・タイムステップは
		刻(サブタイム)を更新。	の値で一定。
		$\tau = \tau + \Delta \tau$	
		・サブタイムが全体タイムステップ <i>∆t</i>	
		を越えた場合は 出力に飛ぶ。(理想	
		的には $\Delta t = \tau$ となっているはず。)	
	Dtransu 計算	・前イタレーションの PHREEQC の溶	・最初のイタレーションで
		液濃度および補正係数を用いて移行	はの値を使用。
ļ		計算を実施。	
	PHREEQC 計算	・ の溶液濃度と前イタレーションの	・最初のイタレーションの
		沈殿濃度を用いて地球化学計算を実	沈殿濃度はの値。
		施。	

表 2.3-2 PHREEQC - Dtransu の繰り返し計算の概要

全濃度 / 補正係	・ の溶液濃度および沈殿濃度を用い	
数更新	て全濃度および補正係数を更新。	
誤差計算	・ の全濃度と前イタレーションの全	・ の式と同じ。 デバック
	濃度の相対誤差を計算。	出力用(確認用)。
出力	・ の PHREEQC の結果を時刻 $t + \Delta t$	
	の結果として出力。	

【補足】

- ・ブロック では,濃縮/希釈の効果を体積含水率の変化に反映して溶液濃度を設定する。 沈殿濃度(あるいは全濃度)は前タイムステップの値(時刻 tの出力)を使用する。
- ・ブロック ~ の収束反復ループ(タイムステップ細分ループ)は,許容値を満たすサ ブ・タイムステップ Δt が見つかるまで繰り返す。これは $t ~ t+\Delta t$ の時間に相当する計 算であり,Dtransu への入力は常にブロック の値(時刻 tの出力)を使用する。
- ・ブロック ~ のサブタイム計算ループは,タイムステップ細分ループで見つかったサ ブタイムステップムτ(固定)を用いて,t ~ t+Δtの時間(THAMES が制御している全 体の時間)に相当する非定常計算であり,Dtransuへの入力は常に前イタレーション(ブ ロック の結果)を使用する。
- ・タイムステップ細分ループでは最大分割数を入力できるようにしておき,計算時間の観 点から過度の細分化を回避する。例えば,最大分割数を 5 に設定すると,サブ・タイム ステップ $\Delta \tau$ の最小値は $\Delta t/2^5 = \Delta t/32$ となる。ここで許容値を満たしたとすると, $\Delta \tau$ の 設定で 6 回の計算を行ったことになる。この後,サブタイム計算ループで $\Delta \tau$ を用いて時 刻 Δt までの非定常計算を行うため,31 回の計算が必要になる(細分数5でも,一つのタ イムステップ Δt で PHREEQC - Dtarnsu の計算を 40 回近く行うことになる)。
- ・サブタイム計算ループは非定常計算であり,あるイタレーションで沈殿が枯渇した場合は,次のイタレーションで鉱物指定を解除する。(生成の場合は,次イタレーションで鉱物指定を行う。)

JNC TJ8400 2004-004

2.4 物質移行解析コードの整備

上記 2.1 の検討結果に基づき,鉱物の溶解/沈殿,水溶性化学種の液相中の移行,および O₂, CO₂等の化学反応・脱ガスと気相中のガス拡散を考慮した物質移行解析コードを整備 した。

2.4.1 追加変数およびコモンブロック

脱ガス・ガス拡散の機能追加に伴い, Dtransu に追加した変数およびコモンブロックを それぞれ表 2.4-1, 2.4-2 に示す。

表 2.4-1 ブロックコモンの内容

CT3#

PARAMETER (PSTAN=101325.0D+0, TSTAN=273.15D+0) COMMON / GHEM00 / ERETA(MUMELC,MXCHEM),TCON(MXCHEM) COMMON / GHEM01 / ETEMP(MUMELC),PBUN20(MUMELC,MXCHEM) COMMON / GMAT00 / GASDIF(MXCHEM),AMOL(MXCHEM)

変数名	型	配列	内容
PSTAN	real*8	-	標準状態圧力(1atom=101,325Pa)
TSTAN	real*8	-	標準状態温度(273.15K)
ERETA	real*8	(MUMELC, MXCHEM)	気相濃度 - 液相濃度補正係数 ε
			各成分×各要素[-]
TCON	real*8	(MXCHEM)	各成分の温度依存係数[-]
ETEMP	real*8	(MUMELC)	各要素の温度[K]
PBUN20	real*8	(MUMELC, MXCHEM)	各成分の各要素でのガス圧[Pa]
GASDIF	real*8	(MXCHEM)	各成分のガス拡散係数×屈曲度[m²/sec]
AMOL	real*8	(MXCHEM)	各成分の分子量[g/mol]

表 2.4-2 变数一覧表

JNC TJ8400 2004-004

2.4.2 境界条件,初期条件

脱ガス・ガス拡散の機能追加に伴い, Dtransu に追加した境界条件, 初期条件ファイル 様式を変更した。その内容を表 2.3-3 に示す。また, 修正 に関する入力ファイル様式を 表 2.4-4 に示す。

行	カラム	書式	変数名	備考
1 行目	1~ 5	I5	NXCHEM	右つめ
2~2+NXCHEM-1	1~4	A4	MAT20	左つめ(成分名)
	5	-	-	空白
	6~15	F10.0	GASDIF	右つめ
	16~25	F10.0	TCON	右つめ
	26~35	F10.0	AMOL	右つめ
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

表 2.4-3 境界条件,初期濃度分布ファイルフォーマット

網掛け部が拡張領域

表 2.4-4 修正 , ファイルフォーマット

行	カラム	書式	变数名	備考
2~2+NXCHEM-1	1~4	A4	MAT20	左つめ(成分名)
	5	-	-	空白
	6 ~ 1 5	I5	要素番号	右つめ
	16~25	F10.0	GRETA	右つめ
	26~35	F10.0	ERETA	右つめ
	36~45	F10.0	ETEMP	右つめ

網掛け部が拡張領域

2.4.3 修正サブルーチン

本研究では,以下に示す3つのサブルーチンの修正を実施した。

1) SOL

境界条件,初期濃度分布ファイル(UNIT71)の読み込み部

修正 入力ファイル(UNIT75)の読み込み部

ガス拡散用のブロックコモン文の追加(GHEM00, GHEM01, GMAT00)

ガス拡散用のパラメータ文の追加(PSTAN, TSTAN)

COUPLYS(Coupling analysis system)関連

-) , に対する修正
-) 各時間ステップでの更新変数

ERETA: 気相濃度 - 液相濃度補正係数 ε

ETEMP: 各要素の温度

PBUN20: 各成分の各要素でのガス圧

2) CONCE

成分番号のサブルーチン SETELC への引き渡し(MCHEM)

3) ELM3IC

ガス拡散用のブロックコモン文の追加(GHEM00, GHEM01, GMAT00)

ガス拡散用のパラメータ文の追加(PSTAN, TSTAN)

分散係数の対角項へのガス拡散項の追加

ただし, ERETA, ETEMP, PBUN20 がサブルーチン SOL で更新されていることが 前提である。

ガス圧 PBUN20 がゼロの場合,ゼロ割が生じるので,変数 GASPTOL を用意し,この GASPTOLの値より PBUN20の絶対値が小さい場合はガス圧がゼロとしてガス拡散 係数をゼロに変更する(GASPTOL には 1×10⁻¹⁶を DATA 文で設定)。 3. 地球化学モデルの高度化

本章では,前章の物質移行の改訂に併せて,地球化学モジュールにおいて,脱ガス・ガス拡散モ デル,速度モデルなどが取り扱える様に改良した。更に,鉱物の取り扱いにおいて柔軟性を持たせ るための高度化を行った。

3.1 脱ガス・ガス拡散を考慮したモデルの検討

平成 14 年度の地球化学モデルは,鉱物の溶解/沈殿のみを取り扱うもので,液相-気相間の脱 ガスを考えない「閉鎖系」の取り扱いであった。本年度は,鉱物の溶解/沈殿に加えて,O₂,CO₂ 等の化学反応・脱ガスを考慮した地球化学モデルを構築した。

前述「2.1 脱ガス・ガス拡散を考慮したモデルの検討」の方程式群を解析するにあたり,以下の 取り扱いとする。

気相部が消滅した際の計算

THAMES の解析結果で飽和に到達した場合,すなわち $\theta = n$ となった場合は,ガス分圧を 0 に設定して PHREEQC の計算を進める。なお,前タイムステップで気相に存在した元素は全 量が液相に溶解する(次式で初期溶液濃度を補正する)。

 $\theta_{t+At} C_{t+At}^{0} = \theta C_t + (n - \theta_t) G_t$

飽和時に脱ガスが起こった際の計算

飽和到達後($\theta = n$)の計算中に,PHREEQCの計算でガス成分の飽和指数が過飽和になっ た場合は,脱ガス(気相部の生成)が起こることになる。しかし,脱ガスによる気相部の生成 はTHAMESの適用範囲外であるため,気相部体積はゼロのままとする。このとき,ガス分圧 は0のままPHREEQCの計算を進める。また,飽和到達後の計算中に,THAMESの計算で 不飽和になった場合は,気相部が生成したとし,PHREEQCの計算では脱ガスを考慮する。(飽 和指数が過飽和になった場合は,気相部に脱ガスする。未飽和の場合は当該成分のガス分圧は 0とする。)なお,上述のように,気相部の体積 $(n-\theta)V$ は,必ず THAMES の体積含水率を 使って計算する。(飽和であれば気相部の体積は必ず0となる。飽和到達後に THAMES の計 算で不飽和になった場合は,たとえガス成分がなくても気相部の体積は必ず値を持つ。) 3.2 考慮鉱物,速度モデル導入に関する検討

鉱物の多様性を考慮すべく,本年度は,スメクタイトのイオン交換,表面酸・塩基解離反応,オ ーバーパック腐食生成物の変遷を地球化学モデルに導入する。スメクタイトのイオン交換,表面酸・ 塩基解離反応についてのモデルは,第2次取りまとめの緩衝材間隙水化学モデルを採用した。

また,本年度は,緩衝材間隙水化学の時間的/空間的変遷を予測する上で重要となる地球化学現 象(スメクタイト,セメント系材料構成鉱物の溶解/沈殿など)について,速度モデルを導入した。

3.2.1 セメント系材料

セメント系材料の鉱物については,表3.2-1 に示す熱力学データ(BERNER,1990)に基づき,地球化学コード PHREEQC 様式の熱力学データを作成する。本研究では,低 pH セメントを想定し,C/S(セメント系材料の Ca 元素とSi 元素の比)=0.78 に着目していることから,当該 C/S に対応する H₄SiO₄(aq), CaH₂SiO₄の鉱物について熱力学データを作成した。なお,本表に示す熱力学データは,PHREEQE の熱力学データベースに基づき作成されたものであり,

初期溶液を純水として, C/S=0.78 の CSH (Ca と Si 系の水和物)ゲルとの平衡計算を実施 した結果を図 3.2-1 ~ 図 3.2-3 に示す。本図のプロットは,実験データを示しており,実戦,破 線は BERNER がモデル解析により求めた結果である。本検討で採用した熱力学データベース 並びに PHREEQC による結果(\rightarrow : 図中の赤矢印)は,実験データ(Ca 溶液濃度,Si 溶液濃 度,pH)とほぼ一致していることを確認した。

セメント系材料の Ca と Si 成分比	仮想鉱物の熱力学データ
(0) C/S=0	$SiO_2 + 2H_2O(l) = H_4SiO_4(aq)$
	$K = \frac{\left[H_4 SiO_4(aq)\right]}{\left[SiO_2\right]\left[H_2 O(l)\right]^2}$ $\log K = -2.71$
(1) $0 < C/S < 1$	$SiO_2 + 2H_2O(l) = H_4SiO_4(aq)$
	$K = \frac{\left[H_4 SiO_4(aq)\right]}{\left[SiO_2\right] \left[H_2 O(l)\right]^2}$ $\log K = -1.994 + \frac{0.861}{C/S - 1.2}$
	$CaH_2SiO_4 = Ca^{2+} + H_2SiO_4^{2-}$
	$K = \frac{\left[Ca^{2+}\right]\left[H_2SiO_4^{2-}\right]}{\left[CaH_2SiO_4\right]}$ $\log K = -7.12 - \frac{1 - C/S}{C/S} \left(0.79 + \frac{0.816}{C/S - 1.2}\right)$
(2) $1 < C/S < 2.5$	$Ca(OH)_2 = Ca^{2+} + 2OH^{-}$
	$K = \frac{[Ca^{2+}][OH^{-}]^{2}}{[Ca(OH)_{2}]}$ $\log K = -4.945 - \frac{0.338}{C/S - 0.85}$
	$CaH_2SiO_4 = Ca^{2+} + H_2SiO_4^{2-}$
	$K = \frac{[Ca^{2+}][H_2SiO_4^{2-}]}{[CaH_2SiO_4]}$ $\log K = -7.12$
(3) $2.5 < C/S$	$Ca(OH)_2 = Ca^{2+} + 2OH^{-}$
	$K = \frac{[Ca^{2+}][OH^{-}]^{2}}{[Ca(OH)_{2}]}$ log K = -5.15 $CaH_{2}SiO_{4} = Ca^{2+} + H_{2}SiO_{4}^{2-}$ $K = \frac{[Ca^{2+}][H_{2}SiO_{4}^{2-}]}{[Targer = 1]}$
	$\begin{bmatrix} CaH_2SiO_4 \end{bmatrix}$ $\log K = -7.12$

表 3.2-1 BERNER モデル CSH の熱力学データ



図 3.2-1 BERNER モデル文献値 (C/S vs. 総 Ca 液濃度)と事例解析用条件の比較



図 3.2-2 BERNER モデル文献値(総 Si 液濃度 vs. 総 Ca 液濃度)と事例解析用条件の比較



図 3.2-3 BERNER モデル文献値 (pH vs. 総 Ca 液濃度)と事例解析用条件の比較

- 3.2.2 速度論モデル
 - (1) 概要

本資料は,THMC(速度論モデルの導入)の構築に向け,速度論モデルを用いた場合の関連 データ(Mass Transport \rightarrow Chemical, Chemical \rightarrow Mass Transport の連成データ受渡し) 受渡し方法を明確にすることを目的として,PHREEQC による速度論モデルの予備解析を実 施した。また,THMC の信頼性を確認するための,検証用データセット(比較用解析結果) の準備を目的として PHREEQC による1次元物質移行 - 地球化学(速度論考慮)の計算を実 施した。

(2) 予備解析方針

THMC の検証は,今後,実施を予定している事例解析との共通性を考慮し,緩衝材,周辺 岩体で共通する鉱物として Calcite を採用した。また,事例解析などで想定される種々の事象 として,下記の4ケースを考慮したバッチ形の解析を実施した。

- ・ケース1: Calcite 未飽和側の反応(溶解速度を考慮した事象)
- ・ケース2: Calcite 過飽和側の反応(沈殿速度を考慮した事象)
- ・ケース 3: Calcite 未飽和側の反応 (反応途中で Calcite が枯渇する事象)
- ・ケース4:ケース1に基づき Pyrite を平衡鉱物とした場合

(3) 速度論モデル

方解石の反応速度に関する情報は,地球化学のテキストブック(Werner Stumm, James J.Morgan and Aquatic Chemistry)並びに phreeqc のマニュアルに記載されている速度式, 速度定数 (Plummer,L.N. et al., 1978) として,式1~式6を採用した。

$$R_{Calcite} = r_f (Area) \left[1 - \left(\frac{IAP}{K_{Calcite}} \right)^{\frac{2}{3}} \right]$$
(1)

$$r_{f} = k_{1}[H^{+}] + k_{2}[CO_{2}(aq)] + k_{3}[H_{2}O]$$
(2)

$$k_1 = 10^{(0.198 - \frac{444.0}{T})} \tag{3}$$

$$k_2 = 10^{(2.84 - \frac{2177.0}{T})} \tag{4}$$

$$k_3 = 10^{(-5.86 - \frac{317.0}{T})}$$
 (25 以下の場合) (5)

$k_3 = 10^{(-1.10-1)}$	(25 より大きい場合)	(6)
ここで,		
$\mathbf{R}_{\mathrm{Calcite}}$:	方解石の反応速度(mmol ⁻ cm ⁻² -s ⁻¹)	
Rf :	方解石の反応速度定数(-)	
Area :	反応物の表面積 (cm ² / little_water)	
T :	温度(K)	
[]:	化学種の活量 (mol / litter_water)	

である。

(4) 解析条件

解析条件を以下に示す。

- ・初期 pH=9, 初期 pe=5 (ケース 4: pH=7, pe=10), 初期溶液: 純水
- ・温度:25
- ・熱力学データ:<u>http://migrationdb.jnc.go.jp/cgi-bin/formf.cgi?1=980300</u>(phreeqc温 度依存熱力学データ)
- ・Calcite 初期濃度: 7e-4(mol / l_water), 1e-5(mol / l_water)
- ・SA / V: 5.0(cm² / little), モル分率の指数: 0.3
- ・反応時間:~2,000,000秒(約23日)

参考文献: Plummer, L. N., Wigley, T.M.L., and Parkhurst, D.L. (1978) The Kinetics of Calcite Dissolution in CO₂-Water Systems at 5 to 60 and 0.0 to 1.0 atm CO₂, Am. J. Sci. 278, 179-216.

(5) 解析結果

前記の解析条件により得られた結果を図 3.2-1~3.2-4 にそれぞれ示す。

- ・図 3.2-4:バッチ系(未飽和側)Calcite の速度論考慮
- ・図 3.2-5: バッチ系 (過飽和側) Calcite の速度論考慮
- ・図 3.2-6: バッチ系 (未飽和側) Calcite の速度論考慮 / 枯渇考慮
- ・図 3.2-7: バッチ系 (未飽和側) Calcite の速度論, Pyrite の平衡考慮
- ・図 3.2-8:カラム系 Calcite の速度モデル / 平衡モデルの比較
- (6) 結論

本予備計算を通じて得られた結果を以下に示す。

溶液濃度の受渡し部位:PHREEQC の入力,出力部位反応前・後における鉱物の質量:PHREEQC の入力,出力部位時間ステップの指定:PHREEQC の入力部位反応物の SA (表面積) / V (体積) 指定:PHREEQC の入力部位反応物の表面積を求める際に,モル分率(現反応物の質量 / 初期反応物の質量)に指数を考慮する場合:PHREEQC の入力部位温度の指定:PHREEQC の入力部位



図 3.2-4 速度モデル予備計算結果 (バッチ系・未飽和側 / 方解石)



図 3.2-5 速度モデル予備計算結果(バッチ系・過飽和 / 方解石)



図 3.2-6 速度モデル予備計算結果 (バッチ系・未飽和 / 方解石・枯渇ケース)





図 3.2-7 速度モデル予備計算結果 (バッチ系・過飽和 / 方解石・黄鉄鉱共存)



図 3.2-8 速度モデルを考慮した検証用データセット

3.3 地球化学解析コードの整備

前記の第2章,第3章の検討結果に基づき,鉱物の溶解/沈殿(平衡モデル・速度モデル併用; スメクタイトのイオン交換,表面酸・塩基解離反応,オーバーパック腐食性生物の変遷を含む),お よび O₂, CO₂等の化学反応・脱ガスを考慮した地球化学解析コードを整備した。

これらの整備に応じて,地球化学モジュール PHREEQC の改良項目の一覧を表 3.3-1 に示す。

表 3.3-1 地球化学モジュール PHREEQC 改良項目一覧(1/2)

No.	Get/Set 仕様	改良目的	パラメータ名称	単位	配列の制限
1	CS_getEx(*,"MCV_VND[%]",i-1)	温度変化の取り込み	温度		[10000]
2	CS_getEx(*,"PHQ_CNC20E[%][%]",i-1,j-1)	溶液濃度の取り込み	溶液濃度	mol/l_w	[10000][20]
3	Cs_setEx(*,"PHQ_CNC20E[%][%]",i-1,j-1)	溶液濃度の格納	溶液濃度	mol/l_w	[10000][20]
4	Cs_setEx(*,"PHQ_H2O2[%][%]",i-1,j-1)	H2(aq) , O2(aq)濃度の格納	H2(aq) , O2(aq)濃度	mol/l_w	[10000][2]
5	CS_getEx(*,"ADD_aintmin[%][%]",i-1,j-1)	鉱物濃度(平衡)の取り込み	鉱物濃度(平衡)	mol/l_w	[10000][20]
6	Cs_setEx(*,"ADD_aintmin[%][%]",i-1,j-1)	鉱物濃度(平衡)の格納	鉱物濃度(平衡)	mol/l_w	[8000][10]
7	Cs_setEx(*,"DELTA_PHASE[%][%]",i-1,j-1)	鉱物濃度変化量(平衡)の格納	鉱物濃度変化量(平衡)	mol/l_w	[10000][10]
8	CS_getEx(*,"PHQ_m[%][%]",i-1)	鉱物濃度(速度)の取り込み	鉱物濃度(速度)	mol/l_w	[10000][20]
9	Cs_setEx(*,"PHQ_m[%][%]",i-1,j-1)	鉱物濃度(速度)の格納	鉱物濃度(速度)	mol/l_w	[8000][10]
10	CS_setEx(*,"PHQ_DPK[%][%]",i-1,j-1)	鉱物濃度変化量(速度)の格納	鉱物濃度変化量(速度)	mol/l_w	[10000][10]
11	CC met(* "DHO stor")	速度モデルに関する時間幅の	口午日日中日		
	CS_get(", PHQ_step)	取り込み		8	-
12	CS_getEx(*,"PHQ_PBUN20[%][%]",i-1,j-1)	ガス分圧の取り込み	ガス分圧	-	[10000][20]
13	CS_setEx(*,"PHQ_GNG20E[%][%]",i-1,j-1)	ガス濃度の格納	ガス濃度	mol/l_w	[10000][20]
14	CS_getEx(*,"THM_VOL_G[%]",i-1)	気相体積の取り込み	気相体積	1	[10000]
15	CC = +E = (* "DIIO = EVOIDONO[0/][0/]" : 1 : 1)	イオン交換サイトにおける化	イオン交換サイトにお		[10000]["]
10	US_geidx(", FIQ_EAUIUUNU[%][%],1-1,3-1/	学種濃度の取り込み	ける化学種濃度	11101/1_W	[10000][9]

表 3.3-1 地球化学モジュール PHREEQC 改良項目一覧(2/2)

No.	Get/Set 仕様	改良目的	パラメータ名称	単位	配列の制限
10	$OC = +E_{-}(*, DIIO EVOILOONO DDI[0/][0/]"; 1; 1)$	イオン交換サイトにおける化	イオン交換サイトにお		[10000][r]
16	$CS_setEx(", PHQ_EACHCONC_PKI[\%][\%], I^{-1}, J^{-1})$	学種濃度の格納	ける化学種濃度	mol/1_w	[10000][5]
17	Cs_setEx(*,"PHQ_SURFMOL[%][%]",i-1,j-1)	表面サイトにおける化学種濃	表面サイトにおける化		[10000][2]
17		度の取り込み	学種濃度		[10000][9]
18	CS_getEx(*,"PHQ_REAC[%][%]",i-1,j-1)	REACTION データの取り込み	REACTION データ	mol/l_w	[10000][20]
19	Cs_setEx(*,"PHQ_pH[%]",i-1)	pH の格納	pН	-	[10000]
20	Cs_setEx(*,"PHQ_pe[%]",i-1)	pe の格納	ре	-	[10000]
21	Cs_setEx(*,"PHQ_TOTAL_H[%]",i-1)	トータル H の格納	トータル Η 濃度	mol/l_w	[10000]

aq: aqueous, 液相

l_w: litter_water, 液相体積

4. 熱 - 水 - 応力 - 化学連成解析コードの構築

本章では,ニアフィールド環境の複合現象について解析するためのコードを構築することを目的として,連成解析システムの高度化,物性・連成モジュールの拡張,連成解析コードの構築,物質移行モデル・地球化学モデルの高度化に関する検証について検討した。

4.1 連成解析システムの高度化

連成解析の高度化を図るべく,有限要素毎に実行される地球化学解析の並列処理方法に 関する検討を行ない,平成14年度に開発した連成解析システム(プロセス管理プログラム, 共有メモリ管理プログラム)の改良を実施する。

4.1.1 目的および概要

連成解析システムのサブシステムとして,要素毎に計算する地球化学計算の並列処理方法に関する検討を行ない,昨年度開発した連成解析システム COUPLYS(Coupling analysis system)環境下において作動するプラットホームを構築する。今年度に導入を予定している地球化学モジュール PHREEQC の計算を複数の CPU で処理するため,以下の環境で使用できる連成解析システムを作成した。

・連成解析システム COUPLYS:基本的に昨年度の COUPLYS と同じ。

Multi_PHREEQC: 本プログラムは,複数 CPU を有する UNIX マシン
 / Linux マシンにおいて COUPLYS 環境下または単独(COUPLYS 無し:ただし
 地球化学の計算のみ)で並列処理可能な PHREEQC を作成した。

4.1.2 Multi_PHREEQC の内容

Multi_PHREEQC は,図 4.1-1 に示すように COUPLYS のコントローラ(メモリ管理, プロセス管理)から,解析コード PHREEQC を1つの解析コードとして認識できるように, 新たに作成したものである。本 Multi_PHREEQC は,PHREEQC 単体(地球化学計算の み), COUPLYS との併用も可能である。Multi_PHREEQC は複数 CPU(1~複数個)の 対応が可能である。図 4.1-2 は,Multi_PHREEQC の処理フローとして 2 - CPU を例にし た場合を示している。

また, Multi_PHREEQC は, PHREEQC, 熱力学データの指定に加え CPU 等の情報を 与える必要があることから,表 4.1-1 に示す追加の入力データを作成する必要がある。 Multi_PHREEQC の入力ファイルは, ファイル名を「mpc.dat」【固定】とし, 実行形式プ

- 43 -

ログラム「mpc」と同じディレクトリに格納する。本表の「#」以降の文字は,コメントとして扱う。

なお、表 4.1-1 の入力では PHREEQC の出力制御についてもオプションを設けている(本 オプションの設定は, PHREEQC ソースプログラムに手を加えることなく制御している)。

Multi_PHREEQC の出力は,各要素の PHREEQC の出力ファイルを,全要素分の PHREEQC 実行終了後,一つのファイルにまとめ,その後,PHREEQC の出力ファイルを 削除する。なお,Multi_PHREEQC の出力ファイル名は,表 4.1-1 に示す入力ファイルの 3 行目に定義された PHREEQC 入力ファイル名の拡張子を除いた部分に,「.out」を付加し たものとする。



図 4.1-1 Multi_PHREEQCの概念



MultiPHREEQC入力ファイルからCPU 数、要素数等を読み込む。

CPU数分のスレッドを生成する。各スレッドは、 OSの制御により、自動的に各CPUに配分され る。

プログラム引数に、要素番号を付けて PHREEQCを起動する。

共有メモリ内の該当要素の元素濃度を用いて 計算を行う。

各スレッドに割振られた要素数分、 、 を繰 り返す。

全要素のPHREEQCの出力結果を MultiPHREEQC出力ファイルに保存する。



行	カラム	内容		
1	1	要素数		
2	1	CPU の個数		
3	1	PHREEQC 出力ファイルを、Multi_PHREEQC 実行後に削除するか		
		否かを指定する。		
		0 - 削除しない。		
		1 - 削除する。		
	2	PHREEQC からコンソールへの出力を表示するか否かを指定する。		
		0 - 表示しない。		
		1 - 表示する。		
	3	Multi_PHREEQCの出力ファイルに出力される内容を指定する。		
		0 - 出力なし。		
		1 - PHREEQCの出力ファイルを全て出力する。		
		2 - PHREEQCの出力ファイル中で、「Beginning of		
		batch-reaction calculations」以降のデータのみを出力		
		する。		
4	1	PHREEQC の熱力学データベースファイル名		
5 行目	1	PHREEQC の入力ファイル名		
以降	2	対応要素番号 「,」「-」で区切って複数指定可能		
		例)1 No.1 の要素の入力ファイル		
		2,3 No.2 と No.3 の要素の入力ファイル		
		4-6 No.4 から No.6 の要素の入力ファイル		
٢-1 ا	1	入力ファイルの指定終了		
次行	1			

表 4.1-1 Multi_PHREEQC の入力仕様並びに入力例

例) 要素数「7220」, CPU 数「2」

7220	# No. of elements
2	# No. of CPUs
sample1.in	# PHREEQC input file

PHREEQC.dat # PHREEQC thermodynamic database file

1 0 2 # option [deletion][standard out][output type]

4.1.3 Multi_PHREEQC の使用方法

(1) ディレクトリ構成

Multi_PHREEQCのディレクトリ構成を以下に示す。



図 4.1-3 Multi_PHREEQC ディレクトリ構成

(2) コンパイル方法

以下の手順で Multi_PHREEQC をコンパイルする。

cd \$COUPLYS_HOME/src/MultiPHREEQC

make

注) COUPLYS_HOME COUPLYS がインストールされているディレクトリ が設定されている環境変数

コンパイル後,実行形式プログラム「mpc」は,\$COUPLYS_HOME/bin ディレ クトリにコピーされる。なお,Multi_PHREEQCは,必ず,COUPLYS本体と同 じディレクトリに格納すること。

(3) 実行方法

COUPLYS 本体から,実行形式プログラム「mpc」を起動する。(通常の解析コードと同様に, control.dat に定義する。)

4.2 物性・連成モジュールの拡張

連成挙動に係る物性値の相互依存性について,本年度は,セメント影響に係る既存の知 見およびデータについて調査した。また,この調査結果に基づき,平成14年度に作成した 物性・連成モジュールを拡張する。本研究では,前記の検討に加え,空隙率変化モジュー ルについても,簡易な取り扱い方法を反映し改訂を行った。

4.2.1 空隙率変化モジュール

体積 $V[m^3]$ の微小セルを対象に,セル内の鉱物濃度 $MIN[mol/m^3_Cell]$,セルの乾 燥密度 $\rho [kg/m^3]$,空隙率 $\varepsilon [-]$ として,乾燥密度および空隙率の変化を検討する。な お,セルの体積は不変とする。時刻 tにおいてセル内に存在する鉱物量(固相の量)は, マスバランスから乾燥密度およびセル内の鉱物濃度と次式の関係にある。

$$m_t = \rho_t \bullet V = \sum_i \left(MIN_t^i \bullet V \bullet A^i \times 10^{-3} \right)$$
(1)

ここで, *m_t*: 時刻 *t*におけるセル内の全鉱物量(固相の量)[kg]

 ρ_t : 時刻 *t*におけるセルの乾燥密度 [kg/m³]

 MIN_t^i :時刻 tにおけるセル内の鉱物 iの濃度 [mol/m³_Cell]

- A^i : 鉱物 iの分子量 [g/mol]
- *V*: セルの体積 [m³]

(1)式を書き直すと,乾燥密度は鉱物濃度から次式で計算できる。これは,時刻 t における PHREEQC の計算で得られた鉱物濃度に各鉱物の分子量を乗じて総和を取り,これを時刻 t+∆t(次タイムステップ)の乾燥密度として使用する(受け渡す)ことを表している。

$$\rho_{t+\Delta t} = \sum_{i} \left(MIN_{t}^{i} \times \frac{A^{i}}{1000} \right)$$
(2)

なお,平成14年度版THMCはTHAMESで得られた乾燥密度に溶解・沈殿による密度の変化量を加えて,乾燥密度を求めていた(次式参照)。

$$\rho_{t+\Delta t} = \rho_{THAMES} + \Delta \rho_t \tag{3}$$

ここで,

 ρ_{THAMES} :時刻 tにおける THAMES の計算で得られた乾燥密度 $[kg/m^3]$

 $\Delta \rho_t$:時刻 tにおける PHREEQC の計算に基づく乾燥密度の変化量 [kg/m³] (3)式中の密度の変化量 $\Delta \rho_t$ は,時刻 tにおける PHREEQC の計算で得られた溶解・沈殿 の変化量 (PHREEQC の Delta Phase 変数)を用いて,次式で求めることができる。

- 48 -

(3)式と(4)式から,時刻 *t+*Δ*t*(次タイムステップ)の乾燥密度は,漸化式の形式では次式 で表される。

$$\rho_{t+\Delta t} = \rho_{THAMES} + \sum_{i} \left(\left(-\Delta Phase \right)_{t}^{i} \bullet \theta_{t} \bullet A^{i} \right)$$
(5)

以上のように, PHREEQC で計算された鉱物の溶解・沈殿を反映した乾燥密度は,(2)式 あるいは(5)式から求めることができる。

一方,空隙率と乾燥密度は以下の関係で表される。

$$\rho = (1 - \varepsilon)\rho_0$$
 (6)

 ここで,
 ρ
 :乾燥密度 [kg/m³]

 ρ_0
 : 真密度 [kg/m³]

 ε
 :空隙率 [-]

これより,(2)式あるいは(5)式で求めた乾燥密度を用いて,時刻 *t+*Δ*t* における空隙率は次 式で求めることができる。

$$\rho_{t+\Delta t} = (1 - \varepsilon_{t+\Delta t})\rho_0$$

$$\therefore \varepsilon_{t+\Delta t} = 1 - \frac{\rho_{t+\Delta t}}{\rho_0}$$
(7)

ここで,

 \mathcal{E}_{t+At} : 時刻 $t+\Delta t$ における空隙率 [-]

 ρ_{t+At} : 時刻 $t+\Delta t$ における乾燥密度 [kg/m³]

 ρ_0 : 真密度 [kg/m³]

``

(7)式を用いて,空隙率を求める際は真密度 ρ_0 の設定に注意が必要である。ここで用いる 真密度は,(1)式と(6)式から,鉱物の初期濃度と次式の関係を満たす必要がある。すなわち, (7)式中の真密度 ρ_0 は,物理的な真密度ではなく解析対象とする系(媒体)の初期鉱物濃度 の総和として設定する必要がある。
$$(1 - \varepsilon_0)\rho_0 = \sum_i \left(MIN_0^i \cdot \frac{A^i}{1000} \right)$$
(8)

ここで,

 ε_0 : 初期空隙率 [-]

 ρ_0 : 真密度 [kg/m³] = 初期密度 [kg/m³]

 MIN_0^i : セル内の初期鉱物濃度 $[mol/m^3_Cell]$

以下,具体的な事例で説明する。

(1) 単一鉱物系

例えば, Calcite(分子量 100, 真密度 2500[kg/m³]とする)を充てんした単一 鉱物のカラム(空隙率 0.33 とする)を解析する場合を考える。

密度および空隙率(あるいは乾燥密度)が与えられた場合→鉱物濃度設定 Calcite の現実の真密度およびカラムの空隙率より,カラム内の初期 Calcite 濃度は(8)式から以下となる。

$$(1-0.33) \times 2500 = MIN_0 \times \frac{100}{1000}$$

 $MIN_0 = 1.675 \times 10^4$

したがって,初期の Calcite 濃度として 1.675×10⁴ [mol/m³_Cell]を設定(入 力)することで,セル内の鉱物濃度,空隙率,乾燥密度の関係を満足させた値 となる。ただし,沈殿濃度(鉱物濃度)が解析中にこの濃度を超える場合,鉱 物の密度が真密度を超えることになり,空隙率が負値となるため,補正が必要 となる。

空隙率および鉱物濃度が与えられた場合→真密度(初期密度)設定

空隙率が 0.33, 初期の Calcite 濃度(鉱物量)が 1.0 [mol/m³_Cell]で与えら れた場合,初期密度(解析上の真密度)は(8)式から以下となる。

$$(1-0.33)\rho_0 = 1.0 \times \frac{100}{1000}$$

 $\rho_0 = 1.4925 \times 10^{-1}$

ここで設定する初期密度 0.14925 [kg/m³]は現実の真密度 2500 [kg/m³]より, はるかに小さいが,セル内の鉱物濃度,空隙率,乾燥密度の関係を満足させる 値として,これを入力しなければならない。

真密度および鉱物濃度が与えられた場合→空隙率設定

真密度が 2500 [kg/m³], 初期の Calcite 濃度(鉱物量)が 100.0 [mol/m³_Cell] で与えられた場合, 初期空隙率は(8)式から以下となる。

$$(1 - \varepsilon_0) \times 2500 = 100.0 \times \frac{100}{1000}$$
$$\varepsilon_0 = 0.996$$

ここで設定する初期空隙率 0.996 は,ほとんど水媒体に近い状態であるが,セル内の鉱物濃度,空隙率,乾燥密度の関係を満足させる値として,これを入力しなければならない。

(2) 複数鉱物系

例えば,30[wt%]ケイ砂混合体のベントナイト系緩衝材(乾燥密度 1600 [kg/m³],真密度 2700 [kg/m³])を対象とした解析を考える。ここで,ベントナ イト(クニゲル V1)中の鉱物組成は,下表に示すとおりとする。

鉱物	2000 年レポート	設定(便宜的)
モンモリロナイト	46~49	$50 \mathrm{~wt\%}$
石英 / 玉髄	29~38	$35 \mathrm{~wt\%}$
長石類	$2.7 \sim 5.5$	$5 \mathrm{~wt\%}$
方解石	$2.1 \sim 2.6$	$2.5 \mathrm{~wt\%}$
苦灰石	$2.0 \sim 2.8$	$2.5~{ m wt\%}$
方沸石	$3.0 \sim 3.5$	4.0 wt%
黄鉄鉱	$0.5 \sim 0.7$	$1.0 \mathrm{~wt\%}$
有機物	$0.31 \sim 0.34$	0 wt%
(合計)	-	100 wt%

表 4.2-1 緩衝材構成鉱物

ここで,ベントナイト中の全鉱物を解析の対象にする場合は,緩衝材中の各鉱物の乾燥密度および鉱物濃度の入力値は次表となる。

緩衝材	鉱物	重量比 [-]	乾燥密度 [kg/m ³]	鉱物濃度 [mol/m ³ _Cell]
クニゲル V1	モンモリロナイト	0.5×0.7	560	左欄の乾燥密度を
	石英/玉髄	0.35×0.7	392	各鉱物の分子量で
	長石類	0.05×0.7	56	除算して算出。
	方解石	0.025×0.7	28	
	苦灰石	0.025×0.7	28	
	方沸石	0.04×0.7	44.8	
	黄鉄鉱	0.01×0.7	11.2	
ケイ砂	-	0.3	480	
(合計)	-	1.0	1600	-

表 4.2-2 緩衝材構成鉱物濃度の設定方法

また,空隙率の初期値は(7)式から,0.407となる(入力値)。

$$\varepsilon = 1 - \frac{1600}{2700} = 0.407_4$$

上述した例は,緩衝材の構成鉱物を全て解析に含める場合であるが,これは全 鉱物の平衡計算(溶解・沈殿反応)を必ず行うため,PHREEQCの計算に非常 に時間がかかるとともに,Dtransuの解析における移行の対象元素が多大にな る。特に,平衡計算の場合は計算に含めた鉱物が必ず溶解あるいは沈殿を生じ るため,化学場の変遷が過度に複雑になる。このため,一般的には対象とする 鉱物(化学反応)を絞った問題設定がなされることが多い。

解析対象の鉱物(地球化学反応)を絞った問題を設定した場合の乾燥密度の設 定方法として,地球化学計算に含めない鉱物の乾燥密度を定数として設定する 方法が整合的である。すなわち,(8)式を書き直すと,乾燥密度は各鉱物の乾燥 密度の和として表すことができる。

$$\rho = \sum_{i} \rho^{i} \tag{9}$$

ここで,

ρ: 解析対象とする媒体の乾燥密度 [kg/m³]

 ρ^i : 鉱物 iの乾燥密度 [kg/m³]

(9)式において,反応に寄与しない鉱物の乾燥密度を定数としてあらかじめ与 えておけば,媒体の乾燥密度は次式で計算することができる。

$$\rho = \sum_{i} \rho^{i} + \rho_{const} = \sum_{i} \left(MIN^{i} \cdot \frac{A^{i}}{1000} \right) + \rho_{const}$$
(10)

ここで, ρ_{const} : 反応に寄与しない鉱物の乾燥密度(定数)[kg/m³] (10)式は,反応を考慮した鉱物の溶解・沈殿に伴う乾燥密度の変化と,反応に 寄与しない鉱物の乾燥密度(定数)の和から,媒体の乾燥密度を求めることを 表している。これにより,解析対象としない鉱物に対する地球化学の冗長的な 計算を避けることができる。

一例として,前述の緩衝材(30%ケイ砂混合体,乾燥密度 1600 [kg/m³],真 密度 2700 [kg/m³])において,モンモリロナイトと方解石のみを反応鉱物とし て設定する場合を考える。各鉱物の乾燥密度および鉱物濃度の初期入力値は以 下となる。

緩衝材	鉱物	重量比 [-]	乾燥密度 [kg/m ³]	鉱物濃度 [mol/m ³ _Cell]
クニゲル V1	モンモリロナイト	0.5×0.7	560	乾燥密度を分子量で
	方解石	0.025×0.7	28	除算して設定。
	その他	0.3325	1010	-
ケイ砂	-	0.3	1012	-
(合計)	-	1.0	1600	-

表 4.2-3 緩衝材構成鉱物濃度の設定方法

上表のように,地球化学計算に含めない鉱物(モンモリロナイトおよび方解石 以外の鉱物)の乾燥密度 1012 [kg/m³]を定数と設定する。また,空隙率の初期 値は,前述の場合と同様に,0.407 となる(入力値)。このような設定(初期入 力)を行うことにより,反応を考慮した鉱物(モンモリロナイト,方解石)が 計算中に全て溶解しても,緩衝材領域の最小乾燥密度は 1012 [kg/m³],最大空 隙率は0.63 として扱われる。

4.2.2 緩衝材透水係数変化モジュール(飽和状態)

図 4.2-1 に種々のベントナイト材料の平衡膨潤圧と乾燥密度の関係を示す。ここに示して あるのはクニゲル V1・MX-80・クニピア F の測定結果(鈴木ほか,1992),クニゲル V1 およびクニゲル V1 とケイ砂の混合体(以下,ケイ砂混合体とする)に蒸留水・人工海水を 浸潤させた際の測定結果(核燃料サイクル開発機構,1999),ケイ砂混合体と MX-80 に異 なる濃度の NaCl 溶液を浸潤させた際の結果(早川ほか,2003)である。同図より,乾燥 密度が大きくなるに従い,膨潤圧は大きくなっていることが分かるが,同一乾燥密度の場 合,ケイ砂混合体が最も膨潤圧が小さいことが分かる。そこで,乾燥密度とケイ砂の混合 率から次式に示す有効粘土密度 ρ_e を求めた(核燃料サイクル開発機構,1999)。

$$\rho_e = \frac{\rho_d \left(100 - Rs\right)}{\left(100 - \frac{\rho_d Rs}{\rho_s}\right)} \tag{1}$$

ここで, ρ_e :有効粘土密度 (Mg/m³), ρ_d :乾燥粘土密度 (Mg/m³), Rs:ケイ砂の乾燥質量での混合率(%), ρ_s :ケイ砂の土粒子密度(Mg/m³)である。ここで, ρ_s =2.64 Mg/m³ とした。

有効粘土密度と平衡膨潤圧との関係を図 4.2·2 に示す。有効粘土密度を用いることにより ベントナイトが同じ場合(ここではクニゲル V1),ケイ砂の有無に関係なく有効粘土密度 が同じであれば,同じ膨潤圧の値になることが分かる。しかし,ベントナイトが異なる場 合,モンモリロナイト含有率の差により平衡膨潤圧の値が大きく異なり,モンモリロナイ ト含有率が最も高いクニピア F が最も発生する膨潤圧の値が高くなっている。そこで,次 式により有効モンモリロナイト密度 ρ_{em} (財団法人原子力環境整備促進・資金管理センター, 2002)を求め整理し直した。

$$\rho_{em} = \frac{C_m \rho_e}{\left(100 - (100 - C_m) \frac{\rho_e}{\rho_{nm}}\right)}$$
(2)

ここで, ρ_{em} :有効モンモリロナイト密度(Mg/m^3), C_m :モンモリロナイト含有率(%), ρ_{nm} :ベントナイト内におけるモンモリロナイト以外の鉱物の土粒子密度(Mg/m^3)である。 ここで,各種ベントナイトのモンモリロナイト含有率およびベントナイト内におけるモン モリロナイト以外の鉱物の土粒子密度は以下の通りとした。

クニゲル V1:
$$C_m = 58.6\%$$

- MX-80 : $C_m = 75.0\%$
- クニピア F: $C_m = 99.0\%$

$$\rho_{nm} = 2.81 \text{Mg/m}^3$$

有効モンモリロナイト密度と平衡膨潤圧の関係を図 4.2-3 に示す。同図より,有効モンモ リロナイト密度で整理すると,ベントナイトの種類およびケイ砂の混合率に関係なく,平 衡膨潤圧との関係が一意的に決まることが分かる。同図より得られた有効モンモリロナイ

- 54 -

ト ρ_{em} (Mg/m³) と平衡膨潤圧 σ_{sw} (MPa) との関係は次式のようになる。

 $\sigma_{sw} = 0.0013 \exp(5.6917 \rho_{em})$

(3)

また,図4.2-4には種々のベントナイト材料の透水係数と乾燥密度の関係を示す。データ としては,核燃料サイクル開発機構により取得されたクニゲル V1 およびケイ砂混合体(松 本ほか,1997),電力中央研究所により取得されたクニゲルV1およびケイ砂混合体(小峯・ 緒方,2001),原子力環境整備促進·資金管理センターにより取得されたクニゲル V1と礫 砂の混合体, enresa により取得された FEBEX ベントナイト (enresa, 1998), 核燃料サ イクル開発機構により取得されたベントナイト OT-9607 (Fujita et al., 1997), SKB によ り取得された MX-80 (Börgesson and Hernelind, 1999), TRU 廃棄物処分を対象にして 核燃料サイクル機構により取得された Na 型ベントナイト (クニゲル V1) およびクニゲル V1 を Ca 型化したベントナイト(笹倉ほか,2002)の値を合わせて示している。FEBEX ベントナイトについては実測値に基づく関数式から得られる直線を示している。平衡膨潤 圧とは逆に,乾燥密度が同じ場合,ケイ砂あるいは礫砂の混合率が高くなるほど,透水係 数は大きくなっている。図 4.2–5 には有効粘土密度で整理した結果を示す。Ca 型ベントナ イトである FEBEX ベントナイトは有効粘土密度が約 1.4Mg/m³以下になると急激に透水係 数は大きくなっており,また,クニゲル V1をCa型化したベントナイトは他のベントナイ トより1桁程度値が大きいが,それ以外のベントナイトはほぼ直線に乗ってくることがわ かる。 すなわち , Na 型ベントナイトであるクニゲル V1 および MX-80 は有効粘土密度で整 理することにより一意的に透水係数と関係付けることが出来ると考えられる。ここで,連 成物性モジュールの作成に当たり、有効粘土密度よりは有効モンモリロナイト密度で整理 した方が,鉱物の変化との関連がつけ易いため,図 4.2-5 においてクニゲル V1 のケイ砂混 合体に対して有効モンモリロナイト密度を求め,透水係数との関係を求めた。結果を,図 4.2-6 に示す。ここでは,核燃料サイクル機構により取得されたデータと,電力中央研究所 により取得されたデータのうち比較的データのバラツキが少ないベントナイトの配合率が 少ないデータを用いてプロットした。その結果,得られた有効モンモリロナイト密度 ρ_{em} (Mg/m³)と透水係数 k_{sat} (m/s)の関係は次式の通りとなる。

 $k_{sat} = 7.0 \times 10^{-11} \times \exp(-5.1561 \rho_{em})$

(4)

また,緩衝材の透水係数に関しては,核燃料サイクル開発機構により図 4.2-7 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 4.2-7 に示してある人工海水を用いた場合の透水係数のデータ,図 4.2-5 に示した Ca 型化したベントナイトの透水係数のデータおよび図 4.2-6 のデータを用 いて,透水係数 k_{sat} (m/s)を有効モンモリロナイト密度 ρ_{em} (Mg/m³),塩濃度 *C*(%)および Ca 型化率 *Ca*(%)の関数として関係式を作成する。ここで,蒸留水の塩濃度は 0.0%,人工 海水の塩濃度は 3.3%とした。また,Ca 型化率 *Ca*(%)は以下のように定義されている。

$$Ca = \frac{\alpha - \alpha_0}{\alpha_{100} - \alpha_0} \times 100 \tag{5}$$

ここで, はベントナイトの Ca²⁺イオン含有率であり, , *o*および 100 はそれぞ れ以下のようになる。

$$\alpha = \frac{Ca^{2+}}{Ca^{2+} + Na^{+}} \tag{6}$$

$$\alpha_0 = \frac{Ca_{\text{int}}^{2+}}{Ca_{\text{int}}^{2+} + Na_{\text{int}}^+}$$
(7)

$$\alpha_{100} = \frac{Ca_{fin}^{2+}}{Ca_{fin}^{2+} + Na_{fin}^{+}}$$
(8)

ここで, Ca_{int}^{2+} はクニゲル V1 に含まれる交換性 Ca^{2+} イオン総量(meq/100g), Ca_{fin}^{2+} は Ca 型化処理後のベントナイトに含まれる交換性 Ca^{2+} イオン総量(meq/100g), Na_{int}^+ はク ニゲル V1 に含まれる交換性 Na^+ イオン総量(meq/100g), Na_{fin}^+ は Ca 型化処理後のベント ナイトに含まれる交換性 Na^+ イオン総量(meq/100g), α_0 は Ca 型化率 0%(Na 型化ベン トナイト)と定義したベントナイトの Ca²⁺イオン含有率, α_{100} は Ca 型化率 100%と定義し たベントナイトの Ca²⁺イオン含有率である。クニゲル V1(Na 型) および Ca 型化したク ニゲル V1 の交換性陽イオンの量は表 4.2-4 のような値が得られている(笹倉ほか,2002)。 同表には第 2 次取りまとめに示してある交換性陽イオンの量も示している。表 4.2-4 より, α_0 は 0.43, α_{100} は 0.92 となる。

試験項目	材料	クニゲル V1 (笹倉ほか, 2002)	Ca 型化クニゲル V1(笹倉ほか, 2002)	クニゲル V1 (第 2 次取りまと め)
	Na+	60.8	8.3	54.6
溶出陽イオン	Ca^{2+}	45.9	97.4	41.9
(meq/100g)	Mg^{2^+}	3.6	11.0	6.6
	K+	2.0	1.5	1.3
		0.43	0.92	0.43
Ca 型化率 (%)		0	100	0

衣 4.2 ⁻ 4 クークル VI のよび Ua 空化しにクークル VI の成力方机	4.2-4	.2-4 クニゲル V1 および (Ca 型化したクニゲル	V1 の成分分析結果
---	-------	--------------------	-------------	------------

以上より得られた透水係数の関係式は以下の通りとなる。

 $\ln(k_{sat}) = -10.0914 - 2.3240\rho_{em} + 0.4073C + 0.0103Ca$ (9)

ここで,

k_{sat} :	透水係数(m/s)
<i>em</i> :	有効 _{モンモリロナイト} 密度(Mg/m ³)
C:	塩濃度(%)(0 C 3.3%)
Ca:	Ca型化率(%)(0 <i>Ca</i> 100%)

図 4.2-8 には,図 4.2-6 に示す蒸留水により得られたケイ砂混合体,図 4.2-7 に示す人工 海水により得られたケイ砂混合体および Ca 型化ベントナイトの透水係数の実測値と,(9) 式を用いてそれぞれの透水係数が得られた時の有効モンモリロナイト密度,塩濃度および Ca 型化率から得られた透水係数の比較を示す。(9)式により算出された透水係数の値は実測 値と良い一致を示している。

- 57 -



図 4.2-1 各種ベントナイトの乾燥密度と平衡膨潤圧の関係



図 4.2-2 各種ベントナイトの有効粘土密度と平衡膨潤圧の関係



図 4.2-3 各種ベントナイトの有効モンモリロナイト密度と平衡膨潤圧の関係



図 4.2-4 各種ベントナイトの乾燥密度と透水係数の関係







図 4.2-6 クニゲル V1 を用いたケイ砂混合体の有効モンモリロナイト密度と透水係数の関

係



図 4.2-7 透水係数と有効粘土密度の関係(蒸留水および人工海水)





4.2.3 緩衝材透水係数変化モジュール(不飽和状態)

緩衝材の不飽和浸透特性として現在,水分拡散係数が使用されている。これはある仕様 (ケイ砂混合率および乾燥密度(間隙率)が一定,浸潤水として蒸留水を使用)の基での 体積含水率と水分拡散係数の関係として取得されており,その関数式が数値計算に用いら れている。しかしながら,今回,地球化学との連成を検討しようとする場合,鉱物の溶解・ 沈殿等に伴う間隙率の変化や海水の浸潤等を考慮する必要があるため,現在使用されてい る水分拡散係数ではこれらの考慮が難しいというのが現状である。そこで,今年度は,不 飽和浸透特性として不飽和透水係数を使用することとする。図 4.2-9 にはケイ砂混合体(ケ イ砂混合率 30%,乾燥密度 1.6Mg/m³)の水分拡散係数を示す。水分拡散係数 D_{θ} [cm²/s]は 次式のように体積含水率 θ [-]と温度T[]の関数となっている。

$$D_{\theta} = \frac{a_{1}(\theta - \theta_{s})}{(\theta - b_{1})(b_{1} - \theta_{s})} + \frac{a_{2}\theta}{b_{2}(\theta - b_{2})}$$
(10)

$$a_{1} = 2.99 \times 10^{-8}T - 3.74 \times 10^{-7}$$

$$a_{2} = -1.50 \times 10^{-8}T + 1.49 \times 10^{-7}$$

$$b_{1} = -2.49 \times 10^{-3}$$

$$b_{2} = 5.59 \times 10^{-4}T + 3.93 \times 10^{-1}$$

$$\theta_{s} = 0.403$$

$$0 \quad \text{Mixin [25]}$$

$$0 \quad \text{Mixin [40]}$$

$$\Omega = 0.403$$

$$0 \quad \text{Mixin [40]}$$



図 4.2-9 ケイ砂混合体の水分拡散係数 (ケイ砂混合率 30%, 乾燥密度 1.6Mg/m³)

なお,水分拡散係数 D_{θ} と不飽和透水係数kは次式のような関係にある。

$$k = D_{\theta} \cdot C(\theta) = D_{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial \psi}$$
(11)

ここで, $C(\theta) = \partial \theta / \partial \psi$ は比水分容量と呼ばれ,水分特性曲線の上の,ある水分ポテンシャル ψ [m]における勾配である。

ケイ砂混合体の水分特性曲線は図 4.2-10 のようになっている。プロットが実測値であり, 25,40,60 の時の値が得られている。水分ポテンシャルの温度依存性は水分拡散係数に 比べて小さいと考えられ,水分ポテンシャルは体積含水率のみの関数として関数式が設定 され数値計算に使用されている。ここで,関数式として次式に示す van Genuchten 式が採 用されている。

$$S_{e} = \frac{\theta - \theta_{r}}{\theta_{s} - \theta_{r}} = \left\{ 1 + \left| \alpha \psi \right|^{n} \right\}^{\left(1 - \frac{1}{n} \right)}$$
(12)

ここで, *S*_e は有効間隙率, *s*[-]は飽和体積含水率, *r*[-]は最小容水量, [1/m], *n*[-] はパラメータである。

各パラメータは以下のように得られている。

$$\theta_s = 0.403$$

 $\theta_r = 0.000$

 $\alpha = 8.0 \times 10^{-3}$

 $n = 1.6$
(13)

図 4.2-10 には(12), (13)式より得られる van Genuchtenの関数式を示す。



図 4.2-10 ケイ砂混合体の水分特性曲線 (ケイ砂混合率 30%, 乾燥密度 1.6Mg/m³)

また, van Genuchten 式によると比水分容量は次式のようになる。

$$C(\theta) = \alpha \cdot (n-1)(\theta_s - \theta_r)(S_e)^{1/m} (1 - (S_e)^{1/m})^m$$
(14)

$$m = 1 - 1/n \tag{15}$$

ここで,(13)式に示す(14)式の各パラメータ,および(11)式より不飽和透水係数を算出す ることとする。結果を図 4.2-11 に示す。なお飽和透水係数 ksは 4×10⁻¹³ m/s であるが,上 記の手順により不飽和透水係数を算出すると有効飽和度が高い部分で飽和透水係数より大 きくなってしまっている。解析の際には,(11)式より得られた透水係数が飽和透水係数より 大きくなると透水係数の値を飽和透水係数とするように処理している。今年度の計算では 不飽和透水係数として,次式を使用することとする。

 $k = k_s \cdot S_r^{\ n_b} \tag{16}$

ここで,*S*rは飽和度,*n*bはパラメータである。

図 4.2-11 には nb=2.5 とした時の(16)式より得られる不飽和透水係数の値を示す。今回の 解析では、(16)式を緩衝材の不飽和透水係数の関数式として用いる。本式を用いることによ り、間隙率の変化や、浸潤水の影響による飽和透水係数の違いを解析で考慮できることに なる。



図 4.2-11 不飽和透水係数の比較

4.3 連成解析コードの構築

前記の第2章"物質移行モデルの高度化",第3章"地球化学モデルの高度化",4.1 "連成解 析システムの高度化",4.2 "物性・連成モジュールの拡張"で得られた成果に基づき,熱-水 - 応力-化学連成解析コードを構築した。

THAMES, Dtransu, PHREEQCを連成させるための連成モジュールを作成し,熱-水-応力-化学連成解析コードを構築した。本研究で構築した連成解析コードの処理フローを図 4.3-1 に示す。また,本図フローの各要素の入出力情報ならびにデータの授受を行う上で必要となる共有メモリ名称,処理方法の概要についてまとめた結果を表 4.3-1(1/8)~表 4.3-1(8/8)に示す。

		\frown	\frown
START) (A)	(В)	(c)
1	20 \downarrow	$_{39}$ \checkmark	58 \checkmark
THAMES	CREARANGE2	REACTION	CC CONV2
2	21	40	59 1
MESHCONV	EXSORT	CHMINE	DTRANSU
3 1		41	60 1
THAMES	GDENS	CHUNIT3	CC CONV1
4	23	42	
DTRANSU	PPRESS2	GASVOL	DELTAHYDO
5	24 V	43	62 V
NTOECONV	ELEMCONC	DTIME	PPRESS
6 1	25	44	63 V
DTRANSU	ELEMCONC2	MPC	CHMINE
7	26 1	45	
CC CONV1	CHUNIT2	HYDOCONC	CHUNIT3
8 1	27 \checkmark	46	65 V
DTRANSU	CHMINE2	CREARANGE2	SAVEPHPE
9 1		47	66 V
ADDINP	CHPREM	EXSOURCE	ELEMCONC
10	29	48	67
MINSORT	DTRANSU	EXSORT	RMMINE
11	30 🗸	49	68 V
KMINSORT	CC CONVT2	SURFACE	CHUNIT2
12	31 🗸	50	69
CDENS	DTRANSU	EPSIRON	CHMINE2
13	32 🗸	51	70
CHEMLEN	THAMES	TPRESS	CHPERM
14		52 V	71
INITVOL	DTRANSU	SOURCE	DTRANSU
15	34	53	72 V
GASVOL	MESHCONV	CONVT3	THAMES
16	35 🗸	54	\checkmark
CHMINE	DTRANSU	ELEMCONC	D ITER EXIT= 1
17	36 🗸	55	
CHUNIT3	NTOECONV	ELEMCONC2	
18	37	56	END
MPC	DTRANSU	CHUNIT2	
19	38	57	
HYDOCONC	CHCONC2	CHMINE2	
×	\checkmark	×	
$\left(A \right)$	В	С	

図 4.3-1 熱 - 水 - 応力 - 化学連成解析コードの処理フロー

表 4.3-1 各モジュールにおける入出力情報一覧(1/8)

番号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理内容 / 処理方法
1	THAMES	-	-	-	-	THAMES 入力データの読み込み
		20節点要素データ	THM_x,THM_y,THM_z	8節点要素データ	MCV_X,MCV_Y,MCV_Z	20 節点要素データから 8 節点要素デー
		タルシー 流速 Vd[m/s] 体理会北東 0[]	THM_VEL	クルシー流速 Vd [m/s] はほ会せて 0[]	MCV_VEL MCV_CATVOI	タイの変換
2	MESHCONV	体積呂小舎り[-]	THM_SATVOL	体視さ小傘切り	MCV_SATVOL	
					MCV_HEADI MCV_TEMD1	
			THM FIDENC		MCV_IEMF1 MCV_DENS1	
9	THAMES	派体密度 pw[kg/m [*]]	I HM_FLDENS	流体出度 pw [kg/m [*]]	MCV_DENSI	
э	THAMES	- 	-	- 	- DTP MAT20	
4	Dtransu	兀糸石 筋占溶液濃度[mo]/m3 m]	-	兀糸石 筋占溶液濃度[mol/m3 m]	DTR_MAI20	Dtransu入力テータの読み込み
~	NTOFOONV		MOV VND		MCU VND	筋上泪斑から亜美泪斑々の恋協
о С	Dturner		MCV_VND		MCv_vND	即只温度から安系温度への変換
6	Dtransu		-		- DUO CNICOOF	
7	CONVT1	即只溶液源度 C[mol/m°_w]	DTR_CNC20	安系洛波源度 C[mol/I_w]	PHQ_CNC20E	即只溶液濃度から安系溶液濃度への変換
8	Dtransu	-	-	-	-	-
		初期体積含水率 θ _i [-]		初期体積含水率 θ _i [-]	ADD_satinit	初期体積含水率,初期空隙率,真密度,
		初期空隙率 ε _i [-]		初期空隙率 ε_i [-]	ADD_epsinit	鉱物情報の読み込み
		真密度 ρt [kg/m ³]		真密度 ρt [kg/m ³]	ADD_truedens	
		鉱物数(平衡論)		鉱物数(平衡論)	SATRATEP	
		鉱物名(平衡論)		鉱物名(平衡論)	ADD_minnum	
		鉱物分子量(平衡論)[g/mol]		鉱物分子量(平衡論)[g/mol]	ADD_minname	
0	ADDIND	鉱物濃度(平衡論)		鉱物濃度(平衡論)	ADD_aintwgt	
9	ADDINI	M _i [mol/m ³ _Cell]	-	M _i [mol/m ³ _Cell]	ADD_aintmin	
		鉱物数(速度論)		鉱物数(速度論)		
		鉱物名(速度論)		鉱物名(速度論)	ADD_kminnum	
		鉱物分子量(速度論)[g/mol]		鉱物分子量(速度論)[g/mol]	ADD_kminname	
		鉱物濃度(速度論)		鉱物濃度(速度論)	ADD_kaintwgt	
		Mk _i [mol/m ³ _Cell]		Mk _i [mol/m ³ _Cell]	PHQ_m	
					PHQ_m0	
		鉱物名(平衡論)	ADD_minname	鉱物名(平衡論)	ADD_minname	鉱物名の並び替え(平行論)
10	MINSORT	鉱物分子量(平衡論)[g/mol]	ADD_aintmin	鉱物分子量(平衡論)[g/mol]	ADD_aintmin	
		鉱物濃度(平衡論)	ADD_aintwgt	鉱物濃度(平衡論)	ADD_aintwgt	

番号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理方法
		鉱物名(速度論)	ADD_kminname	鉱物名(速度論)	ADD_kminname	鉱物名の並び替え(平行論)
11	KMINSORT	鉱物分子量(速度論)[g/mol]	PHQ_m0	鉱物分子量(速度論)[g/mol]	PHQ_m0	
		鉱物濃度(速度論)	ADD_kaintwgt	鉱物濃度(速度論)	ADD_kaintwgt	
		初期空隙率 ε _i [-]	ADD_epsinit	考慮している鉱物が枯渇したと	ADD_CDENS	反応に寄与しない乾燥密度の計算
		真密度 ρ _t [kg/m ³]	ADD_truedens	きの密度 ρ _c [kg/m³]		$\rho_M = \Sigma(M_i \times A_i / 1000)$
19	CDENS	鉱物濃度(平衡論)M _i [mol/m ³ _Cell]	ADD_aintmin			$\rho_d = (1 - \epsilon_i) \times \rho_t$
12	CDENS	鉱物濃度(速度論)M _i [mol/m ³ _Cell]	PHQ_m			$ρ_c=ρ_d$ - $ρ_M$
		分子量(速度論,平衡論)	ADD_aintwgt			ρ _M : 残存鉱物に対する乾燥密度[kg/m ³]
		A _i [g/mol]	ADD_kaintwgt			ρ _d : 初期の乾燥密度[kg/m ³]
13	CHEMLEN	元素名	DTR_MAT20	元素名の文字数	CHEMLEN	元素名の文字数の保存
14	INITVOL	節点,要素データ	MCV_X,MCV_Y,MCV_Z	要素体積[m ³]	THM_VOL_I	要素体積の算出
		初期体積含水率 θ _i [-]	ADD_satinit			気相体積の算出
15	GASVOL	初期空隙率 ε _i [-]	ADD_epsinit	気相体積 Va[1]	THM_VOL_G	$V_a = (\epsilon_i - \theta_i) \times V \times 1000$
		要素体積 V[m3]	THM_VOL_I			
		鉱物濃度(平衡論)M _i [mol/m ³ _Cell]	ADD_aintmin	鉱物濃度(平衡論)M[mol/m ³ _w]	ADD_aintmin	鉱物濃度の単位変換
16	CHMINE	鉱物濃度(速度論)M _i [mol/m ³ _Cell]	PHQ_m	鉱物濃度(速度論)M[mol/m ³ _w]	PHQ_m	$M[mol/m^3_w]=M[mol/m^3_Cell]/\theta_i[-]$
		初期体積含水率 θ_i [-]	ADD_satinit		PHQ_m0	
		鉱物濃度(平衡論)M _i [mol/m ³ _w]	ADD_aintmin	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w]	ADD_aintmin	鉱物濃度の単位変換
17	CHUNIT3	鉱物濃度(速度論)M _i [mol/m ³ _w]	PHQ_m	鉱物濃度(速度論)M[mol/l_w]	PHQ_m	M[mol/l_w]=M[mol/ m ³ _w]/1000
					PHQ_m0	
		要素溶液濃度 C[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	要素溶液濃度 C[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	PHREEQC の計算
		鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w]	ADD_aintmin	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w]	ADD_aintmin	
		鉱物濃度(速度論)M[mol/l_w]	PHQ_m	鉱物濃度(速度論)M[mol/l_w]	PHQ_m	
			PHQ_m0		PHQ_m0	
		ガス分圧 P _p [-]	入力データ	鉱物変化量(平衡論)ΔM[mol/l_w]	DELTA_PHASE	
		要素温度 T[]	MCV_VND	鉱物変化量(速度論) $\Delta Mk[mol/l_w]$	PHQ_DPK	
18	MPC	pH[-]	入力データ	定義ガスの全圧 Pt[Pa]	PHQ_PTOTAL	
10	MII C	pe[-]	入力データ	初期ガス分圧[-]	PHQ_PBUN20	
		気相体積 Va [1]	THM_VOL_G	pH[-]	PHQ_pH	
		イオン交換化学種濃度	入力データ	pe[-]	PHQ_pe	
		表面反応化学種濃度	入力データ	計算前ガス濃度 G1[mol/l_w]	PHQ_GNGINIT	
		REACTION データ	入力データ	計算後ガス濃度 G2[mol/l_w]	PHQ_GNG20E	
				イオン交換化学種濃度[mol/l_w]	PHQ_EXCHCONC_PRI	
				表面反応化学種濃度[mol/l_w]	PHQ_SURFMOL	

表 4.3-1 各モジュールにおける入出力情報一覧(2/8)

番号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理方法
10	INDOCONC	H2 溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_H2O2	H2 溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	H2(aq) , O2(aq)濃度の保存
19	HIDOCONC	O2 溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_H2O2	O2 溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	
		元素名 (Dtransu)	DTR_MAT20	溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	元素の配列の編集
20	CREARANGE	元素名(PHREEQC)	PHQ_CNAME	溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_CNC20EZ	
		溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_CNC20E			
		イオン交換化学種名(PHREEQC 計算	PHQ_EXCHNAME			イオン交換化学種の並び替え
		前)	PHQ_EXCHNAME_PRI			
21	EXSORT	イオン交換化学種名(PHREEQC 計算	PHQ_EXCHCONC_PRI	イオン交換化学種濃度[mol/l_w]	PHQ_EXCHCONC	
		後)				
		イオン交換化学種濃度[mol/l_w]				
		ガス体積 Vg[l]	THM_VOL_G			反応に寄与しないガス質量の算出
00	ODENC	温度 T[]	MCV_VND	反応に寄与しないガス質量	DUO ODENO	$\rho_{gc} = (1 - P_p)*V_g/(0.082*T)$
22	GDENS	ガス分圧 P _p [atm]	PHQ_PBUN20	$ ho_{ m gc}[m mol]$	PHQ_GDENS	
		ガス体積 Vg[l]	THM_VOL_G			ガス分圧の算出
23	PPRESS2	温度 T[]	MCV_VND	ガス分圧 P _p [-]	PHQ_PBUN20	P _p =G*0.082*T/ V _g
		ガス濃度 G[mol/l_w]	PHQ_GNG20E			
		鉱物濃度(平衡論) M [mol/l_w]	ADD_aintmin			pH,pe,温度,溶液濃度,ガス濃度の
		鉱物濃度(速度論)Mk [mol/l_w]	PHQ_m			出力
94	EI EMCONC	溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	云表边励漂度 D[mol/1 m]		P=M×COFF
24	ELEWICONC	ガス濃度[mol/l_w]	PHQ_GNG20E	儿系/儿殿/辰度 F[III01/1_W]	-	COFF:化学量論係数[-]
		pH[-]	PHQ_pH			
		pe[-]	PHQ_pe			
05	EI EMCONCO	イオン交換化学種濃度[mol/l_w]	PHQ_EXCHCONC			イオン交換化学種濃度および表面錯体
25	ELEMCONC2	表面錯体濃度[mol/l_w]	PHQ_SURFMOL	-	-	濃度の出力
		鉱物濃度(平衡論) M [mol/l_w]	ADD_aintmin	鉱物濃度(平衡論)M[mol/ m³_w]	ADD_aintmin	鉱物濃度の単位変換
26	CHUNIT2	鉱物濃度(速度論)Mk [mol/l_w]	PHQ_m	鉱物濃度(速度論)Mk[mol/ m³_w]	PHQ_m	$M[mol/m^3_w]=M[mol/l_w]\times 1000$
					PHQ_m0	
		鉱物濃度(平衡論)M[mol/ m³_w]	ADD_aintmin	鉱物濃度(平衡論)M[mol/m ³ _Cell]	ADD_aintmin	鉱物濃度の単位変換
27	CHMINE?	鉱物濃度(速度論)Mk[mol/m³_w]	PHQ_m	鉱物濃度(速度論)M[mol/m ³ _Cell]	PHQ_m	$M[mol/m^3_Cell]=M[mol/m^3_w]\times\theta_i[\cdot]$
41	UIIIIII112		PHQ_m0		PHQ_m0	
		初期体積含水率[-]	ADD_satinit			

表 4.3-1 各モジュールにおける入出力情報一覧(3/8)

番号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理方法
28	CHPERM	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/l_w] 鉱物分子量(平衡論)A[g/mol] 鉱物分子量(速度論)Ak[g/mol] 真密度 ρ _t [kg/m ³] 考慮している鉱物が枯渇したと きの密度 ρ _c [kg/m ³]	ADD_aintmin PHQ_m ADD_aintwgt ADD_kaintwgt ADD_turedens ADD_CDENS	乾燥密度 ρ _d [kg/m ³] 空隙率 ε[-] 透水係数 k[m/s]	THM_DRYD THM_POR THM_EKK	乾燥密度・空隙率・透水係数の算出 $\rho_d = \Sigma(M_i \times A_i/1000) + \rho_c$ $\epsilon = 1.0 - \rho_d/\rho_t$ $\log(k) = -10.0914 - 2.3240^*\rho_{em}$ +0.4073*NaCl+0.0103*Ca
29	Dtransu	-	-	-	-	-
30	CONVT2	要素溶液濃度 C[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	節点溶液濃度 C[mol/m ³ _w]	DTR_CNC20	溶液濃度の要素値から節点値への変換
31	Dtransu	-	-	-	-	-
32	THAMES	乾燥密度 ρ _d [kg/m ³] 空隙率 ε[-] 透水係数 k[m/s] 温度 T[-] 水頭 h[m] 体積含水率 θ[-] etc	THM_DRYD THM_POR THM_EKK 前時間ステップのデータ ″ ″	温度[] 体積含水率[-] ダルシー流速[m/s]	THM_B THM_SATVOL THM_VEL	Thames の計算
33	Dtransu	-	-	-	-	-
34	MESHCONV	20 節点要素データ ダルシー流速 Vd[m/s] 体積含水率 θ[-] 水頭 h[m] 温度 T[] 流体密度 ρ _w [kg/m ³]	THM_x,THM_y,THM_z THM_VEL THM_SATVOL THM_B THM_B THM_FLDENS	8 節点要素データ ダルシー流速 Va [m/s] 体積含水率 θ[-] 水頭 h[m] 温度 T[] 流体密度 ρ _w [kg/m ³]	MCV_X,MCV_Y,MCV_Z MCV_VEL MCV_SATVOL MCV_HEAD1 MCV_TEMP1 MCV_DENS1	20 節点要素データから 8 節点要素デー タへの変換
35	Dtransu	温度[]	MCV_TEMP1	温度[]	MCV_VND	-
36	NTOECONV	温度 T[]	MCV_VND	要素温度 T[]	MCV_VND	節点温度から要素温度への変換
37	Dtransu	要素温度[]	MCV_VND	-	-	-
38	CHCONC2	溶液濃度 C _{in} [mol/_w] 前ステップ体積含水率 θ1[-] 現ステップ体積含水率 θ2[-] 現ステップ時間 t _i [秒,時,日,年] 前ステップ時間 t _{i-1} [秒,時,日,年]	PHQ_CNC20E THM_SATVOL THM_SATVOLEP	溶液濃度 C _{out} [mol/1_w] 現ステップ体積含水率 02[-] 現ステップ時間 ti [秒,時,日,年]	PHQ_CNC20E THM_SATVOLEP DTR_TIMEEP	濃縮/希釈後の溶液濃度の算出 C _{out} =C _{in} ×(θ1 - q×Δt)/θ2 q:ダルシー流速の勾配 Δt:時間ステップ幅 ti - ti-1

表 4.3-1 各	็÷モジュールにおける入出力情報・	-覧(4/8)
-----------	-------------------	---------

番号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理方法
39	REACTION	前ステップ飽和度 Se1[-] 現ステップ飽和度 Se2[-] ガス分圧[-]	SATRATEP THM_SATRAT PHQ_PBUN20	ガス分圧 P _p [-](REACTION)	PHQ_REAC	REACTION データの設定 Se2 =1.0 かつ Se1 < 1.0 のとき P _p =P _p (t-1) Se2 =1.0 かつ Se1=1.0 のとき P _p =0, V _a =0 P _p (t-1):前ステップのガス分圧[-]
40	CHMINE	鉱物濃度(平衡論)M _i [mol/m ³ _Cell] 鉱物濃度(速度論)M _i [mol/m ³ _Cell] 初期体積含水率θ _i [-]	ADD_aintmin PHQ_m ADD_satinit	鉱物濃度(平衡論)M[mol/m ³ _w] 鉱物濃度(速度論)M[mol/m ³ _w]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0	鉱物濃度の単位変換 M[mol/m ³ _w]=M[mol/m ³ _Cell]/θ _i [-]
42	GASVOL	初期体積含水率 θ _i [-] 初期空隙率 ε _i [-] 要素体積 V[m ³]	ADD_satinit ADD_epsinit THM_VOL_I	気相体積 V _a [1]	THM_VOL_G	気相体積の算出 V _a =(ε _i - θ _i)×V×1000
43	DTIME	現タイムステップの時間 T _i [秒,時,日,年] 前タイムステップの時間 T _i -1 [秒,時,日,年]	TIME TIMEEP	現タイムステップの時間 T _i 時間ステップ幅 ∆t [秒,時,日,年]	DTR_step DTIME	時間幅の計算 ∆t=Ti−Ti-1
44	MPC	要素溶液濃度 C[mol/1_w] 鉱物濃度(平衡論) M[mol/1_w] 鉱物濃度(速度論) M[mol/1_w] ガス分圧 P _p [-] 要素温度 T[] pH[-] pe[-] 気相体積 V _a []] イオン交換化学種濃度[mol/1_w] REACTION データ	PHQ_CNC20E ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0 PHQ_PBUN20 MCV_VND PHQ_CNC20E PHQ_CNC20E THM_VOL_G PHQ_EXCHCONC PHQ_REAC	要素溶液濃度 C[mol/1_w] 鉱物濃度(平衡論) M[mol/1_w] 鉱物濃度(速度論) M[mol/1_w] 鉱物変化量(速度論) ΔM[mol/1_w] 鉱物変化量(速度論) ΔMk[mol/1_w] 定義ガスの全圧 Pt[Pa] 初期ガス分圧[-] pH[-] pe[-] 計算前ガス濃度 G1[mol/1_w] 計算後ガス濃度 G2[mol/1_w] イオン交換化学種濃度[mol/1_w] 表面反応化学種濃度[mol/1_w]	PHQ_CNC20E ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0 DELTA_PHASE PHQ_DPK PHQ_PTOTAL PHQ_PBUN20 PHQ_pH PHQ_pe PHQ_GNGINIT PHQ_GNG20E PHQ_EXCHCONC_PRI PHQ_SURFMOL	PHREEQC の計算
45	HYDOCONC	H2 溶液濃度[mol/l_w] O2 溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_H2O2 PHQ_H2O2	H2 溶液濃度[mol/l_w] O2 溶液濃度[mol/l_w]	PHQ_CNC20E PHQ_CNC20E	H2(aq),O2(aq)濃度の保存
46	CREARANGE2	- 元素名(Dtransu) 元素名(PHREEQC) 溶液濃度[mol/1_w]	DTR_MAT20 PHQ_CNAME PHQ_CNC20E	 溶液濃度[mol/1_w] 溶液濃度[mol/1_w]	PHQ_CNC20E PHQ_CNC20EZ	元素の配列の編集

表 4.3-1 各モジュールにおける入出力情報一覧(5/8)

番号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理方法
47	EXSOURCE	 イオン交換化学種名(PHREEQC計算前) イオン交換化学種名(PHREEQC計算後) イオン交換化学種濃度(PHREEQC計算後) イオン交換化学種濃度(PHREEQC計算前) 時間幅[秒,時,日,年] 	PHQ_EXCHNAME PHQ_EXCHNAME_PRI PHQ_EXCHCONC_PRI PHQ_EXCHCONC DTR_step	イオン交換反応化学種の時間変 化量 ΔΡ _፡ /Δt[mol/(l_w・s)]	PHQ_DELTAEX	イオン交換反応化学種の時間変化量の 算出
48	EXSORT	イオン交換化学種名(PHREEQC計算前) イオン交換化学種名(PHREEQC計算後) イオン交換化学種濃度[mol/l_w]	PHQ_EXCHNAME PHQ_EXCHNAME_PRI PHQ_EXCHCONC_PRI	イオン交換化学種濃度[mol/l_w]	PHQ_EXCHCONC	イオン交換化学種の並び替え
49	SURFACE	表面反応化学種名(PHREEQC計算前) 表面反応化学種名(PHREEQC計算後) 表面反応化学種濃度(PHREEQC計算後) 表面反応化学種濃度(PHREEQC計算前) 時間幅[秒,時,日,年]	PHQ_SURFNAMEPRE PHQ_SURFNAME PHQ_SURFMOLPRE PHQ_SURFMOL DTR_step	表面反応化学種の時間変化量 ΔP _s /Δt[mol/(l_w・s)]	PHQ_DELTASURF	表面反応化学種の時間変化量の算出
50	EPSIRON	溶液濃度 C[mol/1_w] 計算後ガス濃度 G2[mol/1_w]	PHQ_CNC20E PHQ_GNG20E	ε[-] 1+ε[-]	DTR_ERETA DTR_GRETA	補正係数 ε の算出 ε= G2/C
51	TPRESS	反応に寄与しないガス質量[mol] ガス体積[1] 温度[] ガス濃度[mol/l_w]	PHQ_GDENS THM_VOL_G MCV_VND PHQ_GNG20E	全圧 P _{t2} [Pa]	DTR_PBUN20	全圧の算出 Pt2=Pcon+Pp*101325.0 Pcon:反応に寄与しないガスの分圧[atm] Pp:ガス分圧[atm] Pcon, Ppは理想気体の状態方程式より算 出
52	SOURCE	 鉱物変化量(平衡論)ΔM[mol/l_w] 鉱物変化量(速度論)ΔMk[mol/l_w] 時間ステップ幅Δt [秒,時,日,年] イオン交換反応化学種の時間変 化量ΔP_i/Δt[mol/(l_w・s)] 表面反応化学種の時間変化量 ΔP_s/Δt[mol/(l_w・s)] 	DELTA_PHASE PHQ_DPK DTR_stepPHQ_DELTAEX PHQ_DELTASURF	$\Delta P / \Delta t [mol / (m^3 w \cdot s)]$	PHQ_DELTAPT	ΔΡ/Δtの算出 ΔΡ/Δt=ΔP _m /Δt+ΔP _i /Δt+ΔP _s /Δt ΔP _m /Δt:鉱物の時間変化量[mol/(m ³ _w・ s)]
53	CONVT3	ΔP/Δt[mol/m ³ _w] (要素値)	PHQ_DELTAPT	ΔP/Δt[mol/m ³ _w](節点値)	DTR_DELTAPT	ΔP/Δt の要素値から節点値への変換

表 4.3-1 各モジュールにおける入出力情報一覧(6/8)

番号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理方法
54	ELEMCONC	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/l_w] 溶液濃度[mol/l_w] ガス濃度[mol/l_w] pH[-] pe[-]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_CNC20E PHQ_GNG20E PHQ_pH PHQ_pe	元素沈殿濃度 P[mol/l_w]	-	pH,pe,温度,溶液濃度,ガス濃度の 出力 P=M×COFF COFF:化学量論係数[·]
55	ELEMCONC2	イオン交換化学種濃度[mol/l_w] 表面錯体濃度[mol/l_w]	PHQ_EXCHCONC PHQ_SURFMOL	-	-	イオン交換化学種濃度および表面錯体 濃度の出力
56	CHUNIT2	鉱物濃度(平衡論)M [mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk [mol/l_w]	ADD_aintmin PHQ_m	鉱物濃度(平衡論)M[mol/ m ³ _w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/ m ³ _w]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0	鉱物濃度の単位変換 M[mol/ m³_w]=M[mol/l_w]×1000
59	Dtransu	節点溶液濃度 C[mol/m ³ _w] 全圧 P _t [Pa] ε[-] 1 - ε ^[-] 要素温度[]	DTR_CNC20 DTR_PBUN20 DTR_ERETA DTR_GRETA MCV_VND	節点溶液濃度 C[mol/m ³ _w]	DTR_CNC20	Dtransu の計算
60	CONVT1	節点溶液濃度 C[mol/ m³_w]	DTR_CNC20	要素溶液濃度 C[mol/l_w]	PHQ_CNC20E	節点溶液濃度から要素溶液濃度への変 換
61	DELTAHYDO	トータル H[mol/l_w](PHREEQC 計算後) トータル H[mol/l_w](Dtransu 計算後)	PHQ_HCONC PHQ_CNC20E	トータル H の変化量[mol/l_w]	PHQ_DELTAH	トータル H の変化量の算出
62	PPRESS	体積含水率[-] 空隙率[-] ガス体積 Vg [l] 温度 T[] 溶液濃度[mol/l_w] 補正係数 ε[-]	THM_SATVOL THM_POR THM_VOL_G MCV_VND PHQ_CNC20E DTR_ERETA	ガス分圧 P _p [-]	PHQ_PBUN20	ガス分圧の算出 P _p =G*0.082*T/V _g G:ガス質量[mol]
63	CHMINE	鉱物濃度(平衡論)M _i [mol/m ³ _Cell] 鉱物濃度(速度論)M _i [mol/m ³ _Cell] 初期体積含水率 θ _i [-]	ADD_aintmin PHQ_m ADD_satinit	鉱物濃度(平衡論)M[mol/m³_w] 鉱物濃度(速度論)M[mol/m³_w]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0	鉱物濃度の単位変換 M[mol/m³_w]=M[mol/m³_Cell]/θ _i [-]
64	CHUNIT3	鉱物濃度(平衡論)M _i [mol/m ³ _Cell] 鉱物濃度(速度論)M _i [mol/m ³ _Cell]	ADD_aintmin PHQ_m	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)M[mol/l_w]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0	鉱物濃度の単位変換 M[mol/l_w]=M[mol/ m³_w]/1000
65	SAVEPHPE	pH , pe	PHQ_CNC20E	pH[-] pe[-]	PHQ_pH PHQ_pe	pH , pe の設定

表 4.3-1 各モジュールにおける入出力情報一覧(7/8)

番 号	モジュール名	入力情報	呼び出し共有メモリ名 Get	出力情報	保存共有メモリ名 Set	処理方法
66	ELEMCONC	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/l_w] 溶液濃度[mol/l_w] ガス濃度[mol/l_w] pH[-] pe[-]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_CNC20E PHQ_GNG20E PHQ_pH PHQ_pe	元素沈殿濃度 P[mol/l_w]	-	pH,pe,温度,溶液濃度,ガス濃度の 出力 P=M×COFF COFF:化学量論係数[-]
67	RMMINE	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/l_w]	ADD_aintmin PHQ_m	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/l_w]	ADD_aintmin PHQ_m	鉱物濃度の設定 M _{in} 0.0 のとき M _{out} =0.0
68	CHUNIT2	鉱物濃度(平衡論)M [mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk [mol/l_w]	ADD_aintmin PHQ_m	鉱物濃度(平衡論)M[mol/ m ³ _w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/ m ³ _w]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0	鉱物濃度の単位変換 M[mol/ m ³ _w]=M[mol/l_w]×1000
69	CHMINE2	鉱物濃度(平衡論)M[mol/m ³ _w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/m ³ _w] 体積含水率θ _i [-]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0 THM_SATVOL	鉱物濃度(平衡論)M[mol/m ³ _Cell] 鉱物濃度(速度論)M[mol/m ³ _Cell]	ADD_aintmin PHQ_m PHQ_m0	鉱物濃度の単位変換 M[mol/m ³ _Cell]=M[mol/m ³ _w]×θ _i [-]
70	CHPERM	鉱物濃度(平衡論)M[mol/l_w] 鉱物濃度(速度論)Mk[mol/l_w] 鉱物分子量(平衡論)A[g/mol] 鉱物分子量(速度論)Ak[g/mol] 真密度 ρ _t [kg/m ³] 考慮している鉱物が枯渇したと きの密度 ρ _c [kg/m ³]	ADD_aintmin PHQ_m ADD_aintwgt ADD_kaintwgt ADD_turedens ADD_CDENS	乾燥密度 ρd [kg/m³] 空隙率 ε[-] 透水係数 k[m/s]	THM_DRYD THM_POR THM_EKK	乾燥密度・空隙率・透水係数の算出 $\rho_d = \Sigma(M_i \times A_i/1000) + \rho_c$ $\varepsilon = 1.0 - \rho_d/\rho_t$ $\log(k) = -10.0914 - 2.3240*\rho_{em}$ +0.4073*NaCl+0.0103*Ca
71	Dtransu	溶液濃度[mol/m ³ _w]	DTR_CNC20	-	-	-
72	THAMES	乾燥密度[kg/m ³] 空隙率[-] 透水係数[m/s] 温度[-] 水頭[m] 体積含水率[-] etc	THM_DRYD THM_POR THM_EKK 前時間ステップのデータ ″ ″	温度[] 体積含水率[-] ダルシー流速[m/s]	THM_B THM_SATVOL THM_VEL	Thames の計算

表 4.3-1 各モジュールにおける入出力情報一覧 (8/8)

4.4 物質移行モデル・地球化学モデルの高度化に関する検証

本研究で熱-水-応力-化学連成解析コードの高度化について,コード構築の正確性を 確認する観点から,以下の検証解析を実施した。

- ・ PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証
- ・ 脱ガス・ガス拡散モデルに関する検証
- ・ 濃縮 / 希釈モデルに関する検証
- ・ 速度論モデルに関する検証

4.4.1 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証

目的

本検証は,PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂の妥当性を確認す ることを目的として,平衡論に基づく溶解/沈殿モデルを用いた解析を実施した。本検証 解析では,既存の解析コード(HYDROGEOCHEM,PHREEQC)との比較を行った。

検証解析条件

ここでは,平成 13 年度,平成 14 年度に実施した物質移行 - 地球化学連成の検証解析条 件を採用する。本検証解析では,PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改 訂の妥当性確認を目的としているため,濃縮/希釈モデル,脱ガス・ガス拡散モデル,速 度論モデルは採用しない。本検証解析に使用した初期・境界条件を図 4.4-1 に,THAMES, Dtransu,およびPHREEQCの入力データを表 4.4-1~4.4-3 に示す。また,本検証解析に 使用した時間ステップ情報を図 4.4-2 に示す。



図 4.4-1 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析条 件(初期·境界条件)

表 4.4-1 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析条件 (THAMES 入力データ)

入力項目		単位	值	
空隙率		-	0.33	
初期体積含7	K率	-	0.33	
固有透過周	宦	m^2	3.0×10^{-30}	
熱伝導率		W/(mK)	式(1)	
比熱		J/(kgK)	式(2)	
初期乾燥密	度	g/cm ³	1.8178	
	θs	-	0.33	
VG	$\theta \mathbf{r}$	-	0	
パラメータ	α	1/m	8.0×10 ⁻³	
	n	-	1.6	
比透水係数	-	-	-	
	a1	-	2.99×10 ⁻⁸ T - 3.74×10 ⁻⁷	
水分	a2	-	- 1.5×10 ⁻⁸ T+1.49×10 ⁻⁷	
拡散係数	b1	-	- 2.49×10 ⁻³	
	b2	-	5.59×10 ⁻⁴ T+3.93×10 ⁻¹	
_温度勾配 _水分拡散係数		m²/(sK)	式(3)	
$\overline{\lambda} = 0.444 + 1.38 \times 10^{-2} \text{w} + 6.14 \times 10^{-3} \text{w}^2 - 1.69 \times 10^{-4} \text{w}^3 \qquad \overrightarrow{\pi}(1)$				
C=(34.1 + 4.18w)/(100+w) 式(2				

C = (34.1 + 4.18w)/(100+w)

 $D_t=D_{t0}\times exp[(\alpha_t(T - T_0)/T_0)]$

λ: 熱伝導率[W/(mK)]

w: 含水率[-]

C: 比熱[J/(kgK)]

Dt: 温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)]

Dto: 基準温度における温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)]

式(3)

表 4.4-2 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析条件 (Dtransu入力データ)

入力項目	単位	值
元素種	-	Ca , C
初期溶液濃度	mol/l_w	1.242×10^{-4}
縦分散長	m	0.0
横分散長	m	0.0
拡散係数	m²/s	3×10^{-10}
遅延係数	-	1.0
減衰係数	1/y	0

表 4.4-3 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析条件 (PHREEQC 入力データ)

入力項目	単位	值
鉱物種	-	Calcite
初期鉱物濃度	mol/m ³ _cell	0.28967
鉱物分子量	g/mol	100.0
pН	-	7.0
pe	-	5.0



図 4.4-2 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析条件 (時間ステップ)

検証解析結果

THMC 連成解析コード, HYDROGEOCHEM, PHREEQC による, 10年, 60年の時点 における pH, 溶液濃度, 方解石の沈殿濃度の空間分布を図 4.4-3~4.4-5 に示す。THMC 連成解析コードの結果は,HYDROGEOCHEM,PHREEQCとほぼ一致しており,本研究 で実施したPHREEQC導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂が適切であることが 確認できた。



図 4.4-3 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析結果 (pH 分布)



図 4.4-4 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析結果 (溶液濃度分布)



図 4.4-5 PHREEQC 導入,貯留項取り扱い・収束アルゴリズム改訂に関する検証解析結果 (沈殿鉱物濃度分布)

4.4.2 脱ガス・ガス拡散モデルに関する検証

脱ガス・ガス拡散モデルについては,下記要領にて機能確認のための段階的な検証解析を 実施した。

・ 脱ガスモデルの検証

・ ガス拡散モデルの検証

また,不飽和媒体中の地球化学に対する脱ガス・ガス拡散の影響を把握するべく,脱ガ ス・ガス拡散に関するケーススタディを実施した。

(1) 脱ガスモデルの検証

目的

本検証は,脱ガスモデルの信頼性を確認することを目的として解析を実施した。脱ガス および溶液中の物質移行は,PHREEQC で取り扱うことができるため,本検証解析では PHREEQC とのベンチマークテストを実施した。

検証解析条件

本検証解析では,制約条件付きのベンチマークテストとして,気相中のガス拡散を考慮 しない場合の物質移行-地球化学連成解析(THMC連成解析コード,PHREEQC)を実施 した。本検証解析に使用した初期・境界条件を図 4.4-6 に,THAMES,Dtransu,PHREEQC の入力データを表 4.4-4~4.4-6 に示す。また,本検証解析に使用した時間ステップ情報を 図 4.4-7 に示す。



図 4.4-6 脱ガスモデルに関する検証解析条件 (初期・境界条件)

表 4.4-4 脱ガスモデルに関する検証解析条件 (THAMES 入力データ)

入力項目		単位	值
空隙率		-	0.403
初期体積含7	K率	-	0.114
固有透過周	度	m^2	1.0×10^{-15}
熱伝導率		W/(mK)	式(1)
比熱		J/(kgK)	式(2)
初期乾燥密	度	g/cm ³	1.6197
	θs	-	0.403
VG	$\theta \mathbf{r}$	-	0
パラメータ	α	1/m	8.0×10 ⁻³
	n	-	1.6
比透水係数	-	-	-
	a1	-	2.99×10 ⁻⁸ T - 3.74×10 ⁻⁷
水分	a2	-	- 1.5×10 ⁻⁸ T+1.49×10 ⁻⁷
拡散係数	b1	-	- 2.49×10 ⁻³
	b2	-	$5.59 \times 10^{-4} \text{T} + 3.93 \times 10^{-1}$
温度勾配 水分拡散係数		m²/(sK)	式(3)

体積含水率は,要素内の水分量が1[l]となるように設定した。 $\lambda=0.444+1.38\times10^{-2}w+6.14\times10^{-3}w^2-1.69\times10^{-4}w^3$ 式(1) C=(34.1+4.18w)/(100+w) 式(2) D_t=D_{t0}×exp[(α_t (T - T₀)/T₀) 式(3)

λ: 熱伝導率[W/(mK)]

w: 含水率[-]

C: 比熱[J/(kgK)]

Dt: 温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)]

- Dto: 基準温度における温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)]
- T: 温度[]
- T₀: 基準温度[]

表 4.4-5 脱ガスモデルに関する検証解析条件 (Dtransu 入力データ)

入力項目	単位	值
元素種	-	Ca , C
初期溶液濃度	mol/l_w	1.242×10^{-4}
縦分散長	m	1×10^{-4}
横分散長	m	1×10 ⁻⁴
拡散係数	m²/s	1×10^{-10}
遅延係数	-	1.0
減衰係数	1/y	0

表 4.4-6 脱ガスモデルに関する検証解析条件 (PHREEQC 入力データ)

入力項目	単位	值
鉱物種	-	Calcite
初期鉱物濃度	mol/m ³ _cell	0.02
鉱物分子量	g/mol	100.0
pH	-	7.0
ре	-	4.0
ガス種	-	CO_2
初期ガス分圧	atm	0.000316



図 4.4-7 脱ガスモデルに関する検証解析条件(時間ステップ)

検証解析結果

THMC 連成解析コード, PHREEQC の解析結果を図 4.4-8~4.4-9 に示す。本検証解析では, 左端境界の溶液濃度が初期条件と比較し低い条件となっているため, 右側から左側へ物質移行が生じ, 左端より Calcite が溶解する系となっている。

0.5 年後の結果は,全体的に一致しているが,左端要素について若干の差が生じている。 これは,THMC 連成解析コードにおいて,濃度差が急勾配となっている領域で溶液濃度の 節点値 要素値の変換により溶液濃度に変化が生じるためであると考えられる。また,C溶 液濃度分布は,THMC 連成解析コードの方が移行が促進している。これは,PHREEQC の 時間幅 Δt(自動時間分割により決定)が0.086年に対し,THMC の時間幅を 0.1 年と設定 しているため,1ステップ毎の物質移行量が増加したためであると考えられる。

1.0 年後の結果も 0.5 年後の結果と同様に左端要素について若干の差が見られるが,全体的に一致している結果となった。以上より,本研究で導入した脱ガスモデルが適切である ことが確認できた。



図 4.4-8 脱ガスモデルに関する検証解析結果(0.5 年後)



図 4.4-9 脱ガスモデルに関する検証解析結果(1.0 年後)
(2) ガス拡散モデルの検証

目的

本検証は,ガス拡散モデルの信頼性を確認することを目的として解析を実施した。本年 度開発したモデルは,溶液濃度とガス濃度を線形近似している観点から,脱ガス無しの条 件下でガス拡散有りといった現象は再現できない。したがって,本検証解析では,脱ガス 有り,ガス拡散有りの条件下でガス拡散モデルの検証を実施した。

検証解析条件

本検証解析では,ガス拡散モデルを検証するため,次の2ケースを実施した。 ケース1:ガス拡散と溶液中拡散の移行条件を同等とするケース(THMC連成解析コード)

- ・ 脱ガスは,溶液濃度とガス濃度が同値になるように設定(ε=1:ガス濃度と液相の 溶質濃度が一致)
- ・ 拡散特性は,ガス拡散効果と溶液拡散効果(溶液中拡散係数,およびガス拡散係数) が同等になるように設定

<u>ケース2</u>:溶液中拡散のみを対象とするケース(THMC 連成解析コード, PHREEQC)

- ・ 脱ガスは考慮しない。
- ・ 溶液拡散特性は,ケース1と同値に設定

ケース1は,ガス拡散と溶液中拡散の移行条件を同等とする解析で,ガス濃度分布と溶 液濃度分布が一致することを確認するものである。ケース2は,脱ガス・ガス拡散を考慮 しない溶液中拡散のみを対象とした解析で,ケース2の溶液濃度分布が,ケース1のガス 濃度分布および溶液濃度分布と一致することを確認するものである。

本検証は,上記2ケースの解析を通じて,フィック則に基づくガス拡散挙動のモデル化の 正確性を検証するものである。

本検証解析に使用した初期・境界条件を図 4.4-10 に, THAMES, Dtransu, および PHREEQCの入力データを表 4.4-7~4.4-9 に示す。また,本検証解析に使用した時間ステ ップ情報を図 4.4-11 に示す。

また,THMC 連成解析コードの処理フローを図 4.4-12 に示す。THMC 連成解析コード の処理手順は,初期の地球化学解析を実施した後,時間ループ内において THAMES(熱-水-応力連成解析)→PHREEQC(地球化学解析)→EPSIRON(補正係数 ε計算)→Dtransu (物質移行解析)の順に実行する。検証解析ケース 1 では,溶液濃度とガス濃度を同値と するため,EPSIRONにおいて補正係数 εを強制的に 1 とした。



図 4.4-10 ガス拡散モデルに関する検証解析条件 (初期・境界条件)

表 4.4-7	ガス拡散モデルに関する検証解析条件
	(THAMES 入力データ)

入力項目		単位	入力情報	
空隙率		-	0.403	
初期体積含	水率	-	0.2015	
固有透過	度	m^2	4.0×10^{-20}	
熱伝導率	<u>x</u>	W/(mK	式(1)	
)		
比熱		J/(kgK)	式(2)	
初期乾燥部	<u>密度</u>	g/cm ³	1.5785	
MO	θs	-	0.403	
	$\theta \mathbf{r}$	-	0	
ハラメー タ	α	1/m	8.0×10 ⁻³	
	n	-	1.6	
比透水係	-	-	-	
<u>\$X</u>	ล1	-	2 99×10 ⁻⁸ T - 3 74×10 ⁻⁷	
水分	a2	-	- 1.5×10 ⁻⁸ T+1.49×10 ⁻⁷	
拡散係数	b1	-	- 2.49×10 ⁻³	
	b2	-	$5.59 \times 10^{-4} T$ + 3.93×10^{-1}	
温度勾配 水分拡散係数		m²/(sK)	式(3)	

 λ =0.444 + 1.38×10⁻²w + 6.14×10⁻³w² - 1.69×10⁻⁴w³ 式(1)

C=(34.1 + 4.18w)/(100+w)

 $D_t=D_{t0}\times exp[(\alpha_t(T - T_0)/T_0)$

λ: 熱伝導率[W/(mK)]

w: 含水率[-]

C: 比熱[J/(kgK)]

式(2) 式(3)

- D_t: 温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)]
- Dto: 基準温度における温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)]
- T: 温度[]
- T₀: 基準温度[]

表 4.4-8 ガス拡散モデルに関する検証解析条件 (Dtransu 入力データ)

入力項目	単位	入力情報
元素	-	C , Ca
縦分散長	m	2.0×10^{-2}
横分散長	m	1.0×10^{-3}
空隙水中の拡散係数	m^2/s	5.0×10^{-10}
遅延係数	-	1.0
減衰係数	1/y	0
標準状態での大気中の	m ² /a	5 0×10-10
ガス拡散係数	111-/S	0.0~10-10
温度依存係数	-	0.0

標準状態での大気中のガス拡散係数および温度依存係数は, ケース1のみ設定

表 4.4-9 ガス拡散モデルに関する検証解析条件 (PHREEQC 入力データ)

単位	入力情報
-	6.0
-	- 5.0
-	CO_2
-	0.000316
	<u>単位</u>

ガス成分はケース1のみ設定



図 4.4-11 ガス拡散モデルに関する検証解析条件(時間ステップ)



検証解析結果

ケース 1 の THMC 連成解析コードによる CO₂ガス濃度分布および C 溶液濃度分布を図 4.4-13 に示す。図 4.4-13 より, CO₂ガス濃度分布および C 溶液濃度分布が一致しているこ とを確認した。

図 4.4-14 に,ケース1の THMC 連成解析コードによる CO₂ ガス濃度分布および C 溶液 濃度分布(脱ガス・ガス拡散あり),ケース2の THMC 連成解析コードによる C 溶液濃度 分布(脱ガス・ガス拡散なし)および PHREEQC による C 溶液濃度分布(脱ガス・ガス拡 散なし)を示す。図 4.4-14 より,ケース1の THMC 連成解析コードによる CO₂ ガス濃度 分布および C 溶液濃度分布(脱ガス・ガス拡散あり)は,ケース 2の THMC 連成解析コードによる C 溶液濃度分布(脱ガス・ガス拡散なし)および PHREEQC による C 溶液濃度分布(脱ガス・ガス拡散なし)と一致していることを確認した。

以上より,ケース 1 のガス拡散挙動が,フィック則に基づく正確な拡散挙動を示すこと を確認し,ガス拡散モデルが THMC 連成解析コードに正確に導入されていることを検証す ることができた。



図 4.4-13 ガス拡散モデルに関する検証解析結果 (ケース1:2年後)



図 4.4-14 ガス拡散モデルに関する検証解析結果(ケース1・ケース2:2年後)

JNC TJ8400 2004-004

(3) 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ

目的

脱ガス・ガス拡散は複雑な現象であり,モデル検証の最善策としては TOUGH2(Pruess,1999)などとのベンチマーク解析が望ましい。本研究では,前記(1)脱ガス モデルの検証,(2)ガス拡散モデルの検証にて,制約条件を付した簡易的な検証解析を実施 した。

ここでは,脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディを実施し,不飽和媒体中の地球化学 に対する脱ガス・ガス拡散の影響を把握する。

ケーススタディ条件

本解析では,不飽和媒体中の地球化学に対する脱ガス・ガス拡散の影響を把握するべく, 次の3ケースを実施した。

<u>ケース1</u>:水分浸潤下における脱ガス有り,ガス拡散有りの解析(固相: Calcite 考慮) <u>ケース2</u>:水分浸潤下における脱ガス有り,ガス拡散無しの解析(固相: Calcite 考慮) ケース3:水分浸潤下における脱ガス無し,ガス拡散無しの解析(固相: Calcite 考慮)

本解析では,ケース1,2の比較を通じて,不飽和媒体中の地球化学に対するガス拡散の 影響を,ケース2,3の比較を通じて,不飽和媒体中の地球化学に対する脱ガスの影響を考 察する。

本解析に使用した初期・境界条件を図 4.4-15 に ,THAMES ,Dtransu ,および PHREEQC の入力データを表 4.4-10~4.4-12 に示す。また,本解析に使用した時間ステップ情報を図 4.4-16 に示す。



図 4.4-15 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件(初期・境界条件)

表 4.4-10 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件(THAMES 入力データ)

入力項目	3	単位	入力情報]	
空隙率		-	0.403		
初期体積含水率		-	0.2015		
固有透過	度	m^2	5.0×10^{-15}		
熱伝導率	ĸ	W/(mK)	式(1)	_	
比熱		J/(kgK)	式(2)	_	
初期乾燥密	逻度	g/cm ³	1.6197	_	
VG	θs	-	0.403	_	
パラメー	θr	-	0	_	
タ	α	1/m	8.0×10 ⁻³	_	
	n	-	1.6	_	
比	-	-	-		
	a1	-	2.99×10 ⁻⁸ T - 3.74×10 ⁻⁷		
水分	a2	-	- 1.5×10 ⁻⁸ T+1.49×10 ⁻⁷		
拡散係数	b1	-	- 2.49×10 ⁻³		
	b2	-	$5.59 \times 10^{-4} T$ + 3.93×10^{-1}		
温度勾配 m²/(sK) 式(3)					
$\lambda = 0.444 + 1.38 \times 10^{-2} \text{w} + 6.14 \times 10^{-3} \text{w}^2 - 1.69 \times 10^{-4} \text{w}^3$ $\vec{\pi}(1)$					
C=(34.1 + 4	.18w)	/(100+w)		式(2)	
Dt=Dt0×exp	$[(\alpha_t(T))]$	$T - T_0)/T_0$		式(3)	
λ: 執伝導率[W/(mK)]					
w: 含水率[-]					
C: 比熱[J/(kgK)]					
D:: 温度勾配水分拡散係数[m ² /(sK)]					
D 其進温度における温度の配水分拡散係数[m2/(aK)]					

T₀: 基準温度[]

表 4.4-11 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件 (Dtransu 入力データ)

入力項目	単位	入力情報
元素	-	C , Ca
縦分散長	m	1.0×10^{-4}
横分散長	m	1.0×10^{-4}
空隙水中の拡散係数	m²/s	1.0×10^{-10}
遅延係数	-	1.0
減衰係数	1/y	0
標準状態での大気中の	$m^{2/a}$	1 35×10-5
ガス拡散係数	111-78	1.00/10 0
温度依存係数	-	1.71

標準状態での大気中のガス拡散係数および温度依存係数は, ガス拡散有りのケースのみ入力

表 4.4-12 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件 (PHREEQC 入力データ)

入力項目	単位	入力情報
pН	-	6.0
pe	-	- 5.0
ガス成分	-	CO_2
初期ガス分圧	-	0.0316

ガス成分は脱ガス有りのケースのみ設定



図 4.4-16 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ条件(時間ステップ)

ケーススタディ結果

ケース1(脱ガス有り,ガス拡散有り)とケース2(脱ガス有り,ガス拡散無し)の解析 結果の比較を図 4.4-17~4.4-19 に示す。本解析では,左端境界の溶液濃度が初期条件と比 較し低い条件となっているため,右側から左側へ物質移行が生じ,左端より Calcite が溶解 する系となっている。また,水の移動は,左端境界から水が流入し,左側から右側へ不飽 和状態から飽和状態へ変遷する。

25 日後の結果は, pH, Ca 溶液濃度, Calcite 沈殿濃度は両者で同様の傾向となった。ガ ス拡散を考慮しているケース1のCO₂ガス濃度は,ガス拡散を考慮していないケース2の CO₂ガス濃度に比して,ガス拡散の効果が反映され,移行が若干促進する傾向となった。 また,ガス拡散を考慮しているケース1のC溶液濃度も,ガス拡散を考慮していないケー ス2のC溶液濃度に比して,移行が若干促進する傾向にある。これは,CO₂ガスが拡散で 移行し,CO₂の脱ガスが促進された結果,C溶液濃度の拡散プロファイルに影響を与えた ためと考えられる。また,50日後の結果も25日後の結果と同様の傾向となった。

ケース1,ケース2,ケース3の解析結果の比較を図4.4-20~4.4-22に示す。0日後(初 期地球化学平衡計算後)の結果より脱ガスを考慮していないケース3のpH,およびCalcite 沈殿濃度は,ガス拡散を考慮しているケース1,ケース2のpH,Calcite沈殿濃度に比し て,高い値を示している。これに伴い,脱ガスを考慮していないケース3のC,Ca溶液濃 度は,脱ガスを考慮しているケース1,ケース2のC,Ca溶液濃度に比して,低い値を示 す傾向にある。これらは,不飽和媒体中に初期に存在するCO2ガスの溶解/脱ガス平衡が, 溶液化学や鉱物の溶解/沈殿に影響を与えているためである。また,25日後,および50 日後の結果も同様の傾向となった。

本ケーススタディの結果から,ガス拡散が不飽和媒体中の物質移行プロファイルに影響 を与えること,脱ガスが不飽和媒体中の溶液化学や鉱物の溶解/沈殿に影響を与えること が示唆された。



図 4.4-17 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果 (ケース 1・ケース 2:0 日後)



図 4.4-18 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果 (ケース 1・ケース 2:25 日後)



図 4.4-19 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果 (ケース 1・ケース 2:50 日後)



図 4.4-20 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果 (ケース 1・ケース 2・ケース 3:0 日後)



図 4.4-21 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果 (ケース1・ケース2・ケース3:25日後)



図 4.4-22 脱ガス・ガス拡散に関するケーススタディ結果 (ケース1・ケース2・ケース3:50日後)

4.4.3 濃縮・希釈モデルに関する検証

目的

濃縮/希釈モデルについては,温度勾配下の不飽和媒体中における高温領域での溶液濃度の濃縮傾向や低温領域における溶液濃度の希釈傾向を確認するべく,1次元カラム体系を 対象とした検証解析を実施した。

検証解析条件

本検証解析では,濃縮/希釈モデルを検証するため,次の2ケースを実施した。

ケース1:温度勾配下において水分浸潤が無いケース

<u>ケース2</u>:温度勾配下において,水分浸潤が有るケース

本解析に使用した初期・境界条件を図 4.4-23 に ,THAMES ,Dtransu ,および PHREEQC の入力データを表 4.4-13~4.4-15 に示す。また,本解析に使用した時間ステップ情報を図 4.4-24 に示す。

本解析は, 左端境界を 100 (高温側), 右端境界を 20 (低温側), 初期温度を 20 とし, 左端境界近傍において溶解濃度の濃縮, 右端境界近傍において溶解濃度の希釈を想定したものである。

また,THMC 連成解析コードの処理フローを図 4.4-25 に示す。THMC 連成解析コード の処理手順は,初期の地球化学解析を実施した後,時間ループ内において THAMES(熱-水-応力連成解析)→CHCONC2(濃縮/希釈計算)→PHREEQC(地球化学解析)→Dtransu (物質移行解析)の順に実行する。



図 4.4-23 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件(初期・境界条件)

表 4.4-13 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件 (THAM)

入力項目		単位	入力情報 (A,B)
空隙率		-	0.403
初期体積含7	K率	-	0.2015
固有透過周	吏	m ²	4.0×10^{-20}
熱伝導率		W/(mK)	式(1)
比熱		J/(kgK)	式(2)
初期乾燥密	度	g/cm ³	1.6417
	θs	-	0.403
VG	$\theta \mathbf{r}$	-	0
パラメータ	α	1/m	8.0×10 ⁻³
	n	-	1.6
比透水係数	-	-	-
	a1	-	2.99×10 ⁻⁸ T - 3.74×10 ⁻⁷
水分	a2	-	- 1.5×10 ⁻⁸ T+1.49×10 ⁻⁷
拡散係数 b1 b2		-	- 2.49×10 ⁻³
		-	$5.59 \times 10^{-4} T + 3.93 \times 10^{-1}$
温度勾配 水分拡散係数		m²/(sK)	式(3)
$\lambda = 0.444 + 1.38 \times 10^{-2} \text{w} + 6.14 \times 10^{-3} \text{w}^2 - 1.69 \times 10^{-4} \text{w}^3$			
C=(34.1 + 4.18w)/(100+w)			
D _t =D _{t0} ×(1.0 - Se ²)			

- λ: 熱伝導率[W/(mK)]
- w: 含水率[-]
- C: 比熱[J/(kgK)]
- D_t: 温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)]
- D_{t0}::基準温度における温度勾配水分拡散係数[m²/(sK)](=7.0×10⁻¹²)
- Se: 飽和度[-]

表 4.4-14 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件(Dtransu 入力データ)

入力項目	単位	入力情報(A,B)
化学種	-	Na,Cl
初期溶液濃度	mol/l_w	図1参照
縦分散長	m	1×10^{-4}
横分散長	m	1×10 ⁻⁴
拡散係数	m²/s	5×10^{-10}
遅延係数	-	1.0
減衰係数	1/y	0

表 4.4-15 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件 (PHREEQC 入力データ)

入力項目	単位	入力情報(A,B)
鉱物種	-	なし
初期鉱物濃度	mol/m ³ _cell	"
鉱物分子量	g/mol	"
pH	-	7.0
pe	-	5.0



図 4.4-24 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件(時間ステップ)



図 4.4-25 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析条件 (THMC 連成解析コードの処理フロー) 検証解析結果

<u>ケース1</u>:温度勾配下において水分浸潤が無いケース

温度分布,体積含水率分布,飽和度分布,Na溶液濃度分布の解析結果を図 4.4-26 に示す。 体積含水率および飽和度の解析結果は,高温側において減少傾向を,低温側において増加 傾向を示している。これは,高温側から低温側に向けて,温度勾配に起因した水蒸気移動 が生じたためである。温度の解析結果は,0.001 年後に直線的な温度分布となり,その後, 凹型の温度分布を示す傾向となっている。これは,前述した体積含水率および飽和度の変 化が,媒体の熱伝導率に変化を与えたためである。Na溶液濃度の解析結果は,初期の一様 分布から,高温側の水分が減少している領域において増加すなわち濃縮傾向を,低温側の 水分が増加している領域において減少すなわち希釈傾向を示している。以上より,温度勾 配下において水分浸潤が無いケースについて,濃縮/希釈効果が想定どおり適切に表現さ れていることを確認した。



図 4.4-26 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析結果 (ケース1)

<u>ケース2</u>: 温度勾配下において水分浸潤が有るケース温度分布,体積含水率分布,飽和 度分布,Na溶液濃度分布の解析結果を図 4.4-27 に示す。体積含水率および飽和度の解析結 果は,右端境界から水分が浸潤する系となっているため,右端境界から増加する傾向を示 し,高温側から低温側に向けて,温度勾配に起因した水蒸気移動が生じたことにより,0cm ~4cm 間の領域において減少する傾向を示している。温度の解析結果は,0.001 年後に直線 的な温度分布となり,その後,凹型の温度分布を示す傾向となっている。これは,前述し た体積含水率および飽和度の変化が,媒体の熱伝導率に変化を与えたためである。

Na 溶液濃度の解析結果は,右端の境界固定濃度(619.99[mol/m³_w])が初期濃度 (17.11[mol/m³_w])より高いため,右端境界から Na 溶液濃度が増加する傾向となってい る。右端境界近傍では,前ケース同様希釈現象が生じているはずであるが,本解析条件で は,右端境界からの物質移行が支配的なため,前ケースに見られるような溶液濃度の低下 は見られない。また,左端境界近傍の Na 溶液濃度は,右端境界からの物質移行の影響が小 さい 0.001 年後および 0.01 年後において,増加すなわち濃縮傾向を示している。以上より, 水分浸潤が有るケースについても,温度勾配下の不飽和媒体中における濃縮/希釈効果が, 溶液濃度分布の定性的な傾向に適切に反映されていることを確認した。

- 107 -



図 4.4-27 濃縮 / 希釈モデルに関する検証解析結果 (ケース 2)

4.4.4 速度論モデルに関する検証

目的

本検証は,本研究で導入した速度論モデルの信頼性を確認することを目的として解析を 実施した。

検証解析条件

本検証解析では,速度論モデルを検証するため,次の2ケースを実施した。

<u>ケース1</u>:検証解析データセットに基づき,速度論モデルを使用した解析

(THMC 連成解析コード, PHREEQC)

<u>ケース2</u>:検証解析データセットに基づき,平衡論モデルを使用した解析

(THMC 連成解析コード)

ケース1は,THMC連成解析コードとPHREEQCの解析結果を比較することにより, 本研究で実施した速度論モデル導入の妥当性を確認するものである。ケース2は,THMC 連成解析コードで,速度論モデルと平衡論モデルの解析結果の差を確認し,貯留項取り扱 い・収束アルゴリズムの妥当性を再確認するものである。

検証解析条件

本検証解析に使用した初期・境界条件を図 4.4-28 に, THMC 連成解析コードおよび PHREEQC の解析条件を表 4.4-16 に示す。また,本検証解析に使用した時間ステップ情報 を図 4.4-29 に示す。Calcite の速度論モデルは,式(1)~式(6)を採用した。

また,THMC 連成解析コードの処理フローを図 4.4-30 に示す。THMC 連成解析コード の処理手順は,初期の地球化学解析を実施した後,時間ループ内において THAMES(熱-水-応力連成解析)→PHREEQC(地球化学解析)→Dtransu(物質移行解析)の順に実行 する。時間ループ内の PHREEQC では,沈澱濃度の変化量($\partial P/\partial t$)を計算し,Dtransu の源泉項へ受け渡す。

<u>Calcite</u> 速度論モデル

$$R_{Calcite} = r_f \left(Area \right) \left[1 - \left(\frac{IAP}{K_{Calcite}} \right)^{\frac{2}{3}} \right]$$
$$\vec{z}(1)$$
$$r_f = k_1 \left[H^+ \right] + k_2 \left[CO_2(aq) \right] + k_3 \left[H_2 O \right]$$
$$\vec{z}(2)$$

$$k_1 = 10^{\left(0.198 - \frac{444.0}{T}\right)}$$
 $\Xi \zeta(3)$

$$k_2 = 10^{\left(2.84 - \frac{2177.0}{T}\right)}$$
 $\vec{rt}(4)$

$$k_2 = 10^{\left(-5.86 - \frac{317.0}{T}\right)}$$
 (25 以下の場合) 式(5)

$$k_3 = 10^{\left(-1.10 - \frac{1737.0}{T}\right)}$$
 (25 より大きい場合) 式(6)

ここで,

RCalcite:方解石の反応速度[mmol/(cm²s)]

Rf: 方解石の反応速度定数[-]

Area: 反応物の表面積[cm²/l_Water]

T: 温度[K]

[]: 化学種の活量[mol/l_Water]

である。



図 4.4-28 速度論モデルに関する検証解析条件(初期・境界条件)

項目	THMC 連成解析コード	PHREEQC
溶存元素	C,Ca	C,Ca
初期濃度 [mol/m ³ _w]	1.0×10^{-12}	1.0×10^{-12}
左端境界条件	closed	closed
右端境界条件	fix: 1.0×10 ⁻¹²	fix: 1.0×10 ⁻¹²
鉱物種	Calcite	Calcite
初期鉱物濃度(0~0.1m)[mol/l_w]	1.0×-1	1.0×-1
初期鉱物濃度(0.1~1.0m)[mol/l_w]	1.0×-3	1.0× ⁻³
初期鉱物濃度(1.0m~1.1m)[mol/l_w]	0.0	0.0
自由水中の拡散係数 [m ² /s]	3.0×10^{-10}	3.0×10^{-10}
空隙率 [-]	0.33	1.0
体積含水率[-]	0.33	1.0
固有透過度[-]	1.0×10^{-30}	-
温度〔〕	25.0	25.0
pH [-]	9.0	9.0
pe [-]	5.0	5.0

表 4.4-16 速度論モデルに関する検証解析条件



図 4.4-29 速度論モデルに関する検証解析条件(時間ステップ)



図 4.4-30 速度論モデルに関する検証解析条件 (THMC 連成解析コードの処理フロー)

検証解析結果

ケース1:検証解析データセットに基づき,速度論モデルを使用した解析

ここでは,THMC 連成解析コード,PHREEQC の結果を示し,THMC 連成解析コード への速度論モデル導入の適切性を確認する。

pH 分布, Ca, C 溶液濃度分布, Calcite 沈澱濃度分布の解析結果(THMC 連成解析コード, PHREEQC)を図 4.4-31 に示す。Ca, C 溶液濃度の解析結果は,初期段階の 0.1 日, 0.5 日において右端境界近傍で溶液濃度の節点値 要素値の変換による影響により両者に差が見られるが, 50 年後においては両者同様の結果となった。また, pH の分布も 50 年後において両者同様の結果となった。Calcite 沈澱濃度は, 50 年後において THMC 連成解析コ

ードによる解析結果の方が溶解が促進している傾向にあるが,両者ほぼ同様の結果となった。THMC 連成解析コードにおいて Calcite 沈澱濃度の溶解が促進された原因は,溶液濃度の節点値 要素値の変換による影響により,THMC 連成解析コードの方が要素溶液濃度を低く見積もるためである。

次に,初期段階の0.1日,0.5日において変化の大きい領域(軸方向距離90~110cm)を 細分割(100分割)したケースの解析結果を図4.4-32に示す。図4.4-32より,濃度変化が 顕著に生じる領域の空間メッシュを細分割することにより,両者の結果は近づく傾向となった。以上より,速度論モデルの妥当性が確かめられたが,濃度差が高い領域については, 誤差を減少させるためにメッシュをより細かく分割することが望ましいと考えられる。



(a) pH 分布



(b) Ca, C 溶液濃度分布



(c) Calcite 沈澱濃度分布

図 4.4-31 速度論モデルに関する検証解析結果 (ケース 1)



図 4.4-32 速度論モデルに関する検証解析結果(ケース 1-メッシュ細分割, THMC 連成解析コード:メッシュ 109 分割, PHREEQC:メッシュ 29 分割)

ケース2:検証解析データセットに基づき,平衡論モデルを使用した解析

ここでは, THMC 連成解析コードで速度論モデルおよび平衡論モデルを使用した場合の 解析結果を比較し, 貯留項取り扱い・収束アルゴリズムの適切性を確認する。

pH 分布, Ca, C 溶液濃度分布, Calcite 沈澱濃度分布の解析結果(THMC 連成解析コード: 速度論モデル, 平衡論モデル)を図 4.4-33 に示す。初期段階の 0.1 日, 0.5 日の解析結果は, 速度論モデルと平衡論モデルの差が見られる。しかし, Calcite が比較的短時間で平衡状態に到達することから,時間の経過とともに両者の挙動は近づき, 60 年後では速度論モデルと平衡論モデルの解析結果が一致することを確認した。これより, 速度論モデルを採用した場合の貯留項取り扱い・収束アルゴリズムの妥当性を再確認することができた。



図 4.4-33 速度論モデルに関する検証解析結果 (ケース 2)

JNC TJ8400 2004-004

5. 熱 - 水 - 応力 - 化学連成挙動の事例解析の実施

本章では,本年度開発した熱-水-応力-化学連成解析コードの実例題に対する適用性を 確認することを目的として,オーバーパックの破損を想定している 1,000 年程度の評価期 間を考慮し,2,000 年までの1次元事例解析ならびに3次元事例解析を実施した。本事例解 析は,第2次取りまとめの条件のうち希薄-還元-高pH(以後,FRHP:Fresh Reducing High pH という)の地下水条件に基づき,熱-水-化学(物質移行)の現象に着目し,1 次元事例解析ならびに3次元事例解析を実施した。

5.1 解析ケースの設定

1次元事例解析は,解析結果の解釈を容易に実施する観点ならびに地下水組成や間隙水組 成への影響度を把握する観点から,緩衝材中における可溶性塩の有無,人工バリア構成に おける支保工の有無,地球化学モデルのバリエーション(平衡論,速度論)を考慮した解 析ケースを設定することとした。本研究で実施する1次元事例解析のケース仕様を表 5.1-1 に示す。

なお,3次元事例解析は,昨年度の幾何形状モデル体系を採用することとした。

5.2 事例解析(1次元)

本節では,前記6ケースの1次元事例解析を対象として,解析条件の設定,解析結果および考察について記載する。

5.2.1 解析条件

本事例解析のモデル体系は,図 5.2-1(1)に示すように仮想的なオーバーパック,緩衝材, 岩盤の3領域を考慮した。仮想的なオーバーパック領域の温度は80 固定とし,緩衝材, 岩盤中の初期温度は45 として,熱が緩衝材から岩盤へ移動する条件としている。また, 緩衝材中の不飽和帯では,初期段階において炭酸ガスと酸素ガスを含有するガス相を考慮 しており,飽和している岩盤領域から地下水が侵入する条件を考慮している。

当初は,オーバーパック領域に腐食生成物として安定な酸化鉄鉱物(磁鉄鉱,Fe₃O₄)を 考慮し,拡散係数を極めて小さな値に設定する予定であったが,磁鉄鉱の溶解度が緩衝材 中における鉄濃度より低くなった場合に緩衝材中から腐食生成物領域への物質移行が見ら れたこと,他の元素においても腐食生成物領域への物質移行が見られたことなど,実現象 とは異なる挙動が発生し,緩衝材と岩体の適切な相互作用が考察できないと判断し,腐食 生成物領域の初期濃度は緩衝材中の初期濃度と同一の値とした。ただし,腐食生成物領域 の温度は80 一定とし,その他の熱-水理条件は,緩衝材と同一の条件とした。

熱 - 水 - 応力 (THAMES) に係る岩盤, 緩衝材の解析条件は表 5.2-1,表 5.2-2 に示す値 とした。物質移行 (Dtransu) に係る物質移行特性は,各領域において表 5.2-3 に示す値と した。

表 5.2-4 は,緩衝材中,岩体中の初期溶液組成を示す。本表の初期濃度は,以下に示す様 な方法により求めた。なお,地球化学モデルの計算において使用した熱力学データベース は,サイクル機構殿のホームページよりダウンロードした第2次取りまとめ用熱力学デー タベース(Version:991231c0.tdb,以後,第2次取りまとめデータベースという)を採用 した。

緩衝材中の初期溶液濃度は,予め地球化学モデル(PHREEQC)により,操業時の環境を 想定し,45 の条件において純粋と大気中の炭酸ガス(ガス分圧の対数:-3.5),酸素ガス (ガス分圧の対数:-0.7)の平衡溶液組成を計算した。この平衡溶液は,pH=5.726,pe= 14.872,C(トータル) = 1.262×10⁻⁵ [mol/l_water]となり,本溶液を初期溶液として,緩 衝材中の地球化学プロセス(随伴鉱物 Calcite ,Pyrite ,Chalcedony との平衡,イオン交換, 表面錯体,可溶性塩)を考慮して求めた。可溶性塩のモデル化は,それぞれ,NaCl=1.10×10⁻⁵ [w%],KCl=4.40×10⁻⁵ [w%],CaSO4=3.80×10⁻³ [w%]が瞬時に初期含水比 7%の空隙水に 溶解するものと仮定し,可溶性塩の濃度を地球化学モデルの反応物として,それぞれ,NaCl = 1.882×10⁻³ [mol/l_water],KCl = 5.902×10⁻³ [mol/l_water],CaSO4 = 2.791×10⁻¹ [mol/l_water]を入力条件として設定した。例えば,表5.2⁻⁴のCl 濃度は,可溶性塩のNaCl 濃度とKCl 濃度の和として7.784×10⁻³ [mol/l_water]となっている。

岩盤中の初期地下水組成は,第2次取りまとめの地下水組成(pH,pe,イオン濃度),岩 盤構成鉱物(Calcite, Pyrite, Chalcedony, Magnetite, Albite, Kaolinite, Microcline) の平衡,環境温度45,第2次取りまとめデータベースを考慮し,PHREEQCにより設定 した。 また,緩衝材中の構成鉱物ならびに岩盤中の構成鉱物に関する初期濃度は,表 5.2-5,表 5.2-6 に示す様な値を入力条件とした。また,緩衝材中のイオン交換モデル,表面錯体モデ ルの基本定数ならびに緩衝材空隙中のガス分圧は,表 5.2-7 に示す値を採用した。さらに, 解析ケース 5,6 では,緩衝材中でのスメクタイトの溶解・沈殿現象のモデル化において, 速度論を考慮するものであり,表 5.2-8 に示す条件を考慮した。本研究では,反応速度モデ ルを地球化学コード PHREEQC の入力データで定義し,スメクタイトの平衡定数は,熱力 学データベースに新たなデータとして追加した。

なお,本事例解析の時間ステップは,数年までの間において,溶液濃度の空間分布が鋭敏 となり,しばしば,不安定な解が得られたことから,経験的に初期段階では5分程度の t を採用し,徐々に増加するよう配慮し,計算時間の効率化ならびに解の安定性確保を図っ た。本事例解析で採用した時間メッシュ情報を図 5.2-1(2)に示す。 5.2.2 解析結果および考察

本項では,前記の条件に基づき解析した結果ならびに考察について,ケース毎に記載する。 なお,各解析ケース間の比較を含めた1次元事例解析のまとめについては,後述の「5.2.3 事 例解析(1次元)の総括」で記載する。

解析結果は,熱,水,移行元素,移行を伴わない元素(例えば,イオン交換サイト,表面 錯体サイト)などの空間分布を初期状態から 2,000 年までの任意の時間に対して整理し, 緩衝材と岩盤中での環境条件の変化ならびに相互作用を考察する。また,緩衝材中での代 表位置(ガラス固化体近傍:以後,緩衝材内側という,岩体近傍:以後,緩衝材外側とい う)ならびに岩体中での緩衝材近傍(以後,岩盤内側という)における熱,水,移行元素, 移行を伴わない元素を対象とした時間変化(遷移図)についても整理し,各特性値の変遷 について考察する。

解析結果として,解析ケース1~4は,緩衝材構成鉱物は平衡モデルを採用している。解 析結果は,各パラメータの空間分布,各パラメータの時間変化(緩衝材内側,緩衝材外側, 岩盤内側)の分布図を示している。解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し)については 図 5.2-2~図 5.2-58,解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し)については図 5.2-59~図 5.2-115,解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り)については図 5.2-116~図 5.2-176, 解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り)については図 5.2-177~図 5.2-237 にそれぞれ 示す。一方,解析ケース5,6は,緩衝材構成鉱物のスメクタイトのみを速度論モデル(そ の他の鉱物は全て平衡論モデルを採用)としており,可溶性塩無し・支保工有り(図 5.2-238)

本項では,熱特性,水理特性,物質移行-地球化学特性の観点から,解析結果ならびに考察について記載している。特に,水理特性は,本特性の傾向について述べ,これらの傾向が,物質移行-地球化学特性とどの様な因果関係があるのかについて議論する。物質移行-地球化学特性については,元素濃度の挙動について示すとともに,地球化学反応の観点から議論することとした。

なお,解析ケース5,6は,地球化学の計算において,速度論モデルにおいて計算時間を 要することから,3週間程度を限度として途中段階での結果をまとめることとした。

- 121 -
(1) 熱特性

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-2 は,温度の空間分布を示す。本図の横軸は,緩衝材内側部分(仮想的オーバーパック領域との境界部分)を始点としている。初期状態において,緩衝材内側要素の温度は 62.5 (仮想的オーバーパック領域の 80 と他領域の初期温度 45 の平均値)となってお り,徐々に 80 一定となる挙動を示しており,10年以内に定常状態となる。図 5.2-47(a), 図 5.2.51(a),図 5.2-55(a)にそれぞれ緩衝材内側,外側,岩盤内側の遷移図を示す。本図か ら,約5年で定常状態となっていることを示している。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

図 5.2-59 は,温度の空間分布を示す。解析ケース1とほぼ同一の傾向を示しており可溶 性塩の効果は,温度分布に対して顕著でないことを示している。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

図 5.2-116 は,温度の空間分布を示す。本ケースにおいて支保工の熱・水理学的条件は, 岩盤と同一であることから,解析ケース1とほぼ同一の傾向を示しており支保工の効果は, 温度分布に対して顕著でないことを示している。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

図 5.2-177 は,温度の空間分布を示す。本ケースにおいて支保工の熱・水理学的条件は, 岩盤と同一であることから,解析ケース2,3とほぼ同一の傾向を示しており支保工ならび に可溶性塩の効果は,温度分布に対して顕著でないことを示している。

・解析ケース 5(可溶性塩無し,支保工有り,速度論),解析ケース 6(可溶性塩有り, 支保工有り,速度論)

後述の様に速度論モデルを採用することにより,平衡モデルと比較した場合に pH の分布 において顕著な差はみられない。このことは,溶解・沈殿反応による変化が小さく,透水 係数の差も見られないことから,解析ケース5ならびに6の熱移動の変化は,解析ケース3, 4 とほぼ同一であるものと考えられる。 (2) 水理特性

ここでは,水理特性として体積含水率,飽和度,乾燥密度,空隙率,透水係数の結果について記載する。これらの特性値のうち,乾燥密度,空隙率,透水係数については,緩衝材構成鉱物の溶解・沈殿やイオン交換による Ca型化の影響により変化するパラメータであることから,適宜,物質移行-地球化学特性の結果も引用しつつ考察を行った。

()体積含水率

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-3 は,初期段階から 2,000 年までにおける体積含水率の空間分布を示す。緩衝材 中の初期体積含水率は,緩衝材乾燥密度と初期含水比より 0.112 [l_w/l_cell] = 1.6 [g_bent/cm³_cell] × 0.07 [g_w/g_bent]となっており,岩盤中は,0.02 の間隙率で飽和し ている。本図より,10 年の時点において緩衝材中は飽和(間隙率=0.403)していること を示している。

図 5.2-51(c)は,緩衝材外側の体積含水率の変遷を示す。岩盤中に隣接する要素である ため,速やかに飽和している。図 5.2-47(c)は,緩衝材内側の体積含水率の変遷を示す。 緩衝材中での地下水の移動現象により,緩衝材外側よりも飽和に到達するまで時間を要 するが,約 10 年で飽和していることを示している。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

図 5.2-60 は,初期段階から 2,000 年までにおける体積含水率の空間分布を示す。解析 ケース1が10年で飽和するのに対して,本ケースは約4年で飽和する結果となっている (図 5.2-104(c))。これは,図 5.2-47,図 5.2-104に示す様に緩衝材中での透水係数が可 溶性塩の効果により1桁大きくなっているためである。

図 5.2-112(c)は,岩盤内側における体積含水率の変遷を示す。本図より岩盤中の体積含 水率は 0.02 以下となっている。この減少傾向は,図 5.2-112(e)に示す空隙率の変遷と関 係付けることができる。岩盤内側は,緩衝材中からの可溶性塩を構成する元素(Ca,Na, K,S)の侵入ならびに緩衝材中における Fe 溶液濃度(低いpH,酸素ガスとの平衡環境 下における Pyrite の高い溶解度)の侵入により岩盤構成鉱物が沈殿現象を起している可 能性がある。例えば,図 5.2-57,図 5.2-58 に示す様に Calcite(CaCO₃), Albite(NaAlSi₃O₈), Microcline (KalSi₃O₈), Pyrite (FeS₂), Magnetite (Fe₃O₄)は, 沈殿現象となり, 空 隙中に沈殿鉱物が生成され空隙率が減少している。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

図 5.2-117 は,初期段階から 2,000 年までにおける体積含水率の空間分布を示す。本傾向は,解析ケース 1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)と同一の傾向を示しており,体積含水率に対して支保工(岩盤と同一の水理条件)の影響度は無いことを示している。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

図 5.2-178 は,初期段階から 2,000 年までにおける体積含水率の空間分布を示す。本傾向は,解析ケース 2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)と同一の傾向を示しており,体積含水率に対して支保工(岩盤と同一の水理条件)の影響度は無いことを示している。

・解析ケース5(可溶性塩無し,支保工有り,速度論),解析ケース6(可溶性塩有り, 支保工有り,速度論)

後述の様に速度論モデルを採用することにより,平衡モデルと比較した場合に pH の分 布において顕著な差はみられない。このことは,溶解・沈殿反応による変化が小さく, 透水係数の差も見られないことから,解析ケース5ならびに6の体積含水率の変化は, 解析ケース3,4とほぼ同一であるものと考えられる。 () 飽和度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-4 は,初期段階から 2,000 年までにおける飽和度の空間分布を示す。岩盤中は飽 和を仮定していることから,初期段階から 2,000 年に至るまで飽和状態(=1.0)となっ ている。緩衝材中における初期飽和度は,0.278(=初期体積含水率 0.112/初期間隙率 0.403)となっており,10年の時点において緩衝材中は飽和(間隙率=0.403)しているこ とを示している。図 5.2-47(b)は,緩衝材内側の飽和度の変遷を示す。図 5.2-51(c)の体積 含水率と比較すると地下水の移動遅れを反映した分布となっている。図 5.2-51(b)は,緩 衝材外側の飽和度の変遷を示す。岩盤と隣接する要素であるため,速やかに飽和してい る。岩盤内側の飽和度は,図 5.2-55(b)に示す様に解析の前提である飽和状態となってい る。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

図 5.2-61 は,初期段階から 2,000 年までにおける飽和度の空間分布を示す。体積含水 率と対応した傾向となっている。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

図 5.2-118 は,初期段階から 2,000 年までにおける飽和度の空間分布を示す。体積含水 率と対応した傾向となっている。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

図 5.2-179 は,初期段階から 2,000 年までにおける飽和度の空間分布を示す。体積含水 率と対応した傾向となっている。

・解析ケース5(可溶性塩無し,支保工有り,速度論),解析ケース6(可溶性塩有り,

支保工有り,速度論)

後述の様に速度論モデルを採用することにより,平衡モデルと比較した場合に pH の分 布において顕著な差はみられない。このことは,溶解・沈殿反応による変化が小さく, 透水係数の差も見られないことから,解析ケース5ならびに6の飽和度の変化は,解析 ケース3,4とほぼ同一であるものと考えられる。 () 乾燥密度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-5 は,初期段階から 2,000 年までにおける緩衝材領域,岩盤領域の乾燥密度の空間分布を示す。本図は,両領域の乾燥密度を 1 つの図で示しているが,本図のレンジでは微小な変化が見られないため,緩衝材領域,岩盤領域のそれぞれについて,図 5.2-6,図 5.2-7 に示す様に乾燥密度の空間分布を再整理した。

図 5.2-6 より, 緩衝材中の乾燥密度は緩衝材内側において増加傾向を示し, 緩衝材の外 側は減少傾向を示している。これは, 緩衝材構成鉱物の溶解・沈殿が支配していること が考えられる。すなわち, 緩衝材内側では, 緩衝材構成鉱物の沈殿現象が支配的であり, 緩衝材外側では緩衝材構成鉱物の溶解減少が支配的となっている。例えば, 図 5.2-49(n) ~(p)に示す様に,緩衝材内側において, Chalcedony(SiO₂), Pyrite(FeS₂)は,溶解・沈 殿が初期段階で緩慢となるのに対して, Calcite(CaCO₃)は沈殿現象が顕著となる。また, 図 5.2-53(n)~(p)に示す様に,緩衝材内側では, Chalcedony, Pyrite は,溶解・沈殿が 初期段階において緩慢であるのに対して, Calcite は溶解現象が顕著となる(Calcite の溶 解・沈殿メカニズムについては,後述「(3)物質移行-地球化学特性」で考察する)。

一方,岩盤中の乾燥密度は,図 5.2-7 に示す様に緩衝材と隣接する位置において,乾燥 密度の増加が顕著となっている。この理由としては,図 5.2-57,図 5.2-58 に示す様に Calcite,Albite(NaAlSi₃O₈),Microcline(KAlSi₃O₈),Pyrite,Magnetite(Fe₃O₄)が沈殿 現象支配であることに起因している。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

緩衝材中の乾燥密度(図 5.2-108(d)参照)は,可溶性塩の効果により緩衝材構成鉱物の 溶解が抑制されることから,ケース 1(図 5.2-51(d)参照)と比較して減少率は低い結果 を示している。

岩盤中の乾燥密度は,可溶性塩を考慮した場合は,可溶性塩が無い場合よりも pH が低い(本ケースは図 5.2-113(a)より pH=6.8,ケース1 は図 5.2-56 より pH=7.5)ことから岩 盤構成鉱物の溶解が顕著となり,本ケースの乾燥密度は,ケース1 よりも僅かながら小 さくなっている。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

緩衝材中の乾燥密度は,支保工からの Ca 濃度の移行により緩衝材構成鉱物の沈殿現象 が顕著となり,解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し)よりも増加傾向を示している (図 5.2-108(d),図 5.2-169(d)参照)。解析ケース1の緩衝材外側における方解石の濃度 (図 5.2-110(f)参照)は,解析ケース2の沈殿濃度(図 5.2-171(f)参照)よりも小さいこ とが主な要因となっている。

岩盤内側の乾燥密度は,図5.2-173(d)に示す様に時間の経過とともに増加している。 これは,方解石の沈殿(図5.2-142),黄鉄鉱の沈殿(図5.2-148),Albiteの沈殿(図5.2-150), Magnetiteの沈殿(図5.2-152)の沈殿現象が時間の経過とともに増加することが起因し ている。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

緩衝材中の乾燥密度は,解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し)のケースと比較し ほぼ同一の傾向を示しており,支保工の影響度が顕著でないことを示している。これは, 図 5.2-225(d),図 5.2-230(d)に示す様に緩衝材内側ならびに外側の乾燥密度の時間変化が, 解析ケース2の分布(図 5.2-104(d),図 5.2-108(d)参照)と同一であることから明らかと なる。また,本ケースの乾燥密度の時間変化は(図 5.2-225(d),図 5.2-230(d)),解析ケ ース 3 の時間変化とほぼ同一となっており,支保工の効果をモデル化した場合は,この 効果が顕著となり影響度を緩慢にさせる効果がある。

岩盤内側の乾燥密度も,図 5.2-234(d)に示す様に,解析ケース2(可溶性塩有り,支保 工無し)の図 5.2-112(d)とほぼ同一の傾向を示している。一方,岩盤内側は,可溶性塩の 効果により pH が減少(図 5.2-127 の約 pH=8 に対して図 5.2-188 の pH=7)することに より,岩盤構成鉱物の溶解現象が顕著となり乾燥密度は減少傾向を示している(図 5.2-234(d),図 5.2-173(d)参照)。

・解析ケース 5(可溶性塩無し,支保工有り,速度論),解析ケース 6(可溶性塩有り, 支保工有り,速度論)

後述の様に速度論モデルを採用することにより,平衡モデルと比較した場合に pH の分 布において顕著な差はみられない。このことは,溶解・沈殿反応による変化が小さいこ とから,解析ケース5ならびに6の乾燥密度の変化は,解析ケース3,4とほぼ同一であ

- 127 -

るものと考えられる。

() 空隙率

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-8 は,初期段階から 2,000 年までにおける緩衝材領域,岩盤領域の空隙率の空間 分布を示す。本図は,両領域の空隙率を 1 つの図で示しているが,本図のレンジでは微 小な変化が見られないため 緩衝材領域,岩盤領域のそれぞれについて 図 5.2-9 図 5.2-10 に示す様に空隙率の空間分布を再整理した。

図 5.2-9 より, 緩衝材中の空隙率は, 増加傾向を示している。また,図 5.2-10 より岩 盤内側の空隙率は減少傾向を示している。緩衝材内側の空隙率(図 5.2-47(e))は,図 5.2-49(f)に示す様に Calcite の沈殿・溶解濃度に依存した分布となっている。また,緩衝 材外側は全般的に増加傾向を示しており,空隙率の変遷挙動(図 5.2-51(e))は,図 5.2-53(f) の溶解現象変遷傾向と類似していることから,これらの地球化学現象が関係しているこ とが言える。

岩盤内側の空隙率は,図 5.2-55(e)に示す様に時間の経過とともに減少(空隙閉塞)傾向を示す。この傾向は,図 5.2-57(e),(g),(h),図 5.2-58(b)に示す様に岩盤構成鉱物である Calcite, Pyrite, Albite, Magnetite の沈殿が支配しているものと考えられる。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

緩衝材内側の空隙率は,図 5.2-104(e)に示す様に時間の経過とともに僅かながら減少傾 向(空隙閉塞傾向)を示すが,徐々に増加傾向を示す。この傾向は,図 5.2-106(f)に示す 様に Calcite の沈殿・溶解現象に起因したものとなっている。緩衝材外側の空隙率は,図 5.2-108(e)に示す様に時間の経過とともに増加している。この現象は,図 5.2-110(f)に示 す様に Calcite 濃度に対応したものとなっていることから,緩衝材外側の空隙率増加傾向 は,Calcite の溶解現象が支配しているものと考えられる。

岩盤内側の空隙率は,図 5.2-112(e)に示す様に時間の経過とともに減少(空隙閉塞)傾向を示す。この傾向は,図 5.2-57(e),(g),(h),図 5.2-58(a),(b)に示す様に岩盤構成鉱物である Calcite, Pyrite, Albite, Kaolinite, Magnetiteの沈殿が支配しているものと考えられる。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

緩衝材内側の空隙率は,図 5.2-164(e)に示す様に時間の経過とともに増加傾向を示す。 この傾向は,図 5.2-167(f)に示す様に Calcite の溶解挙動と連動している。緩衝材外側の 空隙率は,図 5.2-169(e)に示す様に時間の経過とともに減少傾向(空隙閉塞)を示し,そ の後増加傾向を示している。この現象として,初期段階の空隙閉塞は,図 5.2-171(g)に示 す様に Chalcedonyの沈殿現象が支配し,その後,図 5.2-171(f),(h)に示す様に Calcite, Pyrite の溶解現象により,空隙率が増加している。

岩盤内側の空隙率は,図 5.2-173(e)に示す様に時間の経過とともに減少(空隙閉塞)傾向を示す。この傾向は,図 5.2-175(e),(g),(h),図 5.2-176(b)に示す様に岩盤構成鉱物である Calcite, Pyrite, Albite, Magnetite の沈殿が支配しているものと考えられる。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

緩衝材内側の空隙率は,図 5.2-225(e)に示す様に時間の経過とともに僅かながら減少傾 向(空隙閉塞傾向)を示すが,徐々に増加傾向を示す。この傾向は,図 5.2-228(f)に示す 様に Calcite の沈殿・溶解現象に起因したものとなっている。緩衝材外側の空隙率は,図 5.2-230(e)に示す様に時間の経過とともに増加している。この現象は,図 5.2-232(f)に示 す様に Calcite 濃度に対応したものとなっていることから,緩衝材外側の空隙率増加傾向 は,Calcite の溶解現象が支配しているものと考えられる。

岩盤内側の空隙率は,図 5.2-234(e)に示す様に時間の経過とともに減少(空隙閉塞)傾向を示す。この傾向は,図 5.2-236(g),(h),図 5.2-237(b)に示す様に岩盤構成鉱物である Pyrite,Albite,Magnetiteの沈殿が支配しているものと考えられる。

・解析ケース 5 (可溶性塩無し,支保工有り,速度論),解析ケース 6 (可溶性塩有り,

支保工有り,速度論)

後述の様に速度論モデルを採用することにより,平衡モデルと比較した場合に pH の分 布において顕著な差はみられない。このことは,溶解・沈殿反応による変化が小さいこ とから,解析ケース5ならびに6の空隙率の変化は,解析ケース3,4とほぼ同一である ものと考えられる。

()透水係数

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

JNC TJ8400 2004-004

図 5.2-11 は,初期段階から 2,000 年までにおける緩衝材領域,岩盤領域の透水係数の 空間分布を示す。本図は,両領域の空隙率を 1 つの図で示しているが,本図のレンジで は微小な変化が見られないため,緩衝材領域について,図 5.2-12 に示す様に透水係数の 空間分布を再整理した。なお,岩盤領域の透水係数については,地球化学反応による連 成物性モジュールを整備していないことから,本研究では一定値となっている。

図 5.2-12 は,緩衝材中における透水係数の空間分布を示している。本図より,透水係 数は時間の経過とともに変化はほとんど見られない。また,緩衝材内側,外側の透水係 数の時間変化を,それぞれ図 5.2-47(h),図 5.2-53(h)に示すが,時間の経過にともない, 一定値を示している。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

図 5.2-69 は,緩衝材中における透水係数の空間分布を示している。本図より,透水係 数は時間の経過ととも減少傾向を示している。また,緩衝材内側,外側の透水係数の時 間変化を,それぞれ図 5.2-104(f),図 5.2-108(f)に示すが,時間の経過にともない,減少 傾向を示している。この減少傾向は,初期段階において緩衝材中に設定された可溶性塩 が岩盤中に散逸する効果によるものと考えられる。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

図 5.2-126 は,緩衝材中における透水係数の空間分布を示している。本図より,透水係 数は時間の経過とともに変化はほとんど見られない。また,緩衝材内側,外側の透水係 数の時間変化を,それぞれ図 5.2-164(f),図 5.2-169(h)に示すが,時間の経過にともない, 一定値を示している。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

図 5.2-187 は,緩衝材中における透水係数の空間分布を示している。本図より,透水係 数は時間の経過ととも減少傾向を示している。また,緩衝材内側,外側の透水係数の時 間変化を,それぞれ図 5.2-225(f),図 5.2-230(f)に示すが,時間の経過にともない,減少 傾向を示している。この減少傾向は,初期段階において緩衝材中に設定された可溶性塩 が岩盤中に散逸する効果によるものと考えられる。

・解析ケース5(可溶性塩無し,支保工有り,速度論),解析ケース6(可溶性塩有り,

支保工有り,速度論)

後述の様に速度論モデルを採用することにより,平衡モデルと比較した場合に pH の分 布において顕著な差はみられない。このことは,溶解・沈殿反応による変化が小さいこ とから,透水係数の変化についても違いは無いものと考えられるため,解析ケース 5 な らびに 6 の透水係数の変化は,解析ケース 3,4 とほぼ同一であるものと考えられる。 (3)物質移行 - 地球化学特性:解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し)

ここでは,物質移行-地球化学特性として pH, pe,液相濃度(Al,C,Ca,Cl,Fe,K, Mg,Na,S,Si),CO₂ガス濃度,鉱物濃度(Chalcedony,Calcite,Pyrite,Albite,Kaolinite, Microcline, Magnetite),イオン交換化学種,表面錯体化学種の結果について記載する。 以下に,各特性の傾向について述べた後,物質移行もしくは地球化学的な解釈を加える。

() pH

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-13 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における pH の空間分布 を示す。緩衝材中における初期 pH は,表 5.2-4 の各組成を初期条件として各節点に割り 当てた後,要素中心における濃度に変換されたデータに基づき平衡計算した結果となっ ている。緩衝材中の pH は,2,000 年に至るまで顕著な変化は,見られないが 0 年から 2,000 年の間で僅かではあるが減少する。図 5.2-13(a),(b)に示す様に緩衝材中の pH は 減少傾向を示す。これは以下に示す,空隙中の炭酸ガスと間隙水の平衡,緩衝材構成鉱 物である黄鉄鉱の溶解平衡が支配している。一方,pH を増加させるための反応として方 解石の溶解があるが,前記の反応がより支配している。

 $CO_{2}(gas) + H_{2}O = H^{+} + HCO_{3}^{-}$

 $2FeS_2(Pyrite) + 2H_2O + 7O_2(aq) = 2Fe^{2+} + 4SO_4^{2-} + 4H^+$

緩衝材中では,前記低 pH 化とは別に高 pH 化に寄与する以下の反応もあるが,前記の低 pH 化の反応が支配的となる。

 $CaCO_3(Calcite) + H^+ = Ca^{2+} + HCO_3^-$

一方,緩衝材中では,図 5.2-13(a),(b)に示す様に内側の方が低 pH 傾向を示している。 これはオーバーパック中において,空隙中の酸素ガスにより黄鉄鉱の溶解,空隙中の炭 酸ガスとの平衡,酸化・還元の広い範囲で安定となる磁鉄鉱の沈殿現象により低 pH 環境 となることから,この影響が緩衝材の内側にも影響を与えている。

 $2FeS_2(Pyrite) + 2H_2O + 7O_2(aq) = 2Fe^{2+} + 4SO_4^{2-} + 4H^+$

 $CO_2(gas) + H_2O = H^+ + HCO_3^-$

 $2Fe^{3+} + Fe^{2+} + 4H_2O = Fe_3O_4(Magnetite) + 8H^+$

図 5.2-13(a) ~ (f)に示す様に岩盤中の pH は,減少傾向を示しており,これは岩盤構成 鉱物の溶解・沈殿現象が支配している。図 5.2-28,図 5.2-35 ~ 38 に示す様に方解石の沈 殿,カオリナイトの溶解・アルバイトの沈殿,磁鉄鉱の沈殿が考えられる。 $Ca^{2+} + HCO_3^- = CaCO_3(Calcite) + H^+$ $Al_2Si_2O_5(OH)_4(Kaolinite) + 2Na^+ + 2OH^- + 4H_4SiO_4 = 11H_2O + 2NaAlSi_3O_8(Albite)$ $2Fe^{3+} + Fe^{2+} + 4H_2O = Fe_3O_4(Magnetite) + 8H^+$

一方,黄鉄鉱は図 5.2-34 に示す沈殿挙動, Microcline は図 5.2-58(c)に示す様に妖怪反応により pH は増加傾向となるが(反応式を以下に示す),前記の低 pH 化の現象が支配している。また, Chalcedonyの溶解平衡の様に pH の変化に影響を与えない反応も起こっている。

 $2Fe^{2+} + 4SO_4^{2-} + 4H^+ = 2FeS_2(Pyrite) + 2H_2O + 7O_2(aq)$ KAlSi₃O₈(Microcline) + 7H₂O + H⁺ = Al(OH)₃(aq) + K⁺ + 3Si(OH)₄(aq) SiO₂(Chalcedony) + 2H₂O = H₄SiO₄

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

解析ケース 2 の pH は図 5.2-70 に示す様に可溶性塩無しと同様の傾向を示すが,下記の点で異なる。

1) 可溶性塩の効果により緩衝材中における初期 pH は低い。

2) 緩衝材中の pH は時間の経過とともに増加する。

可溶性塩による初期 pH の減少の要因は,可溶性塩のうち Ca が顕著に多いことから方 解石の溶解が抑制(緩衝材中では,炭酸塩濃度が低いレベルとなっていることから沈殿 現象とはならない)されることに加え,以下の反応が寄与しているものと考えられる。

 $CaSO_4$ (可溶性塩)+ $H_2O = CaOH^+ + H^+ + SO_4^{2-}$

 $MgZ_2 = Mg^{2+} + 2Z^{-}$

 $Mg^{2+} + H_2O = MgOH^+ + H^+$

時間の経過につれて緩衝材中の pH が増加する地球化学現象は,可溶性塩が緩衝材領域から岩盤に移行するにつれ,方解石の溶解が促進されること,イオン交換サイトへの水素イオンの吸収(図 5.2-107(e),図 5.2-111(e)参照)が考えられる。これらの反応式を以下に示す。

$$Z^{-} + H^{+} = ZH$$

CaCO₃(Calcite) + H⁺ = Ca²⁺ + HCO₃⁻

岩盤中の pH は,図 5.2-70 に示す様に,時間の経過とともに全体的に減少傾向を示す。 岩盤中の Calcite は図 5.2-85 に示す様に沈殿傾向を示す。図 5.2-92,93 より Albite, Kaolinite は,岩盤内側において沈殿傾向を示す。また,図 5.2-94 に示す様に Magnetite も岩盤内側において沈殿傾向を示す。さらに,初期段階では,図 5.2-95(b)に示す様に沈 殿傾向を示す。これらの反応は,以下に示す様に低 pH 化の解釈を支援することができる。

 $Ca^{2+} + HCO_3^- = CaCO_3(Calcite) + H^+$

 $3Al(OH)_3(aq) + 5Si(OH)_4(aq) + Na^+ = NaAlSi_3O_8(Albite) +$

 $Al_2Si_2O_5(OH)_4(Kaolinite) + 12H_2O + H^+$

 $2Fe^{3+} + Fe^{2+} + 4H_2O = Fe_3O_4(Magnetite) + 8H^+$

一方,時間の経過とともに岩盤内側の pH は増加するが,これは,図 5.2-95 に示す様に Microcline は,岩盤内側において徐々に溶解現象となることから,以下の反応が支配するものと考えられる。

 $KAl_{3}O_{8}(Microcline) + 7H_{2}O + H^{+} = Al(OH)_{3}(aq) + K^{+} + 3Si(OH)_{4}(aq)$

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

図 5.2-127 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における pH の空間分布 を示す。本図より,支保工領域は高 pH となっている。この化学反応は,以下に示す様に 支保工構成鉱物の溶解ならびに 2 次鉱物である方解石の沈殿が支配していると考えられ る。

 CaH_2SiO_4 (支保工)+ $H^+ = Ca^{2+} + H_3SiO_4^-$

 $CaOH^+ + CO_3^{2-} = CaCO_3(Calcite) + OH^-$

緩衝材中の pH は,図 5.2-127(a)の初期段階での pH=8 が時間の経過とともに僅かに減少しており,空隙中の炭酸ガスの影響,酸素ガスによる黄鉄鉱の溶解が支配的となる。 これらの支配反応を以下に示す。

 $CO_2(gas) + H_2O = H^+ + HCO_3^-$

 $2FeS_2(Pyrite) + 2H_2O + 7O_2(aq) = 2Fe^{2+} + 4SO_4^{2-} + 4H^+$

ただし,支保工の影響(高 pH:支保工領域から緩衝材領域への OH の拡散による移行) の影響により,一般的に見られる様な低 pH 化には至っていない。

緩衝材内側は時間の経過とともに増加している(図 5.2-127(b), (c))。これは,オーバーパック腐食生成物(黄鉄鉱の溶解,磁鉄鉱の沈殿)の影響により低 pH 傾向となっている。時間の経過とともに支保工中で溶解した液相 Si が緩衝材中を移行し,緩衝材全域に

おいて沈殿傾向を示す(図 5.2-144 参照)。また,図 5.2-144 に示す様に緩衝材中におい て方解石も溶解挙動となり,これによる効果においても pH は以下に示す様に増加傾向を 示す。

 $H_{3}SiO_{4}^{-} + H^{+} = SiO_{2}(Chalcedony) + 2H_{2}O$ $CaCO_{3}(Calcite) + H^{+} = Ca^{2+} + HCO_{3}^{-}$

図 5.2-127 より岩盤の内側において低 pH となっている。これは,図 5.2-142 に示すように Calcite の岩盤内側での局部的な沈殿,図 5.2-145 に示す様に岩盤内側での局部的な Chalcedony の溶解,図 5.2-150,151 に示す様に Albite の沈殿・Kaolinite の溶解が起こる。また,図 5.2-152 に示す様に Magnetite の局部的沈殿が主な要因となる。これらの反応を以下に示す。

$$\begin{split} Ca^{2+} + HCO_{3}^{-} &= CaCO_{3}(Calcite) + H^{+} \\ SiO_{2}(Chalcedony) + 2H_{2}O &= H_{3}SiO_{4}^{-} + H^{+} \\ 3Al(OH)_{3}(aq) + 5Si(OH)_{4}(aq) + Na^{+} &= NaAlSi_{3}O_{8}(Albite) + \\ Al_{2}Si_{2}O_{5}(OH)_{4}(Kaolinite) + 12H_{2}O + H^{+} \\ 2Fe^{3+} + Fe^{2+} + 4H_{2}O &= Fe_{3}O_{4}(Magnetite) + 8H^{+} \end{split}$$

図 5.2-127(b), (c)より,岩盤内側では高 pH のフロントが見られるが,約 100 年後に高 pH 分布は消滅している。これは,以下に示す様に岩盤構成鉱物である Albite・Kaolinite 両鉱物の沈殿が局部的に起こる。

 $3Al(OH)_{4}^{-} + 5H_{3}SiO_{4}^{-} + Na^{+} + 7H^{+} = NaAlSi_{3}O_{8}(Albite)$ + $Al_{2}Si_{2}O_{5}(OH)_{4}(Kaolinite) + 15H_{2}O$

本図より,全時間領域にわたって支保工領域では高 pH を示しているが,緩衝材,岩盤 領域では高 pH の影響は受けない。岩盤において pH が増加しないと考えられる反応を以 下に示す。

【Albite の沈殿, Kaolinite の溶解】

 $(1/2)Al_2Si_2O_5(OH)_4(Kaolinite) + Na^+ + OH^- + 2H_4SiO_4 = (11/2)H_2O + NaAlSi_3O_8(Albite)$ 【Magnetite の沈殿】 $2Fe(OH)_2^+ + Fe^{2+} + 4OH^- = Fe_3O_4(Magnetite) + 4H_2O$ 【Microcline の溶解】 $KAlSi_{3}O_{8}(Microcline) + 7H_{2}O + H^{+} = Al(OH)_{3}(aq) + K^{+} + 3H_{4}SiO_{4}$ $Al^{3+} + 3OH^{-} = Al(OH)_{3}(aq)$ 【Pyrite の沈殿】 $Fe(OH)^{+} + 2HS^{-} + OH^{-} = FeS_{2}(Pyrite) + 2H_{2}O + 2e^{-}$

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

図 5.2-188 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における pH の空間分布 を示す。初期状態(図 5.2-188(a))において,緩衝材中の pH は解析ケース 2(可溶性塩 有り,支保工無し)と同一レベルであり,支保工領域は高 pH を示している。時間の経過 とともに岩盤中の pH は,初期 pH よりも減少傾向を示している。これは,可溶性塩が緩 衝材から岩盤中に移行することにより,前記の解析ケース 3(可溶性塩無し,支保工無し) で示した反応がさらに顕著となることが考えられる。

・解析ケース5(可溶性塩無し,支保工有り,速度論),解析ケース6(可溶性塩有り, 支保工有り,速度論)

解析ケース 5,6 については,地球化学モデルにおける収束性(PHREEQC で設定した 時間メッシュが粗いため)が悪かったこと,ならびに 2-CPU のうち,速度モデルの計算 が 1-CPU でのみの処理となったことから,膨大な計算時間を必要とした。そのため,本 ケースは,数年までの計算結果に基づき考察を行った。

図 5.2-238(b), (d), (f), (h)は, 解析ケース 5(可溶性塩無し,支保工有り,速度モデ ル採用)を対象として,経過時間 5年までの緩衝材,支保工,岩盤領域の空間を横軸と した pH の空間分布を示している。本分布は,平衡モデル(解析ケース3)を採用した場 合【図 5.2-238(a), (c), (e), (g)】と比較すると,ほぼ同一の傾向を示しており, pH の 解釈は,前記の解析ケース3と同じであると考えられる。

図 5.2-239(b),(d),(f)は,解析ケース 6(可溶性塩有り,支保工有り,速度モデル採用) を対象として,経過時間2年までの緩衝材,支保工,岩盤領域の空間を横軸とした pHの 空間分布を示している。本分布は,平衡モデル(解析ケース4)を採用した場合【図 5.2-239(a),(c),(e)】と比較すると,緩衝材領域,支保工領域においては,ほぼ同一の傾 向を示しており,pHの解釈は,前記の解析ケース4と同じであると考えられる。ただし, 岩盤領域では,支保工近傍の領域においてのみ異なる傾向を示している。これは,可溶 性塩の有無により Smectite の溶解挙動において , pH の依存性が関与しているものと考えられる。

() pe

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-15 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における pe の空間分布を 示す。緩衝材中の pe は,初期段階において空隙中の気相(酸素ガス,炭酸ガス)により 高い pe (=-2.2)を示すが,時間の経過とともに, Pyrite との平衡効果により pe は徐々 に低下する (=-2.8)。

岩盤中の pe は,緩衝材との境界部分から徐々に増加する。ただし,緩衝材と隣接する 岩盤中の pe は,図 5.2-15(d),(e),(f)より 100年以降徐々に減少(pe=-2.8 から-3.2 に減 少)している。緩衝材近傍での pe の減少は,以下のプロセスによるものと考えられる。

緩衝材中では,炭酸ガス,酸素ガスの効果により Pyrite の溶解が促進し,岩盤よ り高濃度の液相 Fe 化学種,S 化学種が岩盤領域へ流入する。本挙動は,図 5.2-20 の Fe 濃度の変化ならびに図 5.2-24 の S 濃度の変化より明らかである。 緩衝材中における可溶性塩のうち CaSO4の高い S 濃度が,空隙水中に瞬時に溶解 し,岩盤領域へ流入する。本挙動は,図 5.2-24 の S 濃度の変化より明らかである。 緩衝材に隣接する岩盤領域では,Fe,S の水溶性化学種の流入により Pyrite なら びに Magnetite が沈殿すると考えられる。図 5.2-35 より,緩衝材に隣接する部分 において Pyrite は沈殿が生じている。また,図 5.2-38 より,緩衝材に隣接する部 分において Magnetite は沈殿が生じている。これらの沈殿平衡により pe は減少し ているものと考えられる。

岩盤中全般の pe の増加は, 緩衝材中の pe を基点として増加していることから, 酸化 性の環境条件に移行することは無いと考えられる。岩盤中での全般的な pe の増加は, pH の減少に連動しており,整合性は確保できているものと考えられる。 pH と pe の関係に ついては,一般的に水の安定限界(酸素ガスと水,水素ガスと水の酸化還元平衡)とし て表示される下記の式からも明らかな様に, pe が増加する場合 pH は減少し, pe が減少 する場合 pH は増加することを示している。この関係は,酸化還元対を有する元素におい JNC TJ8400 2004-004

ても類似の関係がある。

水と酸素ガスの境界: *pe* = 20.8 - *pH* 水と水素ガスの境界: *pe* = - *pH*

他の解析ケース(2~6)における pe の傾向は, pH の挙動に対応した空間分布,時間 変化を示している。

()液相濃度

ここでは,緩衝材ならびに岩盤中における液相中の元素濃度(Al,C,Ca,Cl,Fe,K, Mg,Na,S,Si)の挙動について記載し,これらの挙動を物質移行,地球化学的な視点 から考察する。

Al 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/Al濃度

図 5.2-15 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Al 濃度 の空間分布を示す。本ケースでは,緩衝材中において Al 系鉱物(例えば,Smectite)を 考慮していないことから,初期段階で液相中の Al 濃度は 1×10⁻¹⁰ [mol/l_w]と設定してい る。岩盤中は,Albite/Kaolinite の平衡により液相 Al 濃度が支配されている。本図の空 間分布は,図 5.2-15 に示す pH の空間分布と類似しており,Albite の沈殿,Kaolinite の 溶解によって液相 Al 濃度との因果関係が考えられる。岩盤中の初期段階(本来であれば, 経過時間に応じて水溶性化学種情報を確認すれば良いが,出力情報が膨大であり,本研 究では出力情報に制限を加えている。短期間・小規模モデルであれば,地球化学の全情 報は出力可能である)における液相 Al 濃度と Si 濃度を支配する水溶性化学種は,それぞ れ Al(OH)4,H4SiO4であることから,Kaolinite の溶解は,以下に示す反応が支配してい るものと推定した。

 $Al_2Si_2O_5(OH)_4(Kaolinite) + 7H_2O = 2Al(OH)_4^- + 2H_4SiO_4 + 2H^+$

上記の平衡が成立すると仮定し,液相 Si 濃度が一定と仮定した場合(図 5.2-24 より岩 盤中は全時間において,他の液相元素濃度と比べ一定と見なせる),質量作用の式を考え られると,液相 Al 濃度と H+の関係のみとなる。したがって,液相 Al 濃度が減少すると H+濃度は増加することとなり,結果的に pH は減少することとなる。一方,緩衝材中の 液相 Al 濃度は,岩盤からの流入により,徐々に定常状態となる。2,000 年の時点では, 1,000 年時点よりも液相 Al 濃度は増加しており,今回の評価期間では定常には到達していない。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/Al濃度

図 5.2-72 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Al 濃度の空間分布を示す。溶液中の Al 濃度は,可溶性塩の有無による pH の違い(図 5.2-70(e),図 5.2-13(e))を反映した傾向となっており,高 pH では高い Al 濃度となっている。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/Al濃度

図 5.2-129 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Al 濃度の空間分布を示す。図 5.2-176(c)により岩盤内側では初期段階(~1 年)において Maicrocline の沈殿が起こっており,図 5.2-150,151 より Albite の沈殿・Kaolinite の 溶解が起こっている。これらの地球化学反応を以下に示すが,これらの反応は液相 Al 濃度の減少傾向を説明することができる。

 $Al(OH)_{3}(aq) + K^{+} + 3Si(OH)_{4}(aq) = KAlSi_{3}O_{8}(Microcline) + 7H_{2}O + H^{+}$ $Al_{2}Si_{2}O_{5}(OH)_{4}(Kaolinite) + 2Na^{+} + 2OH^{-} + 4H_{4}SiO_{4} = 11H_{2}O + 2NaAlSi_{3}O_{8}(Albite)$

・解析ケース 4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論) / Al 濃度

図 5.2-190 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Al 濃 度の空間分布を示す。岩盤内側の Al 濃度は,ケース 1 と同様に Microcline の沈殿ならび に Kaolinite の溶解・Albite の沈殿が支配反応となる。

C 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/C濃度

図 5.2-16 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の C 濃度の空間分布を示す。液相 C 濃度は,時間の経過とともに緩衝材側から岩盤中へ拡散による移行が見られる。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/C濃度

図 5.2-73 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の C 濃度の空間分布を示す。初期段階での液相 C 濃度は,緩衝材,岩盤領域ともほぼ同一レベル

- 139 -

であることから,物質移行の観点からは変化しない。ただし,緩衝材中の pH の変化に応 じて Calcite の溶解濃度が変化したり,緩衝材に隣接する岩盤部分で,可溶性塩 CaSO4 の流入にともなう Calcite の沈殿現象により液相 C 濃度が変化したりしている。ただし, 他の元素濃度と比較して時間の経過にともなう濃度の変化量は少なく,全領域にわたっ てほぼ均等な分布となっている。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/C濃度

図 5.2-130 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の C 濃 度の空間分布を示す。緩衝材中の液相 C 濃度は,支保工,岩盤中への移行により減少し, 一定値(方解石との平衡濃度)となる。支保工中の液相 C 濃度は,高 pH 環境下におけ る方解石との平衡濃度で支配され,ほぼ一定値となっている。岩盤中の液相 C 濃度は, 支保工側への移動により減少傾向を示している(図 5.2-130(b)参照)。ただし,10年~100 年にかけて(図 5.2-130(c),(d))液相 C 濃度は緩衝材中と同一レベルに回復する(pH と 連動)。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/C濃度

図 5.2-191 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の C 濃 度の空間分布を示す。緩衝材中,岩盤内側の液相 C 濃度は,支保工への移動により減少 傾向を示している(図 5.2-191(a),(b)参照)。岩盤中において凹型の分布が時間の経過と ともに岩盤外側に移動している(図 5.2-191(b)~(f))。これは,緩衝材中での可溶性塩 CaSO4 の岩盤中への移行挙動と連動しており,後述液相 Ca 濃度の岩盤中における移動 フロントに対応している。すなわち,岩盤中において凹型の分布は,Calcite の沈殿が顕 著な部分となっている。これは,図 5.2-203 に示す様に方解石の沈殿が顕著となる領域と 一致している。

Ca 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/Ca濃度

図 5.2-17 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Ca 濃 度の空間分布を示す。緩衝材中の液相 Ca 濃度は,方解石の溶解(図 5.2-27 参照)によ り初期状態より僅かに増加する。一方,岩盤中の液相 Ca 濃度は,緩衝材中の Ca が岩盤 中に流入することから,以下の平衡により方解石は沈殿し,液相 Ca 濃度は時間の経過と ともに減少する(pHの減少傾向と連動する)。

 $Ca^{2+} + HCO_3^- = CaCO_3(Calcite) + H^+$

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/Ca濃度

図 5.2-74 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Ca 濃度の空間分布を示す。本ケースは,緩衝材中において可溶性塩 CaSO4を定義していることから,緩衝材中での高い液相 Ca 濃度は,時間の経過とともに岩盤中へ拡散により流入する挙動を示している。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/Ca濃度

図 5.2-131 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Ca 濃 度の空間分布を示す。本ケースは,緩衝材領域と岩盤領域の間に支保工領域を設けてお り,支保工を構成している鉱物 CaH₂SiO₄の溶解により,支保工領域で顕著な液相 Ca ピ ーク濃度分布を示している。岩盤中の液相 Ca 濃度は,支保工からの Ca の拡散による移 行により,岩盤内側では高い液相 Ca 濃度となっている。また,岩盤中では全般的に Ca が方解石として沈殿することから,初期状態の液相 Ca 濃度よりも低いレベルとなってい る。

・解析ケース 4 (可溶性塩有り,支保工有り,平衡論) / Ca 濃度

図 5.2-192 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Ca 濃度の空間分布を示す。本ケースは,緩衝材中において可溶性塩 CaSO4を定義していることから,緩衝材中での高い液相 Ca 濃度は,時間の経過とともに岩盤中へ拡散により流入する挙動を示している。

Cl 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/Cl濃度

図 5.2-18 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Cl 濃度 の空間分布を示す。本ケースは,緩衝材中で液相 Cl 溶液を定義していないため,時間の 経過とともに岩盤側から緩衝材中に流入する傾向を示している。2,000 年後には,ほぼ定 常状態となっている。 ・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/Cl濃度

図 5.2-19 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Cl 濃度 の空間分布を示す。本元素は,緩衝材中で可溶性塩 NaCl として,岩盤中の地下水組成よ りも高い液相濃度となっている。そのため,緩衝材から岩盤中への流入現象が起こる。 本図におい 2,000 年の時点では,1,000 年時点よりも緩衝材中の液相 Cl 濃度は僅かなが ら減少しており,今回の評価期間では定常には到達していない。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/Cl濃度

図 5.2-132 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Cl 濃度の空間分布を示す。本ケースは,緩衝材中で液相 Cl 溶液を定義していないため,時間の経過とともに岩盤側から緩衝材中に流入する傾向を示している。2,000 年後には,ほぼ 定常状態となっている。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/Cl濃度

図 5.2-193 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Cl 濃度の空間分布を示す。本元素は,緩衝材中で可溶性塩 NaCl として,岩盤中の地下水組成よりも高い液相濃度となっている。そのため,緩衝材から岩盤中への流入現象が起こる。

Fe 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/Fe濃度

図 5.2-19 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Fe 濃度 の空間分布を示す。本図において,緩衝材内側の液相 Fe 濃度が減少しているが,これは, オーバーパックの腐食生成物において Magnetite 沈殿・Pyrite の溶解により,低い液相 Fe 濃度の影響を受けているためである。初期段階(図 5.2-19(a)参照)における緩衝材中 の液相 Fe 濃度は,不飽和帯の酸素ガスの効果により黄鉄鉱から溶解する Fe が支配的と なっているが,酸素ガスの消失により緩衝材中の液相 Fe 濃度は徐々に減少する(図 5.2-19(a),(b))。さらに,岩盤中は還元雰囲気が維持されているため,低いレベルの液相 Fe 濃度となっている。岩盤領域の液相 Fe 濃度は,時間の経過とともに,緩衝材から拡 散による Fe の流入が見られる。液相 Fe 濃度分布は,酸化還元電位 pe に敏感な黄鉄鉱と の平衡に依存していることから(黄鉄鉱の平衡濃度は、酸化還元電位 pe に依存している), 図 5.2-14 に示す pe の分布と類似の傾向を示している。 ・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/Fe濃度

図 5.2-76 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Fe 濃度 の空間分布を示す。緩衝材中の液相 Fe 濃度は,初期段階において空隙中の酸素ガスと Pyrite との平衡により高い濃度となるが,酸素ガスが消費され酸化還元電位 pe の低下に 応じて液相 Fe 濃度も減少する。緩衝材中の高い Fe 濃度は,時間の経過とともに岩盤中 に流入することにより,岩盤構成鉱物の Pyrite,Magnetite として沈殿する。したがっ て,図 5.2-76 (c),(d)に示す様に岩体中のほとんどの部分において濃度一定の部分が 見られる。これは,この時点(10年,100年)において pH,pe が初期状態の地下水組 成とほぼ同じ状態であることから,Pyrite,Magnetite の平衡濃度が顕著に変化していな い。また,図 5.2-76 の空間分布は,前記図 5.2-74 に示した液相 Ca 濃度と類似の分布で ある。これは,緩衝材/岩盤における初期濃度の類似性,岩盤中に当該元素の構成鉱物 が存在するといった類似性があるものと考えられる。液相 Fe 濃度分布は,酸化還元電位 pe に敏感な黄鉄鉱との平衡に依存していることから(黄鉄鉱の平衡濃度は,酸化還元電 位 pe に依存している),図 5.2-71 に示す pe の分布と類似の傾向を示している。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/Fe濃度

図 5.2-133 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Fe 濃 度の空間分布を示す。本図において,緩衝材内側の液相 Fe 濃度が減少しているが,これ は,オーバーパックの腐食生成物において Magnetite 沈殿・Pyrite の溶解により,低い 液相 Fe 濃度の影響を受けているためである。図 5.2-133(b)において緩衝材中の液相中 Fe 濃度の最大値は,図 5.2-133(a)とほぼ同一であるが,これは,支保工領域から緩衝材中へ の OH の拡散による移行により,初期 pH レベルからの低下が緩慢となっており,緩衝材 中において(~1 年)結果的に pH, pe の変動が僅かであったことから,黄鉄鉱からの Fe の溶解に変化が無かったものと考えられる。

また,岩盤全域において低いレベルの液相 Fe 濃度を維持しているは,岩盤中での pH, pe の変動が顕著でないことが起因している。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/Fe濃度

図 5.2-194 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Fe 濃度の空間分布を示す。液相 Fe 濃度分布は,酸化還元電位 pe に敏感な黄鉄鉱との平衡に

依存していることから(黄鉄鉱の平衡濃度は,酸化還元電位 pe に依存している),図 5.2-189 に示す pe の分布と類似の傾向を示している。

K 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/K濃度

図 5.2-20 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の K 濃度 の空間分布を示す。図 5.2-58(c)に示す様に Microcline は時間の経過とともに徐々に溶解 挙動を示しており,下記の平衡が考えられる。また,当該鉱物の溶解は,岩盤内側で顕 著となっており,岩盤内側で液相中 K 濃度が顕著となる。

 $KAlSi_3O_8(Microcline) + 7H_2O + H^+ = Al(OH)_3(aq) + K^+ + 3Si(OH)_4(aq)$

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/K濃度

図 5.2-77 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の K 濃度 の空間分布を示す。K 元素も液相 Ca 濃度(図 5.2-74),液相 Fe 濃度(図 5.2-76)と類 似の分布となる。これは,緩衝材/岩盤における初期濃度の類似性(可溶性塩 KCl),岩 盤中に当該元素の構成鉱物(Microcline: KalSi₃O₈)が存在するといった類似性があるも のと考えられる。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/K濃度

図 5.2-134 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の K 濃度の空間分布を示す。岩盤内側における Microcline の濃度は,図 5.2-176(c)に示す様に 沈殿現象の後に溶解現象に転じる。これに伴い,液相 K 濃度は,図 5.2-134(b)から(f)に 示すように,岩盤内側の液相 K 濃度は,溶解挙動に転じる際に(上に)凸型の分布となる。下に凸の分布は,局部的に pH が増加している部分であり,pH に応じて Microcline の沈殿が生じていると考えられる。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/K濃度

図 5.2-195 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の K 濃度の空間分布を示す。緩衝材中での可溶性塩 KCl が岩盤中へ拡散による移行挙動を示している。岩盤内側において Microcline は,図 5.2-237(c)に示す様に時間の経過とともに減少している。

Mg 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/Mg濃度

図 5.2-21 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Mg 濃度の空間分布を示す。岩盤は,Mg 元素で構成される鉱物を定義していないことから,岩盤中の液相 Mg は,緩衝材中に侵入する。これのより僅かではあるが,緩衝材の Mg 化が促進されると考えられる(図 5.2-42(a),(b)参照)。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/Mg濃度

図 5.2-78 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Mg 濃度の空間分布を示す。Mg 元素は,緩衝材中でのイオン交換サイトとの平衡状態で支配されており,岩盤中において当該元素の構成鉱物が存在しないため,Cl 元素と類似の空間分布となる(図 5.2-75 参照)。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/Mg濃度

図 5.2-135 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Mg 濃度の空間分布を示す。岩盤は, Mg 元素で構成される鉱物を定義していないことから,岩盤中の液相 Mg は,緩衝材中に侵入する。これのより僅かではあるが,緩衝材の Mg 化が促進されると考えられる(図 5.2-160(a), (b)参照)。

・解析ケース 4 (可溶性塩有り,支保工有り,平衡論) / Mg 濃度

図 5.2-196 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Mg 濃度の空間分布を示す。Mg 元素は,緩衝材中でのイオン交換サイトとの平衡状態で支配されており,岩盤中において当該元素の構成鉱物が存在しないため,Cl 元素と類似の空間分布となる(図 5.2-193 参照)。

Na 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/Na濃度

図 5.2-22 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Na 濃度の空間分布を示す。Na 元素も液相 Ca 濃度(図 5.2-17),液相 Fe 濃度(図 5.2-19),液相 K 濃度(図 5.2-20)と類似の分布となる。これは,緩衝材/岩盤における初期濃度

- 145 -

の類似性(可溶性塩 NaCl),岩盤中に当該元素の構成鉱物(Albite, NaAlSi₃O₈)が存在するといった類似性があるものと考えられる。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/Na濃度

図 5.2-79 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Na 濃度の空間分布を示す。Na 元素も液相 Ca 濃度(図 5.2-74),液相 Fe 濃度(図 5.2-76),液相 K 濃度(図 5.2-77)と類似の分布となる。これは,緩衝材/岩盤における初期濃度の類似性(可溶性塩 NaCl),岩盤中に当該元素の構成鉱物(Albite)が存在するといった類似性があるものと考えられる。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/Na濃度

図 5.2-136 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Na 濃度の空間分布を示す。Na 元素で構成されている鉱物は Albite であり,当該鉱物の空間分 布は図 5.2-150 に示す様に岩盤内側をピークとして沈殿挙動を示している。図 5.2-136 に 示す下に凸の液相 Na 濃度の分布は, pH に依存する平衡濃度を示している。

・解析ケース 4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/Na 濃度

図 5.2-197 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Na 濃度の空間分布を示す。Na 元素で構成されている鉱物は Albite であり,当該鉱物の空間分 布は図 5.2-211 に示す様に岩盤内側をピークとして沈殿挙動を示している。図 5.2-197 に 示す下に凸の液相 Na 濃度の分布は, pH に依存する平衡濃度を示している。

S 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/S濃度

図 5.2-23 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の S 濃度 の空間分布を示す。液相 S 濃度は,緩衝材ならびに岩盤構成鉱物である Pyrite の平衡濃 度に支配されている。また, Pyrite の平衡濃度(液相 S 濃度)は酸化還元電位 pe に大き く依存している。そのため、図 5.2-23 の分布傾向は、酸化還元電位 pe の分布図(図 5.2-14) と類似している。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/S濃度

図 5.2-80 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の S 濃度 の空間分布を示す。S 元素も液相 Ca 濃度(図 5.2-74),液相 Fe 濃度(図 5.2-76),液相 K 濃度(図 5.2-77),液相 Na 濃度(図 5.2-79)と類似の分布となる。これは,緩衝材/ 岩盤における初期濃度の類似性(可溶性塩 CaSO4),岩盤中に当該元素の構成鉱物(Pyrite) が存在するといった類似性があるものと考えられる。また,Pyrite の平衡濃度(液相 S 濃度)は酸化還元電位 pe に大きく依存している。そのため,図 5.2-80 の分布傾向は,酸 化還元電位 pe の分布図(図 5.2-71)と類似している。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/S濃度

図 5.2-137 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の S 濃度 の空間分布を示す。液相 S 濃度は,緩衝材ならびに岩盤構成鉱物である Pyrite の平衡濃 度に支配されている。また, Pyrite の平衡濃度(液相 S 濃度)は酸化還元電位 pe に大き く依存している。そのため,図 5.2-137 の分布傾向は,酸化還元電位 pe の分布図(図 5.2-128)と類似している。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/S濃度

図 5.2-198 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の S 濃度 の空間分布を示す。緩衝材中の可溶性塩 CaSO4が,岩盤領域へ拡散による移行現象を示 している。液相 S 濃度は,緩衝材ならびに岩盤構成鉱物である Pyrite の平衡濃度に支配 されている。また, Pyrite の平衡濃度(液相 S 濃度)は酸化還元電位 pe に大きく依存し ている。そのため,図 5.2-198 の分布傾向は,酸化還元電位 pe の分布図(図 5.2-189) と類似している。

Si 濃度

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/Si濃度

図 5.2-24 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Si 濃度 の空間分布を示す。緩衝材領域,岩盤領域の液相 Si 濃度は,同一レベルであり,時間の 経過により変化は見られない。このことから,緩衝材中のケイ砂は人工バリア中の環境 条件や水理特性に影響を与えないと考えられる。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/Si濃度

図 5.2-81 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Si 濃度 の空間分布を示す。液相 Si 濃度は,両領域で顕著な差が見られない。また, Si 系鉱物で ある Chalcedony の濃度分布は,図 5.2-87,図 5.2-88 に示す様に顕著な溶解・沈殿の変 化は見られない。このことから,緩衝材中のケイ砂は人工バリア中の環境条件や水理特 性に影響を与えないと考えられる。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/Si濃度

図 5.2-138 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Si 濃 度の空間分布を示す。支保工の領域では,構成鉱物 CaH₂SiO₄からの Si の溶解により, 液相 Si 濃度のピークが見られる。緩衝材領域,岩盤領域の液相 Si 濃度は,同一レベルで あり,時間の経過により変化は見られない。支保工領域からの液相 Si 溶質が,緩衝材領 域,岩盤領域に拡散による移行が起こるが,液相 Si 濃度の変化が見られないことから, 支保工に接する両領域では,Chalcedony の局部的な沈殿が起こっているものと考えられ る。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/Si濃度

図 5.2-199 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材,岩盤領域における液相中の Si 濃 度の空間分布を示す。支保工の領域では,構成鉱物 CaH₂SiO₄からの Si の溶解により, 液相 Si 濃度のピークが見られる。緩衝材領域,岩盤領域の液相 Si 濃度は,同一レベルで あり,時間の経過により変化は見られない。支保工領域からの液相 Si 溶質が,緩衝材領 域,岩盤領域に拡散による移行が起こるが,液相 Si 濃度の変化が見られないことから, 支保工に接する両領域では,Chalcedony の局部的な沈殿が起こっているものと考えられ る。

ガス濃度

ここでは、各ケースの緩衝材中不飽和帯における炭酸ガス濃度の結果ならびに考察について記載する。

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)/炭酸ガス濃度

図 5.2-25 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材領域における不飽和帯での炭酸ガス 濃度の空間分布を示す。本ケースは,図 5.2-47(b),(c)で示す様に約9年で完全飽和とな ることから,図 5.2-25(c)に示す様に10年時点では,炭酸ガス濃度は0となる。また,図

- 148 -

5.2-47(a),(b)の炭酸ガス濃度分布は,図5.2-16に示す液相C濃度と同一傾向を示している。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/炭酸ガス濃度

図 5.2-82 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材領域における不飽和帯での炭酸ガス 濃度の空間分布を示す。本ケースは,図 5.2-104(b),(c)で示す様に約 0.4 年で完全飽和と なることから,図 5.2-25(c)に示す様に1年時点では,炭酸ガス濃度は0となる。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)/炭酸ガス濃度

図 5.2-139 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材領域における不飽和帯での炭酸ガス 濃度の空間分布を示す。本ケースは,図 5.2-164(b),(c)で示す様に約 9 年で完全飽和と なることから,図 5.2-139(c)に示す様に 10 年時点では,炭酸ガス濃度は 0 となる。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)/炭酸ガス濃度

図 5.2-200 は,初期段階から 2,000 年までの緩衝材領域における不飽和帯での炭酸ガス 濃度の空間分布を示す。本ケースは,図 5.2-225(b),(c)で示す様に約 0.4 年で完全飽和と なることから,図 5.2-200(c)に示す様に1年時点では,炭酸ガス濃度は0となる。

()鉱物濃度

ここでは,各ケースにおける緩衝材・岩盤構成鉱物の空間分布ならびに任意位置での時 間変化に関する結果,考察について記載する。

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

緩衝材 岩盤領域における Calcite ,Chalcedony ,Pyrite ,Albite ,Kaolinite Magnetite , Microcline の空間分布をそれぞれ図 5.2-26~38 に示す。

緩衝材領域における Calcite の濃度は,図 5.2-27 に示す様に,緩衝材外側では速やか に溶解(図 5.2-27(b))しており,緩衝材領域から岩盤領域への液相 Ca 溶質の拡散によ る移動が起因している。緩衝材外側では,図 5.2-49(f)に示す様に,初期段階で Calcite は 沈殿傾向を示すが,最終的には溶解挙動となる。これは,図 5.2-50 に示す様に Z₂Ca が 時間の経過とともに増加しており,緩衝材中の液相 Ca 溶質がイオン交換サイト Z₂Ca に 吸収されるためと考えられる。岩盤中の Calcite 濃度は,図 5.2-28 に示す様に時間の経 過とともに沈殿現象が促進される。これは,緩衝材中における液相 Ca が岩盤中へ拡散に よる移行によるものと考えられる。

緩衝材,岩盤領域における Chalcedony の濃度分布を図 5.2-29~図 5.2-31 に示す。緩 衝材内側では,図 5.2-49(g)に示す様に Chalcedony は沈殿挙動を示す。緩衝材外側も同 様に図 5.2-53(g)に示す様に沈殿挙動を示している。これは,岩盤領域での液相 Si が緩衝 材中に流入することが起因しているものと考えられる。一方,岩盤内側では,図 5.2-57(f) に示す様に,岩盤からの液相 Si の流出により溶解挙動となっている。

緩衝材,岩盤領域における Pyrite の濃度分布を図 5.2-32~図 5.2-34 に示す。緩衝材中 の Pyrite は 図 5.2-33 に示す様に溶解挙動となっている。また 図 5.2-49(h) 図 5.2-53(h) は,緩衝材の内側,外側での Pyrite 溶解濃度の時間変化を示す。これは,緩衝材中の液 相 Fe が岩盤領域へ拡散による移行が起こるためと考えられる。岩盤中の Pyrite は,図 5.2-34 に示す様に緩衝材からの Fe の流入により沈殿現象となっている。

岩盤領域における Albite, Kaolinite の鉱物濃度を図 5.2-35,36 に示す。岩盤内側にお いて Albite の局部的な沈殿,それに伴い Kaolinite の溶解が起こっている。図 5.2-57(h), 図 5.2-58(a)は,岩盤内側における両鉱物濃度の時間変化を示している。本図からも Albite は時間の経過とともに沈殿傾向となり,Kaolinite は時間の経過とともに溶解挙動を示し ている。図 5.2-37 は,岩盤中における Magnetite 濃度を示している。緩衝材領域からの 液相 Fe の流入により,岩盤内側において局部的に沈殿していることを示している。図 5.2-38 は,岩盤中における Microcline の空間濃度を示している。図 5.2-58(c)は,岩盤中 における Microcline 濃度の時間変化を示している。本図より,Microcline は岩盤内側に おいて溶解挙動を示している。

・解析ケース2(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

緩衝材中の Calcite の濃度は,緩衝材領域から岩盤への液相 Ca 化学種の移行にともな い,緩衝材外側では溶解現象が促進している(図 5.2-84 参照)。一方,緩衝材外側から岩 盤に流入する液相 Ca 化学種は,図 5.2-85 に示すように岩盤内側において局部的に沈殿 が顕著となる。図 5.2-86~図 5.2-88 は,緩衝材,岩盤領域における Chalcedony の空間 濃度分布を示す。両領域において鉱物濃度の顕著な変化は見られない。図 5.2-89~図 5.2-91 は,緩衝材,岩盤領域における Pyrite の空間濃度分布を示す。両領域において鉱 物濃度の顕著な変化は見られない。図 5.2-92 は 岩盤中の Albite 濃度の空間分布を示す。 Albite は時間の経過とともに緩衝材に隣接する岩盤部分で局部的に沈殿が顕著となる。 一方, Kaolinite は図 5.2-93 に示す様に Albite とは逆に緩衝材に隣接する岩盤部分で局部的に溶解が顕著となる。図 5.2-94 は,岩盤中の Magnetite 濃度の空間分布を示す。この鉱物は,緩衝材から流入する液相 Fe 化学種により緩衝材に隣接する岩盤部分で局部的に沈殿が顕著となる。岩盤中の Microcline も同様に,緩衝材から液相 K 化学種の流入により,緩衝材に隣接する岩盤部分で局部的に沈殿が顕著となる(図 5.2-95(b)参照)。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

緩衝材中のCalciteの濃度は 緩衝材領域から岩盤への液相C化学種の移行にともない, 緩衝材外側では溶解現象が促進している(図 5.2-141 参照)。一方,緩衝材外側から岩盤 に流入する液相 C 化学種により,図 5.2-142 に示すように岩盤内側において局部的に沈 殿が顕著となる。図 5.2-143 ~ 図 5.2-145 は,緩衝材,岩盤領域における Chalcedonyの 空間濃度分布を示す。支保工領域の高いレベルの液相 Si 化学種が緩衝材中に侵入するこ とにより,緩衝材外側において局部的な沈殿が起こる。一方,岩盤内側では Albite が局 部的に沈殿することから、Chalcedony は局部的な溶解現象となる。図 5.2-146~図 5.2-147 は,緩衝材,岩盤領域における Pyrite の空間濃度分布を示す。緩衝材領域から岩 盤への液相 Fe 化学種の移行にともない,緩衝材外側では溶解現象が促進している(図 5.2-147 参照)。一方,緩衝材外側から岩盤に流入する液相 Fe 化学種により,図 5.2-148 に示す様に岩盤内側において局部的に沈殿が顕著となる。図 5.2-150 は ,岩盤中の Albite 濃度の空間分布を示す。Albite は時間の経過とともに緩衝材に隣接する岩盤部分で局部 的に沈殿が顕著となる。一方, Kaolinite は図 5.2-151 に示す様に Albite とは逆に緩衝材 に隣接する岩盤部分で局部的に溶解が顕著となる。図 5.2-152 は,岩盤中の Magnetite 濃度の空間分布を示す。この鉱物は,緩衝材から流入する液相 Fe 化学種により緩衝材に 隣接する岩盤部分で局部的に沈殿が顕著となる。岩盤内側の Microcline は図 5.2-176(c) に示す様に初期段階において沈殿挙動となるが、その後は溶解挙動となる(図 5.2-153 参 照)。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

緩衝材中の Calcite の濃度は,緩衝材領域から岩盤への液相 Ca 化学種(可溶性塩 CaSO4)の移行にともない,緩衝材外側では溶解現象が促進している(図 5.2-202 参照)。 緩衝材内側は,可溶性塩の流出効果が小さいことから沈殿現象が起こっている。一方, 緩衝材外側から岩盤に流入する液相 Ca 化学種により,図 5.2-203 に示すように岩盤内側

- 151 -

において局部的に沈殿が顕著となる。図 5.2-204~図 5.2-206 は,緩衝材,岩盤領域にお ける Chalcedony の空間濃度分布を示す。支保工領域の高いレベルの液相 Si 化学種が緩 衝材中に侵入することにより、緩衝材外側において局部的な沈殿が起こる。一方、岩盤 内側では Albite が局部的に沈殿することから, Chalcedony は局部的な溶解現象となる。 図 5.2-207~図 5.2-209は,緩衝材,岩盤領域における Pyrite の空間濃度分布を示す。緩 衝材領域から岩盤への液相 Fe 化学種の移行にともない , 緩衝材外側では溶解現象が促進 している (図 5.2-208 参照)。緩衝材内側は , 可溶性塩(CaSO4)の流出効果が小さいこと から沈殿現象が起こっている。一方,緩衝材外側から岩盤に流入する液相 Fe 化学種によ リ,図 5.2-209 に示す様に岩盤内側において局部的に沈殿が顕著となる。図 5.2-210 は、 緩衝材中のスメクタイト濃度の空間分布を示す。本図より,溶解・沈殿による顕著な分 布は見られない。図 5.2-211 は,岩盤中の Albite 濃度の空間分布を示す。Albite は時間 の経過とともに緩衝材に隣接する岩盤部分で局部的に沈殿が顕著となる。一方,Kaolinite は図 5.2-212 に示す様に Albite とは逆に緩衝材に隣接する岩盤部分で局部的に溶解が顕 著となる。図 5.2-213 は , 岩盤中の Magnetite 濃度の空間分布を示す。この鉱物は , 緩 衝材から流入する液相 Fe 化学種により岩盤全域にわたって沈殿現象が起こる。 岩盤内側 の Microcline は図 5.2-214(b)に示す様に初期段階において沈殿挙動となるが,その後は 溶解挙動となる。(図 5.2-214(c)~(f)参照)。

() イオン交換化学種濃度

ここでは、各ケースにおけるイオン交換化学種の空間分布ならびに任意位置での時間変 化に関する結果,考察について記載する。

・解析ケース1(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

図 5.2-39~図 5.2-43 は, 緩衝材領域におけるイオン交換化学種(移行しない化学種) 濃度の空間分布を示す。緩衝材中では, Calcite の溶解にともない液相 Ca 化学種が生成 されることから,図 5.2-41 に示す様に Ca 型化が徐々に進行することを示している。た だし,2,000 年の時点では, Na 型のベントナイトが支配的である。KZ ならびに MgZ₂ は, NaZ, Z₂Ca と比べ2桁小さく緩衝材間隙水に影響は及ぼしていない。

・解析ケース2(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)/C濃度

図 5.2-96~図 5.2-100 は,緩衝材領域におけるイオン交換化学種(移行しない化学種)

- 152 -

濃度の空間分布を示す。緩衝材間隙水の Na と Ca のイオン交換により,図 5.2-96 に示す 様に NaZ は,時間の経過にともない減少し,一方,Z₂Ca は図 5.2-97 に示す様に Ca 型 化が徐々に変化することを示している。ただし,2,000 年の時点では,Na 型のベントナ イトが支配的である。KZ ならびに MgZ2 は,NaZ,Z2Ca と比べ 2 桁小さく緩衝材間隙 水に影響は及ぼしていない。

・解析ケース3(可溶性塩無し,支保工有り,平衡論)

図 5.2-156~図 5.2-160 は,緩衝材領域におけるイオン交換化学種(移行しない化学種) 濃度の空間分布を示す。緩衝材中では,Calcite の溶解にともない液相 Ca 化学種が生成 されることから,図 5.2-157 に示す様に Ca 型化が徐々に進行することを示している。た だし,2,000 年の時点では,Na 型のベントナイトが支配的である。KZ ならびに MgZ₂ は,NaZ,Z₂Ca と比べ2桁小さく緩衝材間隙水に影響は及ぼしていない。

・解析ケース4(可溶性塩有り,支保工有り,平衡論)

図 5.2-217 ~ 図 5.2-221 は,緩衝材領域におけるイオン交換化学種(移行しない化学種) 濃度の空間分布を示す。緩衝材中では,Calcite の溶解にともない液相 Ca 化学種が生成 されることから,図 5.2-218 に示す様に Ca 型化が徐々に進行することを示している。た だし,2,000 年の時点では,Na 型のベントナイトが支配的である。KZ ならびに MgZ₂ は,NaZ,Z₂Ca と比べ2桁小さく緩衝材間隙水に影響は及ぼしていない。

()表面錯体化学種濃度

図 5.2-44~図 5.2-40(解析ケース 1) 図 5.2-101~図 5.2-103(解析ケース 2) 図 5.2-161 ~図 5.2-163(解析ケース 3),図 5.2-222~図 5.2-224(解析ケース 4)は,緩衝材領域 における表面錯体化学種(移行しない化学種)濃度の空間分布を示す。全ての空間分布 図は,飽和状態(1年以降)に顕著な変化が見られないことから緩衝材間隙水に影響は及 ぼしていない。 JNC TJ8400 2004-004

5.2.3 事例解析(1次元)の総括

本項では,前記6ケースの総括として,可溶性塩の効果,支保工の効果,緩衝材中におけるモデルの依存性がニアフィールド環境に及ぼす影響について記載する。

(1) 可溶性塩の効果

可溶性塩の効果により,緩衝材中は低 pH が長期間維持されることとなる。この影響は岩 盤中の低 pH 化にも影響を及ぼす(解析ケース1:可溶性塩無しと解析ケース2:可溶性塩 有りとの比較)。解析ケース1,2の比較により,ニアフィールドの酸化還元雰囲気は,緩 衝材中の酸化還元電位に支配される。可溶性塩の効果により,ニアフィールドの環境条件 は酸化雰囲気にシフトする。

また,解析ケース1,2の比較に基づき,可溶性塩の効果(NaCl 濃度)により,緩衝材 中の透水係数は増加傾向となる。

以上の効果は,支保工の有無に係わらず同一の傾向である。

(2) 支保工の効果

支保工領域は,長期にわたって高 pH 環境条件を維持する。支保工(高 pH 環境)の効果 により,緩衝材,岩盤の両領域とも僅かではあるが,高 pH 化の傾向を示す(解析ケース1 と解析ケース3の比較,解析ケース2と解析ケース4の比較)。ただし,支保工領域での高 pH までには至ることなく,初期状態における緩衝材間隙水中の pH を超えることは無い。

解析ケース1(支保工無し,可溶性塩無し),3(支保工有り,可溶性塩無し)の比較により,緩衝材中の透水係数の変化は顕著でない。

(3) 緩衝材中における速度論モデルの効果

本研究において,速度論モデルを考慮したケースは,膨大な計算時間を要したことから, 数十年,数百年,数千年での速度論モデルの効果を考察することができなかった。数年レ ベルの計算結果からは,平衡論モデルと比較して,顕著な差は見られなかった。

(4) その他

緩衝材間隙水の酸化還元電位は,初期段階での酸素ガス,炭酸ガスの平衡により長期的に低 pH,高 pe の条件を維持する。

緩衝材中の構成鉱物は、時間の経過とともに溶解現象が支配的となり空隙率は増加するが、

緩衝材または支保工から岩盤に流入する各元素の水溶性化学種により,岩盤の内側では, 岩盤構成鉱物の沈殿現象が支配的となり,何れのケースにおいても空隙率は減少傾向(閉 塞傾向)を示す。従って,連成現象を取り扱うことにより,緩衝材の密度低下など隔離機 能低下傾向を示すが,周辺岩盤の空隙構造が改善される傾向(空隙率低下,密度増加)を 示すことがわかった。



支保工有りの場合:緩衝材と岩盤の間に長さ 5cm の要素を2個追加。

図 5.2-1(1) 解析メッシュ分割(空間メッシュ,支保工無しのケース)



図 5.2-1(2) 解析メッシュ分割(時間メッシュ)
ケース No.	地下水 組成	可溶性塩の 有無	支保工 の有無	速度論 モデル	平衡論 モデル
1	FRHP	×	×	×	
2	"		×	×	
3	"	×		×	
4	"			×	
5	"	×			×
6	"				×

表 5.1-1 1 次元事例解析に係る解析ケース

:考慮する場合,x:考慮しない場合

入力データ項目	変数名	式または値	参考元	
真密度 ρ _s [Mg/m ³]	ROUS	2.7	12/25 配布資料 J-7,p.1	
間隙比 n [-]	EVOID	0.020408	"	
弾性係数 E [MPa]	YUNG	3.7×10^{4}	"	
ポアソン比	ENU	0.25	"	
熱伝導率 λ[W/(mK)]	-	2.8 (飽和状態)	"	
水の熱伝導率 λ _f [W/(mK)]	AKTF	0.6	"	
[W/(mK)]	AKTS	$\lambda_m = \theta \lambda_f + (1-n) \lambda_s $, $\lambda_s = (\lambda_m - \theta \lambda_f)/(1-n) = 2.8449$	"	
比熱 Cm[J/(kgK)]	-	1,000(飽和状態)	"	
固相の比熱 C _s [J/(kgK)]	CVE	$\rho_m C_m - \theta \rho_f C_f + (1-n) \rho_s C_s \pm 1 \mathcal{I} ,$ $C_s = (\rho_m C_m - \theta \rho_f C_f) / (1-n) = 975.96$	11	
固有透過度 K[m ²]	EK	1.0×10^{-15}	"	
水分特性曲線 比透水係数	-	$VG = \overrightarrow{\mathcal{F}} \overrightarrow{\mathcal{F}}$ $S_{e} = \frac{\theta - \theta_{r}}{\theta_{s} - \theta_{r}} = \left[1 + (\alpha \Psi)^{n}\right]^{-m}$ $\Psi = -\left(S_{e}^{-\gamma_{m}} - 1\right)^{\gamma_{n}} / \alpha$ $k_{r} = S_{e}^{\gamma_{2}} \left(1 - \left(1 - S_{e}^{\gamma_{m}}\right)^{m}\right)^{2}$	"	
飽和体積含水率 θ _s [-]	XTS	0.02	"	
最小体積含水率 θ_r [-]	XTR	0.0	"	
VG パラメータ α [-]	XAA	0.01	"	
VG パラメータ n [-]	XAN	2.25	"	
温度勾配水分拡散係 数 D _T [m²/(sK)]	DVT	0.0	"	

表 5.2-1 岩盤領域の材料物性値(THAMES 入力条件)

表 5.2-2 オーバーパック・緩衝材領域の材料物性値(THAMES 入力条件)

入力データ項目	変数名	式または値	参考元
真密度 ρ _s [Mg/m ³]	ROUS	2.6801	12/25 配布資料 J-7,p.3
間隙比 n [-]	EVOID	0.67504	"
弾性係数 E [MPa]	YUNG	$E = \alpha_0 + \alpha_1 \omega$	"
a_0 [MPa]	YUNG_1	58.74	"
a_1 [MPa]	YUNG_2	- 1.87	"
ポアソン比	ENU	0.3	"
		JNC モデル	
熱伝導率 λ[W/(mK)]	-	$\lambda_m = a + b\omega + c\omega^2 + d\omega^3$	11
		ω :含水比[-]	
a [-]	TP1	0.444	"
<i>b</i> [-]	TP2	1.38×10^{-1}	"
<i>c</i> [-]	TP3	6.14×10^{-3}	"
d[-]	TP4	- 1.69×10 ⁻⁴	"
		JNC モデル	
比熱 C _m [J/(kgK)]	-	$C_s + C_t \omega$	"
		$C_m = \frac{1}{a+\omega}$	
a [-]	TP5	100	"
C_{s}	TP6	34.1	"
C_{l}	TP7	4.18	"
 固有诱過度 K[m ²]	EK	4.0×10 ⁻²⁰	"
		VG モデル	
水分结性曲缐		$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left[1 + (\alpha \Psi)^n\right]^{-m}$	
比诱水係数	-	$\Psi = -\left(S_e^{-Y_m} - 1\right)^{Y_n} / \alpha$	"
		$\left(\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right)^{m} \right)^{2}$	
		$k_r = S_e^{/2} \left(1 - \left(1 - S_e^{/m} \right) \right)$	
_ 飽和体積含水率 θ_s [-]	XTS	0.403	"
最小体積含水率 θ_r [-]	XTR	0.0	"
VG パラメータ α [-]	XAA	0.008	"
VG パラメータ n [-]	XAN	1.6	"
水分勾配水分拡散係		$a_1(\theta - \theta_s) = a_2\theta$	
数	-	$D_T = \frac{1}{(\theta - b_1)(b_1 - \theta_s)} + \frac{1}{b_2(\theta - b_2)}$	"
D _T [cm ² /s]			
a1 [·]	-	2.99×10 ⁻⁸ ×T - 3.74×10 ⁻⁷	"
a2 [-]	-	- 1.50×10-8×T +1.49×10-7	"
<i>b1</i> [-]	-	- 2.49×10- ³	"
<i>b2</i> [-]	-	- 5.59×10-4×T +0.393	"
温度勾配水分拡散係 数 D _T [m²/(s)]	-	$D_T = D_{T0} \exp\left\{\frac{\alpha_T (T - T_0)}{T_0}\right\}$	"
標準状態の温度勾配 水分拡散係数 DTo [m ₂ /(s)]	DVT	7.0×10 ⁻¹²	"
標準温度 T ₀ []	TT0	25	"
ατ [-] ALFT		0.0	//

入力データ項目		オーバーパック緩衝材	岩盤
縦分散長	[m]	2×10 ⁻²	1×10 ⁻¹
横分散長	[m]	2×10 ⁻³	1×10^{-2}
実効拡散係数	$[m^2/s]$	5×10^{-10}	5×10^{-10}
遅延係数	[-]	1.0	1.0
減衰係数	[1/y]	0.0	0.0

表 5.2-3 Dtransu 入力条件

表 5.2-4 初期溶液濃度条件

	オーバーパック	岩盤	
	緩衝材		
pН	6.572	9.083	
pe	- 2.173	- 5.849	
	単位	<u>z</u> : [mol/l_w]	
Ca	8.069×10^{-2}	2.139×10^{-5}	
Mg	1.043×10^{-3}	5.000×10^{-5}	
Na	4.067×10^{-1}	4.117×10^{-3}	
K	3.096×10^{-3}	2.644×10^{-6}	
Fe	4.654×10^{-3}	3.251×10^{-9}	
Al	1.000×10^{-10}	1.683×10^{-6}	
Si	3.224×10^{-4}	5.935×10^{-4}	
Cl	7.784×10^{-3}	1.460×10^{-5}	
С	1.965×10^{-3}	3.452×10^{-3}	
S	2.844×10^{-1}	1.119×10^{-4}	
В	1.000×10^{-10}	2.930×10^{-4}	
Р	1.000×10^{-10}	2.860×10^{-6}	
F	1.000×10^{-10}	5.400×10^{-5}	
N	1.000×10^{-10}	2.300×10^{-5}	
Н	$1.110 \times 10^{+2}$	$1.110 \times 10^{+2}$	
$O_2(aq)$	0.0	0.0	

No.	鉱物	設定含有量	設定重量比	設定乾燥密度	分子量	設定鉱物濃度	出典
		[w%]	[-]	[kg/m ³]	[g/mol]	[mol/m ³ _cell]	
1	玉髓 / 石英(Chalcedony)	38.000	0.2660	425.6000	60.1,0000	$7.082 \times 10^{+03}$	第2次取りまとめ(分冊3)
2	方解石(Calcite)	2.6000	0.0180	28.8000	100.09100	$2.877 \times 10^{+02}$	"
3	黄鉄鉱(Pyrite)	0.7000	0.0049	7.8400	120.02800	$6.532 \times 10^{+01}$	"
4	斜長石	0.0000	-	-	-	-	
5	苦灰石	0.0000	-	-	-	-	
6	方沸石	0.0000	-	-	-	-	
7	ケイ砂	-	0.3000	480.000	60.1,0000	-	第2次取りまとめ(分冊3)
	合計	$100.2885 \mathrm{w}\%$	1.0001599	1602.5584	-	-	

表 5.2-5 緩衝材構成鉱物の初期濃度条件

網掛け部分は地球化学のモデル化鉱物として考慮していない。

N	ぐ亡┢∕╖	設定含有量	設定重量比	設定乾燥密度	分子量	設定鉱物濃度	ц.
NO.	1NO. 动公刊2	[w%]	[-]	[kg/m ³]	[g/mol]	[mol/m ³ _cell]	山央
1	曹長石(Albite)	14.2857	0.142857	377.14248	262.272	$1.438 \times 10^{+03}$	
2	玉髄(Chalcedony)	"	"	"	60.100	$6.275 \times 10^{+03}$	
3	方解石(Calcite)	"	"	"	100.091	$3.768 \times 10^{+03}$	
4	黄鉄鉱(Pyrite)	"	"	"	120.028	$3.142 \times 10^{+03}$	
5	カオリナイト(Kaolinite)	"	"	"	258.196	$1.461 \times 10^{+03}$	
6	微斜長石(Microcline)	"	"	"	278.384	$1.355 \times 10^{+03}$	
7	磁鉄鉱(Magnetite)	"	"	"	231.700	$1.628 \times 10^{+03}$	
	合計	99.9999w%	0.999999	2639.99736	-	-	第2次取りまとめデータ

表 5.2-6 岩体構成鉱物の初期濃度条件

	陽イオン交換容量	60.1[n	neq/100g]
	初期の交換性陽イオン組成 [meq/100g]	ZNa	51.4
		Z_2Ca	7.4
		ZK	0.6
イオン交換反応		$ m Z_2 Mg$	0.7
	イオン交換反応選択係数(logK _{G&T})	2ZNa-Z2Ca	0.69
		ZNa-ZK	0.42
		2ZNa-Z2Mg	0.67
		ZNa-ZH	1.88
	表面サイト酸・塩基解離定数: logK(-)=	=-7.92 , logK(-)=5.67
酸・塩基反応	表面サイト密度 : 6.5×10 ⁻	⁰⁵ [mol/g]*	
	表面サイト有効比表面積 : 29[m²/g	ç] *	
	(*:スメ	クタイト単位	重量当たり)
ガス反応	CO ₂ (g)の溶解 / 脱ガス 初期ガス分圧:().000316 [-]	
	O ₂ (g)の溶解 / 脱ガス 初期ガス分圧:	0.2 [-]	

表 5.2-7 緩衝材中の地球化学計算条件

第2次取りまとめ分冊3, V-37, 表 5.2-5.3.1-4 参照

表 5.2-8 Smectite の反応速度関連情報

入力条件	設定値
反応式	$Na_{0.33}Mg_{0.33}Al_{1.67}Si_4O_{10}(OH)_2 + 6H^+ = 0.33Na^+ + 0.33Mg^{2+} + 1.67Al^{3+} + 4SiO_2(aq) + 4H_2O$
反応速度式	$Rate = k \times A \times (a_{H^+})^n \times (1 - \frac{Q}{K})$
平衡定数	LogK(25) = 1.06
反応速度定数	Logk(25) = -14.7
定数値	n(25) = -0.22
定数値	$A = 1.67 E7 (\frac{m^2}{m^3})$











図5.2-4 [1次元ケース1] 飽和度分布 (可溶性塩なし・支保工なし)







図5.2-6 [1次元ケース1] 乾燥密度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし·支保工なし)







図5.2-8 [1次元ケース1] 空隙率分布(全領域) (可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-9 [1次元ケース1] 空隙率分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工なし)











図5.2-12 [1次元ケース1] 透水係数分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工なし)



























































図5.2-27 [1次元ケース1] Calcite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-28 [1次元ケース1] Calcite濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩なし・支保工なし)







図5.2-30 [1次元ケース1] Chalcedony濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工なし)


図5.2-31 [1次元ケース1] Chalcedy濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-32 [1次元ケース1] Pyrite濃度分布(全領域) (可溶性塩なし·支保工なし)



図5.2-33 [1次元ケース1] Pyrite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-34 [1次元ケース1] Pyrite濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩なし・支保工なし)



















図5.2-39 [1次元ケース1] NaZ濃度分布 (可溶性塩なし・支保工なし)







図5.2-41 [1次元ケース1] KZ濃度分布 (可溶性塩なし・支保工なし)























図5.2-47 [1次元ケース1] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内側,1/4) (可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-48 [1次元ケース1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,2/4) (可溶性塩なし、支保工なし)





(可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-50 [1次元ケース1] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内側,4/4)

(可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-51 [1次元ケース1] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外側,1/4) (可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-52 [1次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,2/4)

⁽可溶性塩なし・支保工なし)





(可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-54 [1次元ケース1] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4)

(可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-55 [1次元ケース1] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(岩盤内側,1/4) (可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-56 [1次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,2/4)

(可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-57 [1次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,3/4)

(可溶性塩なし・支保工なし)



図5.2-58 [1次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,4/4) (可溶性塩なし・支保工なし)















図5.2-62 [1次元ケース2] 乾燥密度分布(全領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-63 [1次元ケース2] 乾燥密度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工なし)







図5.2-65 [1次元ケース2] 空隙率分布(全領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-66 [1次元ケース2] 空隙率分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工なし)










図5.2-69 [1次元ケース2] 透水係数分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工なし)























































図5.2-83 [1次元ケース2] Calcite濃度分布(全領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-84 [1次元ケース2] Calcite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-85 [1次元ケース2] Calcite濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-86 [1次元ケース2] Chalcedony濃度分布(全領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-87 [1次元ケース2] Chalcedony濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工なし)











図5.2-90 [1次元ケース2] Pyrite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-91 [1次元ケース2] Pyrite濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩あり・支保工なし)



















図5.2-96 [1次元ケース2] NaZ濃度分布 (可溶性塩あり・支保工なし)















図5.2-100 [1次元ケース2] ZH濃度分布 (可溶性塩あり・支保工なし)














図5.2-104 [1次元ケース2] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内側,1/4) (可溶性塩あり·支保工なし)



図5.2-105 [1次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,2/4)

(可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-106 [1次元ケース2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,3/4)

(可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-107 [1次元ケース2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時 変化(緩衝材内側,4/4)

(可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-108 [1次元ケース2] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外側,1/4) (可溶性塩あり·支保工なし)



図5.2-109 [1次元ケース2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,2/4)

(可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-110 [1次元ケース2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,3/4)

(可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-111 [1次元ケース2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わる パラメータの経時変化(緩衝材外側,4/4)

(可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-112 [1次元ケース2] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(岩盤内側,1/4) (可溶性塩あり·支保工なし)



図5.2-113 [1次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,2/4)

⁽可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-114 [1次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,3/4)

(可溶性塩あり・支保工なし)



図5.2-115 [1次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,4/4) (可溶性塩あり、支保工なし)











図5.2-118 [1次元ケース3] 飽和度分布 (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-119 [1次元ケース3] 乾燥密度分布(全領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-120 [1次元ケース3] 乾燥密度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし、支保工あり)



図5.2-121 [1次元ケース3] 乾燥密度分布(岩盤領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-122 [1次元ケース3] 空隙率分布(全領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-123 [1次元ケース3] 空隙率分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工あり)











図5.2-126 [1次元ケース3] 透水係数分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工あり)


























































図5.2-141 [1次元ケース3] Calcite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-142 [1次元ケース3] Calcite濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩なし、支保工あり)



図5.2-143 [1次元ケース3] Chalcedony濃度分布(全領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-144 [1次元ケース3] Chalcedony濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-145 [1次元ケース3] Chalcedy濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-146 [1次元ケース3] Pyrite濃度分布(全領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-147 [1次元ケース3] Pyrite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩なし、支保工あり)







図5.2-149 [1次元ケース3] NA-MONT(支保工領域) (可溶性塩なし·支保工あり)













- 315 -







図5.2-154 [1次元ケース3] CaH2SiO4濃度分布(支保工領域) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-155 [1次元ケース3] SiO2濃度分布(支保工領域) (可溶性塩なし·支保工あり)



















図5.2-160 [1次元ケース3] ZH濃度分布 (可溶性塩なし・支保工あり)















図5.2-164 [1次元ケース3] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内側,1/5) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-165 [1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,2/5)

⁽可溶性塩なし・支保工あり)



(e) CO2ガス濃度の時間変化

図5.2-166 [1次元ケース3] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,3/5)



図5.2-167 [1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,4/5)



図5.2-168 [1次元ケース3] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時 変化(緩衝材内側,5/5)



図5.2-169 [1次元ケース3] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外側,1/5) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-170 [1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,2/5)



図5.2-171 [1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,3/5)









図5.2-173 [1次元ケース3] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(岩盤内側,1/4) (可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-174 [1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,2/4)

(可溶性塩なし・支保工あり)


図5.2-175 [1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,3/4)

(可溶性塩なし・支保工あり)



図5.2-176 [1次元ケース3]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,4/4) (可溶性塩なし、支保工あり)







図 5.2-238 pHの比較(ケース3:平衡モデル,ケース5:速度モデル,1/2)



(g)平衡モデル 5年後

(h)速度モデル 5年後

図 5.2-238 pHの比較(ケース 3: 平衡モデル, ケース 5: 速度モデル, 2/2)



図 5.2-239 pHの比較(ケース 4: 平衡モデル, ケース 6: 速度モデル)







図5.2-179 [1次元ケース4] 飽和度分布 (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-180 [1次元ケース4] 乾燥密度分布(全領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-181 [1次元ケース4] 乾燥密度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-182 [1次元ケース4] 乾燥密度分布(岩盤領域) (可溶性塩あり·支保工あり)



図5.2-183 [1次元ケース4] 空隙率分布(全領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-184 [1次元ケース4] 空隙率分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり·支保工あり)



図5.2-185 [1次元ケース4] 空隙率分布(岩盤領域) (可溶性塩あり・支保工あり)







図5.2-187 [1次元ケース4] 透水係数分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



























































図5.2-202 [1次元ケース4] Calcite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-203 [1次元ケース4] Calcite濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-204 [1次元ケース4] Chalcedony濃度分布(全領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-205 [1次元ケース4] Chalcedony濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-206 [1次元ケース4] Chalcedy濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩あり・支保工あり)






図5.2-208 [1次元ケース4] Pyrite濃度分布(緩衝材領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-209 [1次元ケース4] Pyrite濃度分布(岩盤領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-210 [1次元ケース4] NA-MONT(支保工領域) (可溶性塩あり·支保工あり)



















図5.2-215 [1次元ケース4] CaH2SiO4濃度分布(支保工領域) (可溶性塩あり·支保工あり)



図5.2-216 [1次元ケース4] SiO2濃度分布(支保工領域) (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-217 [1次元ケース4] NaZ濃度分布 (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-218 [1次元ケース4] CaZ2濃度分布 (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-219 [1次元ケース4] KZ濃度分布 (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-220 [1次元ケース4] MgZ2濃度分布 (可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-221 [1次元ケース4] ZH濃度分布 (可溶性塩あり・支保工あり)















図5.2-225 [1次元ケース4] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内側,1/5) (可溶性塩あり·支保工あり)



図5.2-226 [1次元ケース4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,2/5)

(可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-227 [1次元ケース4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,3/5)

(可溶性塩あり・支保工あり)

(e) CO2ガス濃度の時間変化



図5.2-228 [1次元ケース4]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,4/5)



図5.2-229 [1次元ケース4] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時 変化(緩衝材内側,5/5)



図5.2-230 [1次元ケース4] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外側,1/5) (可溶性塩あり·支保工あり)



図5.2-231 [1次元ケース4]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,2/5)



図5.2-232 [1次元ケース4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,3/5)

(可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-233 [1次元ケース4] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時 変化(緩衝材外側,5/5)



図5.2-234 [1次元ケース4] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(岩盤内側,1/4) (可溶性塩あり·支保工あり)



図5.2-235 [1次元ケース4]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,2/4)

(可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-236 [1次元ケース4]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,3/4)

(可溶性塩あり・支保工あり)



図5.2-237 [1次元ケース4] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,4/4) (可溶性塩あり、支保工あり)



図 5.2-238 pHの比較(ケース3:平衡モデル,ケース5:速度モデル,1/2)



(g)平衡モデル 5年後

(h)速度モデル 5年後

図 5.2-238 pHの比較(ケース 3:平衡モデル,ケース 5:速度モデル,2/2)



図 5.2-239 pHの比較(ケース 4: 平衡モデル, ケース 6: 速度モデル)

5.3 事例解析(3次元)

本節では,開発した熱-水-応力-化学連成解析コードの適用性の確認ならびにニアフィール ド環境の把握を目的として,昨年度の委託研究において採用した幾何形状モデルに基づき2 ケースの3次元事例解析を実施した。

5.3.1 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。 本事例解析では,連成解析コードの適用性(次元の効果,可溶性塩の有無)の確認を目的 として,表 5.3-1 に示す様に2ケースの解析を実施した。

空間メッシュ分割図を図 5.3-1 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 50m,埋め戻し材-50.602m,緩衝材-525.95m 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 5.3-2 に示すようになっている。本事例解析において, THAMES,Dtransu,PHREEQCで採用した解析条件をそれぞれ表 5.3-2~表 5.3-7 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 5.3-3 に示すように,評価ライン(図 5.3-3(a)参照)での空間分布,ならびに評価点(図 5.3-3(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。 5.3.2 解析結果および考察

本項では,前記の条件に基づき解析した結果ならびに考察について,ケース毎に記載する。 なお,各解析ケース間の比較を含めた3次元事例解析のまとめについては,後述の「5.3.3 事 例解析(3次元)の総括」で記載する。

(1) 解析ケース1(可溶性塩有り,支保工無し,平衡論)

ここでは,1次元事例解析結果との比較を容易にするため,熱的挙動,水理的挙動,物質 移行 地球化学的挙動に関する解析結果は,緩衝材領域~岩盤領域における空間分布ならび に任意位置(緩衝材内側・外側,岩盤内側)での時間変化の図化処理結果に基づき考察し た。さらに,ニアフィールド全体の変化を把握することを目的として,3次元コンタ図の結 果に基づき考察した。

解析結果として,前記評価ラインにおいて熱-水に係る主要パラメータの空間分布を図 5.3-4~図5.3-14に示す。物質移行-地球化学に関する主要パラメータの空間分布を図5.3-15 ~図5.3-48に示す。任意位置(緩衝材内側・外側,岩盤内側)における熱-水,物質移行-地球化学に関する主要パラメータの時間変化を図5.3-49~5.3-60に示す。また,3次元コ ンタ図の結果は,それぞれ図5.3-118~122に示す。

()熱的挙動

温度の挙動は(図 5.3-4,図 5.3-49(a),図 5.3-53(a),図 5.3-57(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 5.3-49(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。

図 5.3-118 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, 10 年の時点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。

()水理的挙動

緩衝材は,図 5.3-5,図 5.3-6 に示すように 100 年以下で飽和状態となっている。緩衝 材内側では,図 5.3-49(b),(c)に示す様に約 20 年で飽和状態となる。緩衝材外側は,図 5.3-53(b),(c)に示す様に約8年で飽和状態となる。これは岩盤に隣接していることから, 速やかに地下水が移動することを示している。また,本解析ケースでは,可溶性塩 NaCl の効果により初期段階で高い透水係数となることから,解析ケース2よりも再冠水時間が 約10年早い結果となっている。

乾燥密度,空隙率の変化は,図 5.3-7~図 5.3-12 に示す様に緩衝材中では,構成鉱物の 溶解により乾燥密度は減少し,空隙率も増加する傾向を示す。岩盤中は,岩盤構成鉱物の 溶解・沈殿による変化が微量であることから,乾燥密度,空隙率の顕著な変化は見られな かった。図 5.3-13,図 5.3-14 は,透水係数の空間分布を示す。本ケースは,緩衝材中で 可溶性塩(NaCl,KCl,CaSO4)を考慮していることから,初期段階では図 5.3-13(a),図 5.3-14(a)に示す様に NaCl の効果により,高い透水係数を示すが,緩衝材中の可溶性塩 NaCl が時間の経過とともに岩盤領域に散逸することから,透水係数は減少傾向を示す。

図 5.3-119 は, ニアフィールドの体積含水率の分布を示している。初期状態で岩盤は地下水で飽和(青色)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。

()物質移行-地球化学的举動

図 5.3-15~図 5.3-48 は, pH, pe, 元素濃度,構成鉱物濃度,イオン交換化学種濃度, 表面錯体化学種濃度の任意時間(0年,1年,10年,100年,1,000年,2,000年)にお ける空間分布を示す。また,任意空間(緩衝材内側,緩衝材外側,岩盤内側)における pH, pe, 元素濃度,構成鉱物濃度,イオン交換化学種濃度,表面錯体化学種濃度の時間 変化をそれぞれ,図 5.3-50~図 5.3-52,図 5.3-54~図 5.3-56,図 5.3-58~図 5.3-60 に示 す。

岩盤の内側(1000年,2000年の時点)において,pH,pe,イオン濃度は顕著なピー ク値を示している。岩盤内側におけるこれらの傾向は,図 5.3-58~図 5.3-60の時間変化 でも顕著である。さらに,地球化学パラメータの時間変化(図 5.3-58~図 5.3-60)より, 0.1年から 0.3年に至る時間ステップにおいても不連続/値の飛び跳ね傾向を示している。 特に Mg 濃度(図 5.3-59(a))は,0.3年の時点で1×10⁻¹⁵ [mol/l_water]となっており, 物質移行の計算において Mg 濃度が負値となり,この値が地球化学モジュールに受け渡さ

- 406 -
れた結果, PHREEQC にて 0 濃度と認識している。元素濃度の不連続/値の飛び跳ね現象は,空間・時間メッシュを密としている 1 次元事例解析で生じていないことから,これらの影響が大きいものと思われる。特に,物質移行 地球化学連成挙動は,以下に示す傾向を示す。

素濃度の僅かな変化で,溶解/沈殿挙動が決定される。

前記 により溶解/沈殿の境界部分では,元素濃度が不連続となる。

この様な挙動が考えられることから,元素濃度の不連続性が生じる空間の近傍では,系 全体での質量収支を確保する観点から空間領域を密にしておく必要がある。また,本研究 で開発した熱-水-応力-化学連成解析コードは,時間キザミ幅に対して収束繰り返し計 算ルーチンを考慮していないことから,濃度変化が顕著な時間帯においては時間メッシュ を密にしておく必要がある。

これらの不連続/値の飛び跳ね傾向を連続挙動として見た場合,初期段階から100年の 間は,1次元事例解析(ケース2)結果と概ね同一傾向である(1次元事例解析と同様の 解釈をすることが可能)。

図 5.3-120 は,ニアフィールド全体の空隙率変化をコンタ図で表わしている。緩衝材, 岩盤領域において,空隙率が顕著に変化するだけの溶解・沈殿反応が無いことから,長期 的に変化が無いことを示している。図 5.3-121 は,ニアフィールド全体における pH の変 化をコンタ図で表わしている。本図より,周辺岩盤の pH は埋め戻し材の pH に漸近する 傾向を示している。また,図 5.3-121(e),(f)において岩盤内側において局部的に pH の高 い(赤色)部分が見られるが,これは空間・時間メッシュが粗いことによる数値不安定が 起因しているものと考える。

(2) 解析ケース2(可溶性塩無し,支保工無し,平衡論)

ここでは,解析ケース1と同様の結果図に基づき考察を行った。

解析結果として,前記評価ラインにおいて熱-水に係る主要パラメータの空間分布を図 5.3-61~図 5.3-71 に示す。物質移行-地球化学に関する主要パラメータの空間分布を図 5.3-72~図 5.3-105 に示す。任意位置(緩衝材内側・外側,岩盤内側)における熱-水,物 質移行-地球化学に関する主要パラメータの時間変化を図 5.3-106~5.3-117 に示す。また, 3 次元コンタ図の結果は,それぞれ図 5.3-123~127 に示す。図 5.3-122 は,ニアフィール ド全体における pe の変化をコンタ図で表わしている。本図は, pH と同様の傾向(周辺岩 盤の pe が時間の経過とともに埋め戻し材の pe に漸近)を示している。

1) 熱的挙動

温度の挙動は(図 5.3-61,図 5.3-106(a),図 5.3-110(a),図 5.3-114(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 5.3-106(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。

図 5.3-123 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, 10 年の時点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。

2) 水理的挙動

緩衝材は,図 5.3-62,図 5.3-63 に示すように 100 年以下で飽和状態となっている。緩 衝材内側では,図 5.3-106(b),(c)に示す様に約 30 年で飽和状態となる。緩衝材外側は, 図 5.3-110(b),(c)に示す様に約 10 年で飽和状態となる。これは岩盤に隣接していること から,速やかに地下水が移動することを示している。

乾燥密度,空隙率の変化は,図 5.3-64~図 5.3-69 に示す様に緩衝材中では,構成鉱物 の溶解により乾燥密度は減少し,空隙率も増加する傾向を示す。岩盤中は,岩盤構成鉱物 の溶解・沈殿による変化が微量であることから,乾燥密度,空隙率の顕著な変化は見られ なかった。図 5.3-70,図 5.3-71 は,透水係数の空間分布を示す。本ケースは,緩衝材中 で可溶性塩(NaCl, KCl, CaSO4)を考慮していないこと,乾燥密度の変化が微量であ ることから顕著な透水係数の変化は見られなかった。

図 5.3-124 は,ニアフィールドの体積含水率の分布を示している。初期状態で岩盤は地下水で飽和(青色)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。

3)物質移行·地球化学的举動

図 5.3-72~図 5.3-105 は, pH, pe, 元素濃度,構成鉱物濃度,イオン交換化学種濃度, 表面錯体化学種濃度の任意時間(0年,1年,10年,100年,1,000年,2,000年)にお ける空間分布を示す。また,任意空間(緩衝材内側,緩衝材外側,岩盤内側)における pH, pe, 元素濃度,構成鉱物濃度,イオン交換化学種濃度,表面錯体化学種濃度の時間 変化をそれぞれ,図 5.3-107~図 5.3-109,図 5.3-111~図 5.3-113,図 5.3-115~図 5.3-117 に示す。本ケースにおいても,ケース1と同様に,pH, pe,イオン濃度で不連続/値の 飛び跳ね傾向が見られる。この傾向は,空間・時間メッシュが粗いことによることが起因 しているものと考える。さらに,これらの不連続/値の飛び跳ね傾向を連続挙動として見 た場合,1次元事例解析(ケース2)結果と概ね同一傾向である(1次元事例解析と同様 の解釈をすることが可能)。

図 5.3-125 は, ニアフィールド全体の空隙率変化をコンタ図で表わしている。緩衝材, 岩盤領域において,空隙率が顕著に変化するだけの溶解・沈殿反応が無いことから,長期 的に変化が無いことを示している。図 5.3-126 は,ニアフィールド全体における pH の変 化をコンタ図で表わしている。本図より,周辺岩盤の pH は埋め戻し材の pH に漸近する 傾向を示している。また,図 5.3-126(e),(f)において岩盤内側において局部的に pH の高 い(赤色)部分が見られるが,これは空間・時間メッシュが粗いことによる数値不安定が 起因しているものと考える。図 5.3-127 は,ニアフィールド全体における pe の変化をコ ンタ図で表わしている。本図は,pH と同様の傾向(周辺岩盤の pe が時間の経過ととも に埋め戻し材の pe に漸近)を示している。 5.3.3 事例解析 (3次元)の総括

本項では,前記2ケースの総括として,可溶性塩の効果,次元の効果(5.2の事例解析との比較検討)がニアフィールド環境に及ぼす影響について記載する。

可溶性塩の効果(CaSO₄)により,緩衝材中のpHは減少傾向を示す。

可溶性塩の効果(CaSO₄)により, Na 型ベントナイトの変質(Ca 型ベントナイト) は促進される。

処分坑道(埋め戻し材)と処分坑(緩衝材)から岩盤領域への可溶性塩の移行(水平 方向)に加え,時間の経過とともに上部(埋め戻し材)からの移行効果がある。岩盤 中の低 pH 化は,1次元よりも3次元モデルの方が加速される。

空間・時間メッシュが粗い場合, pH, pe, イオン濃度の分布において不連続/値の 飛び跳ね傾向が見られる。

不連続 / 値の飛び跳ね傾向を連続挙動として見た場合,1次元事例解析結果と概ね同 一傾向である(1次元事例解析と同様の解釈をすることが可能)。 **上端境界面** 水頭規定境界:全水頭 50 [m] 温度規定境界:45 [] 濃度規定境界:初期濃度で固定



節点数:32891(THAMES) 8580(DTRANSU) 要素数:7220

単位:m

岩盤

埋め戻し材

緩衝杖

オーバーパック ガラス固化体





図 5.3-2 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 5.3-3 大規模 3 次元事例解析評価ラインおよび評価点

ケース No.	地下水 組成	可溶性塩の 有無	支保工 の有無	速度論 モデル	平衡論 モデル
1	FRHP		×	×	
2	"	×	×	×	

表 5.3-1 3次元事例解析に係る解析ケース

:考慮する場合,x:考慮しない場合

表 5.3-2 3 次元事例解析入力情報 (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	
乾燥密度	[g/cm ³]	2.8	7.8	1.60	1.80	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}	$1 \times 10^{.21}$	4×10^{-20}	1×10 ⁻¹⁵	
空隙率		-	-	0.403	0.403	0.005	
	θs [-]	-	-	0.403	0.403	5.0×10-3	
VG	θr [-]	-	-	0	0	0	
パラメータ	α [1/m]	-	-	8.0×10-3	8.0×10-3	8.0×10-3	
	n [-]	-	-	1.6	1.6	1.6	
比透水係数 [-]		-	-	-	-	VG+Mualem モデル	
	a1	-	-	2.99×10^{-8} T - 3.78×10^{-7}	2.99×10 ⁻⁸ T - 3.78×10 ⁻⁷		
水分坊勘係数	a2	-	-	-1.5×10 ⁻⁸ T+1.49×10 ⁻⁷	-1.5×10 ⁻⁸ T+1.49×10 ⁻⁷		
	b1	-	-	-2.49×10^{-3}	-2.49×10^{-3}	-	
	b2	-	-	$5.59 \times 10^{-4} T + 3.93 \times 10^{-1}$ $5.59 \times 10^{-4} T + 3.93 \times 10^{-1}$			
温度勾配水分拡散係数 [m²/(sK)]		-	-	$Dt=D_{t0}\times exp[(\alpha_t(T - T_0) /$	$\overline{\mathrm{D}_{\mathrm{t0}} \times \mathrm{exp}[(\alpha_{\mathrm{t}}(\mathrm{T} - \mathrm{T}_{\mathrm{0}}) / \mathrm{T}_{\mathrm{0}}]}$		
熱伝導率 [W/(mK)]		1.2	53.0	4.44×10^{-1} + 1.38×10^{-2} w + 6.14×10^{-3} w ² - 1.69×10^{-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 5.3-3 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

	オーバーパック	岩盤
	緩衝材	
pН	6.572	9.083
pe	- 2.173	- 5.849
		単位:[mol/l_w]
Ca	8.069×10^{-2}	2.139×10^{-5}
Mg	1.043×10^{-3}	5.000×10^{-5}
Na	4.067×10^{-1}	4.117×10 ⁻³
Κ	3.096×10^{-3}	2.644×10^{-6}
Fe	4.654×10^{-3}	3.251×10^{-9}
Al	1.000×10^{-10}	1.683×10^{-6}
Si	3.224×10^{-4}	5.935×10^{-4}
Cl	7.784×10^{-3}	1.460×10^{-5}
С	1.965×10^{-3}	3.452×10^{-3}
S	2.844×10^{-1}	1.119×10^{-4}
В	1.000×10^{-10}	2.930×10^{-4}
Р	1.000×10^{-10}	2.860×10^{-6}
F	1.000×10^{-10}	5.400×10^{-5}
Ν	1.000×10^{-10}	2.300×10^{-5}
Н	$1.110 \times 10^{+2}$	$1.110 \times 10^{+2}$
$O_2(aq)$	0.0	0.0

表 5.3-4 初期溶液濃度条件

N	会亡业加	設定含有量	設定重量比	設定乾燥密度	分子量	設定鉱物濃度	LL th
INO.	シムイクノ	[w%]	[-]	[kg/m ³]	[g/mol]	[mol/m ³ _cell]	山央
1	玉髄 / 石英 (Chalcedony)	38.000	0.2660	425.6000	60.10000	$7.082 \times 10^{+03}$	第2次取りまとめ(分冊3)
2	方解石(Calcite)	2.6000	0.0180	28.8000	100.09100	$2.877 \times 10^{+02}$	"
3	黄鉄鉱 (Pyrite)	0.7000	0.0049	7.8400	120.02800	$6.532 \times 10^{+01}$	"
4	斜長石	0.0000	-	-	-	-	
5	苦灰石	0.0000	-	-	-	-	
6	方沸石	0.0000	-	-	-	-	
7	ケイ砂	-	0.3000	480.000	60.10000	-	第2次取りまとめ(分冊3)
	合計	100.2885w%	1.0001599	1602.5584	-	-	

網掛け部分は地球化学のモデル化鉱物として考慮していない。

表 5.3-6 岩体構成鉱物の初期濃度条件

	A 4-6-	設定含有量	設定重量比	設定乾燥密度	分子量	設定鉱物濃度	
No.	新学校	[w%]	[-]	[kg/m ³]	[g/mol]	[mol/m ³ _cell]	出典
1	曹長石 (Albite)	14.2857	0.142857	377.14248	262.272	$1.438 \times 10^{+03}$	
2	玉髄 (Chalcedony)	"	"	"	60.100	$6.275 \times 10^{+03}$	
3	方解石 (Calcite)	"	"	"	100.091	$3.768 \times 10^{+03}$	
4	黄鉄鉱 (Pyrite)	"	"	"	120.028	$3.142 \times 10^{+03}$	
5	カオリナイト (Kaolinite)	"	"	"	258.196	$1.461 \times 10^{+03}$	
6	微斜長石 (Microcline)	"	"	"	278.384	$1.355 \times 10^{+03}$	
7	磁鉄鉱 (Magnetite)	"	"	"	231.700	$1.628 \times 10^{+03}$	
	合計	99.9999w%	0.999999	2639.99736	-	-	第2次取りまとめデータ

	陽イオン交換容量	60.1[meq/100g]				
	初期の交換性陽イオン組成 [meq/100g]	ZNa	51.4			
		Z_2Ca	7.4			
		ZK	0.6			
イオン交換反応		$ m Z_2Mg$	0.7			
	イオン交換反応選択係数(logKG&T)	2ZNa-Z2Ca	0.69			
		ZNa-ZK	0.42			
		2ZNa-Z2Mg	0.67			
		ZNa-ZH	1.88			
	表面サイト酸・塩基解離定数: logK(-)=	-7.92 , logK(-)=5.67			
酸・塩基反応	表面サイト密度 : 6.5×10 ⁻⁰	⁾⁵ [mol/g]*				
	表面サイト有効比表面積 : 29[m²/g] *				
	(*:スメ	クタイト単位	重量当たり)			
ガフ反応	CO2(g)の溶解 / 脱ガス 初期ガス分圧: 0.000316 [-]					
リス区心	O₂(g)の溶解 / 脱ガス 初期ガス分圧:0.2 [-]					

表 5.3-7 緩衝材中の地球化学計算条件

第2次取りまとめ分冊3, V-37,表5.2-5.3.1-4参照

g:ガス



















図5.3-8 [3次元ケース1] 乾燥密度分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)























図5.3-14 [3次元ケース1] 透水係数分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)

































JNC TJ8400 2004-004


























図5.3-29 [3次元ケース1] Calcite濃度分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-30 [3次元ケース1] Calcite濃度分布(岩盤領域) (FRHP型モデル地下水)







図5.3-32 [3次元ケース1] Chalcedony濃度分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-33 [3次元ケース1] Chalcedy濃度分布(岩盤領域) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-34 [3次元ケース1] Pyrite濃度分布(全領域) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-35 [3次元ケース1] Pyrite濃度分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-36 [3次元ケース1] Pyrite濃度分布(岩盤領域) (FRHP型モデル地下水)



















































図5.3-49 [3次元ケース1] 熱・水に係わるバラメータの経時変化(緩衝材内側,1/4) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-50 [3次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内 側,2/4)

(FRHP型モデル地下水)



図5.3-51 [3次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内 側,3/4)





図5.3-52 [3次元ケース1] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時変化 (緩衝材内側,4/4)

(FRHP型モデル地下水)



図5.3-53 [3次元ケース1] 熱·水に係わるバラメータの経時変化(緩衝材外側,1/4) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-54 [3次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外 側,2/4)

(FRHP型モデル地下水)



図5.3-55 [3次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外 側,3/4)





図5.3-56 [3次元ケース1] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるバラメータの経時変化 (緩衝材外側,4/4)

(FRHP型モデル地下水)



図5.3-57 [3次元ケース1] 熱·水に係わるバラメータの経時変化(岩盤内側,1/4) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-58 [3次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤内 側,2/4)

(FRHP型モデル地下水)



図5.3-59 [3次元ケース1]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤内 側,3/4)

(FRHP型モデル地下水)



図5.3-60 [3次元ケース1] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤内 側,4/4) (FRHP型モデル地下水)


















図5.3-65 [3次元ケース2] 乾燥密度分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)























図5.3-71 [3次元ケース2] 透水係数分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)

































JNC TJ8400 2004-004































図5.3-87 [3次元ケース2] Calcite濃度分布(岩盤領域) (FRHP型モデル地下水)







図5.3-89 [3次元ケース2] Chalcedony濃度分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-90 [3次元ケース2] Chalcedy濃度分布(岩盤領域) (FRHP型モデル地下水)







図5.3-92 [3次元ケース2] Pyrite濃度分布(緩衝材領域) (FRHP型モデル地下水)






















































図5.3-106 [3次元ケース2] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材内側,1/4) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-107 [3次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,2/4)



図5.3-108 [3次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材内側,3/4)



図5.3-109 [3次元ケース2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時 変化(緩衝材内側,4/4)



図5.3-110 [3次元ケース2] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(緩衝材外側,1/4) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-111 [3次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,2/4)



図5.3-112 [3次元ケース2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(緩衝 材外側,3/4)



図5.3-113 [3次元ケース2] イオン交換反応,表面錯体反応に係わるパラメータの経時 変化(緩衝材外側,4/4)



図5.3-114 [3次元ケース2] 熱·水に係わるパラメータの経時変化(岩盤内側,1/4) (FRHP型モデル地下水)



図5.3-115 [3次元ケース2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,2/4)



図5.3-116 [3次元ケース2]物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,3/4)





図5.3-117 [3次元ケース2] 物質移行 - 地球化学に係わるパラメータの経時変化(岩盤 内側,4/4) (FRHP型モデル地下水)



図 5.3-118 [3次元ケース 1] 温度分布



図 5.3-119 [3次元ケース 1] 体積含水率分布



図 5.3-120 [3次元ケース 1] 空隙率分布



図 5.3-121 [3次元ケース 1] pH 分布



図 5.3-122 [3次元ケース 1] pe 分布



図 5.3-123 [3次元ケース 2] 温度分布



図 5.3-124 [3次元ケース 2] 体積含水率分布



図 5.3-125 [3次元ケース 2] 空隙率分布



図 5.3-126 [3次元ケース 2] pH 分布



図 5.3-127 [3次元ケース 2] pe 分布

6. 今後の課題

本章では,熱-水-応力-化学連成解析コードを効率的に運用することを目的に,1次元 事例解析,3次元事例解析を通じて明らかになった今後の課題についてまとめた。

6.1 連成解析に関する知識ベースの集約

熱-水-応力-化学連成解析コードを用いて事例解析を行った結果,限られた時間で, 安定な解を得るのにかなりの時間を費やした。これらの検討を通じて得られた知見を以下 に示す。

- 複数領域を取り扱った場合に空間濃度が急激に変化するような位置では、物質移行の 計算で負の濃度が求まる場合が有る。出力情報が膨大であることから、注意深くモニ タリングしなければならない。
- ・ 温度変化が顕著な箇所では,平衡濃度が極端に異なる。
 - → 発散のドライビングフォースとなる可能性がある。
- ・ 発散傾向の兆候は,比較的早期の濃度分布で判明する。

→ 物質移行計算において,負の濃度となる。

- 平衡モデルを採用した場合,計算時間は短縮できるが,平衡前後で液相濃度が極端に 異なるため,不連続な濃度プロファイルとなる。
 - → 不連続となる位置では空間メッシュ密+時間メッシュ密にしなければならない。

6.2 現象モデルに関する課題

現象モデルに関する課題としては,現時点において,力学と地球化学に係る構成式が無いことから事例解析は応力を含まない,熱-水-化学(物質移行を含む)現象のみ取り扱うことができる。ただし,熱-水-応力については,THAMESコードで連成の実現が可能である。今後,化学(物質移行)現象との連成挙動の観点から,応力-化学に係る連成物性モジュールの整備ならびに基礎データの取得が必須となる(例えば,空隙率の変化に応じた機械物性の変化など)。

物質移行モデルでは,本年度,ガス拡散機能を導入した。ただし,2相流などの取り扱い ができないことから,現THMCの体系に対して他の方法,例えば,Dtransuの源泉項を利 用する方法についても検討の余地が残されている。

また,地球化学モデルの高度化としては,コンクリートの溶解・沈殿モデルの導入,乾

燥密度の変化に応じたイオン交換,表面錯体反応の基本物性データの更新などが課題とし て考えられる。

6.3 リスタート機能の追加

熱-水-応力-化学連成解析コードを用いて,複雑な系(化学反応モデルの多様性,元 素数の多様性,解析対象領域の大領域化,超長期の解析評価期間)を扱う場合,解析の途 中段階で不安定な解が得られる場合がある。この原因は,事前に察知することが困難な極 端な現象(例えば,局部的に沈殿反応が発生した場合,局部的に溶液濃度が減少)の発生 などが考えられる。複雑な系を対象とした場合,現状のコードでは計算時間が数週間に及 ぶ可能性が極めて高く,計算途中で発散した時の再計算は,最初からやり直すこととなる。

本節の課題は,作業の効率性の観点から,途中段階における必要な情報をディスクに保存しておき,再解析の必要性に応じて,格納された情報を初期値として計算できるようにすることである。

6.4 連成解析支援機能の導入

熱 - 水 - 応力 - 化学連成解析コードを運用するためには,THAMES,Dtransu, PHREEQC,COUPLYSの利用方法を熟知しておく必要がある。現行のTHMCは,各解析 コード/モジュールの入力ファイルをテキスト形式にて,利用者が作成することとしてい るが,新規モデルのデータセットを準備するためには,数日の時間を要する。これらのこ とから,柔軟かつ迅速に解析作業を実施するためには,連成解析用のグラフィカルユーザ インターフェースを新たに開発し,前記の知識ベースと組み合わせたシステムを準備して おくことが肝要と考える。

前処理(1):有限要素法を対象としたプリポストとの連携

前処理(2):連成の多様性を定義する。現在は,処理の定義ファイル control.dat で連成フ ローをテキスト形式で定義

前処理(3):各解析コードの入力データをテキストファイルで作成するのは,時間を要す ることから,事前に代表的なデータ等を登録しておき,データを迅速にハンド リングできるようにする。新規の入力・登録もできるようにする。

計算中:安定な解が得られているか否かのモニタリングを行ない,解析者にメッセージ

を発信する。各解析コードが出力する値(例えば, PHREEQC で発散傾向にあるか否か。Dtransu で負の濃度を出力していないか等)

計算中:主要なグラフ(溶液濃度,鉱物濃度の変遷)を自動的に描き,意図した結果又 は解釈可能な結果となっているか否かを示す。

解析後:可視化(例えば,処分場の絵との重ね合わせ)

解析後:効率的に TECPLOT 等作図ソフトで図化処理できるようにする。

連成解析支援機能導入のメリットとしては,今後,THMC を用いて多くの解析を実施し た場合に,入力情報と出力情報を人が管理するのではなく,計算機が活用できる。デメリ ットは開発費を要すること。同様の機能についてJNC殿では,第2次取りまとめの安全解 析を効率的かつ迅速に実行でき,かつ追跡可能性や再現性を確保するためのシステム (CAPASA:Computer Assisted Performance Assessment System Analysis)を運用した実 績がある。

6.5 計算時間の高速化

本研究では,速度論モデルを用いた場合に,地球化学モデルPHREEQCでの収束性が悪かったこと,時間を要する計算が複数のCPUに効率的に振り分けられず,1つのCPUに 集中していたことなどが計算時間を要した要因となった。また,熱-水-応力連成解析コード THAMESについても計算に必要な時間が多いと言う問題点がある。今後,大規模なモデル を採用した場合に,可能な限り短時間での計算を行うための課題が残されており,これを 以下に示す。

- 本研究の事例解析では,要素中心での地球化学の計算を,単純にトータル要素の半分を任意の CPU に振り分けている。例えば,複数領域における各領域での要素を,それぞれ割り当てる方法や,入力データで CPU 毎にユーザー指定する方法や,アイドリングとなった CPU に自動的に計算ジョブを割り振るなどの方法が考えられる。
- 地球化学計算の並列処理を、より多くの CPU を搭載した Linux マシンまたは EWS を利用して行う。

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) 物質移行解析モデルの高度化

地球化学解析コードとの連成を実現するため,平成14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。

(2) 地球化学モデルの高度化

本年度は,鉱物の溶解/沈殿に加えて,O₂,CO₂等の化学反応・脱ガスを考慮し た地球化学モデルを構築する。鉱物の多様性を考慮すべく,スメクタイトのイオン 交換,表面酸・塩基解離反応,オーバーパック腐食生成物の変遷を地球化学-物質 移行連成モデルに導入した。スメクタイトのイオン交換,表面酸・塩基解離反応に ついてのモデルは,第2次取りまとめの緩衝材間隙水化学モデルを採用した。更に, 緩衝材間隙水化学の時間的/空間的変遷を予測する上で重要となる地球化学現象 (スメクタイト,セメント系材料構成鉱物の溶解/沈殿など)について,速度モデ ルを導入した。 (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 高レベル放射性廃棄物処分ニアフィールド を対象として,1次元モデル,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,タイムステップの自動分割機能に加 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

- L. Borgesson and J. Hernelind : "Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Calculations of the Water Saturation Phase of a KBS-3 Deposition Hole , Influence of Hydraulic Rock Properties on the Water Saturation Phase", Technical Report TR-99-41, Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, (1999).
- Enresa : "FEBEX Full-Scale Engineered Barriers Experiment in Crystalline Host Rock, Pre-Operational Stage", Summary Report, (1998).
- T. Fujita, M. Chijimatsu, H. Ishikawa, H. Suzuki and K. Matsumoto : "Fundamental Properties of Bentonite OT-9607, Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Experiment at Kamaishi Mine", Technical Note 11-96-04, PNC TN8410 97-071, (1997).
- U. Berner : "A Thermodynamic Description of the Evolution of Pore Water Chemistry and Uranium Speciation during the Degradation of Cement", PSI-Bericht Nr.62, (1990).
- 財団法人 原子力環境整備促進・資金管理センター: "平成 13 年度 高レベル放射性廃棄 物処分事業推進調査報告書 - 遠隔操作高度化調査 - ",(2002).
- 核燃料サイクル開発機構: "わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性 - 地層処分研究開発第2次取りまとめ-分冊2 地層処分の工学技術", JNC TN1400 99-022, (1999).
- 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・埋戻し材の透水特性", 電力中央研究所研究報告:U00041, (2001).
- 笹倉剛,畔柳幹雄,岡本通孝: "ベントナイト変遷挙動のモデル化のためのデータ取得および調査",核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書,JNC TJ8400 2002-025, (2002).
 中野政詩(1991): "土の物質移動学",東京大学出版会.
- 早川幸恵,小峯秀雄,千々松正和,六川武,平賀健史: "ベントナイトの膨潤特性に与える NaCl 濃度の影響",土木学会第 58 回年次学術講演会講演概要集,共通セッション, (2003).
- 松本一浩,菅野毅,藤田朝雄,鈴木英明: "緩衝材の飽和特性",動力炉・核燃料開発事業 団技術資料,JNC TN8410 97-296,(1997).

鈴木英明,柴田雅博,山形順二,広瀬郁郎,寺門一馬: "緩衝材の特性試験",動力炉・核

燃料開発事業団技術資料, PNC TN8410 92-057, (1992).

- 鈴木英明,藤田朝雄: "緩衝材の膨潤特性",核燃料サイクル開発機構技術資料,JNC TN8400 99-038, (1999).
- K.Pruess : "TOUGH2 User's Guide", Version 2.0 ,Earth Science Division,Ernest Orlando Berkeley National Laboratory, (1999).
付録:THMC 平成 15 年度版入力データマニュアル

1 入力データファイル

表 1-1 に THMC の入力データファイルー式を示す。次節より,表 1-1 に示す 10 個の入 カデータファイルの入力書式を記載する。なお,THMC のエラーに係る事項を 598 ページ 以降に示す。

入力データファイル	内容	ページ
INPUT.DAT	THAMES 入力データ (節点 , 要素 , 初期条件 , 境界	
	条件,時間ステップ)。	552
	ファイル名は"calcTHM"で指定。	
MATERIAL.DAT	THAMES の材料物性データ。ファイル名固定。	558
MAT_SW.DAT	THAMES の膨潤特性データ。ファイル名固定。	564
dtransu.dtra	Dtransu 入力データ(節点,要素,材料物性値,時	565
	間ステップ)。ファイル名は"dtra3d.run"で指定。	909
chem_cnc.dat	初期・境界溶液濃度データ。ファイル名固定。	571
ganma.dat	Dtransu の近似係数 , 。ファイル名固定。	573
addinp.dat	鉱物濃度,空隙率,体積含水率,真密度の初期入力	571
	データ。固定ファイル名。	074
mpc.dat	Multi_PHREEQC の入力データ。ファイル名固定。	576
phreeqc.inp	PHREEQC の入力データ。	E70
	ファイル名は"mpc.dat"で指定。	976
phreeqc_db.dat	熱力学データベース。	(注)
	ファイル名は"mpc.dat"で指定。	_ (/_)
control.dat	COUPLYS 制御データ。ファイル名固定。	583
data.dat	COUPLYS 共有メモリデータ。ファイル名固定。	587

表 1-1 入力データファイルの内訳一覧

注:地球化学コード PHREEQC の熱力学データに対して,新たにデータを加える場合は,鉱物名称は必ず2カラム目から入力する様に注意する。

2 入力書式

ここでは,表1-1に示した入力データファイルの入力書式を記載する。

(1) INPUT.DAT

THAMES のメイン入力データファイルである INPUT.DAT は,入力データ項目を判別す るためのヘッダーがなく,入力データ項目の順序が固定となっている。したがって,ここ では,まず,1行目,および2行目の解析をコントロールするデータについて記載した後, 後続する入力データ項目の入力書式を記載する。なお,THAMESの入力データファイルは, 後に説明する材料物性データ(MATERIAL.DAT,MAT_SW.DAT)も含め,すべて空白を データのセパレータとして FORTRAN 自由書式で入力する。

1) 1行目

NUMNP	NUMEL	ISFLG	ISTEAD	IJOINT	IEXCA	IUNIT	TIMOUT
NUMNI	P: 節点勢	汝					
NUMEL	」: 総要す	素数					
ISFLG :	現在	1のみ					
ISTEAD): 定常	・非定常解	所の指定(IS	TED=0:非	定常解析,	=1:定常解析)
IJOINT	: 現在	0のみ					
IEXCA :	: 掘削影	影響領域の	有無(IEXCA	=0:なし,	=1:あり)。	現在使用不	रन,
IUNIT :	単位到	系の指定。ヨ	現在未使用。	THAMES P	りの単位系に	t SI 単位系	である。
TIMOU	Γ: 解析約	詰果リストは	出力を開始す	る時間(時間	TIME>TI	MOUT)のと	:き出力)

2)2行目

	NSTEP	WGT						
--	-------	-----	--	--	--	--	--	--

NSTEP: 最大タイムステップ数

WGT: 重み

3) 節点座標と境界条件の定義(3行目~)

3行目からは,節点座標と境界条件を定義する。ここでは,節点数分繰り返す。

Ι	LY(I,1)	LY(I,2)	LY(I,3)	LY(I,4)	LY(I,5)	X(I)	Y(I)	$\mathbf{Z}(\mathbf{I})$

- I: 節点番号
- LY: 境界条件のフラグ(LY=1:固定境界,=0:自由境界)
- LY(I,1): X 軸方向変位に対する境界条件
- LY(I,2): Y 軸方向変位に対する境界条件
- LY(I,3): Z軸方向変位に対する境界条件
- LY(I,4): 水頭に対する境界条件
- LY(I,5): 温度に対する境界条件
- X(I): X座標值 [m]
- Y(I): Y座標値 [m]
- Z(I): Z座標値 [m]
- 4) 要素構成節点の定義

節点座標データに続き,要素構成節点を定義する。ここでは,まずAカードを定義した後,Bカードを要素数分繰り返す。

Aカード

B カード I MAT NP(1,I) ~ NP(14,I)	NUMMAT
I MAT NP(1,I) ~ NP(14,I)	В カード
	I MAT
$NP(15,I) \sim NP(20,I)$	/

NUMMAT :	材料物性データの数
NJOINT :	現在未使用(=0)
I :	要素番号
MAT :	材料物性番号

NP(1,I)~NP(20,I): 要素構成節点番号

5) 初期応力の定義

要素構成節点に続き,初期応力を定義する。ここでは,まずAカード(コメント行)を 挿入した後,Bカードを定義する。

Aカード

ST1				AT		
Bカード	2					
ST1	AT(1)	AT(2)	AT(3)			

ST1: 主応力 [Pa]

AT(1):X軸方向応力成分の係数[-]

AT(2): Y 軸方向応力成分の係数 [-]

AT(3): Z 軸方向応力成分の係数 [-]

6)初期水頭の定義

初期応力に続き,初期水頭を定義する。ここでは,まずAカード(コメント行)を挿入した後,Bカードを定義する。さらに,CカードをWLEV以外の値を初期状態で持つ節点の数だけ繰り返す。

Aカード

WLEV	/ NWEL	XMEL	SLEV	NWL		
В カー ド						
WLEV	NWEL	XMEL	SLEV	NWL		
Cカード						
Ι	WLV	NWEL				

WLEV: 水頭

NWEL: 定義方法(=0:水頭ポテンシャル[m],=1:圧力水頭[m],=2:水圧[Pa])

XMEL: 現在未使用

SLEV: 現在未使用

NWL: WLEV 以外の値を初期状態に持つ節点の数

I: 節点番号

WLV: 節点 I に対する水頭

7) 初期温度の定義

初期水頭に続き,初期温度を定義する。ここでは,まずAカードを定義した後,Bカードを TINI 以外の値を初期状態で持つ節点の数だけ繰り返す。

Aカード

TINI	ICONST			
Β カード	2			
Ι	TINIO			

TINI :	初期温度[]
		-

ICONSI. IINI 以外の値を初期状態に対し即品の	ICONST :	TINI 以外の値を初期状態に持つ節点の数
------------------------------	----------	-----------------------

I: 節点番号

 TINIO:
 節点 I に対する温度[]

8) 初期時間ステップの定義

初期温度に続き,初期時間ステップを定義する。

NCYCL	TIME	KEXCA	KEXCJ	IPRINT			
NCYCL	: 計算	続行判定フ	ラグ(=1:	次の時間ス	テップへ,=	0:計算終了	了)
TIME :	現在	現在の時間					
KEXCA	: 現在	現在未使用(掘削影響領域に関するフラグ)					
KEXCJ	EXCJ: 現在未使用(掘削影響領域			に関するフラ	ラグ)		

IPRINT: 出力の制御(=1~4:出力あり,=0:出力なし)

9) Neumann 型境界条件の定義

順番が前後するようであるが,初期時間ステップにつづき,応力の Neuman 型境界条件を定義する。ここでは,Aカードを定義した後,NFORCE だけ Bカードを定義し,その後,NVFORCE だけ Cカードを定義する。

Aカード

NFORCE	NVFOR	CE						
Вカード								
NNOD	FX	FY	FZ	QH	QT			
Cカード	Сカード							
NELM	QVH	QVT						

NFORCE: 表面外力を受ける節点の数

NVFORCE: 内力を受ける要素の数

NNOD: 節点番号

- FX: X方向の外力 [N]
- FY: Y方向の外力 [N]
- FZ: Z方向の外力 [N]
- QH: 流出入量 [m³/s]
- QT: 熱の流出入量 [W]
- NELM: 要素番号
- QVH:
 揚水(注水)量[m³]
- QVT: 発生(吸収)熱流量[W]

10)時間ステップの定義

応力の Neuman 型境界条件に続き,時間ステップを定義する。ここでは,まずAカードを定義する。Aカードの IPOS,および ITOS が0 でない場合,Bカード,Cカードを それぞれ IPOS, ITOS だけ繰り返す。また,ITRB が1の場合,前記した Neumann 型 境界条件を同一のフォームで入力する。

Aカード

NCYCL	TIME	IPOS	ITOS	ITRB	KEXCA	KEXCJ	IPRINT
Bカート	2						
Ι	WLV						

0 11 - 14				
Ι	TINIO			

- NCYCL: 計算続行判定フラグ(=1:次の時間ステップへ,=0:計算終了)
- TIME: 現在の時間 [h]または[d]
- IPOS: 水頭の Diriclet 型境界の値が変化する節点数
- ITOS: 温度の Diriclet 型境界の値が変化する節点数
- ITRB: 応力の Neumann 型境界の値が変化するとき 1 とし,前記した Neumann 型境界と同様のフォームで入力する。
- KEXCA: 現在未使用(掘削影響領域に関するフラグ)
- KEXCJ: 現在未使用(掘削影響領域に関するフラグ)
- IPRINT: 出力の制御(=1~4:出力あり,=0:出力なし)

(2) MATERIAL.DAT

MATERIAL.DAT は,"/"で囲まれた 8 文字のフラッグ(例えば,"/MATO/")以降のデ ータを FORTRAN 自由書式で読み込んでいる。MATERIAL.DAT 中のフラグの直後にあ る変数名並びは,その後に続くデータに対応している。以下,各フラッグに入力書式を記 載する。なお,各フラッグの入力順序は任意である。

1) /MAT0/

フラッグ/MAT0/では,間隙水の非線形性に関するデータと,水や重力などを定義する。 /MAT0/は,次に示す3行のコメント行(Aカード)に続き,B,C,Dカードを挿入する。

Aカード

IDNSTY	IVISCO	ISPEC				
DFI	BETAT	BETAP	TMPO	PRSO		
DENSW	VISW	SPECV	W GRAV	VITY		
Bカード	2					
IDNSTY	IVISCO	ISPEC				
Cカード	:					
DFI	BETAT	BETAP	ТМРО	PRSO		
D カード	2					
DENSW	VISW	SPECW	GRAVITY			

IDNSTY: 水の密度に関するフラッグ

- =0: 定数(=DENSW)
- =1: 温度と圧力の関数

 $FLDENS = DFI \times (1 - BETAT \times (T - TMPO) + BETAP \times (P - PRSO))$

- IVISCO: 水の粘性に関するフラッグ
 - =0: 定数(=VISW)
 - =1: 温度と圧力の関数(テーブル)
 - =2: 温度と圧力の関数(関数)

$$EVIS = 2.4 \times 10^{-5} \times 10^{\left(\frac{248.37}{ET} + 133.15\right)} \times \left(1 - \frac{170}{98} \times 10^{-9} \times PNOW\right)$$

ISPEC: 水の比熱に関するフラッグ

=0: 定数(=SPECW)

=1: 現在未使用(温度と圧力の関数)

DFI: 水の密度に関するパラメータ [kg/m³]

- BETAT: 水の密度に関するパラメータ[1/]
- BETAP: 水の密度に関するパラメータ [1/Pa]
- TMPO: 基準温度[]
- PROSO: 基準圧力 [Pa]
- DENSW: 水の密度(基準) [kg/m³]
- VISW: 水の動粘性係数 [Pa・s]
- SPECW: 水の比熱 [J/(kgK)]
- GRAVITY: 重力加速度 [m/s²]

```
2) /MAT2/
```

フラッグ/MAT2/では,各材料の物性値のタイプ(定数,関数など)を定義する。/MAT1/ は,1行のコメント行(Aカード)に続き,Bカードを挿入する。

Aカード

	II MFLG(1)	2	3	4	5 6	7	8	
	В カード							
ſ	MFLG(1)	MFLG(2)	MFLG(3)	MFLG(4)	MFLG(5)	MFLG(6)	MFLG(7)	MFLG(8)

- MFLG(1): ヤング率の非線形性
 - =0: 定数(=YUNG)
 - =2: 関数 $YUNG = (YUNG_1 + YUNG_2 \times WATERCONTENT) \times 10^6$
- MFLG(2): クラックテンソル
 - =1: 有効
 - =0: 無効

MFLG(3) : FVP

=1: 考慮しない

=0: スウェリングを考慮する

- MFLG(4): 水分拡散係数または比透水係数
 - =1: 水分拡散係数が定数
 - =2: 水分拡散係数が関数

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

- =11: 飽和透水係数が定数
- =12: 飽和透水係数が飽和度の関数 $kr = Sr^n$
- =13: 飽 和 透 水 係 数 が VG+Mualem モ デ ル

$$kr = Se^{\frac{1}{2}} \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}}\right)^m \right]^2$$

MFLG(5): DVTT(流量に関するパラメータ)

=0: 考慮しない

=1: 定数(=DVT)

=2: 関数
$$DVTT = DVT \times e^{ALFT \times (TEMP - TTO)/TTO}$$

MFLG(6): 温度に関するパラメータ

=0: 定数

 $RHOSPC = (SR(N) \times FLDENS \times ACVF + (1 - POR(N)) \times EROUS(N) \times GRAVITY \times ACVS)$

=2: 関数(2000年レポート参照)
_K=TP1+TP2×_w+TP3×_w²+TP4×_w³
_C=
$$\frac{(TP6+TP7\times_w)}{(TP5-_w)}$$

=12 : temporary...

 $RHOSPC = (SR(N) \times FLDENS \times ACVF + (1 - POR(N)) \times EROUS(N) \times DENSW \times ACVS)$ $\Box \subset \overline{C},$

$$ACVS = 1.38 \times T + 732.5$$
$$THCOND = \frac{(1.28 - 0.71)}{(1 + e^{CON})}$$
$$CON = \frac{SR(N) - 0.65}{0.1}$$

MFLG(7): θ(体積含水率)-Ψ(サクション), Kr(不飽和透水係数), 水分拡散係数の間の関係

=0: 定数
=1: 関数(テーブル)
=2: VAN GENUCHTEN モデル
$$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left[1 + (\alpha \psi)^n\right]^{-m}$$
=3: 修正 VAN GENUCHTEN モデル
$$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left[1 + (\alpha \psi)^n\right]^{-m} \times \left[1 - \alpha' \psi\right]^{m'}$$
透水性の非線形性

=0: 考慮しない

MFLG(8):

=1: 乾燥密度の関数

 $k = e^{(-2.96 \times dryd - 8.57)}$

3) /MAT3/

フラッグ/MAT3/では,各材料の物性値を与えるためのフラッグを定義する。/MAT3/は, 10行のコメント行(Aカード)に続き,Bカードを挿入する。Bカードは,材料数だけ 繰り返す。

Aカ	ード
----	----

Ι	YUNG(I)	ENU(I)	GAMMA	(I) EVOII	D(I) ROUS(I)	
	EK(1,I)	EK(2,I)	EK(3,I)			
	CVE(I)	AKTF(I)	AKTS(I)	THEX(I)		
	DVT(I)	TTO(I)	ALFT(I)	AAL(I)		
	DTA11(I)	DTA12(I)	DTA21(I)	DTA22(I)		
	DTB10(I)	DTB21(I)	DTA22(I)	DTTHS()	[)	
	XTS(I)	XTR(I)	XAA(I)	XAN(I)		
	TP1(I)	TP2(I)	TP3(I)	TP4(I)	TP5(I)	
	TP6(I)	TP7(I)				
	YUNG_1(I)	YUNG_2	5(I)			

Bカード

Ι	YUNG(I)	ENU(I)	GAMMA(I)	EVOID(I)	ROUS(I)	
	EK(1,I)	EK(2,I)	EK(3,I)			
	CVE(I)	AKTF(I)	AKTS(I)	THEX(I)		
	DVT(I)	TTO(I)	ALFT(I)	AAL(I)		
	DTA11(I)	DTA12(I)	DTA21(I)	DTA22(I)		
	DTB10(I)	DTB21(I)	DTA22(I)	DTTHS(I)		
	XTS(I)	XTR(I)	XAA(I)	XAN(I)		
	TP1(I)	TP2(I)	TP3(I)	TP4(I)	TP5(I)	
	TP6(I)	TP7(I)				
	YUNG_1(I)	YUNG_2(I)				

I: 材料番号

YUNG(I):	縦弾性係数 [Pa]
ENU(I):	ポアソン比 [-]
GAMMA(I):	横弾性係数 [Pa]
EVOID(I):	空隙比[-]
ROUS :	比重 [-]

```
X軸方向の固有透過度 [m<sup>2</sup>]
EK(1,I):
EK(2,I):
          Y軸方向の固有透過度 [m<sup>2</sup>]
          Z軸方向の固有透過度 [m<sup>2</sup>]
EK(3,I):
          土の比熱 [J/kg ]
CVE(I):
AKTF(I) :
          水の熱伝導率 [W/(mK)]
AKTS(I) :
          土の熱伝導率 [W/(mK)]
THEX(I):
          流量に関するパラメータ [m<sup>2</sup>/(s)]
DVT(I):
          基準温度[]]
TTO(I):
ALFT(I):
          温度勾配水分拡散係数に関するパラメータ[-]
AAL(I):
DTA11(I):
          水分拡散係数に関するパラメータ [-]
DTA12(I):
          水分拡散係数に関するパラメータ [-]
          水分拡散係数に関するパラメータ [-]
DTA21(I):
DTA22(I):
          水分拡散係数に関するパラメータ [-]
          水分拡散係数に関するパラメータ [-]
DTB10(I):
DTB21(I):
          水分拡散係数に関するパラメータ [-]
          水分拡散係数に関するパラメータ [-]
DTA22(I):
DTTHS(I):
XTS(I):
          VG パラメータ \theta_{s}[-]
XTS(I):
          VG パラメータ θ_r[-]
XTS(I):
          VG パラメータ α[1/m]
          VG パラメータ n[-]
XTS(I):
          熱に関するパラメータ[-]
TP1(I):
TP1(I):
          熱に関するパラメータ[-]
          熱に関するパラメータ[-]
TP2(I):
TP3(I):
          熱に関するパラメータ[-]
TP4(I):
          熱に関するパラメータ[-]
          熱に関するパラメータ[-]
TP5(I):
TP6(I):
          熱に関するパラメータ[-]
TP7(I):
          熱に関するパラメータ[-]
```

4) /MAT1/

フラッグ/MAT1/では,体積含水率-不飽和透水係数,体積含水率-サクション,体積 含水率-水分拡散係数のデータセット数を定義する。/MAT1/は,1行のコメント行(A カード)に続き,Bカードを材料数だけ繰り返す。

А	カ	—	ド
---	---	---	---

11	NUMK	NUMF	P NUI)T *	NUMMAT	
Bカード	2					
11	NUMK	NUMP	NUDT			

JJ: 材料物性番号

NUMK: 体積含水率 - 不飽和透水係数のデータセット数

NUMP: 体積含水率 - サクションのデータセット数

NUDT: 体積含水率 - 水分拡散係数のデータセット数

5) /MAT4/

フラッグ/MAT4/では,各材料の不飽和特性を定義する。/MAT4/は,1行のコメント行 (A カード)に続き,体積含水率のテーブルを表す B カード,飽和透水係数のテーブル を表す C カード,サクションのテーブルを表す D カード,水分拡散係数のテーブルを表 す E カードを挿入する。ここで,B,C カードの組は,/MAT1/の NUMK が0でないと き,NUMK の値だけ挿入する。B,D カードの組,および B,E カードも同様に,それ ぞれ/MAT1/の NUMP,NUDT が0でないとき挿入する。また,これらの不飽和特性は, 材料数だけ繰り返す。

Aカード

UNSATURATED PROPERTIES IN MATIN

Bカード

SATV(JJ,1)	SATV(JJ,2)	SATV(JJ,3)	SATV(JJ,4)	SATV(JJ,5)	SATV(JJ,6)	SATV(JJ,7)
SATV(JJ,8)	SATV(JJ,9)	SATV(JJ,1	SATV(JJ,11	SATV(JJ,1	SATV(JJ,1	SATV(JJ,1
		0))	2)	3)	4)
•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•
SATV(JJ,N	SATV(JJ,N					
UMK-1)	UMK)					

Cカード

$r_k(JJ,1)$	rk(JJ,2)	rk(JJ,3)	rk(JJ,4)	rk(JJ,5)	rk(JJ,6)	rk(JJ,7)
rk(JJ,8)	rk(JJ,9)	rk(JJ,10)	$r_k(JJ,11)$	rk(JJ,12)	rk(JJ,13)	rk(JJ,14)
•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•
rk(JJ,NUMK-1)	rk(JJ,NUMK)					

Β カード

SATV(JJ,1)	SATV(JJ,2)	SATV(JJ,3	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ
)	,4)	,5)	,6)	,7)

SATV(JJ,8)	SATV(JJ,9)	SATV(JJ,1	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ
		0)	,11)	,12)	,13)	,14)
•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•
SATV(JJ,NU	SATV(JJ,N					
MP-1)	UMP)					

Dカード

ψ(JJ,1)	ψ(JJ,2)	ψ(JJ,3)	ψ(JJ,4)	ψ(JJ,5)	ψ(JJ,6)	ψ(JJ,7)
$\Psi(JJ,8)$	ψ(JJ,9)	ψ(JJ,10)	ψ(JJ,11)	ψ(JJ,12)	ψ(JJ,13)	ψ(JJ,14)
•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•
ψ(JJ,NUMP-	ψ(JJ,NUMP					
1))					

Bカード

SATV(JJ,1)	SATV(JJ,2)	SATV(JJ,3	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ
)	,4)	,5)	,6)	,7)
SATV(JJ,8)	SATV(JJ,9)	SATV(JJ,1	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ	SATV(JJ
		0)	,11)	,12)	,13)	,14)
•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•
SATV(JJ,NU	SATV(JJ,N					
MT-1)	UMT)					

Eカード

$D_{\theta}(JJ,1)$	$D_{\theta}(JJ,2)$	$D_{\theta}(JJ,3)$	$D_{\theta}(JJ,4)$	$D_{\theta}(JJ,5)$	$D_{\theta}(JJ,6)$	$D_{\theta}(JJ,7)$
$D_{\theta}(JJ,8)$	$D_{\theta}(JJ,8)$ $D_{\theta}(JJ,9)$		$D_{\theta}(JJ,11$	$D_{\theta}(JJ, 12$	$D_{\theta}(JJ, 13$	$D_{\theta}(JJ, 14$
))))
•	•	•	•	•	•	•
•	• •		•	•	•	•
D ₀ (JJ,NUMT-	D ₀ (JJ,NUM					
1)	T)					

(3) MAT_SW.DAT

THAMES の材料物性入力データファイルである MAT_SW.DAT は,OPEN 文で開かれ た後,"/"で囲まれた 8 文字のフラッグ(例えば,"/MATO/")を探し出し,それ以降のデ ータを読み込んでいる。MATERIAL.DAT 中のフラグの直後にある各変数名は,その後 に続くデータに対応している。以上より,ここでは,各フラッグに入力書式を記載する。 なお,各フラッグの順序は決まっていない。また,本入力ファイルのデータは,自由書式 形式で入力することになっている。 (4) dtransu.dtra

Dtransuのメイン入力データファイルである dtransu.dtra は,入力ラベルに続き,デー タを入力する形式となっている。dtransu.dtra を作成する際の注意事項として,次の4項 目が挙げられる。

ラベルの入力順序は,自由である。同じラベルが重複して入力された場合は,最後に 入力されたものが認識される。

タイトルデータを除いて,1カラム目に"/"が入力されるとそのデータはコメントと見なす。

入力データはフィールド内右寄せを原則とし,固定フォーマット入力とする。

入力データは,解析タイプに必要なラベルのみ入力すること。解析タイプに対し,過 不足のラベルはエラーとなる。

THMCの解析に必要なラベルは ,DT3D ,MATERIAL ,MTABLE ,NODES ,ELEMENTS , TIMESTEP の 6 個である。以下,これら 6 個のラベルについて記載する。 1) DT3D

DT3D は , 解析をコントロールするデータであり , 次の 3 行から構成される。

DT3D

MODE KAN1 KAN2 KAT INIT MAXIT INTEG NCUL DTMIN NINT IPC1,2,3,4,5 TOL IDL IDT

KAN3 DENF GANMA TOLC KVELF TITLE

行	変数名	カラム	内容	入力 書式
	MODE	1~5	=0:データチェック	A5
1			=1:本実行	
1			=-n:再実行(定常→定常,非定常→非定常)	
			=*n:再実行(定常→非定常,非定常→定常)	
	KAN1	7~8	=0:定常解析	I2
			=1:非定常解析	
			=2:浸透流のみ定常解析(流れ場一定),移流・分散	
			は非定常解析	
	KAN2	9~10	=0:飽和解析(被圧)	I2
			=1:飽和・不飽和解析	
	KAT	10~15	=3:3次元(X-Y-Z)アイソパラメトリック要素	I5
	INIT	$15 \sim 20$	=0:初期水頭分布を圧力水頭で入力	I5
			=1:初期水頭分布を全水頭で入力	
	MAXIT	21~25	各解析時間ステップにおける最大反復計算数	I5
	INTEG	26~30	=1:時間積分方法 後退差分	15
			=2:時間積分方法 中央差分	
	NCUL	31 ~ 35	時間分割繰り返し数	I5
	DTMIN	36~45	最小時間増分	F10.0
	NINT	46~50	ガウスの積分次数(2,3,4より選択)	I5
	IPC1	51	=1:エコープリントを印刷しない	I1
			=0:エコープリントを印刷する	
	IPC2	52	=0:ジェネレートデータを印刷しない	I1
			=1:ジェネレートデータを印刷する	
			=2:ジェネレートデータの節点,要素データを除いて	
			印刷する	
	IPC3	53	=0:解析結果を印刷しない	I1
			=1:解析結果を印刷する	
			=2:収束状況の詳細情報と結果を印刷する	

	IPC4	54	=0:体積含水率を印刷しない	I1
			=1:体積含水率を印刷する	
	IPC5	55	=0:流速ベクトルを印刷しない	I1
			=1:流速ベクトルを印刷する	
	TOL	$56 \sim 65$	圧力水頭収束判定許容値	F10.0
	IDL	67 ~ 70	モデルの長さの単位	A4
	IDT	72 ~ 75	時間の単位	A4
	KAN3	1~5	=0:浸透流解析のみ	I5
			=1:浸透流 + 移流・分散解析	
			=2:密度勾配を考慮した浸透流 + 移流・分散解析	
	DENF	6~15	水の密度(溶媒の密度)	F10.0
	GANMA	$16 \sim 25$	溶質の密度比(海水ならば , GANMA=0.023)	F10.0
	TOLC	26~35	濃度収束判定許容値	F10.0
	KVELF	36~40	=0:節点の流速を有限要素メッシュから計算	I5
			=1:要素流速の体積重み平均を節点の流速とする	
3	TITLE	1~80	タイトル 	A80

2) MATERIAL

MATERIALは,材料物性値を定義するデータであり,次の2行から構成される。

MATERIAL

MAT MTBL K1 K2 K3 POR SS ALFAL ALFAT DIFFC RETRA DECAY

- L1 L2 L3
- M1 M2 M3
- N1 N2 N3

行	変数名	カラム	内容	入力 書式
	MAT	1~5	材料番号(301~399)	I5
	MTBL	6~10	非線形型テーブルのテーブル番号	I5
	K1	$11 \sim 20$	透水係数の X 軸方向成分 [m/s]	F10.0
1	K2	21~30	透水係数の Y 軸方向成分 [m/s]	F10.0
	K3	31~40	透水係数の Z 軸方向成分 [m/s]	F10.0
	POR	$41 \sim 50$	有効間隙率(未使用)	F10.0
	\mathbf{SS}	$51 \sim 60$	非貯留係数(未使用)	F10.0
	ALFAL	$11 \sim 20$	縦分散長 [m]	F10.0
	ALFAT	21~30	横分散長 [m]	F10.0
2	DIFFC	31~40	拡散係数 [m²/s]	F10.0
	RETRA	$41 \sim 50$	遅延係数 [-]	F10.0
	DECAY	$51 \sim 60$	減衰係数 [1/y]	F10.0
3			空白	
4			空白	
5			空白	

3) MTABLE

MTABLE は,材料の非線形性(飽和度と透水係数比,飽和度とサクション圧の非線形 関係)を定義するデータであり,非線形テーブルの数だけ定義する。

MTBL NUMKM NUMPM

Sw1	Kr1	Sw2	Kr2	Sw3	Kr3	Sw4	Kr4
Sw5	Kr5	Sw6	Kr6	Sw7	Kr7	Sw8	Kr8

•

Sw(NUMKM-1) Kr5(NUMKM-1) Sw6(NUMKM) Kr6(NUMKM)

Sw1	φ1	Sw2	φ2	Sw3	φ3	Sw4	φ4
Sw5	$\phi 5$	Sw6	φ6	Sw7	φ7	Sw8	φ8
				•			
				•			
				•			

•

Sw(NUMPM-1) φ5(NUMPM-1) Sw6(NUMPM) φ6(NUMPM)

行	変数名	カラム	内容	入力 書式
	MTBL	$1 \sim 5$	非線形テーブル番号	I5
1	NUMKM	6~10	飽和度[%] - 透水係数比[-]テーブル組数	I5
	NUMPM	$11 \sim 15$	飽和度[%] - サクション圧[Pa]テーブル組数	I5
9	Sw , Kr	$1 \sim 80$	飽和度[%] - 透水係数比[-]テーブル	8F10.0
2~	Sw, φ	$1 \sim 80$	飽和度[%] - サクション圧[Pa]テーブル	8F10.0

4) NODES

NODESは,節点座標値を定義するデータであり,節点の数だけ定義する。

NODE X Y Z

行	変数名	カラム	内容	入力 書式
1	NODE	1~8	節点番号	I5
	Х	13~20	X 座標値	F8.0
	Y	21~28	Y座標値	F8.0
	Ζ	29~36	Z座標值	F8.0

4) ELEMNTS

ELEMENTS は,要素構成節点を定義するデータであり,要素の数だけ定義する。

ELEM NOD1 NOD2 NOD3 NOD4 NOD5 NOD6 NOD7 NOD8 MAT

行	変数名	カラム	内容	入力 書式
	ELEM	1~8	要素番号	I8
	NOD1	9~16	1番目の要素構成節点	I8
	NOD2	$17 \sim 24$	2番目の要素構成節点	I8
	NOD3	25 ~ 32	3番目の要素構成節点	I8
1	NOD4	33~40	4番目の要素構成節点	I8
1	NOD5	41~48	5 番目の要素構成節点	I8
	NOD6	$49 \sim 56$	6番目の要素構成節点	I8
	NOD7	$57 \sim 64$	7 番目の要素構成節点	I8
	NOD8	$65 \sim 72$	8番目の要素構成節点	I8
	MAT	73~76	材料番号	I4

5) TIME STEP

TIME STEP は,非定常解析における時間ステップを定義するデータであり,時間ステップの数だけ定義する。

TS NDIV

行	変数名	カラム	内容	入力 書式
1	TS	1~10	指定解析時間	E15.9
	NDIV	$11 \sim 15$	時間分割数	15

(5) chem_cnc.dat

chem_cnc.dat は,1行目に元素数を定義し(データセット1),2行目から元素名,ガス 拡散に関するデータを定義する(データセット2)。ガス拡散に関するデータは,ガス成分 に対応する元素名(CO2→C,H2→H2(aq),N2→N,O2→O2(aq))と同一行にガス拡散係 数×屈曲度,および温度依存係数を入力する。データセット2に続き,節点溶液濃度データ (データセット3)を入力する。元素が複数ある場合,データセット3を元素数だけ繰り返 す。

データセット1 NXCHEM MAT20(1) GASDIFF(1) TCON(1) AMOL(1) MAT20(2) GASDIFF(2) TCON(2) AMOL(2) MAT20(3) GASDIFF(3) TCON(3) AMOL(3) データセット2 • MAT20(NXCHEM) GASDIFF(NXCHEM) TCON(NXCHEM) AMOL(NXCHEM) _ _ _ _ _ _ _ _ _ _ _ _ _ _____ MAT20(1) NNOD(1) KODEC20(1,1) CNC20(1,1) CQ20(1,1) MAT20(2) NNOD(2) KODEC20(2,1) CNC20(2,1) CQ20(2,1) MAT20(1) NNOD(NUMNP) KODEC20(NUMNP,1) CNC20(NUMNP,1) CQ20(NUMNP,1) MAT20(2) NNOD(1) KODEC20(1,2) CNC20(1,2) CQ20(1,2) MAT20(2) NNOD(2) KODEC20(2,2) CNC20(2,2) CQ20(2,2) MAT20(2) NNOD(NUMNP) KODEC20(NUMNP,2) CNC20(NUMNP,2) CQ20(NUMNP,2) データセット3 MAT20(NXCHEM) NNOD(1) KODEC20(1,NXCHEM) CNC20(1,NXCHEM) CQ20(1,NXCHEM)

MAT20(NXCHEM) NNOD(2) KODEC20(2,NXCHEM) CNC20(2,NXCHEM) CQ20(2,NXCHEM) •

MAT20(NXCHEM)

• •

NNOD(NUMNP) KODEC20(NUMNP,NXCHEM) CNC20(NUMNP,NXCHEM) CQ20(NUMNP,NXCHEM)

データ セット	変数名	カラム	内容	入力 書式
1	NXCHEM	1~5	元素数	I5
	MAT20(I)	1~4	元素番号Iの元素名	A4
9	-	5	空白	
2	GASDIFF(I)	$6 \sim 15$	ガス拡散係数×屈曲度	F10.0
	TCON(I)	26~35	温度依存係数	F10.0
	AMOL(I)	36~45	分子量[g/mol]	F10.0
	-	1~4	空白	A4
	-	5	空白	
	KODEC20(J,I	$11 \sim 15$	節点Jにおける元素Iの濃度境界条件	I5
3)		=0:自由境界	
			=1:固定境界	
	CNC20(J,I)	$16 \sim 25$	節点Jにおける元素Iの溶液濃度	F10.0
	CQ20(J,I)	$26 \sim 35$	節点Jにおける元素Iの濃度フラックス	F10.0

(6) ganma.dat

ganma.dat は,各要素における補正係数 ɛ,および温度を入力する。元素が複数ある場合,元素数だけデータセットを繰り返す。

_____ MAT(1) NNEL(1) GRETA(1,1) ERETA(1,1) ETEMP(1) MAT(1) NNEL(2) GRETA(2,1) ERETA(2,1) ETEMP(2) • データセット MAT(1) NNEL(NUMEL) GRETA(NUMEL,1) ERETA(NUMEL,1) ETEMP(NUMEL) MAT(2) NNEL(1) GRETA(1,2) ERETA(1,2) ETEMP(1) MAT(2) NNEL(2) GRETA(2,2) ERETA(2,2) ETEMP(2) • データセット • MAT(2) NNEL(NUMEL) GRETA(NUMEL,2) ERETA(NUMEL,2) ETEMP(NUMEL) MAT(NXCHEM) NNEL(1) GRETA(1,NXCHEM) ERETA(1,NXCHEM) ETEMP(1) MAT(NXCHEM) NNEL(2) GRETA(2,NXCHEM) ERETA(2,NXCHEM) ETEMP(2) . データセット • MAT(NXCHEM) NNEL(NUMEL) GRETA(NUMEL,NXCHEM) ERETA(NUMEL,NXCHEM) ETEMP(NUMEL)

行	変数名	カラム	内容	入力 書式
1~	MAT20(I)	1~4	元素番号Iの元素名	A4
節点	-	5	空白	
数	NNEL(I)	6~15	要素番号	I5

GRETA(I,J)	$15 \sim 25$	要素 I における元素 J の初期修正 _Y (現在未使	F10.0
		用)	
ERETA(I)	26~35	要素 I における元素 J の初期修正 ε	F10.0
ETEMP(I)	36~45	要素 I の温度[K]	F10.0

(7) addinp.dat

addinp.dat は,鉱物データ,初期体積含水率,空隙率,真密度を定義する。次に addinp.dat の例を示す。なお,本ファイルの入力は,Namelist 形式を用いているので,変数を定義し ている行は","で終わること。また,本ファイルについては"DOS"形式(CR+LF)改行ではな く、UNIX 形式(LF)改行となるように注意すること。

例)

<< sample >> &INPUT nreg = 1, 領域数 nodreg(1)=10*1,要素に対する領域番号の定義 satinit(1)=10*0.16875, 各要素に対する初期体積含水率 [-] 各要素に対する初期空隙率 [-] epsinit(1)=10*0.33, truedens(1)=10*2713.070478, 各要素に対する真密度 [kg/m³] iperm=1, 空隙率・乾燥密度・透水係数変化モジュールの有無 緩衝材領域の指定(緩衝材のとき1を設定) bflag(1)=1,各領域に存在する鉱物数(平衡モデル) aiRminnum(1)=1, 各領域に存在する鉱物名(平衡モデル) aiRname(1,1)='CALCITE', aiRwgt(1,1)=10*100.0, 各領域に存在する鉱物の分子量 [g/m³] (平衡モデル) aiRmol(1,1)=10*1.0e-3, 各領域に存在する鉱物の初期濃度 [mol/m³_Cell](平衡 モデル) aiRkminnum(1)=1, 各領域に存在する鉱物数(速度モデル) 各領域に存在する鉱物名(速度モデル) aiRkname(1,1)='CALCITE', aiRkwgt(1,1)=10*100.0, 各領域に存在する鉱物の分子量 [g/mol] (速度モデル) aiRkmol(1,1)=10*1.0e-3, 各領域に存在する鉱物の初期濃度 [mol/m³_Cell](速度 モデル) &END

addinp.dat の入力方法

,

1. 一次元配列変数(nodreg, satinit, epsinit, turedens, bflag, aiRminnum など) 例) 要素 1~10 を領域 1, 要素 11~20 を領域 2, 要素 21~30 を領域 3 とする場合

		nodreg(1)=10*1,
nodreg(1)=10*1,10*2,10*3,	または	nodreg(11)=10*2,
		nodreg(21)=10*3

2. 二次元配列変数(aiRname, aiRwgt, aiRmol など)

例)領域1に Calcite, Pyrite, 領域2に Calcite, Smectite, Gypsum を入植する場合,

aiRname(1,1)='Calcite', aiRname(2,1)='Pyrite', aiRname(1,2)='Calcite', aiRname(2,2)='Smectite', aiRname(3,2)='Gypsum'

変数名	単位	内容
& INPUT		
nreg	-	領域数 7
nodreg(8000)	-	要素に対する領域番号
satinit(10000)	-	要素に対する初期体積含水率
epsinit(10000)	-	要素に対する初期空隙率
truedens(10000)	kg/m ³	要素に対する真密度
iperm	-	空隙率,乾燥密度,透水係数の計算オプション
		=1:計算する。=0:計算しない。
bflag(7)	-	緩衝材領域の指定
aiRminnum(7)	-	領域に存在する鉱物数(平衡モデル)
aiRminname(10,7)	-	領域に存在する鉱物名(平衡モデル)
aiRmol(10,7)	mol/m ³ _cell	初期鉱物濃度(平衡モデル)
aiRwgt(10,7)	g/mol	初期鉱物の分子量(平衡モデル)
aiRkminnum(7)	-	領域に存在する鉱物数(速度モデル)
aiRkminname(10,7)	-	領域に存在する鉱物名(速度モデル)
aiRkmol(10,7)	mol/m ³ _cell	初期鉱物濃度(速度モデル)
aiRkwgt(10,7)	g/mol	初期鉱物の分子量(速度モデル)
&END		

(注) & INPUT---& END で挟まれたブロックにあるデータの入力順序は任意である。

(8)mpc.dat

mpc.dat は, Malti_PHREEQC の入力データであり,要素数,使用する CPU の数,出力 ファイルの指定方法,熱力学データベース,PHREEQC 入力ファイルなどを定義する。次 に mpc.dat の例を示す。なお,"#"以降はコメントである。

例)		
10		# No. of elements
2		# No. of CPUs
011		<pre># option [deletion] [standard out] [output type]</pre>
phreeqc_db.dat		# PHREEQC thermodynamic database file
phreeqc.inp	1-10	# PHREEQC input file
-1		
sample.out		# MultiPHREEQC output

行	カラム	内容
1	1	要素数
2	1	CPU の個数
3	1	PHREEQC 出力ファイルを, Multi_PHREEQC 実行後に削除する か否かを指定する。 0 - 削除しない。 1 - 削除する。
	2	PHREEQC からコンソールへの出力を表示するか否かを指定する。 0 - 表示しない。 1 - 表示する。
	3	 Multi_PHREEQC の出力ファイルに出力される内容を指定する。 0 - 出力なし。 1 - PHREEQC の出力ファイルを全て出力する。 2 - PHREEQC の出力ファイル中で、「Beginning of batch-reaction calculations」以降のデータのみを出力する。
4	1	PHREEQC の熱力学DBファイル名
5 行目	1	PHREEQC の入力ファイル名
以降	2	対応要素番号「,」「-」で区切って複数指定可能例)1No.1 の要素の入力ファイル2,3No.2 と No.3 の要素の入力ファイル4-6No.4 から No.6 の要素の入力ファイル
r-1 ر	1	入力ファイルの指定終了
次行	1	Multi_PHREEQC 出力ファイル名

(9) phreeqc.inp

phreeqc.inp は, mpc.dat で定義される PHREEQC の入力データである。PHREEQC の入力 データのマニュアルは, ソースプログラム同様 <u>http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC coupled/phreeqc/</u>からダウンロードできるため, ここでは, THMC に必要な入力項目についてのみ記載する。

<u>SOLUTION データブロック</u>

SOLUTION データブロックは, pH, pe, 温度, および元素を定義する。次に SOLUTION データブロックの例を示す。

例)

SOLUTION 1 sample1-1

units	mol/kgw
pН	7.00
pe	5.00
density	1.000
temp	45.0
Ca	1.0E-10
С	1.0E-10

<u>EQUILIBRIUM_PHASES データブロック</u>

EQUILIBRIUM_PHASES データブロックは,鉱物を定義する。次に EQUILIBRIUM_PHQSEデータブロックの例を示す。

例)

EQUILIBRIUM_PHASES 1

Calcite	0.0	10.0
Pyrite	0.0	10.0
Chalcedy	0.0	10.0
Magnetit	0.0	0.0
Anhydrit	0.0	7.76e-2
Sylvite	0.0	1.64e-3
Halite	0.0	5.23e-4

GAS_PHASE データブロック

GAS_PHASE データブロックは,初期分圧,温度,気相体積,および各ガス成分の初期 分圧を定義する。次に GAS_PHASE データブロックの例を示す。

例)

GAS_PHASE 1 sample 1-1

-fixed_volume	
-volume	1.0
-temperature	45.0
O2_gas	0.2000000
PCO2	0.0003160

REACTION データブロック

REACTION データブロックは,各成分の不可逆反応の量を定義する。次に REACTION データブロックの例を示す。

例)

REACTION 1	
O2_gas	0.0000000
PCO2	0.0000000
Anhydrit	1.0000000

RATES データブロック

RATES データブロックは,鉱物の速度論モデルを定義する。次に RATES データブロックの例を示す。

例)

RATES

Calcite

-start

- $1 \quad \text{rem M} = \text{current number of moles of calcite}$
- 2 rem M0= number of moles of calcite initially present
- 3 rem PARM(1) = A/V, cm²/L
- 4 rem PARM(2) = exponent for M/M0

```
10 si_cc = SI("Calcite")
```

- 20 if (M <= 0 and si_cc < 0) then go o 200
- $30 k1 = 10^{(0.198 444.0 / TK)}$
- 40 $k_2 = 10^{(2.84 2177.0 / TK)}$
- 50 if TC <= 25 then $k_3 = 10^{(-5.86 317.0 / TK)}$
- 60 if TC > 25 then k3 = $10^{(-1.10 1737.0 / TK)}$
- 70 t = 1
- 80 if M0 > 0 then t = M/M0
- 90 if t = 0 then t = 1
- 100 area = $PARM(1) * (t)^PARM(2)$
- 110 rf = k1*ACT("H+")+k2*ACT("CO2")+k3*ACT("H2O")
- 120 rem 1e-3 converts mmol to mol
- 130 rate = area * 1e-3 * rf * $(1 10^{(2/3*si_cc)})$
- 140 moles = rate * TIME

200 SAVE moles

-end

<u>KINETICS データブロック</u>

KINETICS データブロックは,速度論モデルに関するパラメータを定義する。次に KINETICS データブロックの例を示す。

例)

```
KINETICS 1
Calcite
-m 1.0E-1
-m0 1.0e-1
-parms 5.0 0.3
-tol 1e-8
-steps 1.0e-10 # seconds
-step_divide 100
-runge_kutta 6
```

<u>EXCHANGE_MASTER_SPECIES データブロック</u>

EXCHANGE_MASTER_SPECIES データブロックは、イオン交換化学種に対応するイオン交換サイトの名前を定義する。次に EXCHANGE_MASTER_SPECIES データブロック

JNC TJ8400 2004-004

の例を示す。

例)

EXCHANGE_MASTER_SPECIES

Z Z-

<u>EXCHANGE_SPECIES データブロック</u>

EXCHANGE_SPECIES データブロックは, 各イオン交換化学種の half_reaction と logK を定義する。次に EXCHANGE_SPECIES の例を示す。

例)

EXCHANGE_SPECIES $Z^- = Z^ \log_k 0.0$ $Z^- + Na^+ = NaZ$ $\log_k 20.0$ $Z^- + K^+ = KZ$ $\log_k 20.42$ $2Z^- + Mg^+2 = MgZ2$ $\log_k 40.67$ $2Z^- + Ca^+2 = CaZ2$ $\log_k 40.69$ $Z^- + H^+ = ZH$ $\log_k 21.18$

<u>SURFACE_MASTER_SPECIES データブロック</u>

SURFACE_MASTER_SPECIES データブロックは,表面反応化学種に対応する表面サイト名を定義する。次にSURFACE_MASTER_SPECIES データブロックの例を示す。

例)

SURFACE_MASTER_SPECIES Surf_s Surf_sOH

<u>SURFACE_SPECIES データブロック</u>

SURFACE_SPECIES データブロックは,表面反応化学種の logK と反応式を定義する。 次に SURFACE_SPECIES データブロックの例を示す。

例)

```
SURFACE_SPECIES
Surf_sOH = Surf_sOH
log_k 0.0
Surf_sOH + H+ = Surf_sOH2+
log_k 5.67
Surf_sOH - H+ = Surf_sO-
log_k -7.92
```

EXCHANGE データブロック

EXCHANGE データブロックは,イオン交換反応化学種の成分と量を定義する。次に EXCHANGE データブロックの例を示す。

例)

EXCHA	NGE 1
NaZ	1.42854
ΚZ	0.01594
MgZ2	0.00922
CaZ2	0.10292
ZH	0.00000

SURFACE データブロック

SURFACE データブロックは,表面反応化学種の成分と量を定義する。次に SURFACE データブロックの例を示す。

例)

SURFACE 1 Surf_sOH 0.0863376 29.00 1332.781 (10) control.dat

本入力データファイルはプロセス定義ブロックと実行順序定義ブロックからなる。 1) プロセス定義ブロックの書式(ブランクを区切りとする自由書式)

<process>から</process>の間で定義する。

<u>n1 process n2 exefile</u>

変数名	内容	
nl	プロセス番号	
process	プロセス名称	
n2	メモリ常住プロセスか非常駐プロセスかの指定	
	=1 のときメモリ非常駐プロセス,	
	=2 のときメモリ常駐プロセス	
exefile	実行ファイル名およびパス	

2) 実行順序定義ブロックの書式(ブランクを区切りとする自由書式)

<sequence>から</sequence>の間で定義する。

<u>m1 nodename m2 m3</u> またループに関しては、…。

3) コメント行(各行#以後の文字はコメントとみなす)

変数名	内容
m1	ノードの順序番号
nodename	ノード名称(任意名)
m2	プロセス番号
m3	本ノードの次に実行されるノードの順序番号

control.dat データリスト

<pre><process></process></pre>	≜
1 thames 2 ./calcTHM	
2 dtransu 2 ./dtra3d.run	
3 addinp 1 ./addinp.run	
4 meshcony 1 ./meshcony7b.run	
5 cc convt1 1 /Cs2 cc convt1 1DJIREI.exe	
6 cc convt2 1 ./Cs2 cc convt2 01.exe	
8 ntoe convert 1 ./ntoe convert.run	
9 chmine 1 ./chmine.exe	
10 mpc 1 ./mpc	
11 elemconc 1 ./elemconc.exe	
13 rmmine 1 ./rmmine 01.exe	
14 chunit3a 1 ./chunit3.exe	
15 chunit2a 1 ./chunit2.exe	
16 chmine2 1 ./chmine2 01.exe	プロセス定義
17 chconc2 1 ./Cs2_inspisation_dilution2	ブロック
18 gasvol 1 ./gasvol.exe	
19 initvol 1 ./initvol.exe	
20 epsiron 1 ./epsiron.exe	
21 ppress 1 ./ppress 01.exe	
22 tpress 1 ./tpress 01.exe	
23 reaction 1 ./reaction_01.exe	
25 chemlen 1 ./chemlen.exe	
26 ppress2 1 ./ppress2_01.exe	
27 minsort 1 ./minsort.exe	
28 cdens 1 ./cdens.exe	
29 chperm 1 ./chperm2_1.exe	
30 gdens 1 ./gdens_01.exe	
31 source 1 ./source_01.exe	
32 cc_convt3 1 ./Cs2_cc_convt3.exe	
33 kminsort 1 ./kminsort.exe	
34 dtime 1 ./dtime.exe	
35 exsort 1 ./exsort.exe	
36 exsource 1 ./exsource.exe	
37 surface 1 ./surface.exe	
38 hydoconc 1 ./hydoconc.exe	
39 deltahydo 1 ./deltahydo.exe	
40 crearange2 1 ./crearange2.exe	
41 elemconc2 1 ./elemconc2.exe	
42 savephpe 1 ./savephpe.exe	
	\downarrow
<sequence></sequence>	······································
1 thamesNode 1 2	宝行順序定義
2 meshconvNode 4 3	
3 thamesNode 1 4	ブロック
	7

4 dtransuNode	25
5 ntoe_convert	86
6 dtransuNode	$2\ 7$
7 cc_convt1Node	e 58
8 dtransuNode	$2 \ 9$
9 addinp	$3\ 10$
10 minsort	$27\ 11$
11 kminsort	$33\ 12$
12 cdens	$28\ 13$
13 chemlen	$25\ 14$
14 initvol	$19\ 15$
15 gasvol	$18\ 16$
16 chmine	$9\ 17$
17 chunit3	$14\ 18$
18 mpc	10 19
19 hydoconc	$38\ 20$
20 crearange2	$40\ 21$
21 exsort	$35\ 22$
22 gdens	$30\ 23$
23 ppress2	$26\ 24$
24 elemconc	11 25
25 elemconc2	41 26
26 chunit2a	$15\ 27$
27 chmine2	16.28
28 chperm	29 29
29 dtransuNode	2 30
30 cc. conv2Node	₽ 6.31
31 dtransuNode	2 32
32 thamesNode	1 33
<loon rule="THI</td><td>M EXIT < 1"></loon>	
33 dtransuNode	2 34
34 meshconNo	$\frac{1}{4}$ $\frac{1}{35}$
35 dtransuNo	de 2.36
36 ntoe conve	rt 837
37 dtransuNo	de 2.38
38 chconc2	17.39
39 reaction	23 40
40 chmine	9 41
41 chunit3a	14.42
42 gasvol	18 43
43 dtime	34 44
44 mpc	10.45
45 hydocone	38.46
46 crearange?	
40 creat angez	36 48
47 exsource	35 40
40 exsurt	30 49 37 50
45 surface	90 51
50 epsiron	40 01 99 59
52 courses	44 04 91 59
52 source	01 00 1 20 54
54 olomoono	11 55
94 elemeone	11 99

実行順序定義 ブロック (つづき1)

55 elemconc 2	$41 \ 56$
56 chunit2a	$15\ 57$
57 chmine 2	$16\ 58$
58 cc_convt2Node	e 659
59 dtransuNode	$2\ 60$
60 cc_conv1Node	$5\ 61$
61 deltahydo	$39\ 62$
62 ppress	$21\ 63$
63 chmine	9.64
64 chunit3a	$14\ 65$
65 savephpe	$42\ 66$
66 elemconc	$11\ 67$
67 rmmine	$13\ 68$
68 chunit2a	$15\ 69$
69 chmine 2	$16\ 70$
70 chperm	$29\ 71$
71 dtransuNode	2.72
72 thamesNode	1

実行順序定義 ブロック (つづき2)

control.dat データリスト・終わり
(11) data.dat

本入力データファイルは、共有メモリにアローケートする変数(任意次元数の配列変数) を定義するのに用いられる。以下の書式により書かれる。(ブランクを区切りとする自由 書式)

type var[k1][k2] $\cdot \cdot \cdot$ [kn]

変数名		内容
type	型名	
	=int :	整数型,
	= double :	倍精度実数型 ,
	=string :	文字列型
var	変数名 (任意名))
k1	配列第1次元数	(ディメンジョン数)
k2	配列第2次元数	(ディメンジョン数)
•		
•		
•		
kn	配列第 n 次元数	(ディメンジョン数)

なお,配列変数でない場合は次元数(ディメンジョン数)を省略する。また,各行"#" 以後の文字はコメントとみなす。 data.dat データリスト

#Meanings of Constant Value
 #[40000] [max.node nuber]
 #[10000] [max.element number]
 #[20] [max.atomic ELEMENT number]

Begin Thames Block int THM ITA int THM NUMNP int THM NUMEL int THM_NUMMAT int THM_NUMEXT[40000] double THM X[40000] double THM Y[40000] double THM_Z[40000] int THM IENOEXT[10000] int THM_MATGLB[10000] int THM_NPGLB[20][10000] double THM_B[40000][5] double THM FLDENS[40000] double THM TIME double THM_VEL[10000][5] double THM_SATVOL[10000] double THM_SATVOLEP[10000] double THM_SATVOLEEP[10000] #1014 double THM_VOL_G[10000]

int THM_EXIT int ITER_EXIT

double THM_DRYD[10000] double THM_VOL_I[10000] double THM_POR[10000] double THM_EKK[6][10000]

double THM_DTEST[40000]

array for memory access testing

Begin meshconv7b Block #int MCV_NUMNP2 int MCV_NUMNP int MCV_NUMEL int MCV_NUMEXT[40000]

number of nodes
number of elements
table of external number for each node

double MCV X[40000] # table of X coordinate of node double MCV_Y[40000] double MCV Z[40000] double MCV_R717[40000] int MCV_IENOEXT[10000] # table of external number for each element int MCV_NOD[10000][10] int MCV ITA2 double MCV TIME int MCV N1 double MCV_VEL[10000][3] double MCV_SATVOL[10000] double MCV_HEAD1[40000] double MCV_TEMP1[40000] double MCV DENS1[40000] double MCV_VND[10000] # Begin Dtranu BLOCK int DTR_NXCHEM # the number of atomic ELEMENTs string*4 DTR MAT20[20] # name of atomic ELEMENT in 4 letters string*4 DTR MAT20INI[20] #add9/12 string*4 DTR_IDT #add9/12 double DTR_CNC20INI[40000][20] # concentration at each node at t double DTR CNC20[40000][20] # resolved concentration at each node int DTR ITA # current time point number which begins fr double DTR_TIME # time value corresponding to the time point DTR IT #add9/12 double DTR_TIMEEP #add9/12 double DTR_CNC20E[10000][20] # resolved concentration at each eleme double PRE_CNC[10000][20] DTR CONFLG int # flag for convergence, 0:no convergenc DTR ITER # iteration counter which begins from 1 int double DTR_GRETA[10000][20] double DTR_GRETAP[10000][20] double DTR CNC20EP[10000][20] double DTR GAM20EP[10000][20] double DTR_CNC20CDE[10000][20] # resolved concentration at each ele **#** Begin PHREEQ60 Block double PHQ_CNC20E[10000][20] double PHQ_CNC20EZ[10000][20] double PHQ_GAMMA[10000][20] #1015 double PHQ_PNP20E[10000][20] #1017 double PHQ_PTOTAL[10000]

double PHQ GNG20E[10000][20] string*12 PHQ_GNAME[10000][20] int PHQ nrgas0[10000] double DTR_ERETA[10000][20] double DTR_PBUN20[10000][20] double DTR_AMOL[20] double SATRATEP[10000] double THM SATRAT[10000] double PHQ REAC[10000][20] double PHQ_H2O2[10000][2] string*12 PHQ_CNAME[10000][20] int PHQ_CLEN[10000][20] string*4 CHEMNAME[10000][20] string*2 CHEM_NAME[20] int CHEMLEN[20] int DTR INDX C[20] int PHQ_INDX_M[10000][10] int PHQ_INDX_KM[10000][10] string*12 ADD_minname[8000][10] int ADD minnum [10000] int ADD bflag[10000] int ADD_minflag int MINLEN[10000][10] #1127 int KMINLEN[10000][10] double ADD truedens[10000] double ADD CDENS[10000] double PHQ pH[10000] double PHQ_pe[10000] double PHQ_GDENS[10000] double DELTA PHASE[10000][10] double PHQ DELTAPT[10000][20] double DTR DELTAPT[40000][20] double DTR DELTAPTZ[40000][20] double TIMEEP int ICOUNT string*12 DTR_ENAME[20] #1030 double PHQ_GNGINIT[10000][20] double PHQ_PBUN20[10000][20] #20040107 double PHQ_GDELTA[10000][20] int PHQ_nreac #1127 double PHQ m[8000][10]

double PHQ_m0[8000][10] double PHQ_step double DTR_step string*12 PHQ_KNAME[10000][10]

double PHQ_DPK[10000][10]

#040115

string*12 PHQ_SURFNAME[10000][3] double PHQ_SURFMOL[10000][3] string*12 PHQ_SURFNAMEPRE[10000][3] double PHQ_SURFMOLPRE[10000][3] string*12 PHQ EXCHNAME[10000][5] double PHQ EXCHCONC[10000][5] string*12 PHQ_EXCHNAME_PRI[10000][5] double PHQ_EXCHCONC_PRI[10000][5] int PHQ_EXNUM[10000] double PHQ_DELTAEX[10000][20] double DTR DELTAEX[40000][20] string*12 PHQ_SURFNAMEINI[10000][3] double PHQ_SURFMOLINI[10000][3] double PHQ_TOTAL_H[10000] double PHQ_HCONC[10000] double PHQ_DELTAH[10000] int PHQ CHEMNUM double PHQ CONCH[10000] string*12 PHQ_REACNAME[10000][20] double PHQ_DELTASURF[10000][20]

#040319 int DTR_INDX_pH int DTR_INDX_pe

Caution !! THIS PROGRUM NODAL 8000 < ######### ######## Caution !! THIS PROGRUM MINERAL < 10 ######### ######## Caution !! THIS PROGRUM COMPONENT 20< ######### THIS PROGRUM REION ######## Caution !! 7 <

Flag of exetution status int

exeStatus

int	ADD_nreg
int	ADD_nodreg[8000]
int	ADD_matir[7]
int	PHR_mat
double	ADD_aintmin[8000][10]
double	ADD_aintden[8000][10]
double	ADD_aintwgt[8000][10]
#0925	
double	ADD_aintmin0[8000][10]

double #double	ADD_aintminEP[8000][10] ADD_drymin[10]
double	BER_caco[8000]
double	BER_sico[8000]
double	BER_casi[8000]
int	ADD_izna
int	ADD_izk
int	ADD_iz2mg
int	ADD_iz2ca
int	ADD_izh
int	ADD_iz2fe
double	ADD_pz
double	ADD_pna
double	ADD_pk
double	ADD_pmg
double	ADD_pca
double	ADD_sna
double	ADD_sk
double	ADD_sca
double	ADD_scl
double	ADD_ss
#0203 int	ADD_nbmax
int	ADD_nblmax
int	ADD_nbrmax
int	ADD_nlbnd[250]
int	ADD_nrbnd[250]
int	ADD_ispron
int	ADD_iterpr
#0206	
int	ADD_iperm
int	SND_msir[7]
int	SND_msirr
string*12	SND_minsel[7][10]
int	SND_lab1[7][10]
int	SND_maxlab[7]
double	SND_minsat
double	SND_maxsat
double	SND_2ndden[7][10]
double #0908 add	SND_2ndwgt[7][10]
int	SND labno[7][10]
double	SND_pmc[20]
+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	
int	HGC_itm
int	HGC_np

int	HGC_last	
int	HGC itime	
int	HGC itit	
	—	
int	PHR_iR	
int	HGC_nnp	
int		HGC_maxn
int		HGC_non1
#string*10	HGC_cnam[20]	
string*4	HGC_cnam[20]	
int		HGC_lreac[20]
double		HGC_tmc[20]
double		HGC_tmc0[20]
double		HGC_pmc[20]
double		HGC_dmc[20]
double		HGC_smc[20]
double	HGC_xlog	
#add9/3		
double	HGC_amol[20]	
double	ADD_satinit[10000]	
double	ADD_satinitlbnd[10000]	
double	ADD_satinitrbnd[10000]	
#add1016		
double	ADD_epsinit[10000]	
int	PHR_nrmins0[8000]	
#1127		
int	PHR_nrkmins0[8000]	
int	PHR_1dry[8000][10]	
int	PHR_1dry0[8000][10]	
string [*] 12	PHR_mname0[8000][10]	
1nt	PHR_label[10]	
#1015		
string [*] 12	PHR_MINN[8000][10]	
double	CHG_z45[8000]	
double	CHG_zna[8000]	
double	CHG_zk[8000]	
double	CHG_z2mg[8000]	
double	CHG_z2ca[8000]	
double	CHG_zh[8000]	
double	CHG_z2fe[8000]	
double	CHG_zcreac[8000]	
#aoyagi add	6.17	
double	PHR tot[20]	
#aoyagi add	6.17	
int	PHR ncompel	
int	PHR ncomps	

int string*12 double	PHR_nrmins PHR_mname[450] PHR_dd1[10]	
int int double	PHR_nmin[450] PHR_lmin[10][450] PHR_cmin[10][450]	
int double	PHR_istep PHR_ph	
int string*12	INP_i INP_mname	
int int double	CHG_ntots CHG_lt[30] CHG_dtot[30]	
int	SPEC_i	
double	SPEC_dm	
#int		PHR_imin
# TEM	PORARY	
double	TMP_moist0[8000]	
double	TMP_moist[15][8000]	
double	TMP_fac	
# TEM	PORARY	
#int	PRN prmins[8000]	
#iiit #doublo	PRN_dd1[8000][10]	
#ububle #etring*19	$PRN_mnamo[8000][10]$	
#501111g 12 ###############		+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
#		
int	BER maxt	
int	BER maxs	
int	BER nrmins	
string*12	BER mname[450]	
int	BER_nmin0[450]	
int	BER nmin[450]	
int	BER_nmcon[450]	
int	BER_mflag[450]	
int	BER_lmin0[10][450]	
int	BER_lmin[10][450]	
int	$BER_lmcon[5][450]$	
double	BER thmin[450]	
double	BER $lkt0m[450]$	
double	BER dhmin $[450]$	
double	BER simin[4000]	
double	BER cmin0[10][450]	
double	BER cmin[10][450]	
double	BER_cmcon[5][450]	

int	BER_nsp[4000]
int	BER_lsp[6][4000]
double	BER_csp[6][4000]
double	BER_zsp[4000]
double	BER_thsp[4000]
string*12	BER_lname[3]
string*12	BERR_mname
double	BER_d1
double	HGC_ttt[20]
int	PRE_np
double	HGC_tkg[8000][20]
double	HGC_ckg[8000][20]
double	HGC_skg[8000][20]
double	HGC_pkg[8000][20]
double	MOL_t[8000][20]
double	MOL_c[8000][20]
double	MOL_s[8000][20]
double	MOL_p[8000][20]
double	ATM_w[20]
#aoyagi add	6.16
double	PHQ_PMASS[20][8000]
#aoyagi add	6.16
double double double double double double double double double double double double #0926 double #0926	HGC_tblmol[250][20] HGC_cblmol[250][20] HGC_sblmol[250][20] HGC_pblmol[250][20] HGC_tbrmol[250][20] HGC_cbrmol[250][20] HGC_sbrmol[250][20] HGC_pbrmol[250][20] HGC_phlbnd[250] HGC_cblkg[250][20] HGC_cblkg[250][20] HGC_ccblkg[250][20]
int	SND_process
int	SND_process1
int	SND_oyalab
string*12	SEL_mname
int	SEL_nmin0
double	SEL_thmin
double	SEL_lkt0m

double int double int double double	SEL_dhmin SEL_mflag SEL_simin SEL_lmin0[10] SEL_cmin0[10] SEL_amin[5]
int double string*12 double int int double int	SND_nrmins SND_idry2[8000][10] SND_min2[8000][10] SND_namelk SND_dsi SND_ichmin[8000][10] SND_ichmn0[8000][10] SND_dsimin[10] SND_i_nlooks
double double	SND_amol[10] SND_amol2[10]
#double #double	PAR_dd11[8000][10] PAR_dd10[8000][10]
double double double double double int int double #double #double	HGC_cdkg[8000][20] MOL_cd[8000][20] MOL_sol[8000][20] HGC_cdmc[20] ADD_aintmoll[20] ADD_aintmolr[20] ADD_nregbl ADD_nregbr ADD_aiRmol[7][10] HGC_pelbnd[250] HGC_perbnd[250]
#1127 int string*12 double double int #0623.add int	ADD_kminnum[10000] ADD_kminname[8000][10] ADD_kaintwgt[8000][10] ADD_kaiRmol[7][10] ADD_nrkmins0[8000] PHR_ioption
#0623.end	

data.dat データリスト:終わり

3 THMC エラーに係る事項

本章では,本年度の研究で実施した事例解析を通じて入手したエラー事項ならびにサイクル機構殿が試運用した際の疑問点(エラーの可否)についてまとめた。以下にその詳細を示す。

3.1 事例解析を通じて得られたエラー事項

本節では,事例解析を通じて得られたエラー項目を示すものであり,THMC を実行した際に COUPLYS が停止する場合,COUPLYS が停止しない場合,後処理段階でのエラー項目についてまとめている。

(1) COUPLYS が停止する時

共有メモリの設定が小さい場合(現在は最大値設定:モデルの規模に依存する) DISKの容量が不足している場合 THAMESでのエラー(収束しない場合) 速度モデルを用いた長時間解析を実施した際に途中でジョブが停止する。エラーメ ッセージ,原因,対応策を以下に示す。

1) エラーメッセージ

"Application gnome-terminal(Process 16697)has crashed due to fatal error (Segmentation fault) Please visit the GNOME Application Crash Page for more information"

2) 原因

LINUX 上で使用している操作コンソールのエミュレータソフト gnome-terminal のバグである。コンソールに大量の出力情報が出したことに よるエラーの可能性が大きい。

3) 対応策

現時点で考えられる対応策を以下に示す

- 別バージョンの LINUX 再インストールするか、または公開されているパッチを適用する。別バージョンの OS(例えば, Red Hat version 9.日本 語版)を使っている LINUX マシンでは,1~2週間にわたってコンソール に情報を出すような作業を行っても,前記の様なエラーメッセージは現れ ない。この対処方法は,新しい OSのインストール等に時間を要すること, ならびに決定的な対処方法であるか否か不明である。
- LINUX で利用可能な他の画面としては,古くから利用されている xterm がある。これは,数十年の実績がありオーソドックスなシステムであるこ とから,バグは極めて少ないと推察できる。ただし,古いデータは見られ ない欠点がある。本方法については,下記の要領にて実施する。

- ア) 余分なプロセスを排除して、システムをクリーンにするため、
 LINUX を一旦シャットダウンして再起動する。
- イ) 通常通り操作コンソールウィンドウ (gnome-terminal)を起動 する。
- ウ) GNOME から xterm を別プロセスとして起動するため,コマンド"xterm & を入力する(このとき COUPLYS 実行用と結果閲覧用のxterm を2個起動しておくのがよい)。
- エ) GMOME terminal を終了する。 ウィンドウ右上の X をクリック するか, exit コマンドを入力する。
- オ) xterm から,ケース1221の計算ディレクトリに cd コマンド で移動し通常通り COUPLYS を起動する。(COUPLYS 実行前に前回 実行時の出力ファイルを消去するため,次のコマンドを実行してお く:rm *.OUT *.out *.lst *.LIST)
- コンソールに大量の情報を出さない方法としては,mpc.datにおいて,コンソールに出力しないオプションがある。このオプションを1→0とする方法もある。ただし,このオプションを用いた場合は,地球化学計算でのエラー,ワーニングメッセージをユーザーが認識できないといった欠点がある。この方法は,優先度2とするのが適切と考える。

(2) COUPLYS が停止しない場合

PHREEQC でのエラー(鉱物名称,ガス相名称の不整合)
 PHREEQC でのエラー(Dtransu から負の濃度が受け渡される場合)
 Dtransu(負の濃度が得られた場合)
 結果を見て解釈が困難な場合(初期濃度の入力ミス)

(3) 後処理

THMC 出力データのハンドリングミス(後処理の標準化)

3.2 サイクル機構殿から問合せのあったエラーの可否

本節では,サイクル機構殿が試運用を通じて問合せのあったエラーの可否に係る事項 を,実際に THMC を実行することにより確認したことから,これら確認結果のまとめ について以下に示す。

(1) 熱力学データベースの所在位置

任意のディレクトリに設定して実行できることを確認した。

(2) Dtransu 入力データファイル ganma.dat の取り扱い

プログラムを修正することにより、当該データは不要となる。当該データを考慮した場

合と考慮しない場合の計算を行ない,両者が一致することを確認した。

(3) 入力データファイル addinp.dat データの書式確認

データブロックの終了マーク&END以下に無効なデータを定義した場合,THMCの解 析実行に支障の無いことを確認した。

以 上