原位置トレーサー試験の逆解析による 核種移行特性の不確実性評価

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)

2002年1月

大成建設株式会社

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。 〒319-1184 茨城県那珂郡東海村大字村松4-49 核燃料サイクル開発機構 技術展開部 技術協力課 Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to : Technical Cooperation Section, Technology Management Division, Japan Nuclear Cycle Development Institute 4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1184 Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute) 2002

原位置トレーサー試験の逆解析による 核種移行特性の不確実性評価

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)

2002年1月

大成建設株式会社

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

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村村松4番地49

核燃料サイクル開発機構

技術展開部 技術協力課

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) 2002

JNC TJ8440 2002-002 2 0 0 2 年 1 月

原位置トレーサー試験の逆解析による

核種移行特性の不確実性評価

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)

畑明仁*,井尻裕二*,鈴木俊一*,大石雅也*,杉原豊*

要旨

高レベル放射性廃棄物地層処分の安全評価においては,モデルやデータの不確実性を評価することが重要な 課題の1つとなっている。特に,天然バリア中核種移行評価においては原位置で実施された様々な調査結果に基 づきモデルやデータが設定される。しかしながら,天然バリアは本来不均質であるにもかかわらず調査数量は 限られ,調査結果には多くの不確実性を伴う。したがって,天然バリア評価において,原位置調査結果から推 定されるモデルやデータの不確実性を定量的に評価する手法を確立する必要がある。

このような観点から,昨年度はツール開発の一環として,核種移行解析コード LTG に対して逆解析によりパ ラメータが同定できるとともに,そのモデルや同定したパラメータの不確実性が定量的に評価することが可能 なコードを作成した。

今年度は,核種移行逆解析コードを用いて数メートルスケールの単一割れ目を対象に実施された非収着/収着 性トレーサー試験データを解析し,トレーサー試験から同定可能なパラメータの同定とその不確実性を評価し た。その結果,本コードを用いて精度良いパラメータ同定が比較的簡易に実施できること,観測値と計算値の 誤差に起因する不確実性は,試験条件やモデルの設定条件によるパラメータの不確実性に比べ小さいことが明 らかとなった。また,本検討で得られたパラメータの不確実性はJNC 第2次とりまとめの不確実性ケースで選 択した不確実性とほぼ同等であったが,もっとも不確実性の高い結果となったマトリックス拡散寄与面積率は 非保守側に大きい不確実性を示した。亀裂中の拡散を正確に把握することが,施設設計の合理化を図る上で重 要と考えられる。

本報告書は,大成建設株式会社が核燃料サイクル開発機構との契約により実施した業務成果に関するものである。

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

JNC TJ8440 2002-002 January, 2002

The evaluation of the uncertainty of the solute transport with the inversion analysis of in-situ tracer tests

Akihito HATA*, Yuji IJIRI*, Shunichi SUZUKI*, Masaya OISHI*, Yutaka SUGIHARA*

Abstract

One of key issues in assessing a safety of a deep geological disposal system for high-level nuclear waste is to evaluate the effects of model uncertainty and data uncertainty on the results of the radionuclide migration analysis. Therefore, it is crucial to develop a tool which evaluate appropriateness of a model and the reliability of data.

With this point of view, inversion code of LTG, which solves radionuclide migration in fractured media owned by JNC, was developed in the last year's work.

This year, with the inversion code, back analysis of the in-situ non-sorptive/sorptive tracer tests which was conducted at a single fracture of the size within 10m, was carried out and the optimum parameters and the uncertainty of those were evaluated. From the results of the analysis, it was found that it was relatively easy to identify the optimum parameters with the use of the inversion code and that the uncertainty originated from the error between the observed value and the calculated was much less than that caused by the difference of test conditions or the model selection. In addition, the uncertainty ranged in almost the same region with that assumed in JNC H12 report. However, only the estimated matrix diffusion effect varied more widely in non-conservative way than JNC H12 report, which means it is important to understand the diffusion effect in the fracture to design the repository cost-effectively.

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

JNC Liaison : System Analysis Group, Waste Isolation Research Division,

Waste Management and Fuel Cycle Research Center, Tokai Works *Taisei Corporation 目 次

1.	はじめに	1
2.	核種移行解析コード LTG の概要	2
2	.1 核種移行支配方程式	2
2	.2 ラプラス変換有限要素法	4
3.	逆解析手法	8
3	.1 解析手法の概要	8
3	.2 最尤推定法	9
	3.2.1 尤度関数	9
	3.2.2 最尤推定法(Maximum Likelihood estimation:ML法)	0
3	.3 非線形最小二乗法	4
	3.3.1 定常問題	4
	3.3.2 非定常問題	20
	3.3.3 収束判定基準	21
3	.4 線形推定誤差解析	23
	3.4.1 パラメータ推定値の共分散行列2	23
	3.4.2 信頼区間推定	25
	3.4.3 パラメータの推定誤差評価	26
3	.5 最適モデルの選定	27
4.	核種移行解析コード LTG マニュアル	28
4	.1 ファイル構成	28
4	.2 入力パラメータ	29
4	.3 入力ファイル	30
4	.4 出力ファイル	36
5.	逆解析プログラム LTGINV マニュアル	37
5	.1 ファイル構成	37
5	.2 プログラムの実行	39
5	.3 入力ファイル	10
5	.4 出力ファイル	14
5	.5 描画プログラム用入力ファイル	19
6.	逆解析ブログラムの検証	52
6	.1 ITOUGH (LBNL)との比較解析	52
	6.1.1 擬似観測値の作成	52
_		52
6	.2 誤差評価バフォーマンスに関するベンチマークテスト	30
	6.2.1 逆解析結果	30
_	6.2.2 ハフメータの信頼区間	′0
7.	SKB TRUE program	′5

7.1	sp Hard Rock Laboratory	. 75
7.2	TRUE 試験の目的	. 75
7.3	sp HRDD地質構造条件	. 76
7.4	地質構造のモデル化	. 79
7.5	トレーサー試験	. 81
7.6	Feature A の水理特性	. 81
7.7	室内試験結果	. 82
8. トレ	ーサー試験	. 84
8.1	試験条件	. 84
8.2	使用したトレーサー	. 85
8.3	トレーサー試験結果	. 85
9. 逆解	析結果	. 88
9.1	逆解析の実施方針	. 88
9.1.	1 移流及び亀裂内分散	. 88
9.1.	2 マトリックス内の拡散	. 88
9.1.	3 核種の収着	. 88
9.1.	4 複数経路間の流量配分	. 89
9.1.	5 逆解析ケースと入力パラメータ	. 89
9.2	逆解析結果	. 91
9.2.	1 STEP-1	. 91
9.2.	2 STEP-2(非収着トレーサーを用いた移流・分散・マトリックス拡散特性の同定)結果	. 96
9.2.	3 STEP-3A(収着トレーサーを用いた収着特性の同定)結果-亀裂表面の収着を考慮しない場合	101
9.2.	4 STEP-3B(収着トレーサーを用いた収着特性の同定)結果-亀裂表面の収着を考慮する場合	110
9.2.	5 複数経路モデルを用いた逆解析の実施方針	120
9.2.	6 STEP-4-1A~STEP-4-1C(2 経路モデルによる同定手順検討)結果	121
9.2.	7 STEP-4-1(2 経路モデル:非収着トレーサーを用いた同定)結果	128
9.2.	8 STEP-4-2A(2 経路モデル:収着特性の同定)結果-亀裂表面の収着を考慮しない場合	135
9.2.	9 STEP-4-2B(2 経路モデル:収着特性の同定)結果-亀裂表面の収着を考慮する場合	145
9.2.	10 STEP-5(3 経路モデル:非収着トレーサーを用いた同定)結果	155
10. 逆解	析結果の評価	157
10.1	最適パラメータ値とその信頼区間	157
10.1	.1 流れ依存パラメータ(移行経路数,流量,流速,分散長,湿潤辺長)の同定	157
10.1	.2 収着パラメータの同定	167
10.1	.3 同定値の不確実性に関する考察	177
10.2	最適モデル選定(情報量基準)	183
11. 逆解	析結果に基づく予測解析	186
11.1	同定パラメータの不確実性の JNC 第2次とりまとめ不確実性ケースとの比較	186
11.2	逆解析結果に基づくパラメータスタディ	187
12. おわ	りに	188

図目次

义	2-1	チャンネルネットワークモデル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	3
义	2-2	亀裂中の核種移行概念図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	3
义	3-1	逆解析フロー・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	8
义	3-2	尤度関数模式図(中川・小柳,1982) ⁷ ······	9
义	3-3	非線形最小二乗法フロー・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	14
义	3-4	最小化アルゴリズムの詳細フロー・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	22
义	3-5	2次元信頼性空間 ••••••••••••••••••••••••••••••••••••	26
义	4-1	核種移行解析コード LTG 入力ファイル構成 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	28
义	4-2	入力パラメータ模式図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	29
汊	5-1	逆解析フローとファイル構成(LTG.DAT ファイルを更新する場合)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	37
汊	5-2	描画用ファイル構成・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	38
図	5-3	測定値および計算値ファイルからのデータ読込み・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	42
図	6-1	順解析結果と擬似観測値(Case-A)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	53
図	6-2		53
図	6-3	· 逆解析结果(Case-A1)····································	54
図	6-4	逆解析結果(Case-A2)····································	54
<u>図</u>	6-5	で新行為点へ(dube A2) - 逆解析结里(Case-B)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	55
2 2	6-6	ビラメータの 05% 信頼区間(Case-A1 ITGINV)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	57
⊼ ⊠	6-7	パラメータの 05% 信頼区間 (Case A2 TGINV)	57
≥ ⊗	6-8	$パラメータの 05% 信頼区間 (Case A_2, LTOUGH) ····································$	58
函 図	6-0	パラメータの 05% 信頼区間 ($Case-R$, $TOOOT$) パラメータの 05% 信頼区間 ($Case-B2$) TGINV)	50
」 図	6-10	パラメータの 05% 信頼区間 ($Case_D2$, $Clother)$	50
N N	6-11		62
N N	6-12		62
区	6 12		62
区	6 1/		62
凶	6 15		64
凶 図	6 16	ど時们紀未(ノース DI、刀取成丸)	04 64
N N	0-10	ど時们約米(クース D2、刀取防丸)	04
N N	0-17		00
N N N	0-10		00
N N N	6 20		00
M	0-20		00
N N N	0-21		67
X	6-22		67
×	6-23		68
× ×	6-24		68
凶	6-25	ツ解析結果(ケー人B3,分散木知) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	69
凶	6-26		69
凶	6-27	目的関数コンターとハラメータの 95% 信頼区間 (ケース A1) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	71
凶	6-28	目的関数コンターとハラメータの 95% 信頼区間 (ケース A2) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	71
凶	6-29	目的関数コンターとバラメータの 95% 信頼区間 (ケース A3) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	72
凶	6-30	目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース A4) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	72
凶	6-31	目的関数コンターとパラメータの 95% 信頼区間 (ケース B1) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	73
义	6-32	目的関数コンターとパラメータの 95% 信頼区間 (ケース B2) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	73
义	6-33	目的関数コンターとパラメータの 95% 信頼区間 (ケース B3) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	74
义	6-34	目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間(ケース B4)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	74
义	7-1	sp Hard Rock Laborator 应 置図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	76
义	7-2	sp Hard Rock Laborator坑道鳥瞰図 ······	76
义	7-3	坑道内試験位置図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	77
义	7-4	sp H間辺の亀裂帯・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	78

义	7-5	sp 島周辺の地質構造モデル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	79
义	7-6	TRUE-1 サイトにおけるボーリングコアの鉱物組成・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	80
义	7-7	TRUE-1 サイトに BIPS 観測結果・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	80
义	7-8	TRUE-1 における水理地質構造モデル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	81
义	7-9	Feature A内の水頭分布(1997年6月) ······	82
义	8-1	Feature A上でのボーリング孔位置関係・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	84
义	8-2	Uranine の破過曲線・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	86
义	8-3	放射性核種の破過曲線・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	87
义	9-1	Uranineの破過曲線と逆解析結果 (STEP-1, STT-1) ······	92
义	9-2	Uranineの破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-2) ······	92
义	9-3	Uranine の破過曲線と逆解析結果 (STEP-1, STT-1b) ······	93
図	9-4	HTO の破過曲線と逆解析結果 (STEP-1, STT-1) ······	94
図	9-5	HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	94
図	9-6	HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-1 STT-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	95
図	9-7	llranineの破過曲線と逆解析結果(STEP-2 STT-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	97
<u>図</u>	9-8	Uranineの破過曲線と逆解析結果(STEP-2 STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	97
<u>下</u>	a_a	Uraningの破過曲線と逆解析結果(STEP-2 STT-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	97
<u>下</u>	0_10	HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP_2 STT_1)	00
ন	0_11	HTO の破過曲線と逆解析結果(STED-2、STT-7)	00
回	0 12		100
凶	9-12	IIIOの吸過回線とと解析指末(SIEF-2,SII-10)	100
凶	9-13	Na Uw 過田線と逆解析結果(SIEP-3A、SII-1)	102
N N N	9-14	SIUW 週田緑と逆解析結果(SIEP-3A、SII-I)	102
N N N	9-15	Da UW 20世紀と逆時们結果(SIEP-3A、SII-1)	103
N N N	9-10	KD UW 週田緑と逆解析結果(SIEP-3A、SII-1)	103
N N N	9-17	US の破迴田緑と逆解析結果(SIEP-3A, SII-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	104
× ×	9-18		105
凶	9-19	Sr の破過囲線と逆解析結果(SIEP-3A, SII-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	105
凶	9-20	Baの破過囲線と逆解析結果(SIEP-3A, SII-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	106
凶	9-21	RDの破過囲線と逆解析結果(SIEP-3A, SII-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	106
凶	9-22	CSの 破過 囲線と 逆解 析 結果 (SIEP-3A, SII-2) ····································	107
凶	9-23	Na の破過囲線と逆解析結果(SIEP-3A, SII-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	108
凶	9-24	Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-3A, STT-1b) ····································	108
凶	9-25	Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	109
义	9-26	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	112
义	9-27	Sr の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	112
义	9-28	Ba の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	113
义	9-29	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	113
义	9-30	Cs の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	114
义	9-31	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	115
义	9-32	Sr の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	115
义	9-33	Ba の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	116
义	9-34	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	116
义	9-35	Cs の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	117
义	9-36	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1b) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	118
义	9-37	Sr の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	118
义	9-38	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B,STT-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	119
义	9-39	Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1A,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	124
义	9-40	Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1B,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	124
汊	9-41	Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1C,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	125
汊	9-42	HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1A, STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	126
叉	9-43	HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1B, STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	126
叉	9-44	HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1C, STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	127
叉	9-45	Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-1) ······	131
义	9-46	Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	131
_			-

义	9-47	Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-1b) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	132
义	9-48	HTO の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-1, STT-1) ······	133
义	9-49	HTO の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-1, STT-2) ······	133
义	9-50	HTO の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-1, STT-1b) ······	134
义	9-51	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1) · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	137
义	9-52	Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2A, STT-1)	137
义	9-53	Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A,STT-1)	138
义	9-54	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1)	138
义	9-55	Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1)	139
义	9-56	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	140
义	9-57	Srの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-2) ······	140
义	9-58	Ba の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	141
义	9-59	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-2) ······	141
义	9-60	Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A,STT-2) ······	142
义	9-61	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	143
义	9-62	Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2A, STT-1b) ······	143
义	9-63	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1b) ······	144
义	9-64	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1) · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	147
义	9-65	Sr の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1) ************************************	147
义	9-66	Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B,STT-1) ······	148
义	9-67	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1) ************************************	148
义	9-68	Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1) ······	149
义	9-69	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2) ······	150
义	9-70	Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2B, STT-2) ······	150
义	9-71	Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2) ·····	151
义	9-72	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2) ······	151
义	9-73	Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2) ······	152
义	9-74	Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1b) ······	153
义	9-75	Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2B, STT-1b) ······	153
义	9-76	Rb の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1b) ************************************	154
义	9-77	Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-5, STT-2) ·····	156
义	9-78	HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP-5, STT-2) ·····	156
义	10-1	流量比の同定結果まとめ(STT-2)···································	158
义	10-2	流速の同定結果まとめ(STT-2) ·····	158
义	10-3	分散長の同定結果まとめ (STT-2) ······	158
义	10-4	湿潤辺長の同定結果まとめ (STT-2) ······	159
义	10-5	STT-2における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	159
义	10-6	流量比の同定結果まとめ(STT-1)···································	161
义	10-7	流速の同定結果まとめ(STT-1)	161
义	10-8	分散長の同定結果まとめ(STT-1)·····	161
义	10-9	湿潤辺長の同定結果まとめ (STT-1) ······	162
义	10-10	STT-1における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	162
义	10-11	流量比の同定結果まとめ(STT-1b)····································	164
义	10-12	流速の同定結果まとめ(STT-1b)	164
义	10-13	分散長の同定結果まとめ(STT-1b)······	164
义	10-14	湿潤辺長の同定結果まとめ(STT-1b)·····	165
义	10-15	STT-1b における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	165
义	10-16	Kd の同定結果のまとめ (STEP-3A, 1 経路モデル)	169
汊	10-17	Kd の同定結果のまとめ (STEP-4-2A, 2 経路モデル)	169
汊	10-18	STEP-3A における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	170
汊	10-19	STEP-4-2A における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	170
図	10-20	Kd の同定結果のまとめ (STEP-3B, 1 経路モデル)	174
図	10-21	Kaの同定結果のまとめ(STEP-3B, 1 経路モデル)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	174
义	10-22	Kd の同定結果のまとめ(STEP-4-2B,2 経路モデル)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	175

図 10-23	Ka の同定結果のまとめ(STEP-4-2B,2 経路モデル)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	175
図 10-24	STEP-3B における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	176
図 10-25	STEP-4-2B における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	176
図 10-26	各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-1, Uranine) ·····	184
図 10-27	各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-1,HTO) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	184
図 10-28	各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-2, Uranine) ·····	184
図 10-29	各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-2,HTO) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	185
図 10-30	各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-1b, Uranine) ・・・・・・・・・・・・・・・・	185
図 10-31	各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-1b, HTO) ·····	185
図 11-1	JNC 第2次取りまとめリファレンスケースとの比較 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	187
図 11-2	JNC 第2次取りまとめリファレンスケースとの比較 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	188

表目次

表	4-1	核種移行解析コード LTG 入力ファイル一覧 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	28
表	4-2	入力パラメータ一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	29
表	4-3	ltg.dat ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	30
表	4-4	ltg.dat ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	31
表	4-5	grid. in ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	33
表	4-6	grid.in ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	33
表	4-7	pipevel.inファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	34
表	4-8	pipevel.in ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	34
表	4-9	retard. in ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	34
表	4-10	retard.in ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	34
表	4-11	pipeimm.in ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	35
表	4-12	pipeimm.in ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	35
表	4-13	immdata.inファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	35
表	4-14	immdata.in ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	35
表	4-15	ltg.out ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	36
表	4-16	sum ファイル	36
表	4-17	win ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	36
表	5-1	逆解析ファイル一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	38
表	5-2	back01.dat ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	40
表	5-3	back01.dat ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	40
表	5-4	back01.ltgファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	43
表	5-5	back01.ltg ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	43
表	5-6	back01.log ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	44
表	5-7	back01.log ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	44
表	5-8	back01.csv ファイル	45
表	5-9	back01.csv ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	45
表	5-10	back01.p##ファイル ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	46
表	5-11	back01.p##ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	47
表	5-12	back01.r##ファイル ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	48
表	5-13	back01.r##ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	48
表	5-14	back01.1ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	49
表	5-15	back01.1 ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	49
表	5-16	back01.2ファイル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	51
表	5-17	back01.2 ファイルの変数一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	51
表	6-1	同定パラメータおよび目的関数値の比較 (Case-A1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	55
表	6-2	同定パラメータおよび目的関数値の比較(Case-A2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	55
表	6-3	同定パラメータおよび目的関数値の比較 (Case-B)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	55
表	6-4	共分散行列の比較 (Case-A1) ·····	56
表	6-5	共分散行列の比較 (Case-A2) ·····	56
表	6-6	共分散行列の比較 (Case-B) ·····	56
表	6-7	ベンチマークテスト結果(分散既知の場合)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	61
表	6-8	ベンチマークテスト結果(分散未知の場合)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	61
表	7-1	Feature A上の全水頭の経時変化・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	82
表	7-2	SKB による物理定数の推奨値・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	83
表	8-1	トレーサー試験の試験条件・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	84
表	8-2	使用したトレーサーと崩壊特性・・・・・	85
表	8-3	トレーサーの注入量と回収率・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	85
表	9-1	入力パラメータ一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	90
表	9-2	逆解析ケース一覧表・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	90
表	9-3	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-1, Uranine)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	91
表	9-4	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-1, HTO) ·····	91

表	9-5	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-2, Uranine)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	• 96
表	9-6	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-2,HTO)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	• 96
表	9-7	STEP-3 で用いた流速,分散長,湿潤辺長 ·····	101
表	9-8	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3A, STT-1) ······	101
表	9-9	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3A, STT-2) ······	101
表	9-10	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3A, STT-1b) ······	101
表	9-11	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3B, STT-1) ·····	111
表	9-12	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3B, STT-2) ·····	111
表	9-13	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3B,STT-1b) ·····	111
表	9-14	断面積同定時に用いた流速と分散長(STEP-4, STEP-5) ······	120
表	9-15	STEP-4-1A~Cにおけるパラメータ同定手順・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	120
表	9-16	同定パラメータの初期値と最適値(STFP-4-1A_STT-2_Uranine)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	122
、夫	9-17	同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-18 STT-2 ranine)	122
、	9-18	同定パラメータの初期値と最適値 (STEP- $4-1$ C) STT-2 raning)	122
北耒	0_10	同定パラメータの初期値と最適値 (STEP_ 1_1 STT_2 HTO) ······	122
北圭	0_20	同定パラメータの初期値と取過値(STEP_ 4 -1R, STF-2, HTO)	123
北圭	9-20	同たパリケークの初期値と取過値($STEP 4 10, STT 2, III0$)	120
衣 =	9-21		120
衣	9-22	回たハフメータの初期他と取週他(SIEP-4-1, SII-1, Utalline)	129
衣	9-23	回 に ハフ メーク の 初 期 他 と 取 通 他 (SIEP-4-1, SII-2, Uranine) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	129
衣	9-24	同 に ハフメータの 初期 個 と 最 週 個 (SIEP-4-1, SII-1D, Uranine) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	129
表	9-25	同定ハフメータの初期値と最適値(SIEP-4-1, SII-1, HIO) ····································	130
表	9-26	同定バラメータの初期値と最適値(STEP-4-1, STT-2, HTO) ······	130
表	9-27	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-1, STT-1b, HTO) ······	130
表	9-28	STEP-4-2 で用いた流速,分散長,湿潤辺長・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	135
表	9-29	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2A,STT-1)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	135
表	9-30	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2A,STT-2)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	135
表	9-31	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2A,STT-1b)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	136
表	9-32	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2B, STT-1) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	146
表	9-33	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2B, STT-2) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	146
表	9-34	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2B, STT-1b) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	146
表	9-35	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-5,STT-2,Uranine) ・・・・・・・・・・・・・・	155
表	9-36	同定パラメータの初期値と最適値(STEP-5,STT-2,HTO) · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	155
表	10-1	遅延係数 Rd の同定値と 95%信頼区間の上下限値(STEP-3A) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	167
表	10-2	遅延係数 Rd の同定値と 95%信頼区間の上下限値(STEP-4-2A) ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	167
表	10-3	遅延係数 Rd から求めた分配係数 Kd(STEP-3A)	168
表	10-4	遅延係数 Rd から求めた分配係数 Kd (STEP-4-2A)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	168
表	10-5	遅延係数 Rd の同定値と 95%信頼区間の上下限値(STEP-3B) ······	172
表	10-6	遅延係数 Ra の同定値と 95%信頼区間の上下限値(STEP-3B) ·····	172
表	10-7	遅延係数 Rd の同定値と 95%信頼区間の上下限値(STEP-4-2B) ······	172
表	10-8	遅延係数 Ra の同定値と 95%信頼区間の上下限値(STEP-4-2B) ······	172
表	10-9	公配係数 Kd の同定値と 95%信頼区間の上下限値(STEP-3B)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	173
、夫	10-10	分配係数 Ka の同定値と 05% 信頼区間の上下限値(STEP-38)・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	173
、夫	10-11		173
、	10-12		173
北圭	10-12	タ番冬姓の追いレスカズカの法法同定値。	177
北主	10-13	日程示什の違いことれられの加水回足値 タ種冬件の造いとこれぞれの無次元化公数目目完値	170
北圭	10-14	日程示什の違いとこれに110無人ル化力取及问定値 タ番冬州の造いとこれごわの泪測辺を同定値	170
北重	10-10	ロ15ボロのほりして1001000000000000000000000000000000000	104
衣声	10-10	- ロ腑1/1ノーヘにのリる////昭昀 田禎 - タ韶ボケーフにおける角列症。	101
衣	10-17	ロ肝111ノー人にのける电教性 タ韶ボケーフにやけるフトリックフが勘案に声程変	101
衣 丰	10-18	「百胜们ノーへにのりるくトリツノ人払取司与則倶半・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	101
衣	10-19) SIEY-3A, SIEY-4-2Aにのける KO 回走他・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	182
表	10-20) SIEP-3B, SIEP-4-2Bにおける KC 同正値・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	182
表	10-21	SIEP-3B, SIEP-4-2Bにおける Ka 同定値・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	182
表	11-1	ご 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一	186

表 11-2 最大線量とその発生時刻 ·····	188
--------------------------	-----

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物地層処分の安全評価においては,モデルやデータの不確実性を評価することが 重要な課題の1つとなっている。特に,天然バリア中核種移行評価においては原位置で実施された様々 な調査結果に基づきモデルやデータが設定される。しかしながら,天然バリアは本来不均質であるにも かかわらず調査数量は限られ,調査結果には多くの不確実性を伴う。したがって,天然バリア評価にお いて,原位置調査結果から推定されるモデルやデータの不確実性を定量的に評価する手法を確立する必 要がある。

このような観点から,昨年度はツール開発の一環として,核種移行解析コードLTGに対して逆解析に よりパラメータが同定できるとともに,そのモデルや同定したパラメータの不確実性が定量的に評価す ることが可能なコードを作成した。

今年度は,核種移行逆解析コードを用いて数メートルスケールの単一割れ目を対象に実施された非収着/収着性トレーサー試験データを解析し,トレーサー試験から同定可能なパラメータの同定とその不確 実性を評価することを目的とする。

本報告書の構成は,2~6 章がプログラムの内容,使用法,基本性能の確認に関する章であり,7~11 章が SKB のトレーサー試験の逆解析に関する章となっている。

2章,3章においてはLTGと逆解析プログラムの背景となる理論構成を概括し,4章,5章においてそ れぞれのプログラムの具体的な使用方法を示す。この内容は,昨年度報告書内容に本年度のプログラム 改良点などを加筆修正したものである。6章においては,最新のプログラムを用いて,米国ローレンス バークレー国立研究所開発のコード"ITOUGH"との比較解析ならびにベンチマークテストを行い,プ ログラムの検証を行っている。

7章 8章においては今回対象となったトレーサー試験とその実施されたサイトに関する要点の整理を 行っている。また,9章では逆解析の結果をまとめ,10章ではその結果の評価,11章では逆解析結果の サイト性能の予測解析への使用方法を示している。

最後に12章で全体の総括を行っている。

2. 核種移行解析コード LTG の概要

核燃料サイクル開発機構保有の核種移行解析コードLTGの概要を以下に示す。

2.1 核種移行支配方程式

核種は,図 2-1に示すように割れ目ネットワークモデルの割れ目交線の中点を連結したチャンネルネットワークモデルの各チャンネル内を地下水の流れに沿って亀裂中を移流分散し,その一部は亀裂表面から岩石基質中にマトリクス拡散して岩石鉱物表面への収着により遅延される(図 2-2参照)。亀裂中および岩石基質中の核種nの移行支配方程式は,それぞれ以下のように表される¹⁾。

$$A(\ell) \left[R_n(\ell) \frac{\mathscr{R}_n}{\mathscr{R}} + q(\ell) \frac{\mathscr{R}_n}{\mathscr{R}} - \frac{\mathscr{R}}{\mathscr{R}} D_L(\ell) \frac{\mathscr{R}_n}{\mathscr{R}} + R_n(\ell) I_n C_n - R_{n-1}(\ell) I_{n-1} C_{n-1} \right] + Q(\ell') (C_n - C'_n) d(\ell - \ell') + W(\ell) F q^m D^m \frac{\mathscr{R}_n^m}{\mathscr{R}} \bigg|_{w=0} = 0$$

$$(2.1)$$

$$R_{n}^{m} \frac{\P C_{n}^{m}}{\P t} - \frac{\P}{\P w} D^{m} \frac{\P C_{n}^{m}}{\P w} + R_{n}^{m} I_{n} C_{n}^{m} - R_{n-1}^{m} I_{n-1} C_{n-1}^{m} = 0$$
(2.2)

ここに,上添え字*m*は岩石基質を表し,A(l)は亀裂断面積[m²],q(l)は亀裂内流速[m/s], $D_L(l)$ は縦方向 分散係数[m²/s] (= $_Lq(l)+D_o$), $_L$ は縦方向分散長[m], D_o は自由水中の拡散係数[m²/s], *n*は崩壊定数 [1/s],Q(l')は外部流出入量[m³/s], はディラックのデルタ関数,W(l)は亀裂幅[m],F は亀裂単位面積 あたりのマトリクス拡散に寄与する面積の割合[-], ^{*m*}は岩石基質部の有効間隙率[-], D^m は岩石基質間 隙中の拡散係数[m²/s], C_n , C_n^m , C_n , はそれぞれ亀裂,岩石基質,外部流出入源の濃度[mol/m³],lは亀 裂ネットワーク中の位置座標[m],l,'は外部流出入点の位置座標[m], は亀裂面に法線方向の距離[m](0)

d), dはマトリクス拡散深さ[m], tは時間[s]を表す。また, $R_n(l)$ および R_n^m は遅延係数でそれぞれ以下のように表される。

$$R_{n}(\ell) = 1 + \frac{Ka_{n}}{b(\ell)} , \quad R_{n}^{m} = 1 + \frac{\mathbf{r}^{m}Kd_{n}}{\mathbf{q}^{m}}$$
(2.3)

ここに Ka_n は亀裂表面への分配係数[m] p(l)は亀裂開口幅の 1/2[m], ^mは岩石基質の乾燥密度[kg/m³], Kd_n は岩石鉱物への分配係数[m³/kg]を示す。

初期条件(t=0)は,

$$C_n = f(\ell) \tag{2.4}$$

$$C_n^m = f^m(\mathbf{W}) \tag{2.5}$$

と表され,処分坑道周辺の緩み域および解析領域の下流側断面における境界条件は,以下のように表 される。

$$q(\ell)C_n - D_L(\ell)\frac{\partial C_n}{\partial \ell} = q^0(\ell)C_n^0(\ell)$$
(2.6)

ここに, $q^{0}(l)$ は固定流速[m/s], $C_{n}^{0}(t)$ は固定濃度[mol/m³]を表す。亀裂表面(=0)およびマトリクス 拡散深さ(=d)における境界条件は,それぞれ以下のように表される。

$$C_n^m(\ell, \boldsymbol{w}, t) = C_n(\ell, t) \quad (\boldsymbol{w}=0)$$
(2.7)



図 2-2 亀裂中の核種移行概念図

2.2 ラプラス変換有限要素法

上記問題に対してラプラス変換を用いて支配方程式中の時間微分項を消去するとともにマトリクス 拡散項を簡単な式に変換する。ラプラス空間上で有限要素法により各節点の濃度を計算し,逆ラプラス 変換により各節点濃度の時間履歴を算定する。時間ステップが不要なため効率的に時間領域の計算が実 行できるうえに,マルチプロセッサーのコンピュータを用いたパラレル処理によって高速化も可能とな る。また,クーラン数による制約がないため,流速の大きな移流支配の亀裂中と流速の小さい拡散支配 の岩石基質中を同時に解く場合でも離散化が粗くても比較的精度の良い解を得ることができる(Sudicky, 1990)²⁾。

(1) 支配方程式のラプラス変換

関数 $C_n(\ell,t)$ のラプラス変換は Lをラプラス変換演算子として複素数pをパラメータとする関数で表される。

$$L[C_n] = \overline{C}_n(\ell, p) = \int_0^\infty C_n(\ell, t) e^{-pt} dt$$
(2.9)

$$L\left[\frac{dC_n}{dt}\right] = p\overline{C}_n - C_n\big|_{t=0}$$
(2.10)

したがって,支配方程式(2.1)は以下のように表される。

$$\begin{bmatrix} A(\ell)R_{n}(\ell)(p+\boldsymbol{I}_{n})+\overline{g}-\sum_{k=1}^{n-1}G_{n,k}^{m}\end{bmatrix}\overline{C}_{n}+A(\ell)\left[q(\ell)\frac{\boldsymbol{\varPi}\overline{C}_{n}}{\boldsymbol{\varPi}\ell}-\frac{\boldsymbol{\varPi}}{\boldsymbol{\varPi}\ell}D_{L}(\ell)\frac{\boldsymbol{\varPi}\overline{C}_{n}}{\boldsymbol{\varPi}\ell}-R_{n-1}(\ell)\boldsymbol{I}_{n-1}\overline{C}_{n-1}\right] +Q(\ell')\left(\overline{C}_{n}-\overline{C}_{n}'\right)\boldsymbol{d}(\ell-\ell')=A(\ell)R_{n}(\ell)C_{n}\big|_{t=0}$$
(2.11)

ここに,

$$\overline{g} = W(\ell) F \boldsymbol{q}^m \boldsymbol{D}^m \boldsymbol{b}_n \tanh(\boldsymbol{b}_n d)$$
(2.12)

$$\boldsymbol{b}_{n} = \sqrt{\frac{R_{n}^{m}(\boldsymbol{p} + \boldsymbol{I}_{n})}{D^{m}}}$$
(2.13)

$$G_{n,k}^{m} = -W(\ell)F\boldsymbol{q}^{m}D^{m} \times \sum_{j=k}^{n} \left[\frac{\prod_{i=k}^{n-1} (\boldsymbol{I}_{i}R_{i}^{m})}{\prod_{\substack{i=k\\i\neq j}}^{n} [R_{i}^{m}(p+\boldsymbol{I}_{i}) - R_{j}^{m}(p+\boldsymbol{I}_{j})]} \cdot \boldsymbol{b}_{j} \tanh(\boldsymbol{b}_{j}d) \right]$$
(2.14)

また,境界条件式(2.6)は,以下のように書き直される。

$$q(\ell)\overline{C}_n - D_L(\ell)\frac{\partial\overline{C}_n}{\partial\ell} = q^0(\ell)\overline{C}_n^0(p)$$
(2.15)

(2) ラプラス空間における有限要素法

ガラーキン法を用いた有限要素法により式(2.11)を解く。空間を離散化し,近似解 \hat{c}_n を以下のように 設定する。

$$\overline{C}_n \approx \widehat{\overline{C}}_n = \sum_{j=1}^M \overline{C}_{n,j}(p) w_j(\ell)$$
(2.16)

ここに, $w_j(l)$ は基底関数,Mは節点数, $\overline{C}_{n,j}(p)$ は節点jにおけるラプラス空間上の濃度を表す。式(2.11)は

$$\mathcal{L}(\overline{C}_n) = 0 \tag{2.17}$$

と表される。ガラーキン法では重み関数に基底関数を用いて領域の近似解に関して次式を得る。

$$\int_{\Omega} \mathcal{L}(\hat{\overline{C}}_n) w_i d\Omega = 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, M$$
(2.18)

グリーンの定理を用いて次式を得る。

$$\begin{split} &\sum_{j=1}^{M} \overline{C}_{n,j} \left\{ \sum_{e} \int_{\Omega^{e}} \left[\left(A(\ell) R_{n}(\ell) (p + \boldsymbol{I}_{n}) + \overline{g} - \sum_{k=1}^{n-1} G_{n,k}^{m} \right) w_{i} w_{j} \right. \\ &+ A(\ell) \left(q(\ell) \frac{\partial w_{j}}{\partial \ell} w_{i} + D_{L} \frac{\partial w_{i}}{\partial \ell} \frac{\partial w_{i}}{\partial \ell} \right) \right] d\ell \right\} - \sum_{j=1}^{M} \overline{C}_{n-1,j} \left\{ \sum_{e} A(\ell) R_{n-1}(\ell) \boldsymbol{I}_{n-1} \int_{\Omega^{e}} w_{i} w_{j} d\ell \right\} \\ &+ \sum_{j=1}^{M} \mathcal{Q}(\ell') \left(\overline{C}_{n,j} - \overline{C}_{n,j}' \right) d(\ell - \ell') - \sum_{j=1}^{M} \sum_{e} A(\ell) \int_{\Gamma^{e}} D_{L} \frac{\partial \widehat{C}_{n,j}}{\partial n} w_{i} d\Gamma \\ &= \sum_{j=1}^{M} C_{n} \Big|_{t=0} \sum_{e} A(\ell) R_{n}(\ell) \int_{\Omega^{e}} w_{i} w_{j} d\ell \quad i = 1, 2, \cdots, M \end{split}$$

(2.19)式は以下のように表される。

$$\left(\left[E \right] + \left(A(\ell) R_n(\ell) \left(p + \boldsymbol{I}_n \right) + \overline{g}_n - \sum_{k=1}^{n-1} G_{n,k}^m \right) M \right] \right) \left[\overline{C}_n \right\} - \left(A(\ell) R_{n-1}(\ell) \boldsymbol{I}_{n-1} \right) \left[M \right] \left[\overline{C}_{n-1} \right] \\
= \left(A(\ell) R_n(\ell) \right) \left[M \right] \left[\overline{C}_n \right]_{\ell=0} + \left\{ \overline{B} \right\}$$
(2.20)

ここに,[*E*]は移流分散行列,[*M*]は質量行列, $\{\overline{c}_n\}$ はラプラス空間上の節点濃度を表す未知ベクトル, $\{\overline{c}_n\}_{=0}$ は初期条件を表す既知ベクトル, $\{\overline{B}\}$ はラプラス空間上の境界条件および外部流出入量を表す既知ベクトルである。この非対称の複素数行列を解いて,ラプラス空間上の節点濃度を計算する。

(3) 逆ラプラス変換

求めたラプラス空間上の各節点の濃度から逆ラプラス変換により時間 t の各節点の濃度を計算する。

$$\hat{C}_{n}(\ell,t) = \sum_{j=1}^{M} L^{-1} \Big[\overline{C}_{n,j}(p_{k}) \Big] w_{j}(\ell) = \sum_{j=1}^{M} C_{n,j}(t) w_{j}(\ell)$$
(2.21)

逆ラプラス変換の数値解法として de Hoog et al. (1982)³⁾の方法を用い,異なる *p*_k(*k*=0, 1,..., 2*K*)に対して(2.20)式を解く。

$$C_{n,j}(t) = \frac{1}{T} \exp(p_0 t) \left\{ \frac{1}{2} \overline{C}_{n,j}(p_0) + \sum_{k=1}^{2K} \operatorname{Re}\left[\overline{C}_{n,j}\left(p_0 + \frac{k \boldsymbol{p} \boldsymbol{i}}{T} \right) \exp\left(\frac{k \boldsymbol{p} \boldsymbol{i}}{T} \right) \right] \right\} + E$$
(2.22)

ここに,2*T* はフーリエ級数の区間[0,2*T*],Re はラプラス空間上の節点濃度の実数部, $p_0+k\mathbf{p}i/T=p_k$, $i=(-1)^{1/2}$ を表し *E* は誤差で10⁻⁴から10⁻⁶の値を用いると解の精度が高くなることが知られている。また, 収束のため通常 K=5 を用い,パラメータ p₀は次式により与えられる。

$$p_0 = m - \ln(E)/2T$$
 (2.23)

ここに, *t*_{max}を最大計算時間として経験的に µ =0, *T*=0.8*t*_{max}が用いられる。

3. 逆解析手法

3.1 解析手法の概要

逆解析手法としては Carrera and Neuman (1986)^{4),5),6)}の手法を踏襲する。すなわち,得られたパラメ ータ推定値の不確実性(誤差)を評価できるように観測値の不確実性を表す共分散行列を入力可能な最 尤推定法を用いて,観測値と計算値の残差二乗和で表される目的関数を最小化する最適パラメータを推 定する。また,複数のモデルの中から最適なモデルを評価できるようにエントロピー最大化原理に基づ く赤池の情報量基準を算定できるものとする。逆解析プログラムの作成にあたっては,ヤコビアン行列 の算定には数値微分を用い,オリジナルのコードは書き換えないこととする。逆解析のフローを図 3-1 に示す。



図 3-1 逆解析フロー

3.2 最尤推定法

3.2.1 尤度関数

ある観測値zに対する母集団の確率分布 P(z)は z_0 を平均値の真値として図 3-2(a)のように表される。 実際に得られた観測値は、この母集団から無作為に抽出された標本であり、その中のある観測値 z_i に対する尤度関数は、図 3-2(b)に示すようにもとの確率分布関数と同型の分布を示すと考えられ、式(3.1)のように表される。

 $L(\hat{z}) = L(\hat{z}|z) = P(z|\hat{z})$ (3.1)

ここに, \hat{z} は平均値の推定値を表す。尤度関数の値が大きい場合は観測値 zに対して真値 z_0 が推定値にある可能性が高く,逆に尤度関数の値が小さい場合は推定値にある可能性は低くなる。さらに測定を繰返して複数の観測値が得られた場合には,それぞれの観測値 z_i に対する尤度関数は図 3-2(c)の点線のようになる。推定値 \hat{z} の尤度関数は,これらの尤度関数の積により求められ,式(3.2)のように表される(図 3-2(c)中の実線)。

$$L(\hat{z}) = L(\hat{z}|z_1, z_2, \cdots, z_n) = \prod_{i=1}^n L(\hat{z}|z_i)$$
(3.2)

この尤度関数が最大となる値を真値 zoの最尤推定値とする。観測値の数が多くなるほど,尤度関数の 最尤推定値 2 が真値 zo に近づき,また,尤度関数の幅はもとの確率分布関数よりも狭くなる。



図 3-2 尤度関数模式図(中川・小柳, 1982)⁷⁾

3.2.2 最尤推定法(Maximum Likelihood estimation: ML法)

最尤推定法によるパラメータ値の推定方法について述べる。一般に最尤推定法は得られた観測値のベ クトル*z**のもとで最も確からしいパラメータを求める問題となり,特に核種移行問題への適用を念頭に おけば,式(3.3)のように表される.

$$L(\hat{a}|z^{*}) \longrightarrow \max$$

$$\hat{a} = (p, \hat{e})^{\mathrm{T}}$$

$$\hat{e} = (\mathbf{s}_{c}^{2}, \mathbf{s}_{p}^{2})^{\mathrm{T}}$$

$$z^{*} = (\mathbf{c}^{*}, \mathbf{p}^{*})$$
(3.3)

ここで, $L(b \mid z^*)$:尤度関数, $b = (p, q)^T$:全ての未知量をまとめて示したベクトル,p:未知パラメ ータ, $q = (s_c^2, s_p^2)^T$ は濃度,パラメータの未知統計量からなるベクトル, s_c^2 :濃度の未知統計量(分散), s_p^2 :パラメータの未知統計量(分散), $z^* = (c^*, p^*)^T$:濃度とパラメータの観測値のベクトル, c^* :濃度 の観測値, p^* :パラメータの観測値である。

尤度関数 $L(\hat{a} / z^*)$ は推定値 **b**のもとで z^* が観測される確率と考えられるので,その確率密度関数を $f(z^* / \hat{a})$ とすると,式(3.3)は式(3.4)のように表される。

 $L(\hat{a}|z^*) = f(z^*|\hat{a}) \longrightarrow \max$ (3.4)

上式はあるbのもとで z^* が観測される確率が最大となるとき,そのbを最尤推定値として採用することを意味している。いま,bの条件下で得られる観測値 z^* の分布 $f(z^*/\hat{a})$ を,bの条件下で得られる計算値zを平均値とする正規分布であると考えると $L(\hat{a}/z^*)$ は式(3.5)のようになる。

$$L(\hat{a}|z^{*}) = f(z^{*}|\hat{a}) = \frac{1}{\sqrt{2\boldsymbol{p}\cdot|\boldsymbol{C}_{z}|}} \exp\left[-\frac{1}{2}(z^{*}-z)^{T}\boldsymbol{C}_{z}^{-1}(z^{*}-z)\right]$$
(3.5)

ここで,*z*:濃度やパラメータの計算値のベクトル,*C_z*:事前誤差の共分散行列である。なお,測定点の間隔が十分に疎であれば,観測値が互いに独立で相関が無くなるため,*C_z*は対角行列となり式(3.6)のように表される。

$$\boldsymbol{C}_{z} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{C}_{c} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{C}_{p} \end{bmatrix}$$
(3.6)

ここで, C_c : 濃度の共分散行列, C_p : パラメータの共分散行列である。 さらに, $C_c \geq C_p$ は式 (3.7)と式 (3.8)のように表される。

$$\boldsymbol{C}_{c} = \boldsymbol{S}_{c}^{2} \cdot \boldsymbol{V}_{c} \tag{3.7}$$

$$\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{p}}^2 \cdot \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{p}}$$
(3.8)

ここで, \mathbf{s}_{e}^{2} :濃度の事前誤差の分散, V_{e} :濃度の観測値間の誤差の相対的割合を示す正値の対角行列, \mathbf{s}_{p}^{2} :パラメータの事前誤差の分散, V_{p} :パラメータの観測値間の誤差の相対的割合を示す正値の対角行列である。

一般に, $C_c \geq C_p$ は未知の場合が多いため, $V_c \geq V_p$ は単位行列, $\mathbf{s}_c^2 \geq \mathbf{s}_p^2$ は濃度観測値およびパラメ ータ観測値の分散が使用される。

一方,時間的にも空間的にも測定点の間隔を密にすると隣接する観測値の誤差間に相関が強くなるため,式(3.6)~(3.8)の C_z , V_c , V_p の非対角成分は0 ではなくなる。本研究では, C_z の非対角成分が0 でなくなる場合は考慮しないことにした。

次に,観測値やパラメータが複数ある場合の尤度関数は,式(3.2)のように単独の場合の尤度関数の 積により表され,トレーサ濃度観測値総数を N_c,パラメータ観測値総数を N_p とすると以下のように表 される。

$$L(\hat{a}|z^{*}) = \prod_{i=1}^{N_{c}+N_{p}} L(\hat{a}|z_{i}) = \prod_{i=1}^{N_{c}+N_{p}} f(z_{i}|\hat{a})$$
(3.9)

式(3.9)は,同時確率密度関数により式(3.10)のように表される。

$$L(\hat{a}|z^{*}) = \frac{1}{(2p)^{\frac{N_{c}+N_{p}}{2}}|C_{c}|^{\frac{N_{c}}{2}}|C_{p}|^{\frac{N_{p}}{2}}} \\ \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_{c}}\left\{\!\!\left(\boldsymbol{c}^{*}_{i}-\boldsymbol{c}\right)^{T}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\left(\!\boldsymbol{c}^{*}_{i}-\boldsymbol{c}\right)\!\!\right\}\!\!-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_{p}}\left\{\!\!\left(\boldsymbol{p}^{*}_{i}-\boldsymbol{p}\right)^{T}\boldsymbol{C}_{p}^{-1}\left(\boldsymbol{p}^{*}_{i}-\boldsymbol{p}\right)\!\!\right\}\!\right]$$
(3.10)

ここで,*c*:濃度の計算値ベクトル,*p*:*c*を計算する際に用いるパラメータのベクトルである。 本研究では,式(3.10)を書き換えた式(3.11)を目的関数Sとして採用した。

$$S = -2\ln\left[L(\hat{a}|z^*)\right] \longrightarrow \min$$
(3.11)

式(3.11)に式(3.10)を代入して式(3.12)を得る。

$$S = \frac{J_c}{\boldsymbol{s}_c^2} + \frac{J_p}{\boldsymbol{s}_p^2} + N_c \ln |\boldsymbol{V}_c| + N_p \ln |\boldsymbol{V}_p| + N_c \ln \boldsymbol{s}_c^2 + N_p \ln \boldsymbol{s}_p^2 + (N_c + N_p) \ln(2\boldsymbol{p}) \rightarrow \min$$
(3.12)

ここで, J_c :濃度観測値と濃度計算値の残差二乗和, J_p :パラメータ観測値と濃度計算時に用いるパラメータ値の残差二乗和であり,それぞれ式(3.13)と式(3.14)で表される.

$$J_{c} = \sum_{i=1}^{N_{c}} \left\{ \left(\boldsymbol{c}^{*}_{i} - \boldsymbol{c} \right)^{T} \boldsymbol{V}_{c}^{-1} \left(\boldsymbol{c}^{*}_{i} - \boldsymbol{c} \right) \right\}$$
(3.13)

$$J_{p} = \sum_{i=1}^{N_{p}} \left\{ \left(\boldsymbol{p}^{*}_{i} - \boldsymbol{p} \right)^{T} \boldsymbol{V}_{p}^{-1} \left(\boldsymbol{p}^{*}_{i} - \boldsymbol{p} \right) \right\}$$
(3.14)

 \mathbf{s}^2 \mathbf{s}^2 が既知の場合と未知の場合でSの解法は異なる。以下にそれぞれの場合について解法を示す。

(1) 分散が既知の場合

分散s²およびs²が既知の場合,式(3.12)は定数項を除いて式(3.15)のように書きかえることができる。

$$S_{k} = \frac{J_{c}}{\boldsymbol{s}_{c}^{2}} + \frac{J_{p}}{\boldsymbol{s}_{p}^{2}} \to \min$$
(3.15)

ここで, *S_k*:分散が既知の場合の目的関数である。
 さらに,式(3.15)を変形して式(3.16)の目的関数 *J_k*を得る。

$$J_k = J_c + I_k J_p \tag{3.16}$$

ここで, J_k : I_k を導入した分散が既知の場合の目的関数である。ただし, I_k は濃度の分散とパラメータの分散の比であり式(3.17)で表されるものとする。

$$\boldsymbol{I}_{k} = \frac{\boldsymbol{S}_{c}^{2}}{\boldsymbol{S}_{p}^{2}}$$
(3.17)

以上より,分散が既知の場合の最尤推定法は,観測値誤差の分散で重み付けされた残差二乗和を最小 にする最小二乗法となる。

(2) 分散が未知の場合

分散 s² および s² が未知の場合,定数項を除いて式(3.12)は式(3.18)のように表される。

$$S_{u} = \frac{J_{c}}{\boldsymbol{s}_{c}^{2}} + \frac{J_{p}}{\boldsymbol{s}_{p}^{2}} + N_{c} \ln \boldsymbol{s}_{c}^{2} + N_{p} \ln \boldsymbol{s}_{p}^{2} \rightarrow \min$$
(3.18)

この最小化の過程では分散値が未知数なので,分散値を仮定する必要がある。本検討では母分散を標本分散で置き換え,式(3.18)の第三項,第四項を定数項と見なして式(3.19)の最小化問題を取り扱う。

$$S_{u} = \frac{J_{c}}{s_{c}^{2}} + \frac{J_{p}}{s_{p}^{2}}$$
(3.19)

ここで s_c^2 : 濃度観測値の計算値まわりの標本分散, s_p^2 : パラメータ観測値の計算値まわりの標本分散 である。式(3.19)は式(3.15)と同形であるので,分散が既知の場合と同様に,式(3.19)を式(3.20)のように 書き直す。

$$\boldsymbol{J}_{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{c}} + \boldsymbol{I}_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{p}} \tag{3.20}$$

ここで, I_u は式(3.21)で表される値である。

$$\boldsymbol{I}_{u} = \frac{\boldsymbol{s}_{c}^{2}}{\boldsymbol{s}_{p}^{2}} \tag{3.21}$$

また, s_c^2 , s_p^2 は次式により算定される。

$$s_c^2 = \frac{J_c}{N_c}, \quad s_p^2 = \frac{J_p}{N_p}$$
 (3.22)

すなわち,分散が未知の場合の最尤推定法は,各同定ステップで得られた標本分散を次ステップの母 分散推定値として扱うことにより,式(3.18)の替わりに式(3.20)の最小化問題を行う。標本分散が決定で きない最初の同定ステップについては初期値を1_u=1として式(3.20)の最小化を開始する。また,最適分 散値の決定については,各同定ステップにおける1_uの変化が十分に小さくなった段階で最適値とする。 3.3 非線形最小二乗法

最適化のための非線形最小二乗法のフローを図 3-3に示す。ここでは,定常問題および非定常問題に おける非線形最小二乗法と収束判定基準について述べる。



図 3-3 非線形最小二乗法フロー

3.3.1 定常問題

水理問題や物質移行問題は,パラメータに関して非線形であるため,パラメータ初期値を設定して残 差二乗和を最小にするパラメータ最適値を反復計算により求める非線形最小二乗法を用いる必要があ る。非線形最小二乗法には,可変計量法,共役勾配法,シンプレックス法など様々な手法があるものの, 目的関数が二乗和の形式であることを積極的に活用した手法の方が収束も速く精度も良いことが知ら れている。そこで,最も単純な最小化アルゴリズムとして,各繰り返し計算において目的関数の減少が 局所的に最大となる方向にそって探索する最急降下法について説明し,線形近似による反復解法である ガウス・ニュートン法と本プログラムで採用したマルカート法について以下に述べる。

(1) 最急降下法

初期推定値のベクトルpから方向dにの距離だけ動いたとき,目的関数の変化はテイラー展開して 2次以上の高次項を無視すれば(3.23)のように表される。

$$S(\boldsymbol{p} + \boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{d}) = S(\boldsymbol{p}) + \boldsymbol{d} \left(\sum_{j=1}^{N_p} d_j \frac{\partial S}{\partial p_j} \right)$$
(3.23)

ここで, :パラメータの変化量(スカラー),*d* は方向ベクトル,*d_j*:方向ベクトルのj 成分である。 いま,式(3.24)のように方向ベクトル*d*の成分*d_j*を最急降下方向*g*の成分*g_j*と等しくとれば,目的関数 S は距離あたり最も大きく減少する。

$$d_{j} = g_{j} \equiv -\frac{\partial S}{\partial p_{j}} \qquad (j=1,2, \cdots, N_{p}) \qquad (3.24)$$

このとき,パラメータの修正ベクトルは式(3.25)で与えられる。

$$\Delta p_{j} = \boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{d}_{j} = -\boldsymbol{d} \cdot \frac{\partial S}{\partial p_{j}} \qquad (j=1,2, \cdot \cdot \cdot N_{p}) \qquad (3.25)$$

また,パラメータは式(3.26)に従い更新する。

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k + \ddot{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{p}_k \tag{3.26}$$

ここで, p_k : ステップ回数 k でのパラメータ修正ベクトル, p_k : ステップ回数 k でのパラメータベクトル値, p_{k+1} : ステップ回数 k+1 でのパラメータベクトル値である。

すなわち,反復計算の各回において,目的関数Sの偏微分を計算して最急降下方向gを求め, p_k から方向gの直線上に極小点を探して次の出発点 p_{k+l} とする。最急降下方向gは,局所的には最良の方向であるが,大局的には必ずしも良い方向ではないため,実際には良い結果は得られないことが多い。

(2) ニュートン法

目的関数が p で極小値を取ると次式を満たす。

$$f(\boldsymbol{p}) = \frac{\partial S}{\partial p_j}\Big|_{p=\hat{p}} = 0 \qquad (j = 1, 2, \cdots, N_p)$$
(3.27)

上式を満たす点を S の停留点と呼び,この点が極小点かどうかは 2 階以上の偏微分行列によって決まるが,連立非線形方程式(3.27)の解が求まれば,極小かどうかの判定は困難ではない。

そこで、この連立非線形方程式を解く方法としてニュートン・ラプソン法を適用する。ニュートン・

ラプソン法は,式(3.28)で与えられる。

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k - \frac{f(\boldsymbol{p}_k)}{f'(\boldsymbol{p}_k)}$$
(3.28)

式(3.28)より,修正ベクトル *p*_kは式(3.29)で表される。

$$\ddot{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{p}_{k} = \boldsymbol{p}_{k+1} - \boldsymbol{p}_{k} = -\frac{f(\boldsymbol{p}_{k})}{f'(\boldsymbol{p}_{k})}$$
(3.29)

式(3.29)より,明らかに式(3.30)が成立する。

$$\boldsymbol{D}\boldsymbol{p} \cdot f'(\boldsymbol{p}_k) = -f(\boldsymbol{p}_k) \tag{3.30}$$

式(3.27)に式(3.29)を代入すると式(3.31)となる。

$$\sum_{i=1}^{N_p} \frac{\partial^2 S}{\partial p_j \partial p_i} \bigg|_{p=p_k} \mathbf{D}_{k,i} = -\frac{\partial S}{\partial p_j} \bigg|_{p=p_k} \qquad (j = 1, 2, \cdots, N_p)$$
(3.31)

ここで p_{ki} :ステップ k における修正ベクトル p_k の i 成分である。

次に,パラメータに関する項が無視できる場合の具体的な例でニュートン・ラプソン法を説明する。 パラメータに関する項を無視すると,目的関数は式(3.32)のようになる。

$$S = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{\{\boldsymbol{c}^*_{i} - \boldsymbol{c}\}^T \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{c}}^{-1} \{\boldsymbol{c}^*_{i} - \boldsymbol{c}\}}{\boldsymbol{S}_c^2} = \sum_{i=1}^{N_c} \{\boldsymbol{c}^*_{i} - \boldsymbol{c}\}^T \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{c}}^{-1} \{\boldsymbol{c}^*_{i} - \boldsymbol{c}\}$$
(3.32)

ここで, $c_i^* = (c_{i,1}^*, c_{i,2}^*, \cdots, c_{i,N^o}^*)$: 各測定箇所における i 回目の観測値, N_o :測定箇所数である。 V_c を単位行列とすると,式(3.32)は式(3.33)のように展開される。

$$S = \frac{1}{\mathbf{s}_{c}^{2}} \left\{ \left(c_{1,1}^{*} - c_{1}^{*} \right)^{2} + \left(c_{1,2}^{*} - c_{2}^{*} \right)^{2} + \dots + \left(c_{2,1}^{*} - c_{1}^{*} \right)^{2} + \left(c_{2,2}^{*} - c_{2}^{*} \right)^{2} + \dots + \left(c_{N_{c},N_{q}}^{*} - c_{N_{q}}^{*} \right)^{2} \right\}$$
(3.33)

式(3.33)は $N_c \times N_o$ 個の観測値と計算値の残差二乗和となる。今,観測値のベクトル c^* を式(3.34)のよう

におくと,式(3.32)は式(3.35)のように表される。

$$\boldsymbol{c}^{*} = \left(c_{1,1}^{*}, c_{1,2}^{*}, \cdots, c_{1,N_{o}}^{*}, c_{2,1}^{*}, c_{2,2}^{*}, \cdots, c_{2,N_{o}}^{*}, \cdots, c_{N_{c},1}^{*}, c_{N_{c},2}^{*}, \cdots, c_{N_{c},N_{o}}^{*}\right)$$
(3.34)

$$S = \frac{\{\boldsymbol{c}^* - \boldsymbol{c}\}^T \boldsymbol{V}_c^{-1} \{\boldsymbol{c}^* - \boldsymbol{c}\}}{\boldsymbol{s}_c^2} = \{\boldsymbol{c}^* - \boldsymbol{c}\}^T \boldsymbol{C}_c^{-1} \{\boldsymbol{c}^* - \boldsymbol{c}\}$$
(3.35)

式(3.35)を微分すると,式(3.36)と式(3.37)が成立する。

$$-\frac{\partial S}{\partial p_{j}} = 2\left[\sum_{i} \frac{\partial c_{i}}{\partial p_{j}} c_{ci}^{-1} \left\{c_{i}^{*} - c_{i}\right\}\right] = 2\boldsymbol{J}^{T} \boldsymbol{C}_{c}^{-1} \left\{c_{i}^{*} - c_{i}\right\}$$
(3.36)

$$\frac{\partial^2 S}{\partial p_j \partial p_k} = 2 \sum_i \left[\frac{\partial c_i}{\partial p_j} c_{c,i}^{-1} \frac{\partial c_i}{\partial p_k} - \frac{\partial^2 c_i}{\partial p_j \partial p_k} c_{c,i}^{-1} \{c_i^* - c_i\} \right]$$

$$= 2 \left[J^T C_c^{-1} J - H C_c^{-1} \{c^* - c\} \right]$$
(3.37)

ここで, c_i :濃度計算値のベクトルの成分, c_i^* :濃度観測値ベクトルの成分, $c_{c_i}^{-1}$:濃度の誤差(分散) を表す行列の第i番目の対角要素,J:ヤコビアン行列,H: $N_p \times N_p$ のヘシアン行列である。式(3.36) と式(3.37)を式(3.31)に代入すると式(3.38)となる。

$$\left[\boldsymbol{J}^{T}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\boldsymbol{J}-\boldsymbol{H}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\left\{\boldsymbol{c}^{*}-\boldsymbol{c}\right\}\right]\cdot\boldsymbol{\ddot{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{J}^{T}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\left\{\boldsymbol{c}^{*}-\boldsymbol{c}\right\}$$
(3.38)

したがって,ニュートン法においては,式(3.39)により修正ベクトル pを求めることとなる。

$$\ddot{A}p = \left[J^{T}C_{c}^{-1}J - HC_{c}^{-1}\left\{c^{*} - c\right\}\right]^{-1} \cdot J^{T}C_{c}^{-1}\left\{c^{*} - c\right\}$$
(3.39)

通常,ヘシアン行列の逆行列を求めるのは容易ではないため,簡単に単位行列を用いることもある。 ニュートン法は,(3.37)式が極小点付近で正定値である場合,解 p の近傍から出発すれば二次収束す るため収束は非常に速い。その反面,極小点まわりの収束領域が非常に狭いことが多く,反復の各ステ ップで c の 2 階偏微分を計算する必要があり,このままでは実用的でない。そこで,次に,この 2 階偏 微分の計算をしない方法としてガウス・ニュートン法系の最小二乗法について述べる。

(3) ガウス・ニュートン法 (Gauss-Newton method)

ニュートン法における式(3.39)の右辺第2項を無視した場合には,ガウス・ニュートン法となり式(3.40) で表される。

$$\ddot{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{p} = \left[\boldsymbol{J}^{T}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\boldsymbol{J}\right]^{-1} \cdot \boldsymbol{J}^{T}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\left\{\boldsymbol{c}^{*}-\boldsymbol{c}\right\}$$
(3.40)

実際,式(3.39)の右辺第2項は,目的関数(3.35)がパラメータに関して線形である場合や右辺第1項に 比較して小さい場合(例えば,計算値と観測値の差が小さい)には無視できる。また,モデルが妥当で あれば,右辺第2項は正規分布をなす各観測点の誤差になるため,無視しても最終計算結果にはほとん ど影響を与えない。

ガウス・ニュートン法では c の 2 階偏微分を計算する必要がなく,2 階微分が小さく線形に近い場合や,残差 { c^* -c} が小さい場合には有効である。しかし,解に近い値を与えた場合には速やかに収束するものの,残差二乗和が反復の各ステップで減少することは保証されていないため,初期値が真の解から大きく離れている場合やcの非線形性が大きい場合には安定性が悪く,解の安定化について検討する必要がある。

(4) マルカート法 (Levenberg-Marquardt method)

式(3.25)に式(3.36)を代入すると,式(3.41)となる。

$$\ddot{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{p} = -\ddot{\boldsymbol{a}} \cdot \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{p}} = \boldsymbol{I} \cdot \left[\boldsymbol{J}^{T} \boldsymbol{C}_{c}^{-1} \left\{ \boldsymbol{c}^{*} - \boldsymbol{c} \right\} \right]$$
(3.41)

となる。ここに、は0または正のスカラー量である。

マルカート法は,ガウス・ニュートン法と最急降下法の長所を活かした折衷手法で,式(3.40)と(3.41) より正規方程式の係数行列の対角要素に付加項を加えた次式により修正ベクトルを計算する。

$$\ddot{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{p} = \left[\boldsymbol{J}^{T}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\boldsymbol{J} + \boldsymbol{I}\boldsymbol{I}\right]^{-1} \cdot \boldsymbol{J}^{\hat{\boldsymbol{O}}}\boldsymbol{C}_{c}^{-1}\left\{\boldsymbol{c}^{*} - \boldsymbol{c}\right\}$$
(3.42)

ここに,Iは単位行列である。したがって, =0 ならばガウス・ニュートン法そのものであり, を 無限大にすると最急降下法となる。すなわち,計算の初期の段階において解が遠く離れ非線形性の影響 が大きい場合には を大きく選び,反復計算の過程で解に近づくにつれて を小さくすることによって 解を安定にかつ早く求めることができる。

本プログラムでは, =0.001とし以下手順で計算を実施する。

残差二乗和 S(p_k) [式(3.35)]を計算する。
パラメータの修正ベクトルDp [式(3.42)]を計算する。
残差二乗和 S(p_k+Dp_k) [式(3.35)]を計算する。
S(p_k+Dp_k) S(p_k)の場合
に戻る。

 $S(p_k+\mathbf{D}p_k) < S(p_k)$ の場合 に進む。 パラメータを更新 [式(3.26)] して,収束条件を満たさなければ に戻る。

ヤコビアン行列の計算には,数値微分(influence coefficient method),感度方程式を用いる手法 (sensitivity equation method),アドジョイント方程式を用いる手法(variational method)があり,前2者 は(パラメータ数+1)回の計算,後者は(観測点数+1)回の計算が必要になり,パラメータ数が観測点 数より少ない場合には,前2者が有利で,多い場合には後者が有利となる。なお,ヤコビアン行列の算 定は,数値微分により算定し,中央差分法を用いることとする。

3.3.2 非定常問題

非定常問題の目的関数は,式(3.35)を参考にして式(3.43)のように表される。

$$S = \{\boldsymbol{c}_{0}^{*} - \boldsymbol{c}_{0}\}^{T} \boldsymbol{C}_{c0}^{-1} \{\boldsymbol{c}_{0}^{*} - \boldsymbol{c}_{0}\} + \sum_{t=1}^{ntime} \{\boldsymbol{c}_{t}^{*} - \boldsymbol{c}_{t}\}^{T} \boldsymbol{C}_{ct}^{-1} \{\boldsymbol{c}_{t}^{*} - \boldsymbol{c}_{t}\}$$
(3.43)

ここで, c_0^* :定常時の濃度観測値ベクトル, c_0 :定常時の濃度計算値ベクトル, C_{c0}^{-1} :定常時の濃度 の誤差(分散)を表す行列の逆行列, c_t^* :非定常時の濃度観測値ベクトル, c_t :非定常時の濃度計算 値ベクトル, C_{ct}^{-1} :非定常時の濃度の誤差(分散)を表す行列の逆行列である。また,*ntime* は時間ステ ップ数を表わす。

3.3.3 収束判定基準

収束の判定には,以下に示す5つの収束判定基準値を設定し,この基準値を満たした場合には繰返し 計算を終了する。すなわち,繰返し計算回数が多い場合,目的関数が小さくなった場合,目的関 数の変化が小さくなった場合,極小点近傍に収束しているためヤコビアン行列のノルムが小さくなった場合には,繰返し計算を終了する。

(1) 繰返し計算回数

 $niter \le 100 \tag{3.44}$

(2) 目的関数

$$J \le 10^{-5}$$
 (3.45)

(3) 目的関数の変化

$$\frac{\left|\Delta J\right|}{J} \le 10^{-5} \tag{3.46}$$

(4) 目的関数の勾配(現時点では設定しない)

$$\left\|\nabla J\right\| \le 10^{-5} \tag{3.47}$$

(5) 目的関数の勾配の変化(現時点では設定しない)

$$\frac{\left\|\nabla J\right\|}{\left\|\nabla J\right\|_{0}} \le 10^{-6} \tag{3.48}$$

また,分散が未知の場合には,式(3.21)で表わされる重みの収束条件として,重みの変化が小さくなった場合には,重みの更新を終了する。

(6) 重み の変化

$$\frac{|\Delta \boldsymbol{I}|}{\boldsymbol{I}} \le 10^{-3} \tag{3.49}$$

一連の最小化アルゴリズムのフローを図 3-4に示す。


図 3-4 最小化アルゴリズムの詳細フロー

3.4 線形推定誤差解析

逆解析により得られたパラメータ推定値の線形誤差解析(Linear Estimation Error Analysis)について述べる。まず,パラメータ推定値の共分散行列を求め,この分布特性からパラメータ推定値の誤差評価手法とその問題点について以下に述べる。

3.4.1 パラメータ推定値の共分散行列

パラメータの最尤推定値 p のごく近傍に対しては,非線形モデルの場合でも線形推定誤差解析を用いることができる。すなわち,最九推定法の正規性より,あるレベルの信頼性区間においては,観測値はパラメータの線形関数と見なすことができ,パラメータ推定値の確率分布は,パラメータの平均値(推定値)と共分散によって表わすことができる。

平均値は推定値そのものであり,また分散については,その下限値を以下に示すフィッシャー情報行 列 *F*_{ii}の逆行列で示すことができる(クラメール・ラオの下限)。

$$F_{ij} = \frac{1}{2} \cdot E\left[\frac{\partial^2 S}{\partial p_i p_j}\right]$$
(3.50)

ここで(3.12)式を代入し、2次以上の項を無視すると以下のように表わされる。

$$F_{ij} = \frac{1}{2} \cdot E\left[\frac{\partial^2 S}{\partial p_i p_j}\right] = E\left[\sum_r \sum_s \frac{\partial c_r}{\partial p_i} \frac{V_{crs}^{-1}}{\boldsymbol{s}_c^2} \frac{\partial c_s}{\partial p_j} + C_{pij}^{-1}\right]$$
(3.51)

このフィッシャー情報行列は,パラメータ推定値における対数尢度の頂点での曲率を表し,この値が 大きければ頂点は急峻でパラメータ推定値から少しずれただけで対数尢度の値は急激に減少し,逆にこ の値が小さければ頂点は扁平でパラメータ推定値周辺では対数尢度の値はあまり変化しない。このこと は,パラメータ推定値の推定量としての良さに対応する。

クラメール・ラオの下限値という観点から説明すれば,フィッシャーの情報量が大きくなるとクラメ ール・ラオの下限値が小さくなり,最小不偏分散量(Minimum Various Bound)が小さくなる。すなわち, とりうる分散の下限値が小さくなり,パラメータ推定値の精度が向上することとなる。

一方,最九推定量は標本数 N_cが大きくなるに従い,漸近的に多変量正規分布に従い,その共分散行列
 pは,このフィッシャー情報行列の逆行列で表わされるので,式(3.52)のような N_p次の正方行列となる
 (Bury, 1975)⁸⁾。

$$\acute{\boldsymbol{O}}_{p} = \left[\frac{1}{\boldsymbol{s}_{c}^{2}}\boldsymbol{J}^{T}\boldsymbol{V}_{c}^{-1}\boldsymbol{J} + \boldsymbol{C}_{p}^{-1}\right]^{-1}$$
(3.52)

ただし,Jはヤコビアン行列である。

(1) 分散が既知の場合

観測値の誤差の分散が既知の場合には,共分散行列は式(3.52)のように表わされ,特にパラメータに 関する事前情報がない場合には,式(3.53)のようになる。

$$\acute{\boldsymbol{O}}_{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{s}_{c}^{2} \left[\boldsymbol{J}^{T} \boldsymbol{V}_{c}^{-1} \boldsymbol{J} \right]^{-1}$$
(3.53)

したがって,得られた各パラメータ推定値は,その値を平均に共分散行列の値を分散に持つ正規分布 となる。この共分散行列は,観測値の誤差行列からパラメータ推定値の誤差行列への変換を表わし,一 般に誤差伝播則と呼ばれる。式(3.53)から,共分散行列は観測点のとり方やパラメータの選び方(ヤ コビアン行列),測定精度(観測値の誤差行列)に規定され,観測値そのものには規定されないことが わかる。

(2) 分散が未知の場合

分散が未知の場合には,最小二乗条件を満たすパラメータ \hat{p} を決定した後,そのあてはめ残差の大き さを用いて未知の比例定数 \hat{s}_c^2 を推定する。すなわち,未知量 s_c^2 を用いて最小二乗法の解の計算を行い, 式(3.54)により分散 \hat{s}_c^2 を求める。

$$\hat{s}_c^2 \equiv \frac{\boldsymbol{s}_c^2}{N_c} \cdot S(\hat{\boldsymbol{p}}) = \frac{\left\{\overline{c} - c(\hat{\boldsymbol{p}})\right\}^T \boldsymbol{V}_c^{-1} \left\{\overline{c} - c(\hat{\boldsymbol{p}})\right\}}{N_c}$$
(3.54)

式(3.54)で求めた標本分散を用いると共分散行列は式(3.55)のようになる。

$$\acute{\boldsymbol{O}}_{p} = \left[\frac{1}{\hat{s}_{c}^{2}}\boldsymbol{J}^{T}\boldsymbol{V}_{c}^{-1}\boldsymbol{J} + \boldsymbol{C}_{p}^{-1}\right]^{-1}$$
(3.55)

パラメータに関する事前情報がない場合には,式(3.56)のようになる(Bard, 1974; Yeh and Yoon, 1976; Shah et al., 1978; Yeh, 1986)^{9),10),11),12)}。

$$\acute{\boldsymbol{O}}_{\boldsymbol{p}} = \hat{\boldsymbol{s}}_{c}^{2} \left[\boldsymbol{J}^{T} \boldsymbol{V}_{c}^{-1} \boldsymbol{J} \right]^{-1}$$
(3.56)

3.4.2 信頼区間推定

式(3.53), (3.54), (3.55), (3.56)に示したパラメータ推定値の誤差行列を用いたパラメータの区間推定 方法について述べる。パラメータ推定値のまわりで観測値がパラメータに関して線形と仮定すると,パ ラメータは最尢推定値のまわりで*M*次元正規分布しており,残差二乗和は次式のように表わされる。

$$S(\boldsymbol{p}) = S(\hat{\boldsymbol{p}}) + (\boldsymbol{p} - \hat{\boldsymbol{p}})^T \left[\boldsymbol{J}^T \boldsymbol{V}_c^{-1} \boldsymbol{J} \right] (\boldsymbol{p} - \hat{\boldsymbol{p}}) = S(\hat{\boldsymbol{p}}) + \ddot{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{p}^T \left[\boldsymbol{J}^T \boldsymbol{V}_c^{-1} \boldsymbol{J} \right] \ddot{\boldsymbol{A}} \boldsymbol{p}$$
(3.57)

ここに , $p = \hat{p} + \ddot{A}p$ である。

一方,残差二乗和の信頼度(1-a)における区間推定は,F分布により次式のように表される。

$$S(\boldsymbol{p}) \leq S(\hat{\boldsymbol{p}}) + \hat{s}_{c}^{2} \cdot N_{p} \cdot F_{N_{p}, N_{c} - N_{p}, 1 - \boldsymbol{a}}$$

$$(3.58)$$

ここで,最九推定値 p のまわりで式(3.58)を満たすパラメータ p の領域を考える。式(3.57)と(3.58)より,式(3.59)が成り立つ。

$$(\boldsymbol{p} - \hat{\boldsymbol{p}})^T \, \boldsymbol{O}_{\hat{\boldsymbol{p}}}^{-1}(\boldsymbol{p} - \hat{\boldsymbol{p}}) \le N_p \cdot F_{N_p, N_c - N_p, 1 - \boldsymbol{a}}$$
(3.59)

パラメータpの信頼区間域は,一般にN_p次元空間での超楕円体で表わされる。この楕円体は,パラメ ータ推定値の共分散行列 pの固有値解析により求められ, pの固有ベクトルの方向に軸を持ちその軸 の長さは固有値の平方根に比例する。したがって,i番目のパラメータ推定値の100(1-a)%信頼区間の楕 円の長軸及び短軸方向の長さは,

$$p'_{i\pm} = \hat{p} \pm \sqrt{(1 \pm \mathbf{r}) \cdot \hat{s}_{c}^{2} \cdot N_{p} \cdot F_{N_{p}, N_{c} - N_{p}, 1 - \mathbf{a}}} \cdot u_{i} \qquad (i = 1, 2)$$

= $\hat{p} \pm \sqrt{N_{p} \cdot F_{N_{p}, N_{c} - N_{p}, 1 - \mathbf{a}}} \cdot a_{i} \cdot u_{i}$ (3.60)

と表わされる。ここに, *a_i*は _pの固有値の平方根, *u_i*は固有ベクトル, は相関係数である。 一般にたとえ観測値の誤差行列が対角行列(互いに独立)であっても,パラメータ推定値の誤差行列 の非対角要素(共分散)はゼロではない。そこで,この非対角要素に関して相関係数が定義される。

$$\boldsymbol{r}_{ij} \equiv \frac{\left(\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{p}}\right)_{ij}}{\sqrt{\left(\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{p}}\right)_{ii}\left(\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{p}}\right)_{jj}}} = \frac{\left(\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{p}}\right)_{ij}}{\boldsymbol{s}_{\hat{p}i} \cdot \boldsymbol{s}_{\hat{p}j}} \qquad \left(-1 \leq \boldsymbol{r}_{ij} \leq 1, i = 1, \cdots, N_{p}, j = 1, \cdots, N_{p}\right) \tag{3.61}$$

この相関係数 $_{ij}$ を要素とする $N_p \times N_p$ の対称行列を相関行列と呼ぶ。各要素の絶対値が大きい場合には,対応するパラメータ間の相互依存性が高いことを示す。また,要素が負の値の場合は,反比例することを示す 9,13,14,15 。

3.4.3 パラメータの推定誤差評価

パラメータ推定値の推定誤差は、パラメータ最尢推定値の共分散行列 $_p$ により評価でき、値が小さい ほど推定値の精度も良いことを示す。共分散行列の i 番目の対角項は、推定値が互いに相関関係にない 場合には i 番目のパラメータ推定値の分散を表わすが、推定値が互いに相関関係にある場合には i 番目の パラメータ推定値の信頼区間 w_i は i 番目の対角項の平方根に比例するものの図 3-5に示すように w_i/v_i だ け過大評価することとなる。すなわち、1つのパラメータの信頼性(uncertainty)が他のパラメータの信 頼性に影響を及ぼす。ここに、 v_i はパラメータ間に相関関係がないか、他のパラメータを固定した場合 の信頼区間である。

そこで、パラメータの信頼性を評価するために共分散行列の固有値解析を行う。すなわち、信頼区間の形状と大きさは pの固有値解析によって求められ、楕円軸の半径 a_1 、 a_2 は固有値の平方根に比例する。したがって、 pの固有値が小さいほど得られたパラメータの推定精度が良く、大きいほどパラメータの推定精度が良くないことを表わす。また 楕円軸の方向 b_{12} は固有ベクトルの成分によって表わされ、 $b_{12}=0$ の場合には相関関係はなく互いに独立となり、 b_{12} が大きい場合には相関関係も大きくなる。異なるパラメータ間の推定誤差の拡がりは、状態数(condition number:最大固有値と最小固有値の比)によって表わされる。

分散 $s_c^2 \ge s_p^2$ が未知の場合, pは濃度観測値とパラメータの事前推定値間の関係を表わす。すなわち, パラメータ事前推定値近傍での計算値が観測値に近い場合には J, J_c, J_p はともに小さくなり,式(3.22)よ り $s_c^2 \ge s_p^2$ も小さくなり,式(3.55)より pも小さくなる。したがって,観測値とパラメータ事前推定値 がともに妥当であれば, pは小さくなる。



図 3-5 2次元信頼性空間

3.5 最適モデルの選定

逆解析においては,解析モデルを変更して同定するパラメータの数を増やすことによって計算値をよ り観測値に近付けることができる反面,個々の推定されるパラメータの精度は低くなる。そこで,最適 な解析モデルを評価するための基準として以下に示す4つの判定基準を採用する。

(1) 赤池の情報量基準

$$AIC(\hat{\boldsymbol{b}}) = S(\hat{\boldsymbol{b}}) + 2N_{p}$$
(3.62)

(2) 赤池の情報量基準

 $BIC(\hat{\boldsymbol{b}}) = S(\hat{\boldsymbol{b}}) + N_p \cdot \ln N_c$ (3.63)

(3) ARMA 基準 (autoregressive moving average models)

$$\boldsymbol{f}(\hat{\boldsymbol{b}}) = S(\hat{\boldsymbol{b}}) + c \cdot N_p \cdot \ln(\ln N_c)$$
(3.64)

(4) 修正 Kashyap 基準

$$d_{N_p} = S(\hat{\boldsymbol{b}}) + N_p \cdot \ln\left(\frac{N_c}{2\boldsymbol{p}}\right) + \ln\left|F_{N_p}\right|$$
(3.65)

ここに, $S(\hat{b})$ は式(3.12)で, N_p はパラメータ数, cは2より大きい定数(デフォルト: c=2), F_{N_p} はフィッシャー情報行列で共分散行列 S_p の逆行列となる。すなわち,分散が既知の場合には s_c^2 を,未知の場合には式(3.54)の \hat{s}_c^2 を用いて式(3.55)より次式のように表わされる。

 $\boldsymbol{F}_{N_p} = \frac{1}{\boldsymbol{S}_c^2} \boldsymbol{J}^T \boldsymbol{V}_c^{-1} \boldsymbol{J} + \boldsymbol{C}_p^{-1}$ (3.66)

以上の4つの基準とも値が最も小さいモデルが最適なモデルと評価され,他の条件が同じであればパ ラメータ数の最も少ないものが最適モデルとなる。また,観測値数が増加するにしたがって最九値 $S(\hat{b})$ も急激に増加するため,基準を小さくするためにはパラメータ数を増加する必要があり,観測値数が増 加するにしたがってより複雑なモデルが要求されることとなる。Carrera and Neuman(1986)は,領域分 割の異なる解析モデルの評価には,これら4つの基準のうち最も領域分割に敏感な d_{Np} を用いることが 望ましく,計測データのノイズよりも解析モデルの構造が及ぼす影響の方が大きいと述べている。

- 4. 核種移行解析コード LTG マニュアル
- 4.1 ファイル構成

核種移行解析コード LTG の入力ファイルの構成と一覧を図 4-1および表 4-1に示す。



図 4-1 核種移行解析コード LTG 入力ファイル構成

ファイル名	データ内容	パラメータ
ltg.dat	メインファイル	拡散係数
grid.in	メッシュデータ	節点,要素
pipevel.in	パイプ特性データ	流速,断面積,分散長
retard.in	亀裂表面収着データ	遅延係数[核種毎]
pipeimm.in	拡散領域データ	拡散領域数,拡散領域番号
immdata.in	拡散領域特性データ	間隙率,湿潤辺長,マトリクス拡散深さ,屈曲率,
		遅延係数[核種毎]

表 4-1 核種移行解析コード LTG 入力ファイル一覧

4.2 入力パラメータ

解析に必要なパラメータを図 4-2と表 4-2に示す。



図 4-2 入力パラメータ模式図

表	4-2	入力ノ	パラメ	ーター	휱

パラメータ	備考
移行経路長[m]	移行経路の長さ
流速 [m/y]	亀裂内実流速: _{q(l)}
断面積[m²] (=亀裂幅×開口幅)	フラックス (mol/y; Cauchy 境界)から濃度への換算流量 (=流速×断面積)に 用いられる。 (A(l)=W(l)×2b(l))
縱方向分散長[m]	亀裂内分散長:a,
 拡散係数 [m²/y]	自由水中の拡散係数: D_0 $D = \mathbf{a}_L q(l) + D_0$
屈曲率 [-]	1.0 に固定
有効間隙率 [-]	マトリクス拡散に寄与する間隙率
湿潤辺長[m]	亀裂幅×2倍:
	$L(\ell) = 2f \cdot \frac{A(\ell)}{2b(\ell)}$
	fはマトリクス拡散寄与面積率[-], $2b(l)$ は亀裂開口幅[m]
マトリクス拡散深さ[m]	マトリクス拡散に寄与する岩石基質の割れ目表面からの垂直距離
遅延係数 [-]	$R(\ell) = 1 + \frac{Ka_n}{\ell}$
(亀裂表面)	$A_n(\ell) = 1 + b(\ell)$
	<i>Ka_n</i> は亀裂表面への分配係数[m],通常は保守的に無視して1.0
遅延係数 [-] (岩石基質)	$R_n^m = 1 + \frac{\boldsymbol{r}^m K d_n}{\boldsymbol{q}^m}$
	[™] は岩石基質の乾燥密度[kg/m ³], Kdnは岩石鉱物への分配係数[m ³ /kg]

- 4.3 入力ファイル
- (1) メインファイル Itg.dat

メインファイル ltg.datを表 4-3に,変数一覧を表 4-4に示す。

表 4-3 ltg.dat ファイル

grid10Cs !6 character file root I !mxnn maxne maxspecies maxpipes maxzonespp !maxbcs maxipnodes maxbctimes maxopnodes maxoptimes mxwindows phist 399 380 1 380 1 1 19 2 399 61 0 0 PAWORKS-LTG Simulation for Cs . TRUE . !logprt . FALSE . !multifile .TRUE. !Cauchy=.true. Dirichlet=.false. !time output to single file (multiflux) .FALSE. !peclet_LTG (PAW:5000) 2 Inspecies! 1 0, 4.730000e-03, 3.010000e-07 !npa, diffusion, lamda (1) 380 .TRUE. !immob_zone_from_file . TRUE . !pipe_vel_from_file . TRUE . !retard_from_file 380 .TRUE. !immob_zone_from_file .TRUE. !grid_from_file !number of bec nodes (for species 1) 1 !nBCs (for species 1) 19 21, 42, 63, 84, 105, 126, 147, 168, 189, 210, 231, 252, 273, 294, 315, 336, 357, 378, 399, !n_BC_times (for species 1) 2 1.000000e+00, 1.000000e+00 !BC_time, Bval 1.000000e+07, 1.000000e+00 !BC_time, Bval 399 !n_output_nodes 1 2 4 5 6 7 8 9 10 3 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 25 26 30 23 24 27 28 29 391 392 393 394 395 396 397 398 399 !n_output_times 61 1.000000e+01 1.258900e+01 1.000000e+07 0 !nwindows 1.000000e-12 !deltol 500 !nitmax 5 !nterm 1.000000e-10 !relerr 5.000000e+00 !tmax_fac

表 4-4 ltg.dat ファイルの変数一覧

	変数名	説明
1	ltgtst	LTG アウトプットのファイル名に使う6文字
2	comments	"!"以下はコメント文となる
3	mxnn	節点数
	maxne	要素数
	maxspecies	核種数
	maxpipes	パイプ種類数
	maxzonespp	パイプあたりの拡散領域(immobile zones)数
	maxbcs	境界条件数
	maxipnodes	境界条件節点数
	maxbctimes	境界条件時間数
	maxopnodes	出力節点数
	maxoptimes	出力時間数
	mxwindows	最大出力 windows 数
	phist	p-space ファイルの取扱い
	=0	全シミュレーションを実施して,逆変換ファイルは消去
	=1	逆変換を実施し,p-space ファイルを保存
4	Test Case for LTG	出力ファイルのタイトル
5	logprt	出力形式 :【.true.】詳細出力,【.false.】概要出力
6	multifile	エコー出力先:【.true.】別ファイル【.false.】ltgtst.out ファイル
7	Cauchy	ソース境界条件:【.true.】フラックス,【.false.】濃度
8	Multiflux	節点濃度出力:【.true.】時間毎別ファイル(*.tim),【.false.】全時間1ファイル
		数値収束改善のためのペクレ数(=流速×パイプ長/分散係数)(この
9	peclet_LTG	値よりも大きい場合はメッシュを分割)
		核種数
10	nspecies	
	For each species <i>i</i>	核種iの親核種の数
11	npa	核種 i の自由水中の拡散係数
	diffusion	核種iの崩壊定数
	lamda	
	end species loop	パイプ種類の数(LTG.DAT と pipeimm.in の値と同じ)
12	nptypes	拡散領域データ:【.true. 】pipeimm.in , 【.false. 】LTG.DAT
13	pipe_imm_from_file	流速,断面積,分散長データ:【.true.】pipevel.in,【.false.】LTG.DAT
14	pipe_vel_from_file	亀裂表面の遅延:【.true.】retard.in , 【.false.】LTG.DAT
15	retard_from_file	拡散領域の種類数(LTG.DAT と immdata.in の値と同じ)
16	niztypes	

	if niztypes>0	拡散領域データ:【.true.】immdata.in , 【.false.】LTG.DAT	
	<pre>immob_zone_from_file</pre>		
	end niztypes if loop	拡散領域データ:【.true.】grid.in , 【.false.】LTG.DAT	
17	grid_from_file		
	loop <i>i</i> : 1 to # of species	核種iの境界条件数	
18	number bc		
	loop k : 1 to number bc	核種 <i>i</i> , 境界条件 <i>k</i> の節点数	
19	nBCnodes	境界条件節点番号(10節点/行)	
20	bc nodes	核種 <i>i</i> , 境界条件 <i>k</i> のソース形状を決めるための点数	
21	n_BC_times		
	loop <i>m</i> : 1 to n_BC_times	時間, フラックス (mol/y ; Cauchy) または濃度 (Direchlet)	
22	time value		
	end <i>m</i> loop		
	end k loop		
	end <i>i</i> loop	外部へのフラックスを計算する節点数	
23	n_output_nodes	節点番号(10節点/行)	
24	output_nodes	出力時間数	
25	n_output_times	出力時間	
26	output_times	フラックスを計算する window の数	
27	nwindows		
	loop <i>i</i> : 1 to nwindows	window の4隅の座標	
28	"window"		
	next "window"	ソルバーの許容誤差(10 ⁻¹²)	
29	deltol	ソルバーの最大繰返し回数(500)	
30	nitmax	de Hoog 逆変換(2×nterm+1)の p-space 値の数(推奨値 5 以上)	
31	nterm	逆変換の相対誤差で FE 解の期待精度に等しく設定,値が小さすぎると	
32	relerr	解の精度が悪くなる(10^{-10} < relerr < 10^{-7})	
		<u>時間領域の逆変換の時間の乗数</u> (5)	
33	tmax_fac		

(2) メッシュデータファイル grid. in

メッシュデータファイル grid.in を表 4-5に, 変数一覧を表 4-6に示す。

399, 380 !nn, ne -9.000000e+01, -1.000000e+01, 0.000000e+00 !x, y, z, node 1, pipe 380 h168 -9.000000e+01, -3.934030e-06, 0.000000e+00 !x, y, z, node 2, pipe 380 t189 -9.000000e+01, 1.000000e+01, 0.000000e+00 !x, y, z, node 3, pipe 381 t210 9.000000e+01, 1.000000e+02, 0.000000e+00 !x, y, z, node 398, pipe 758 t435 9.000000e+01, -1.000000e+02, 0.000000e+00 !x, y, z, node 399, pipe 759 h436 1, 2, 1 ! 2, 3, 2 ! 4, 1, 3 ! 396, 398, 379 ! 399, 397, 380 !

表 4-5 grid.in ファイル

	表	4-6	grid.in	フ	ア1	いの	変数-	-覧
--	---	-----	---------	---	----	----	-----	----

	変数名	説明
1	nn	節点数
	ne	要素数
	loop : 1 to nn	
2	Xcoord, Ycoord, Zcoord	節点の x , y , z 座標
	end loop	
	loop : 1 to ne	
3	node1,node2	要素の節点番号
	pipe type	種類
	end loop	

(3) メインファイル pipevel.in

移行経路特性ファイル pipevel.in を表 4-7に, 変数一覧を表 4-8に示す。

380 !ne_check		
4.083103e-01, 5.176000e-06, 2.0	000000e+00 !pi	ipe 1
4.083099e-01, 5.176000e-06, 2.0	000000e+00 !pi	ipe 2
4.083101e-01, 5.176000e-06, 2.00	000000e+00 !pi	ipe 3
1.070680e+00, 1.357000e-05, 2.0	000000e+00 !pi	ipe 380

表 4-7 pipevel.in ファイル

表 4-8 pipevel.in ファイルの変数一覧

	変数名	説明
1	ne_check	パイプの種類数
	loop : 1 to ne_check	
2	pipe velocity	流速
	area	断面積
	dispersion length	分散長
	end loop	

(4) 亀裂表面収着データファイル retard.in

亀裂表面収着データファイル retard.in を表 4-9に, 変数一覧を表 4-10に示す。

380	!ne_check	
1.000000e+	-00,	pt=1
1.000000e+	-00,	pt=2
1.000000e+	-00,	pt=3
1.000000e+	-00,	pt=380

表 4-9 retard.in ファイル

表 4-10 retard.in ファイルの変数一覧

	変数名	説明
1	ne_check	パイプの種類数
	loop <i>j</i> : 1 to ne_check	
	loop k : 1 to nspecies	
2	retardation of pipe j	遅延係数
	species k	核種

	end loop	
(5)) 拡散領域データファイルpipeimm.in	

拡散領域データファイル pipeimm.in を表 4-11に,変数一覧を表 4-12に示す。

表 4-11 pipeimm.in ファイル

380	!nPipeTypes
1, 1	
1, 380	

表 4-12 pipeimm.in ファイルの変数一覧

	変数名	説明
1	nptypes_check	パイプの種類数
	loop <i>j</i> : 1 to nptypes_check	
	loop $k : 1$ to maxzonespp	
2	immobile zones attached to pipe type	拡散領域数
	immobile zone number	拡散領域番号
	end loop	

(6) 拡散領域特性データファイル immdata.in

拡散領域特性データファイル immdata.in を表 4-13に, 変数一覧を表 4-14に示す。

380	!ne_check	
2.000000e-	02, 2.000000e-01, 1.000000e-01, 1.000000e+00	!pipe 1, imzone 1:1
6.601000e+	03	
2.000000e-	02, 2.000000e-01, 1.000000e-01, 1.000000e+00	!pipe 380, imzone 1:1
6.601000e+	03	

表 4-13 immdata.in ファイル

表	4-14	immdata.in ファイルの変数-	-覧
---	------	---------------------	----

	変数名	説明
1	niztypes_check	拡散領域の種類数
	loop <i>j</i> : 1 to niztypes_check	
2	porosity	間隙率
	perimeter,	湿潤辺
	max.diff.dist.	マトリクス拡散深さ
	tortuosity	屈曲率
	loop $k: 1$ to nspecies	

3	retardation factor	遅延係数
	end loop	

- (1) メインファイル Itg.out

メインファイル ltg.out を表 4-15に示す。

表 4-15 ltg.out ファイル

			*
* Laplace Trans	form Galerkir	1	*
* LT	G		*
Yersion	2.00		*
*			*
AWORKS-LTG Simulation for Cs	=	399	
	=	380	
Maximum number of elements		1	

(2) 時系列ファイル###.sum

フラックスおよび積算フラックスの時系列ファイル###.sumを表 4-16に示す。

表 4-16 sum ファイル

Species	Time	Outflux rate	Cum. Release
1	1.00000E+01	1.41335E-12	7.29365E-12
1	1.25890E+01	8.46392E-11	6.35699E-11
1	1.00000E+07	9.90905E-01	9.88805E+06

(3) 時系列ファイル###.win

LTG の window 出力ファイル###.win を表 4-17に示す。

表 4-17 win ファイル

Species	Window	Time	Flux	Cum.	Flux	Conc
1	1	1.00000E+04	-4.5768E-	08 -1	.9895E-C	03 1.4100E-10

5. 逆解析プログラム LTGINV マニュアル

5.1 ファイル構成

逆解析のフローとファイル構成を図 5-1に,目的関数コンターとパラメータの収束履歴描画のフロー とファイル構成を図 5-2に,逆解析のファイル一覧を表 5-1に示す。図には,LTG.DAT ファイルに規定 されているパラメータを同定する場合のフローを示す。



図 5-1 逆解析フローとファイル構成(LTG.DAT ファイルを更新する場合) (赤:プログラム,青:必須入力ファイル,橙:解析結果ファイル,黄:その他出力ファイル)



図 5-2 描画用ファイル構成

表:	5-1	逆解析フ	アイ	ルー	覧
----	-----	------	----	----	---

種別	ファイル名	内容
プログラム	ltgrun.exe	順解析プログラム LTG
	ltginv.exe	逆解析プログラム LTGINV
	ltgdraw.exe	描画用プログラム LTGDRAW
入力ファイル	back01.dat	逆解析コントロールデータファイル
(逆解析用)	back01.ltg	逆解析同定パラメータ定義ファイル
	ltg.bak	入力データファイル(逆解析で更新されない)
	ltg.dat	入力データファイル(逆解析で更新される)
	***.txt	観測値データファイル(名前の付け方は任意)
(描画用)	back01.1	目的関数コンター計算用コントロールデータファイル
	back01.2	描画用コントロールデータファイル
出力ファイル	test01.sum	計算値データファイル
(ltg)	test01.win	計算値データファイル (window 出力)
	test01.out	LTG出力ファイル
	out	LTG出力ファイル
(ltginv)	back01.log	収束履歴
	back01.csv	収束経路
	back01.p##	結果(AIC 等,パラメータ推定値,感度マトリックス)
	back01.r##	測定値および計算値データ
(ltginv;描画)	back01.s01	目的関数コンター用データファイル

- 5.2 プログラムの実行
- (1) 逆解析プログラムの実行

逆解析プログラムを実行するには, DOS 画面上で,

ltginv@ back01.dat@

とする。

注意:最終的に作られる "ltg.dat" や "test01.sum"はヤコビアン行列を計算する際に作成され たものであり,最適推定値で計算されたファイルではない。

(2) 描画プログラムの実行

コンター図作成のための順解析を実行する。

ltginv

back01.1

"back01.s01"ファイルが作成され,以下の操作でコンター図が描画される。

ltgdraw back01.2

- 5.3 入力ファイル
- (1) 逆解析コントロールデータファイル back01.dat

逆解析コントロールデータファイル back01.dat を表 5-2に,変数一覧を表 5-3に示す。また,同定パ ラメータ定義ファイル back01.ltg をに,変数一覧をに示す。back01.ltg は順解析用ファイル ltg.bak の変更 パラメータ部分のみを修正して作成すればよい。

*command									
copy ltg.bak ltg.dat									
*datain 2		206				npara,nda	ata		
'STT1Uranine.txt' 1 1 1 nskip,jskip,nmod							cip,nmod		
'test01.sum'		1	2	1		nskip,jsk	<pre>cip,nmod</pre>		
'LTGRUN > out	:'								
'back01.ltg'									
'ltg.dat'									
	vary	nloop	eps1	eps2	eps3	nreset	alpa		
pini pobs	id	pmin	pmax	varx	edv				
*inverse	0	100	1.0e-5	1.0e-9	1.0e-9	10	0.5		
1.872 0	0	0.1	10.0	0	0.1 ini	itial,obsen	rved,imat,pmin,pmax,varx,edv		
0.468 0	0	0.05	10.0	0	0.1 ini	itial,obsen	rved,imat,pmin,pmax,varx,edv		
*end									

表 5-2 back01.dat ファイル

表:	5-3	back01.dat	フ	ァイ	ルの変数-	-覧
----	-----	------------	---	----	-------	----

行	変数名	説明
1	*command	DOS コマンド入力行
3	*datain	
	npara	逆解析で同定するパラメータの数
	ndata	測定値データの数
4	'STT1Uranine.txt'	測定値データのファイル名
	nskip	最初にスキップする行数(図 5-3参照)
	jskip	スキップするデータ数(図 5-3参照)
	nmod	スキップする行数
5	`test01.sum'	計算値データのファイル名
	'LTGRUN > out'	順解析 LTGRUN の実行と out への出力
	'back01.ltg'	同定パラメータ定義ファイル名(拡張子:ltg)

	*inverse	最小二乗法コントロールデータ
	vary	観測値分散 s_c^2
		<0:分散未知(初期值=vary×-1)
		=0:分散未知(初期值=1)
		>0:分散既知
	nloop	最大繰返し計算回数(式(3.44)参照)
	epsl	目的関数収束基準 (=0 で nloop 回計算実施 ; 式(3.45)参照)
	eps2	目的関数の変化収束基準(式(3.46)参照)
6	eps3	重みの変化収束基準(分散未知の場合;式(3.49)参照)
	nreset	重みの更新計算回数
	alpa	収束緩和係数(推奨値:0.5~0.7)
		式 (3.26) において
		$p_{k+1} = \mathbf{a} p_{k+1} + (1 - \mathbf{a}) p_k$
		として,次の出発点とする。すなわち,
		=1:近似値を完全に更新
		=0:近似値を更新しない
		となる。
	loop <i>j</i> : 1 to npara	
	pini(j)	パラメータ初期値
	pobs(j)	パラメータ観測値
	id	=0:通常,=1:対数
	pmin	下限值
	pmax	上限值
	varx(j)	パラメータ分散
		<0:分散未知(初期值=varx(j)×-1)
		=0:分散未知(初期值=1)
		>0:分散既知
	edv	数値微分における振れ幅(初期値 + 振れ幅)
	end loop	
8	*end	

jskip (=3) Species Time Outflux rate Cum. Release 1.58490E+00 -6.04646E-50 -6.04646E-50 1 nskip (=4) 2 1.58490E+00 -6.04646E-50 -6.04646E-50 3 1.58490E+00 -6.04646E-50 -6.04646E-50 -6.04646E-50 -6.04646E-50 1.58490E+00 4 5 1.58490E+00 -6.04646E-50 -6.04646E-50 -6.04646E-50 -6.04646E-50 6 1.58490E+00 7 1.58490E+00 -6.04646E-50 -6.04646E-50 8 1.58490E+00 -6.04646E-50 -6.04646E-50 nmod (=8) -2.63768E-49 2.51190E+00 -2.63768E-49 1 2 2.51190E+00 -2.63768E-49 -2.63768E-49 -2.63768E-49 -2.63768E-49 -2.63768E-49 -2.63768E-49 3 2.51190E+00 -2.63768E-49 4 2.51190E+00 5 2.51190E+00 -2.63768E-49 -2.63768E-49 6 2.51190E+00 -2.63768E-49 -2.63768E-49 7 2.51190E+00 -2.63768E-49 -2.63768E-49 8 2.51190E+00 -2.63768E-49 -2.63768E-49 nmod (=8) 1 3.98110E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 2 3.98110E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 3 3.98110E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 4 3.98110E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 5 3.98110E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 6 3.98110E+00 0.00000E+00 0.0000E+00 7 3.98110E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 8 3.98110E+00 0.00000E+00 0.00000E+00

図 5-3 測定値および計算値ファイルからのデータ読込み



表 5-4 back01.ltg ファイル

表 5-5	back01.ltg ファイ	ルの変数-	-覧
-------	----------------	-------	----

行	变数名	説明
	&011pe12.5	(1~3カラム):&01 = 変数番号(01~99) (4カラム以降):書式
	%011pe12.5 B A	(1~3 カラム):%01 = 従属変数番号(01~99) (4 カラム以降スペースまで):書式 (スペース以降):%01=A×&01+B
		 (注) 他の独立変数と1次形式で従属する変数を指定する。 上記例では変数 "%01" は変数 "&01" に線形従属し,%01=A×(&01)+Bという関係となる。 A,Bはフリーフォーマット スペースは1個のみとする(複数連続不可)。

- 5.4 出力ファイル
- (1) 残差情報ファイル back01. log

繰返し計算回数,残差,最大残差の値を出力する。

分散が未知の場合は,重み が収束するまで繰返し計算が実施されるため,作成された back01.p##ファイルや back01.r##ファイルの最大数字ではなく back01.log ファイルに示された最大繰返し回数に相当 する back01.p##ファイルや back01.r##ファイルが最終結果に相当する。

表 5-6 back01.log ファイル

ncal	=	1 , sumj =	4.45127E+07 , delj = 4.45127E+07
ncal	=	2 , sumj =	2.08402E+07 , delj = $2.36725E+07$
ncal	=	3 , sumj =	9.66265E+06 , delj = 1.11775E+07
ncal	=	4 , sumj =	4.95266E+06 , delj = $4.70999E+06$
ncal	=	5 , sumj =	1.66769E+06 , delj = 3.28497E+06
			\leq
ncal ncal	= =	1 , sumj = 2 , sumj =	1.52534E+06 , delj = 3.12345E+00 1.52501E+06 , delj = 0.00000E+00

表 5-7 back01.log ファイルの変数一覧

行	変数名	説明
	loop <i>ii</i> : 1 to nncal	
	loop <i>i</i> : 1 to ncal	
1	ncal	繰返し計算回数
	sumj	残差二乗和 $\sum \{c^* - c\}^2$
	delj	最大残差 max $ c^* - c $
	end loop	
	end loop	(注)分散更新後の結果が追記される。
		nncalは分散の更新回数。

(2) 残差情報ファイル back01.csv

繰り返し計算の各 STEP におけるパラメータ値,および残差二乗和を出力する。

$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					
2 1.43E+00 1.16E+00 2.08E+07 3 1.11E+00 1.48E+00 9.66E+06 4 9.15E-01 2.49E+00 4.95E+06 5 $7.63E-01$ $3.73E+00$ 1.67E+06 1 $7.54E-01$ $3.88E+00$ 1.53E+06 2 $7.53E-01$ $3.89E+00$ 1.53E+06	1	1.87E+00	4.68E-01	4.45E+07	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2	1.43E+00	1.16E+00	2.08E+07	
4 9.15E-01 2.49E+00 4.95E+06 5 7.63E-01 3.73E+00 1.67E+06 1 7.54E-01 3.88E+00 1.53E+06 2 7.53E-01 3.89E+00 1.53E+06	3	1.11E+00	1.48E+00	9.66E+06	
5 7.63E-01 3.73E+00 1.67E+06 1 7.54E-01 3.88E+00 1.53E+06 2 7.53E-01 3.89E+00 1.53E+06	4	9.15E-01	2.49E+00	4.95E+06	
1 7.54E-01 3.88E+00 1.53E+06 2 7.53E-01 3.89E+00 1.53E+06	5	7.63E-01	3.73E+00	1.67E+06	
1 7.54E-01 3.88E+00 1.53E+06 2 7.53E-01 3.89E+00 1.53E+06			5		
2 7.53E-01 3.89E+00 1.53E+06	1	7.54E-01	3.88E+00	1.53E+06	
	2	7.53E-01	3.89E+00	1.53E+06	

表 5-8 back01.csv ファイル

表 5-9 back01.csv ファイ	ルの変数一覧
----------------------	--------

行	変数名	説明
	loop <i>ii</i> : 1 to nncal	
	loop <i>i</i> : 1 to ncal	
1	ncal	繰返し計算回数
	loop j : 1 to ncal	
	paramj	パラメータ値
	end loop	
	sumj	残差二乗和 $\sum \left\{ c^* - c \right\}^2$
	end loop	
	end loop	
		(注)分散更新後の結果が追記される。
		nncalは分散の更新回数。

(2) 結果出力ファイル back01.p##

残差情報,情報量基準値,同定値,分散値など結果情報を出力する。

2	npa	ra		
206	nda	ta		
1.51707E+03	var	у		
0.0000E+00	sum	р		
2.06000E+02	sum	у		
3.12517E+05	sum	j		
1.71486E+03	sum	S		
1.71886E+03	aic			
1.72551E+03	bic			
1.72155E+03	arm	а		
1.73499E+03	dmf	m		
5.98539E-01	0	1.00000E-01	1.00000E+01	0.00000E+00 -1.27346E+00
7.10266E+00	0	5.00000E-02	1.00000E+01	0.00000E+00 6.63466E+00
3.36505E-05	-7.84	357E-04		
-7.84357E-04	7.57	955E-02		
3.91639E+04	4.05	282E+02		
4.05282E+02	1.73	874E+01		
5.38165E+02	2.76	390E+01		
5.89832E+02	2.83	440E+01		
6.39367E+02	2.88	220E+01		
6.86260E+02	2.90	800E+01		
7.30230E+02	2.91	500E+01		
7.71280E+02	2.90	600E+01		
\langle	_			
/	>			

表 5-10 back01.p##ファイル

行	変数名	説明
1	npara	同定パラメータ数
2	ndata	データ数
3	vary	観測値の分散
4	sump	パラメータの重みつき残差 $m{J}_{p}/m{s}_{p}^{2}$ (式 3.14 参照)
5	sumy	観測値の重みつき残差 $m{J}_{_c}/m{s}_{_c}^2$ (式 3.13 参照)
6	sumj	目的関数 $J = J_c + I_p$ (式 3.16,式 3.20 参照)
7	sums	目的関数 S(式 3.12 参照)
8	aic	赤池の情報量基準
9	bic	11
10	arma	ARMA (自己回帰移動平均)基準
11	dmfm	修正 Kashyap 基準
	loop <i>i</i> : 1 to npara	
10	pest	パラメータ最適推定値
	id	=0:実数,=1:対数
	pmin	パラメータ下限値
	pmax	パラメータ上限値
	varx	パラメータ分散値
	diff	観測値と推定値との差(観測値がないときは初期値と推定
	end loop	値の差,なお,実数は実数,対数は対数で表示)
	loop <i>i</i> : 1 to ndata	
11	covar (j=1 to npara)	パラメータ推定値の共分散行列(3.53),(3.54),(3.55),(3.56)
	end loop	
	loop <i>i</i> : 1 to ndata	
12	invcovar(j=1 to npara)	パラメータ推定値の共分散行列(3.53),(3.54),(3.55),(3.56)の
	end loop	逆行列
13	loop <i>i</i> : 1 to ndata	
	jacobian(j=1 to npara)	ヤコビアン行列
	end loop	

表 5-11 back01.p##ファイルの変数一覧

(3) 計算値出力ファイル back01.r##

時間ごとの観測値,計算値および(観測値-計算値)を出力する。

表 5-12 back01.r##ファイル

206	5		
1	4.64065E+01	4.80000E+00	4.16065E+01
2	7.06608E+01	9.60000E+00	6.10608E+01
3	9.58703E+01	1.68000E+01	7.90703E+01
205	1.75918E+00	2.40000E+00	-6.40820E-01
206	1.70610E+00	2.40000E+00	-6.93900E-01

			,
行	変数名	説	明
1	ndata	データ数	
	loop <i>i</i> : 1 to ncal		
2	data	計算値	
	sum	観測値	
	del	計算値 - 観測値	
	end loop		

表 5-13 back01.r##ファイルの変数一覧

- 5.5 描画プログラム用入力ファイル
- (1) 目的関数コンター用データ作成ファイル back01.1

目的関数コンター用のデータファイル作成のための計算を実施する。

*command							
copy ltg.bak ltg.dat							
*datain	2	206			npara,ndata		
'STT1Urani	ne.txt'	1	1	1	nskip,jskip,nmod		
'test01.su	ım '	1	2	1	nskip,jskip,nmod		
'LTGRUN >	out '						
'back01.ltg'							
'ltg.dat'							
*scalc	1	51	0	1	nsta,nend,ids,mode		
1	0	10			locx,idx,ndivx		
2	0	10			locx,idx,ndivx		
*end							

表 5-14 back01.1 ファイル

行	変数名	説明
1-5		back01.dat ファイルと同じ
	loop j : 1 to npara	コンター表示したいパラメータの組合せの数だけ繰返し
б	*scalc	
	nsta	コンター上にプロットしたい繰返し計算の開始回数
	nend	"
	ids	コンターの残差=1:対数
7	mode	=0:,=1:最大値・最小値の範囲を計算
	locx	x軸のパラメータ番号
	idx	(現在,使用していない)
8	ndivx	(2×ndivx)分割
	locy	y 軸のパラメータ番号
	idy	(現在,使用していない)
	ndivy	(2×ndivy)分割
9	end loop	
	*end	

表 5-15 back01.1 ファイルの変数一覧

(2) 収束履歴の描画用コントロールデータファイル back01.2

目的関数コンター図中に逆解析における収束履歴を描画する。

表	5-16	back01.2	フ	ァイル
---	------	----------	---	-----

*sdraw	1	-10	10	-10	10	0.1	1.0e-1	1	0	
*sdraw	1	-10	0	0	10	0.1	1.0e-1	1	0	
*sdraw	1	-10	-5	0	5	0.1	1.0e-1	1	0	

表 5-17 back01.2 ファイルの変数一覧

行	変数名	説明		
	loop <i>j</i> : 1 to npara			
1-5	*sdraw			
	ncalc	ファイル番号 (scalcの順番)		
	nstax	コンター描画範囲指定;x軸開始分割点数		
	nendx	" ; x 軸終了 "		
	nstay	" ; y 軸開始 "		
	nendy	" ; y 軸終了 "		
	alpha	F分布の ((1-)×100%信頼区間を設定)		
	fact	楕円を fact 倍拡大して描画		
	beta	コンターの色分割を実際の値の beta 乗で行う。		
	ids	描画領域の目的関数値の内挿方法		
		=0:目的関数値をそのまま内挿		
		=1:目的関数値の対数を内挿		
	end loop			

- 6. 逆解析プログラムの検証
- 6.1 ITOUGH(LBNL)との比較解析

本検討で開発中の逆解析プログラムは、パラメータを同定するとともに、その誤差評価まで行えるものである。ここでは、本プログラムにより算出された同定パラメータ、共分散行列の値の妥当性を検証するために、米国ローレンスバークレー国立研究所(LBNL)により開発された ITOUGH という逆解析プログラムとの比較解析を行った。

実施方法は次のとおりである。

- ・まずある条件のもとに順解析を行い、その計算結果から統計的にばらつきを与えた擬似観測値を 作成する。
- ・上記擬似観測値をもとに逆解析を行い,求められた同定パラメータ,共分散行列の値を本プログ ラムとITOUGHとで比較する。
- 6.1.1 擬似観測値の作成

擬似観測値作成のための順解析は拡散係数を変えた2ケースについて行った。用いた入力パラメータ 値を以下にまとめる。

- ・ 長さ:1(m),断面積:0.01(m²)の単一管路とする。
- 流速:1.0×10⁵ (m/sec.),流量:1.0×10⁷ (m³/sec.)とする。
- ・時刻:t=0(sec.),場所:x=0(m)において定濃度:C=C₀(kg/m³)を導入する。
- ・ 時刻: $t = 1.0 \times 10^4$ (sec.),場所:x = 0 (m)において定濃度:C = 0 (kg/m^3)とする。
- 縦方向分散長: L = 0.01 (m)
- 拡散係数: $D = 1.0 \times 10^{-7}$ (m²/s) (Case-A)
 - $= 1.08 \times 10^{-6} (m^2/s)$ (Case-B)

擬似観測値作成にあたっては,順解析結果をもとに,Case-Aについては,標準偏差: =0.01(Case-A1) および0.03(Case-A2)として,また,Case-Bについては,標準偏差: =0.03(Case-B)として,それ ぞれに従ってランダムに発生させた。順解析結果,および作成した擬似観測値を図 6-1,図 6-2に示す。

6.1.2 逆解析結果

逆解析にあたっては,拡散係数と流速を同定パラメータとした。図 6-3 ~ 図 6-5に逆解析結果を示す。 また,表 6-1 ~表 6-6にパラメータの同定値と共分散行列の成分値の比較を,図 6-6 ~ 図 6-10に同定パ ラメータの 95% 信頼区間を示す。

逆解析結果は,真値より観測値のばらつきの影響を受けるために,濃度の応答値は真値とは異なる結果を示す傾向がある。しかしながら,同定パラメータ値や目的関数値はLTGINVとITOUGHとの間に有意な差は認められず,計算が正常に行われていると判断できる。

共分散行列の値やパラメータの信頼区間もほぼ同等の値を示しており,計算が正常に行われているこ とが確認できる。







図 6-2 順解析結果と擬似観測値(Case-B)



図 6-3 逆解析結果 (Case-A1)



図 6-4 逆解析結果 (Case-A2)



図 6-5 逆解析結果 (Case-B)

表 6-1 同定パラメータおよび目的関数値の比較(Case-A1)

Case-A1	流速 (m/sec.)	拡散係数 (m ² /sec.)	目的関数値
TRUE	1.000×10^{-5}	1.000×10^{-7}	0
LTGINV	0.997×10^{-5}	0.996×10^{-7}	91.0
ITOUGH	0.997×10^{-5}	0.954×10^{-7}	103.2

表 6-2 同定パラメータおよび目的関数値の比較(Case-A2)

Case-A2	流速 (m/sec.)	拡散係数 (m ² /sec.)	目的関数値
TRUE	1.000×10^{-5}	1.000×10^{-7}	0
LTGINV	0.992×10^{-5}	0.984×10^{-7}	91.0
ITOUGH	1.002×10^{-5}	0.990×10^{-7}	87.0

表 6-3 同定パラメータおよび目的関数値の比較(Case-B)

Case-B	流速 (m/sec.)	拡散係数 (m²/sec.)	目的関数値
TRUE	1.000×10^{-5}	1.080×10^{-6}	0
LTGINV	0.982×10^{-5}	1.103×10^{-6}	91.0
ITOUGH	-	-	90.0

Case-A1	LTGINV		ITOUGH	
	流速	拡散係数	流速	拡散係数
流速	39.8×10^{-16}	-0.85*	9.7×10^{-16}	-0.21*
拡散係数	-36.3×10^{-17}	4.6×10^{-17}	-2.4×10^{-17}	1.4×10^{-17}

表 6-4 共分散行列の比較 (Case-A1)

表 6-5 共分散行列の比較(Case-A2)

Case-A2	LTC	GINV	ITOUGH	
	流速	拡散係数	流速	拡散係数
流速	36.0×10^{-15}	-0.85*	8.7×10^{-15}	-0.21*
拡散係数	-33.0×10^{-16}	4.2×10^{-16}	-2.2×10^{-16}	1.3×10^{-16}

表 6-6 共分散行列の比較 (Case-B)

Case-B	LTGINV		ITOUGH	
	流速	拡散係数	流速	拡散係数
流速	1.5×10^{-13}	-0.63*	1.2×10^{-13}	-0.41*
拡散係数	-2.4×10^{-14}	9.7×10^{-15}	-1.0×10^{-14}	5.5×10^{-15}

注)*は相関係数



図 6-6 パラメータの 95%信頼区間 (Case-A1, LTGINV)



図 6-7 パラメータの 95%信頼区間 (Case-A2, LTGINV)


図 6-8 パラメータの 95%信頼区間 (Case-A, ITOUGH)



図 6-9 パラメータの 95%信頼区間 (Case-B2, LTGINV)



図 6-10 パラメータの 95%信頼区間 (Case-B2, ITOUGH)

6.2 誤差評価パフォーマンスに関するベンチマークテスト

ここでは,前節で検討したケースA,ケースBの双方について標準偏差を0.01,0.03,0.1,0.3とした 4 種類の場合について擬似観測値を作成し,逆解析プログラムの挙動確認(ベンチマークテスト)を行 った。

6.2.1 逆解析結果

表 6-7,表 6-8に逆解析結果を示す。分散未知の場合に,既知の場合より計算回数が1だけ増加しているのは,分散を更新後の計算が実施されていることを示している。

収束に要する繰り返し計算回数はケースAでは分散が大きくなるにつれて回数も増加するが,ケース BではケースAほど明確には表れていない。これは収束に要する回数は目的関数の形状や初期値に依存 するためだと思われる。

同定パラメータの値は標準偏差が0.01~0.1程度までは大きな変化はないが,0.3になると同定精度が 悪くなっている。こうした傾向は逆解析結果からも分かる。

逆解析	標準	偏差	パラメー	タの真値	同定パラメータ値		繰り返し
ケース	真値	同定値	流速	拡散係数	流速	拡散係数	計算回数
ケース A1	0.01	-	1.000 × 10 ⁻⁵	1.000 × 10 ⁻⁷	0.997 × 10 ⁻⁵	0.997 × 10 ⁻⁷	41
ケース A2	0.03	-			0.990 × 10 ⁻⁵	0.988 × 10 ⁻⁷	62
ケース A3	0.1	-			0.969 × 10 ⁻⁵	0.932 × 10 ⁻⁷	82
ケース A4	0.3	-			0.918 × 10 ⁻⁵	0.605 × 10 ⁻⁷	153
ケース B1	0.01	-			0.994 × 10 ⁻⁵	1.09 × 10 ⁻⁶	20
ケース B2	0.03	-	1.000 × 10 ⁻⁵	1.080 × 10 ⁻⁶	0.981 × 10 ⁻⁵	1.11 × 10 ⁻⁶	23
ケース B3	0.1	-			0.934 × 10 ⁻⁵	1.17 × 10 ⁻⁶	15
ケース B4	0.3	-			0.806 × 10 ⁻⁵	1.28 × 10 ⁻⁶	139

表 6-7 ベンチマークテスト結果(分散既知の場合)

表 6-8 ベンチマークテスト結果(分散未知の場合)

逆解析	標準	偏差	パラメー	・タの真値	同定パラ	繰り返し	
ケース	真値	同定値	流速	拡散係数	流速	拡散係数	計算回数
ケース A1	0.01	0.00986	1.000 × 10 ⁻⁵		0.997 × 10 ⁻⁵	0.997 × 10 ⁻⁷	41+1
ケース A2	0.03	0.0296		1 000 × 10 ⁻⁷	0.990 × 10 ⁻⁵	0.988 × 10 ⁻⁷	62+1
ケース A3	0.1	0.0986			0.969 × 10 ⁻⁵	0.932 × 10 ⁻⁷	82+1
ケース A4	0.3	0.298			0.918 × 10 ⁻⁵	0.605 × 10 ⁻⁷	153+1
ケース B1	0.01	0.00993			0.994 × 10 ⁻⁵	1.09 × 10 ⁻⁶	20+1
ケース B2	0.03	0.0298	1.000 × 10 ⁻⁵	1,080 × 10 ⁻⁶	0.981 × 10 ⁻⁵	1.11 × 10 ⁻⁶	23+1
ケース B3	0.1	0.0993			0.934 × 10 ⁻⁵	1.17 × 10 ⁻⁶	15+1
ケース B4	0.3	0.298			0.806 × 10 ⁻⁵	1.28 × 10 ⁻⁶	139+1



図 6-11 逆解析結果 (ケース A1,分散既知)



図 6-12 逆解析結果 (ケース A2,分散既知)



図 6-13 逆解析結果(ケース A3,分散既知)



図 6-14 逆解析結果(ケース A4,分散既知)



図 6-15 逆解析結果 (ケース B1,分散既知)



図 6-16 逆解析結果 (ケース B2, 分散既知)



図 6-17 逆解析結果 (ケース B3, 分散既知)



図 6-18 逆解析結果 (ケース B4, 分散既知)



図 6-19 逆解析結果 (ケース A1, 分散未知)



図 6-20 逆解析結果 (ケース A2,分散未知)



図 6-21 逆解析結果 (ケース A3,分散未知)



図 6-22 逆解析結果 (ケース A4, 分散未知)



図 6-23 逆解析結果 (ケース B1, 分散未知)



図 6-24 逆解析結果 (ケース B2,分散未知)



図 6-25 逆解析結果 (ケース B3, 分散未知)



図 6-26 逆解析結果 (ケース B4, 分散未知)

6.2.2 パラメータの信頼区間

図 6-27~図 6-34に目的関数のコンターと,同定パラメータの 95%信頼区間を示す。分散を未知とし た場合も精度良く真の分散値を同定しており,コンター,信頼区間とも分散が既知の場合とほとんど変 化がないので,ここでは分散が未知の場合のみ示している。これらから,同定パラメータが初期値から 最適値まで適切に求められていることが確認できる。また,その信頼区間が観測値の分散に応じて変化 していることがわかる。パラメータの信頼区間は観測値の標準偏差のみに依存し,その区間幅は標準偏 差と,その領域の面積は分散と比例関係にある。



図 6-27 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース A1)



図 6-28 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース A2)



図 6-29 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース A3)



図 6-30 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース A4)



図 6-31 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース B1)



図 6-32 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース B2)



図 6-33 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース B3)



図 6-34 目的関数コンターとパラメータの 95%信頼区間 (ケース B4)

7. SKB TRUE program

SKB (the Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company)では Äspö Hard Rock Laboratory (略称 HRL)において,1994年以降,Tracer Retention Understanding Experiment (略称 TRUE)というプログラムが実施されている¹⁶。そこでは,試験室スケール(<0.5m),10m以下スケール(0.5~10m),ブロックスケール(10~50m)といった大まかに3種類の規模について順次,各種調査試験を行う予定となっている。本業務ではその中でもTRUE-1と呼ばれる10m以下スケールの試験のうち,Sorbing Tracer Tests (略称 STT)の結果を用いて逆解析プログラムの検証を行うこととする。以下,Äspö HRL 並びに TRUE の概要を記述する。

7.1 Äspö Hard Rock Laboratory

スエーデンでは Stripa Experiment (1985) や Finnsjön Experiment (1984,1993) において結晶質岩中の 物質移行に関する実験が行われてきたが,より豊富な原位置データを取得する必要があった。そこで, 更なる原位置データ取得を目的として Äspö Hard Rock Laboratory (Äspö HRL,1994~)が開設された。 Äspö HRL の目的は,比較的乱されていない地下深部の結晶質岩中での研究を行い,地層処分場として の適性を検討し,必要な技術の開発を行うことにある。

Äspö HRL では地下水流動や物質移行だけでなく,掘削影響や処分施設建設技術に関する調査研究も 行われている。また,諸外国の地層処分技術の原位置試験場としての利用や TRUE で得られたデータに 関するブラインド解析 (Äspö Task Force) など,国際共同研究の場としても利用されている。

7.2 TRUE 試験の目的

TRUE 試験は上述の Äspö HRL において行われる種々の調査研究のうち, Tracer Retention Understanding Experiment という調査研究計画のことを言い, その目的は以下のようになる(Bäckblom and Olsson, 1994)。

- ・亀裂性岩盤中の核種移行特性を理解する。
- モデル中で用いられる概念が亀裂性岩盤の現実的な記述となっているか,あるいは原位置で必要 なデータをどの程度取得できるかを評価する。
- ・核種移行を記述する複数のアプローチ及びモデルの有用性と実現性を比較,評価する。
- ・核種移行の理解に必要な原位置データを実際に取得する。

上記の目標を達成するために Äspö HRL では研究を段階的に進めることとしており,その第1段階の ことを TRUE-1 と呼んでいる。TRUE-1 の目的は主に単一亀裂中の物質移行特性を 10m 以下スケールで 理解することであり,具体的には以下の項目から構成される(Winberg,1994)。

- 1) 非収着及び収着性核種のトレーサー試験結果を用いて実験サイト(10m 以下スケール)の概念 モデル及び定量モデルを構築する。
- 2) 10m 以下スケールにおけるトレーサー試験技術の向上を図る。
- 3) 10m 以下スケールにおける樹脂注入技術,および注入範囲のボーリング技術,ボーリングデー タの分析技術を構築する。
- 4) マトリックス拡散に関する実験技術及びデータ解析技術を構築する。

ただし,上記計画は当初のものであり,実験及び研究の進捗に伴い,適宜計画の追加や変更が行われ

ている。

7.3 Äspö HRL の地質構造条件

Äspö HRLはスエーデン南部の都市 Oskarshamn より北方約 25km に位置する Äspö 島の地下に所在する (図 7-1,図 7-2)。実験区域は海抜-350~-450m とされ,種々の実験が実施されている(図 7-3)。



図 7-1 Äspö Hard Rock Laboratory 位置図



図 7-2 Äspö Hard Rock Laboratory 坑道鳥瞰図



図 7-3 坑道内試験位置図

Äspö 島下部の岩盤は,主に約17~18 億年前に発生した Sm land 花崗岩から成り,そこに見られる苦鉄質の貫入は継続的なマグマの混合によるものと思われる。

周辺のリニアメントとしては E-W 方向, NE 方向, NNW 方向の3種が確認でき,特に卓越する E-W, NE 方向のリニアメントはそれぞれ 20~50km, 1~20km の長さを持つ。

また,顕著な地質構造としては,NE-ENE 方向に縞状構造が見られ,これは NNW-SSE 方向に圧縮作 用を受けたことを示している。更に,約14~17億年前にはNE 方向のせん断ずれが Äspö 島中央部付近 で発生したと考えられ,NE 方向に卓越したせん断ひずみが見られる。

Äspö 島はその南北に亀裂帯を持つが,島を横断する領域規模の亀裂帯は EW-1 のみである(図 7-4)。 局所的な亀裂に注目すると,やはり E-W 方向の亀裂が多く見られるが,露頭調査の結果からは NW 方向 の亀裂帯も見られる。また, N-S 方向から NW 方向に分布する亀裂帯も見られ,これらは大規模な構造 ではないが,水理学的には重要である。(図 7-5)。



in the Äspö HRL model

60-70

Strike and dip

図 7-4 Äspö HRL 周辺の亀裂帯



図 7-5 Äspö 島周辺の地質構造モデル

7.4 地質構造のモデル化

TRUE-1 サイトは NW-2, NNW-4, NW-3 という 3 つのサイト規模の構造に囲まれている。これらはサ イト周辺の地質構造の中では大規模な構造であり,Äspö ではこうした大規模構造を決定論的にモデル化 している。ボーリング孔掘削時には目視により確認できる断層の幾何学的データ(図 7-6,図 7-7)と 注水圧の変動などの水理構造データの双方を取得しており,両者の整合がとれた水理地質構造を表現す る断層位置を決定した(図 7-8)。図中には Feature A~D と NW2'が規定されているが,その中の Feature Aと呼ばれる断層中で,本業務で対象とするトレーサ試験は行われた。Feature Aは変質を受けた破砕岩からなり,ほぼ平面と仮定できる。また,Feature Aの面上は主要な水道となっていると考えられ,その 厚さはボーリングコアより5cm(KXTT2)~9cm(KXTT3)と考えられる。



図 7-7 TRUE-1 サイトに BIPS 観測結果



図 7-8 TRUE-1 における水理地質構造モデル

7.5 トレーサー試験

TRUE-1におけるトレーサー試験はFeature Aと呼ばれる亀裂中で行われている。

Feature Aがトレーサー試験位置として選定されるまでには TRUE-1 サイト全体での水理調査が行われ, 透水性を持つ構造の特定,複数の構造の連結性,個々の構造の透水性の定量化といったことが行われて いる。また Feature Aが選択された後は特に Feature Aに特化して定量的な水理特性や周辺環境との相互 作用に関する調査が行われている。

また,トレーサー試験結果を評価するために必要となる物理及び水理データは実験室内での各種実験 により事前に得られており,トレーサー試験結果との比較,再評価を行っている。

ここでは,まずFeature Aの水理特性に関して得られている知見,及び室内試験結果を概括した後,トレーサー試験の概要と結果をとりまとめる。

7.6 Feature A の水理特性

Feature Aの水理特性については,透水量係数,比貯留係数及び貯留係数,全水頭とその分布について調査が行われているので,それぞれの結果を順に記述する。

透水量係数については複数種の試験結果をもとに複数種の解析手法を用いてその値のクロスチェックを行っているが,その結果8×10⁻⁹~4×10⁻⁷m²/sという値を与えている。

比貯留係数については,その算定法によりばらつきの多いものもあるが,比較的データの安定しているものを採用し,1×10⁻⁶~2×10⁻⁵s⁻¹としている。

また,貯留係数は6×10⁻⁸~2×10⁻⁵としている。

全水頭とその勾配は時期によって異なるものであり、特に坑道の掘削が行われる間はその影響を強く

受けるが,継続的な測定によりトレーサー試験直前はその変動が小さいことが確認されている。表-2.9 にはトレーサー試験に先立って行われた Feature A上の全水頭の値を示す。また,こうしたボーリング孔 内の値をもとに算定した Feature A上の全水頭分布を図 7-9に示す。これによれば流れは図面の左上から 右下に向かって生じている。

ボーリング	PTT	RC-1	DP1-DP4	RC-2,	PDT-1	PDT-2	PDT-3
断面				DP5-DP6			
日時	1995/9/	1996/1/1	1996/5/2	1996/9/2	1997/4/1	1997/8/	1997/6/
KXTT1 R2	-41.8	-46.50	-49.09	-50.20	-53.15	-53.23	-53.02
KXTT2 R2	-42.3	-46.85	-49.36	-50.38	-52.95	-53.13	-53.03
KXTT3 R2	-43.2	-46.50	-48.97	-50.00	-52.78	-52.82	-52.62
KXTT4 R2	-41.8	-46.40	-49.04	-50.12	-52.90	-53.05	-52.88
KA3005A	-42.3	-46.95	-49.90	-50.93	-53.33	-53.68	-53.57

表 7-1 Feature A上の全水頭の経時変化



図 7-9 Feature A 内の水頭分布(1997年6月)

7.7 室内試験結果

室内試験は,Äspö周辺で一般的に見られる閃緑岩と花崗岩について行うとともに,特にFeature Aより採取した閃緑岩と花崗岩についても行われている。室内試験で求められる項目は Kd 値(バッチテスト),拡散係数,間隙率,鉱物組成及び化学組成である。

以上の試験結果を総括し,以下のような結論をまとめている。

- ・核種の遅延効果は黒雲母の含有率に依存し,黒雲母の緑泥石への変質が進むと遅延効果が減少する。
- ・バッチテストの結果では Kd 値は時間に依存し,接触時間が長いほど増大する。

- ・遅延効果は次の順で大きくなる。すなわち, $Na^+ < Ca^{2+}$ $Sr^{2+} < Rb^+$ $Ba^{2+} < Cs^+$
- ・室内透水試験より得られる Kd 値はバッチテストの結果に比較してかなり小さくなる。これはバッチテストにおける岩の粉砕時に吸着表面が増大するためと思われる。また,透水試験時でもその間隙率の非一様性により Kd 値にはばらつきが見られる。
- ・ Rb⁺, Ba²⁺, Cs⁺ といった強吸着性核種の吸着性能には非可逆性, または可逆性と非可逆性の中 間的な性質による影響が見られる。
- ・吸着面と吸着性能の関係は複雑な性状を示し,亀裂表面の吸着とマトリックス部における吸着の モデルだけでは,十分な説明は困難である。

以上より,核種の遅延性能を評価することが決して容易でないことが分かるが,TRUE-1 ではそれぞれの仮定,及び条件を設定した上で推奨値として以下のパラメータ(MIDS: Modelling Input Data Set) を与えている。本検討でもこれらの値を原則として用いるものとする。

Tracer	Ka	Kd	Dw	
	×10E-5	×10E-5	×10E-6	
	m	m3/kg	m2/h	
HTO	0	0	8.4	
Na	0.07	0.14	4.8	
Sr	0.8	0.47	2.8	
Ва	20	20	3	
Rb	50	40	7.3	
Cs	800	600	7.3	

表 7-2 SKB による物理定数の推奨値 (MIDS: Modelling Input Data Set)

porosity	density kg/m3	
0.004	2700	

8. トレーサー試験

TRUE-1 では,1995年から1998年にかけて Feature A と Feature B と呼ばれる透水性亀裂を用いて種々のトレーサー試験が行われている¹⁷⁾。トレーサー試験の最終的な目的は収着性核種の移行特性を把握し, 収着特性を示すパラメータを同定することにあるが,TRUE-1の初期には実験方法と実験設備の妥当性 を確認するための予備試験も多数行っている。

本検討では,上述の多数のトレーサー試験のうち,最終的に行われた本試験である STT-1,STT-2, STT-1b (STT は Sorbing Tracer Test の略称)の試験結果を逆同定の対象問題と設定する。

8.1 試験条件

STT では対象亀裂を Feature Aとし 亀裂を貫通するボーリング孔を用いてトレーサー試験を行っている。上流側のボーリング孔にはパッカー間のトレーサー濃度を一定に保つ注入装置を設置し,下流側で 揚水してトレーサー濃度を計測する。Feature A上でのボーリング孔の位置関係を図 8-1に,主な試験条件を表 8-1に示す。

STT-1とSTT-2は同じボーリング孔を用いて試験を行い,STT-1bは注入側のボーリング孔を変更している。STT-1とSTT-2では流出側での揚水量を変えており,STT-2はSTT-1の半分となっている。



図 8-1 Feature A 上でのボーリング孔位置関係

試験名	STT-1	STT-2	STT-1b
対象亀裂	Feature A	Feature A	Feature A
注入位置	KXTT4:R3	KXTT4:R3	KXTT1:R2
回収位置	KXTT3:R2	KXTT3:R2	KXTT3:R2
揚水量	400 ml/min.	200 ml/min.	400 ml/min.
距離	4.68m	4.68m	5.03m

表 8-1 トレーサー試験の試験条件

8.2 使用したトレーサー

表 8-2に使用したトレーサーと,それぞれの半減期,1時間あたりの崩壊定数を示す。Uranine は安定 であるが,それ以外は全て放射性核種である。また,表の下段に向かうほど岩への収着性能が大きくな る。

STT-1	STT-2	STT-1b	半減期	崩壊定数(1/h)
Uranine	Uranine	Uranine	-	-
HT0	HTO	HTO	12.3yr.	6.43E-06
Na-22	Na-22	Na-22	2.6yr.	3.04E-05
Sr-85	Sr-85	Sr-85	65d.	4.44E-04
Ba-133	Ba-133	-	10.4yr.	7.61E-06
Rb-86	Rb-86	Rb-86	18.7d	1.54E-03
Cs-137	-	-	30yr.	2.64E-06
-	Cs-134	-	2.1yr.	3.77E-05

表 8-2 使用したトレーサーと崩壊特性

表 8-3には使用したトレーサーの注入量と回収率を示している。非収着トレーサーについては比較的 良好な回収率を示しているが,収着が大きくなると回収率が悪くなる傾向がある。とりわけ収着の強い セシウムの回収率は11%~33%と極めて低い値となっている。

Tracer	Injected(MBq)			Recovered(%)		
	STT-1	STT-2	STT-1b	STT-1	STT-2	STT-1b
HTO	123	74.8	93.52	96	83	94
Sodium	1.02	0.79	0.8	97	83	96
Strontium	1.16	2.49	0.4	98	79	81
Barium	0.21	0.14	-	87	66	-
Rubidium	2.46	2.5	1.3	64	49	93
Cesium	8.03	4.64	-	33	11	-

表 8-3 トレーサーの注入量と回収率

8.3 トレーサー試験結果

図 8-2,図 8-3に Uranine および放射性核種のトレーサー試験結果を示す。図 8-3の観測側の濃度は総 注入量で割ることにより基準化している。また,核種崩壊による影響を排除するようデータが補正され ている。これらの図から,非収着トレーサーである Uranine と HTO は類似の破過曲線を示しており,ま た,Na,Sr,Ba,Rb,Csの順に収着による遅延が大きくなっていることが分かる。

また, STT-1とSTT-2では,使用したボーリング孔は同じであるが,揚水量を変化させることで破過 曲線に変化が見られ,STT-1には見られないダブルピークがSTT-2に顕著に表れている。





図 8-2 Uranine の破過曲線





- 9. 逆解析結果
- 9.1 逆解析の実施方針

本検討で用いる核種移行モデルは2章で示した通り、地下水の流動経路を平行平板中の1次元移流分散 モデルで表現し、同時にマトリックス拡散と亀裂表面並びにマトリックス部における核種の収着を扱え るものである。このモデル中で、核種移行特性を左右するパラメータは多数あるが、特に以下の5つの 物理特性に焦点を絞り、それぞれの同定パラメータを決定した。なお、本検討でターゲットとなるトレ ーサー試験結果には、核種崩壊による影響が排除されるようなデータ補正がなされているため、逆解析 においても核種崩壊による影響は考慮しないものとする。

移流
・ 亀裂内の分散
・ マトリックス内の拡散
・ 核種の収着(マトリックス内部,および亀裂表面)
・ 複数経路の流量配分
・ 断面積

以下にそれぞれについて順に説明を加える。

9.1.1 移流及び亀裂内分散

核種の移流と分散特性は,核種移行の特性を決定付けるもっとも主要なパラメータと言える。特に核 種の巨視的な移行特性を少数本の移行経路中の流れにモデル化する手法では,見かけ上の分散特性が大 きくなることに注意する必要がある。

本検討では,移行経路長を試験時のボーリング孔間の実際の距離に固定し,移流特性は流速により表現することとした。また,分散特性については,核種の分子拡散に比べて,地盤の不均質性に伴う機械的分散が卓越するため,拡散係数はSKBが提示する室内実験結果に固定し,縦方向分散長を同定パラメ ータとして用いる。

9.1.2 マトリックス内の拡散

マトリックス拡散を決定するパラメータには,拡散係数,マトリックス部の間隙率,及び湿潤辺長(あるいは開口幅との比)が挙げられる。9.1.1に示した通り拡散係数は固定値としたこと,間隙率については SKB が提示する室内試験結果があることなどにより,本検討では湿潤辺長を同定パラメータとした。なお,LTGにおいては断面積も固定値として与えているため,湿潤辺長を可変させることはすなわち開口幅も同時に変更することになる。

9.1.3 核種の収着

核種の岩への収着に関しては,亀裂表面における収着とマトリックス内部での収着を考慮できるが, JNC 第2次とりまとめでは亀裂表面への収着を考慮せず,マトリックス内部での収着のみを取り扱って いる。一方, SKB では室内試験結果として,両者への収着を考慮して分配係数を提示している。本検討 では SKB との比較も行うことを目的に,マトリックス内部の収着のみを考慮した場合,マトリックス内 部と亀裂表面両者への収着を考慮した双方の場合の逆解析を行った。同定パラメータはそれぞれの遅延 係数を用いている。

9.1.4 複数経路間の流量配分

核種の移行経路を直接決定付けるパラメータとしては,移行経路の本数,及び移行経路の不均質性を 挙げることが出来る。とりわけ,トレーサー試験結果に顕著なダブルピークが見られるなど,複数本の 卓越した移行経路が予想される場合には,移行経路の本数を増減させることが,試験結果の逆解析を行 う際には有効であると思われる。

したがって,本検討では,移行経路本数を1~3本に変え,パラメータ同定を行う。なお,移行経路本数を増減させる場合には特にその流量配分に注目し,亀裂断面積を同定パラメータとする(流速は固定)。

9.1.5 逆解析ケースと入力パラメータ

上記内容にしたがって用いた LTG の入力データ及び,それぞれのケースで同定パラメータとして用いたものと固定値としたものを表 9-1にまとめている。また,実施した解析ケースを表 9-2に示す。

解析の実施手順としてはまず経路数を1本に固定した場合について流速,分散長,湿潤辺長の同定を 行い(STEP-1,2),その同定結果を用いて収着による遅延係数の同定を行った(STEP-3)。また,STEP-4 においては,まず2本の経路の流量比を同定した後,STEP-2,3の内容を実施した。さらに,STEP-5に おいては,まず3本の経路の流量比を同定した後,STEP-2の内容を実施した。

次節以降では,逆解析結果を解析ケース順に示す。

パ゚ラメータ	同定 対象	逆解析ケース	備考
流速		STEP-1,2,4,5	移流パラメータとして同定する。
拡散係数	×	-	SKB 推奨値 (MIDS) を用いる。
縦方向分散長		STEP-1,2,4,5	分散パラメータとして同定する。
湿潤辺長		STEP-2,4,5	マトリックス拡散パラメータとして同定する。
有効間隙率	×	-	SKB 推奨値 (MIDS)を用いる。
マトリックス	×	-	Feature A の特性を考慮して 0.05 に固定する。
拡散深さ	~		
屈曲率	×	-	1.0 に固定する。
遅延係数		STEP-3A,3B	「遅延パラメータとして同定する」
(岩石鉱物)		STEP-4A,4B	
遅延係数		STEP-3B	保守的に1.0に固定した場合と,同定する場合の両者
(亀裂表面)		STEP-4B	を比較する。
移行経路長	×	-	実際のボーリング孔間距離を用いる。
移行経路数		STEP-4,5	1~3本の間で変化させる。
断面積		STEP-4,5	複数経路の流量配分パラメータとして同定する。

表 9-1 入力パラメータ一覧

表 9-2 逆解析ケース一覧表

逆解析STEP	同定パラメータ	対象となる現象	対象ケース	対象トレーサー	備考
STEP-1	流速 縦方向分散長	移流 分散	ALL	Uranine,HTO	
STEP-2	流速 縦方向分散長 湿潤辺長	移流 分散 マトリックス拡散	ALL	Uranine,HTO	
STEP-3A	遅延係数(マトリックス)	収着	ALL	Na,Sr,Ba,Rb,Cs	STEP-2の 決定パラメータを使用
STEP-3B	遅延係数(マトリックス) 遅延係数(亀裂表面)	収着	ALL	Na,Sr,Ba,Rb,Cs	STEP-2の 決定パラメータを使用
STEP-4-1(A)			ALL	Uranine,HTO	同定順: A v, L
STEP-4-1B	経路数(2本)	移行経路選択	STT-2	Uranine,HTO	同定順: A v L
STEP-4-1C			STT-2	Uranine,HTO	同定順: A v1, 1 v2, 2 L
STEP-4-2A	遅延係数(マトリックス)	収着	ALL	Na,Sr,Ba,Rb,Cs	STEP-4-1Aの 決定パラメータを使用
STEP-4-2B	遅延係数(マトリックス) 遅延係数(亀裂表面)	収着	ALL	Na,Sr,Ba,Rb,Cs	STEP-4-1Aの 決定パラメータを使用
STEP-5	経路数(3本)	移行経路選択	STT-2	Uranine.HTO	同定順:Av.L

9.2 逆解析結果

9.2.1 STEP-1

前節で示したように,非収着トレーサーを用いて移流,分散特性の同定を行った。表 9-3,表 9-4に 同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差二乗和を,図 9-1~図 9-6に STEP-1の逆解析結果(破過曲線)を示す。凡例の"observed"は観測値,"forward"は初期値を 用いた計算値,"inverse"は逆解析結果を示す。

流速の初期値は観測値のピーク応答が発生する時刻をもとに,また分散長の初期値は移行経路長の 1/10としている。図 9-1~図 9-6が示すように,逆解析の結果,トレーサー試験を精度良く再現する最適 パラメータを得られていると言える。

また,表 9-3,表 9-4により,求められた最適値は,試験ケースが同じであれば使用したトレーサー の種類に依存せずほぼ同じ値を示している。すなわち,トレーサー試験の水理条件と,トレーサーの収 着特性が同じ(この場合は非収着)であれば,トレーサーの種類によらずほぼ同様の移流・分散特性を 示していることになる。

STT-1とSTT-2では,使用したボーリング孔は同じであるが,揚水条件が異なっており,その結果トレーサーの流出特性が変化している。これは,トレーサーの移行特性にとって,水理条件が大きな影響を与えることを示している。

試験ケース	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-1	流速	1.872	0.599	4 4515,07	3.125E+05	7.021E-03
	分散長	0.468	7.103	4.4512+07		
STT-2	流速	0.936	0.151	2 2665,07	1.461E+05	6.447E-03
	分散長	0.468	6.173	2.200E+07		
STT-1b	流速	1.437	0.727	2 1195,09	7 4205,05	3.508E-03
	分散長	0.503	0.503	2.110E+00	7.430E+03	

表 9-3 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-1, Uranine)

表 9-4 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-1, HTO)

試験ケース	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-1	流速	1.872	0.457	7 000E+14	4 207E 12	5.926E-03
	分散長	0.468	8.675	7.0352+14	4.2071412	
077 0	流速	0.936	0.113	2 0225,14	1 0525,12	2 4715 02
511-2	分散長	0.468	6.826	3.033E+14	1.055E+12	3.47TE-03
STT-1b	流速	1.437	0.646	2 0595115	4 0475,40	6.059E-03
	分散長	0.503	0.636	2.0502+15	1.2472+13	



図 9-1 Uranineの破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-1)



図 9-2 Uranineの破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-2)



図 9-3 Uranineの破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-1b)


図 9-4 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-1)



図 9-5 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-2)



図 9-6 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-1, STT-1b)

9.2.2 STEP-2(非収着トレーサーを用いた移流・分散・マトリックス拡散特性の同定)結果

STEP-2においては、より同定精度を上げるため、STEP-1で用いた同定パラメータに加えて湿潤辺長も同定パラメータとし、マトリックス拡散まで考慮した。

表 9-5,表 9-6に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差二 乗和を,図 9-7~図 9-12に STEP-2の逆解析結果(破過曲線)を示す。

STEP-1の結果と同様に逆解析の結果,破過曲線は精度良く再現されている。また,同定パラメータを 追加したことにより,残差二乗和の減少量もSTEP-1に比べて大きくなっている。

同定パラメータの最適値については,STEP-1で同定対象とした流速と分散長の値はSTEP-1の結果と 大きく変わるものではなく,新たに同定対象とした湿潤辺長が初期値に比べて大きくなることで同定精 度が上がる結果となっている。すなわち,STEP-1で考慮した同定対象に加えてマトリックス拡散効果も 考慮したことで同定精度が向上したと言える。

試験ケース	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率	
STT-1	流速	1.872	0.710				
	分散長	0.468	5.106	4.451E+07	2.137E+05	4.802E-03	
	湿潤辺長	2.000	11.348				
	流速	0.936	0.145			6.391E-03	
STT-2	分散長	0.468	6.455	2.266E+07	1.448E+05		
	湿潤辺長	2.000	0.876				
	流速	1.437	0.780				
STT-1b	分散長	0.503	0.408	2.118E+08	5.758E+05	2.718E-03	
	湿潤辺長	2.000	6.137				

表 9-5 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-2, Uranine)

表 9-6 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-2, HTO)

試験ケース	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率	
	流速	1.872					
STT-1	分散長	0.468	6.130	7.099E+14	1.835E+12	2.584E-03	
	湿潤辺長	2.000	10.217				
	流速	0.936	0.121		1.023E+12	3.371E-03	
STT-2	分散長	0.468	6.201	3.033E+14			
	湿潤辺長	2.000	3.450				
	流速	1.437	0.807				
STT-1b	分散長	0.503	0.327	2.058E+15	2.098E+12	1.020E-03	
	湿潤辺長	2.000	11.780				







図 9-8 Uranineの破過曲線と逆解析結果(STEP-2, STT-2)



図 9-9 Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-2, STT-1b)







図 9-11 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-2, STT-2)



図 9-12 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-2, STT-1b)

9.2.3 STEP-3A(収着トレーサーを用いた収着特性の同定)結果-亀裂表面の収着を考慮しない場合

STEP-3Aでは収着特性をマトリックス内の収着のみに限定し,マトリックス内の収着による遅延係数を同定パラメータとし,逆解析を行った。なお,流速,分散長,湿潤辺長はSTEP-2のHTOの結果を用いて固定している。それぞれの値を表 9-7に示す。

対象試験ケース	流速	分散長	湿潤辺長
STT-1	0.561	6.13	10.2
STT-2	0.121	6.20	3.45
STT-1b	0.807	0.327	11.8

表 9-7 STEP-3 で用いた流速, 分散長, 湿潤辺長

表 9-8~表 9-10に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差二 乗和を,図 9-13~図 9-25に STEP-1の逆解析結果(破過曲線)を示す。

逆解析の結果, 収着特性の違いに合った遅延特性が良好に再現できている。しかしながら,特に収着 特性の強いCs については STT-1 の破過曲線の同定精度が落ちている。

最適パラメータ値については, 収着特性の強い核種ほど遅延係数も増大しており, 定性的な傾向は良好に表現できていると言える。定量的にはそれぞれの試験ケースにおける遅延係数を比較すると Na, Sr で 10⁰~10¹, Ba, Rb で 10²~10³, Cs で 10⁵程度のオーダーとなる結果を得た。

表 9-8 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-3A, STT-1)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	Na	マトリクス遅延係数	1.00	12.1	1.23E+09	1.12E+08	9.11E-02
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	35.0	5.35E+09	8.39E+07	1.57E-02
STT-1	Ва	マトリクス遅延係数	1.00	683	3.19E+08	1.91E+06	5.99E-03
	Rb	マトリクス遅延係数	1.00	797	5.55E+10	4.33E+08	7.80E-03
	Cs	マトリクス遅延係数	1.00	19541	3.15E+10	4.28E+07	1.36E-03

表 9-9 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-3A, STT-2)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	Na	マトリクス遅延係数	1.00	21.9	1.66E+08	4.42E+07	2.66E-01
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	2.92	5.31E+09	3.70E+08	6.97E-02
STT-2	Ва	マトリクス遅延係数	1.00	1639	1.68E+07	2.11E+04	1.25E-03
	Rb	マトリクス遅延係数	1.00	2006	2.59E+09	4.49E+06	1.73E-03
	Cs	マトリクス遅延係数	1.00	28812	1.02E+09	1.95E+05	1.91E-04

表 9-10 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3A, STT-1b)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	Na	マトリクス遅延係数	1.00	9.07	1.31E+10	6.77E+08	5.16E-02
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	65.4	1.07E+10	7.43E+07	6.94E-03
STT-1b	Ва	マトリクス遅延係数	-	-	-	-	-
	Rb	マトリクス遅延係数	1.00	402	8.67E+08	1.11E+08	1.28E-01
	Cs	マトリクス遅延係数	-	-	-	-	-



図 9-13 Naの破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-1)



図 9-14 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-3A, STT-1)







図 9-16 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-1)



図 9-17 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-1)







図 9-19 Sr の破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-2)







図 9-21 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-2)



図 9-22 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-2)







図 9-24 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-3A, STT-1b)



図 9-25 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-3A, STT-1b)

9.2.4 STEP-3B(収着トレーサーを用いた収着特性の同定)結果- 亀裂表面の収着を考慮する場合

STEP-3Bでは亀裂表面とマトリックス内の収着双方を考慮し,それぞれの遅延係数を同定パラメータとし,逆解析を行った。

なお,流速,分散長,湿潤辺長はSTEP-3Aと同様にSTEP-2のHTOの結果を用いて固定している。ここでは前節で示した表 9-7を再掲する。

対象試験ケース	流速	分散長	湿潤辺長
STT-1	0.561	6.13	10.2
STT-2	0.121	6.20	3.45
STT-1b	0.807	0.327	11.8

表 9-7 STEP-3 で用いた流速,分散長,湿潤辺長

表 9-11~表 9-13に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差 二乗和を,図 9-26~図 9-38に STEP-1の逆解析結果(破過曲線)を示す。

STEP-3A と同様に, 収着特性の違いに合った遅延特性が良好に再現できている。しかしながら,特に 収着特性の強い核種については STEP-3A と同様に同定精度が悪くなり, STT-1, STT-2 の Cs, STT-1b の Rb のケースについて遅延係数の初期値を1 とした場合には,最適解が求められなかった。STT-1, STT-2 の Cs はマトリックス部,および亀裂表面の遅延係数の初期値をそれぞれ1000,100 とし,STT-1b の Rb はそれぞれ100,1 として逆解析を再実施したところ,STT-2 の Cs, STT-1b の Rb においては最適 パラメータの同定が実行できたが,STT-1 の Cs については結局最適パラメータが求められなかった。

逆解析が良好に実行できた場合に求められた最適パラメータ値を STEP-3A の場合と比較すると,マト リックス部の遅延係数については, Na, Sr で 10⁰~10¹, Ba, Rb で 10²~10³, Cs で 10⁵程度のオーダーで STEP-3A の結果とほぼ同様であり,加えて亀裂表面の遅延係数が 10⁰~10¹のオーダーとなる結果を得た。

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	No	マトリクス遅延係数	1.00	7.19	1 225,00	5 27E+07	4 255 02
	Na	亀裂表面遅延係数	1.00	1.22	1.232+09	5.37E+07	4.35E-02
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	28.1	5 35E±00	6 31E+07	1 18E_02
	51	亀裂表面遅延係数	1.00	1.13	3.351+09	0.312+07	1.102-02
STT-1	Bo	マトリクス遅延係数	1.00	356	2 105,08	1.47E+05	4 605 04
011-1	Ба	亀裂表面遅延係数	1.00	3.40	3.192+00		4.002-04
	Rh	マトリクス遅延係数	1.00	364	5 55E+10	2 /9E±07	1 19E-01
	КD	亀裂表面遅延係数	1.00	9.85	0.00L+10	2.432+07	4.432-04
	6	マトリクス遅延係数	1.00	100000	2.455.40	0 425.07	2 00E 03
	05	亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	5.15E+10	9.43E+07	2.992-03

表 9-11 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-3B, STT-1)

(注:Csは逆解析が正常に終了していない。)

表 9-12 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-3B, STT-2)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	No	マトリクス遅延係数	1.00	11.5	1 665,08	2.055.07	2 27E 01
	Na	亀裂表面遅延係数	1.00	1.23	1.002+00	3.95E+07	2.372-01
	Сr	マトリクス遅延係数	1.00	94.1	5 21E 00	7 275 07	1 205 02
	31	亀裂表面遅延係数	1.00	1.76	5.312+09	7.37E+07	1.392-02
STT-2	Ba	マトリクス遅延係数	1.00	1089	1 68E±07	1 17E+04	6 98E-04
011 2	Da	亀裂表面遅延係数	1.00	3.59	1.001+07	1.172+04	0.30L-04
	Dh	マトリクス遅延係数	1.00	1346	2 505,00	2 105,06	0.455.04
	κD	亀裂表面遅延係数	1.00	6.30	2.392+09	2.192+00	0.43E-04
	(c	マトリクス遅延係数	1000.00	29743	1 02E±00	2 015,04	2 925 05
	05	亀裂表面遅延係数	100.00	49.1	1.020+09	5.312+04	3.03E-03

表 9-13 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-3B, STT-1b)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	No	マトリクス遅延係数	1.00	5.17	1.215,10	1 905,09	4 445 00
	Na	亀裂表面遅延係数	1.00	1.21	1.312+10	1.092+00	1.44E-02
	S.r	マトリクス遅延係数	1.00	44.4	1 075,10	8 005-06	9 21E 04
	51	亀裂表面遅延係数	1.00	1.29	1.072+10	0.902+00	0.312-04
STT-1b	Bo	-	-	-			
011-10	Da	-	-	-	-	-	-
	Ph	マトリクス遅延係数	100.00	273	8 67E±08	3 23E±07	2 725 02
	ND	亀裂表面遅延係数	1.00	6.48	0.072+00	5.232+07	5.752-02
	6	-	-	-			
	05	-	-	-	-	-	-







図 9-27 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-3B, STT-1)



図 9-28 Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-3B, STT-1)



図 9-29 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-3B, STT-1)



図 9-30 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-3B, STT-1)







図 9-32 Sr の破過曲線と逆解析結果(STEP-3B, STT-2)







図 9-34 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-3B, STT-2)



図 9-35 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-3B, STT-2)







図 9-37 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-3B, STT-1b)



図 9-38 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-3B, STT-1b)

- 9.2.5 複数経路モデルを用いた逆解析の実施方針
 - ・まず STEP-4 において2 経路モデルによる逆解析を実施し,その後 STEP-5 において3 経路モデル について実施する。
 - ・同定手順としては、まず2本あるいは3本の移行経路の断面積(=流量比)を同定し、その後STEP-1 ~STEP-3で同定した種々のパラメータの検討を行う。なお、断面積同定時の流速は試験結果の2 つのピーク位置から移流速度を決定し、分散長は移行経路長の1/10とした。表 9-14に断面積同定 時に用いた流速と分散長の値を示す。
 - ・断面積同定後のパラメータ同定手順については代表的モデルケース(2経路モデル STT-2 Uranine 及び HTO) について,表 9-15に示す逆解析を実施し(STEP-4-1A~C),それぞれの挙動を比較 する。その中で最良の結果を得た手順で他のケースについても逆解析を行う。
 - ・STEP-4-1A は,流速・分散長を先に同定した後,湿潤辺長を同定する。STEP-4-1B は流速と分散 長も分けて段階的に同定する。STEP-4-1C では,個々の移行経路ごとにパラメータ同定を行う。
 - ・STEP-5はSTT-2の非収着トレーサーについてのみ実施し,その同定手順はSTEP-4-1の手順に従うものとする。

試験ケース	分散長	流速1	流速2	流速3	対象解析ケース
STT-1	0.468	1.872	0.551	-	STEP-4
STT-2	0.468	0.936	0.195	0.566	STEP-4, 5
STT-1b	0.503	1.437	0.126	-	STEP-4

表 9-14 断面積同定時に用いた流速と分散長 (STEP-4, STEP-5)

表 9-15 STEP-4-1A~Cにおけるパラメータ同定手順

逆解析 STEP	同定 stage	同定パラメータ
STEP-4-1A	1	断面積(移行経路1&2)
	2	流速・分散長(移行経路 1&2)
	3	湿潤辺長(移行経路 1&2)
STEP-4-1B	1	断面積(移行経路1&2)
	2	流速(移行経路 1&2)
	3	分散長(移行経路1&2)
	4	湿潤辺長(移行経路 1&2)
STEP-4-1C	1	断面積(移行経路1&2)
	2	流速・分散長(移行経路1)
	3	流速・分散長(移行経路2)
	4	湿潤辺長(移行経路1&2)

JNC TJ8440 2002-002

9.2.6 STEP-4-1A~STEP-4-1C(2経路モデルによる同定手順検討)結果

表 9-16~表 9-21に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差 二乗和を,図 9-39~図 9-44に STEP-4-1A~STEP-4-1Cの逆解析結果(破過曲線)を示す。

断面積は流速の小さい流れが通る移行経路が早い移行経路に比べて約5倍程度大きくなっている。流 速,分散長,湿潤辺長ともに同定順序が変わっても,パラメータ値そのものは大きくは変化していない。 しかしながら残差の低減に関しては同定順序によってその効率は変化し,STEP-4-1A < STEP-4-1B < STEP-4-1Cの順で残差は大きくなっている。特にSTEP-4-1Cの残差が大きくなっている。この残差二乗 和の違いは破過曲線にも現れており,STEP-4-1AとSTEP-4-1Bの両者では試験結果のダブルピークを良 好に再現しているものの,STEP-4-1Cではダブルピークを表現できていない。

以上の検討を踏まえて,STEP-4,STEP-5の他のケースについては最も残差二乗和が小さく,ダブル ピークを良好に再現したSTEP-4-1Aと同じ手順で逆解析を実施するものとする。

同定STEP	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STED 4 1A	1	断面積1	1.00E-03	3.87E-05		0.7215+04	8.123E-03
31EF - 4 - 1A		断面積2	1.00E-03	1.85E-04		9.731E+04	
	2	流速1	0.936	0.924			
		流速2	0.195	0.204	1 108E±07	7 528E±03	6.284E-04
		分散長1	0.468	0.186	1.1901-07	7.5201+05	
		分散長2	0.468	0.183			
	3	湿潤辺長1	2.000	1.995		7 5005102	6 2615 04
		湿潤辺長2	2.000	2.009		7.500E+03	0.201E-04

表 9-16 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1A, STT-2, Uranine)

表 9-17 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1B, STT-2, Uranine)

同定STEP	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STED A 1D	1	断面積1	1.00E-03	3.87E-05		0.7215+04	0 1005 00
51EF - 4 - 1D		断面積2	1.00E-03	1.85E-04		9.7312+04	8.123E-03
	2	流速1	0.936	0.919		8 534F+04	7 124F-03
		流速2	0.195	0.176	1 1095,07	0.0042+04	7.1246-00
	3	分散長1	0.468	0.232	1.1902+07	3 562F+04	2 974F-03
		分散長2	0.468	0.266		0.0022104	2.0742 00
	4	湿潤辺長1	2.000	2.025		9 202E+02	7 0065 04
		湿潤辺長2	2.000	1.214		0.3922+03	7.0002-04

表 9-18 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1C, STT-2, Uranine)

同定STEP	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	1	断面積1	1.00E-03	3.87E-05		0 731E+04	0 1005 00
31EF - 4 - 10		断面積2	1.00E-03	1.85E-04		9.7312+04	0.123E-03
	2	流速1	0.936	0.963		0 103E±04	7 674E-03
		分散長1	0.468	0.364	1 1095,07	9.1932+04	7.0742-03
	3	流速2	0.195	0.169	1.1901+07	7 174F±04	5 989F-03
		分散長2	0.468	0.441		7.1742+04	J.909L-03
	4	湿潤辺長1	2.000	2.168		5 1965,04	4 220E 02
		湿潤辺長2	2.000	1.231		5.100E+04	4.3292-03

同定STEP	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STED 4 1A	1	断面積1	1.00E-03	3.16E-05		7 2755111	2 4215 02
51EF - 4 - 1A		断面積2	1.00E-03	1.41E-04		7.3756+11	2.4312-03
	2	流速1	0.936	0.956			
		流速2	0.195	0.208	3 033E+14	1 2/6E+11	4.109E-04
		分散長1	0.468	0.167	3.033L+14	1.2402711	
		分散長2	0.468	0.134			
	3	湿潤辺長1	2.000	1.998		1 2425111	4 0045 04
		湿潤辺長2	2.000	2.018		1.2425+11	4.094E-04

表 9-19 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-1A, STT-2, HTO)

表 9-20 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1B, STT-2, HTO)

同定STEP	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	1	断面積1	1.00E-03	3.16E-05		7 2755111	2 4215 02
51EF - 4 - 1D		断面積2	1.00E-03	1.41E-04		7.373E+11	2.4312-03
	2	流速1	0.936	0.931		7 042F+11	2 322E-03
		流速2	0.195	0.185	3 033E+14	7.0422+11	2.0221-00
	3	分散長1	0.468	0.213	3.0351+14	3 135F+11	1 034F-03
		分散長2	0.468	0.192		5.155E+11	1.0046-00
	4	湿潤辺長1	2.000	1.966		1 282E±11	4 226E-04
		湿潤辺長2	2.000	1.556		1.2020411	4.2202-04

表 9-21 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1C, STT-2, HTO)

同定STEP	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	1	断面積1	1.00E-03	3.16E-05		7 2755111	2 4215 02
51EF - 4 - 10		断面積2	1.00E-03	1.41E-04		7.375E+11	2.431E-03
	2	流速1	0.936	0.956		7 2/0F±11	2 300E-03
		分散長1	0.468	0.396	3 033E±14	1.2432411	2.3301-03
	3	流速2	0.195	0.186	3.033L+14	5 737F±11	1 801E-03
		分散長2	0.468	0.363		0.707L+11	1.0312-03
	4	湿潤辺長1	2.000	2.122		4 0525111	1 6225 02
		湿潤辺長2	2.000	1.651		4.9526+11	1.033E-03



図 9-39 Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1A, STT-2)



図 9-40 Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1B, STT-2)



図 9-41 Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1C, STT-2)



図 9-42 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1A, STT-2)



図 9-43 HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1B, STT-2)



図 9-44 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1C, STT-2)

JNC TJ8440 2002-002

9.2.7 STEP-4-1(2経路モデル:非収着トレーサーを用いた同定)結果

表 9-22~表 9-27に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差 二乗和を,図 9-45~図 9-50に STEP-4-1 の逆解析結果(破過曲線)を示す。パラメータ同定順序として は,STEP-4-1Aの手順に従っており,STT-2の結果は前節 STEP-4-1Aの結果を再掲したものである。

各解析結果の破過曲線から,逆解析が精度良く実施されていることが分かる。また,それぞれの残差 二乗和を確認すると,表 9-5,表 9-6に示された1経路モデルによる逆解析結果よりも精度が向上して いることが分かる。

しかしながら,明瞭なダブルピークが見られず,またトレーサーの流出が比較的鋭敏な STT-1b の逆 同定に関しては不安定な結果となり,分散長の同定値が Uranine と HTO で異なる傾向を示している。唯 一,STT-1bの Uranineの逆解析結果の残差二乗和が,1 経路モデルのそれより大きくなったのは,この ことが原因と考えられる。すなわち,Uranineの同定パラメータは必ずしも最適値ではない可能性がある。

試験ケースが同じであれば,トレーサーが Uranine か HTO であるかに関わらず,同定パラメータがほぼ同じ値を示すことは特徴的である。これは,本検討で考慮している同定パラメータがトレーサーの種類に依存しないことを示している。

試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
OTT 1	1	断面積1	1.00E-03	5.23E-05		2 281E+05	2.263E-02
511-1		断面積2	1.00E-03	8.07E-05		3.3012+03	
	2	流速1	1.872	1.803			
		流速2	0.551	0.644	1 /0/E±07	1 340E±05	8 060E-03
		分散長1	0.468	0.575	1.4342+07	1.3402+03	0.303E-03
		分散長2	0.468	0.246			
	3	湿潤辺長1	2.000	1.997		1 2255,05	8 034E 03
		湿潤辺長2	2.000	1.950		1.3352+05	0.9342-03

表 9-22 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1, STT-1, Uranine)

表 9-23 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1, STT-2, Uranine)

試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-2	1	断面積1	1.00E-03	3.87E-05		0 731E+04	8 123E-03
511-2		断面積2	1.00E-03	1.85E-04		9.7312+04	0.1232-03
	2	流速1	0.936	0.924			
		流速2	0.195	0.204	1 108E±07	7 528E±03	6 284E-04
		分散長1	0.468	0.186	1.1901+07	7.5201+05	0.2042-04
		分散長2	0.468	0.183			
	3	湿潤辺長1	2.000	1.995		7 5005102	6 2615 04
		湿潤辺長2	2.000	2.009		7.500E+03	0.201E-04

表 9-24 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1, STT-1b, Uranine)

試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT 16	1	断面積1	1.00E-03	8.50E-05		2 0465+07	3.174E-01
311-10		断面積2	1.00E-03	2.11E-04	1E-04 3.046E+07	3.0402+07	
	2	流速1	1.437	1.391			
		流速2	1.318	0.797	0 507E±07	8 502E±05	8 052E-03
		分散長1	0.503	0.154	9.3976+07	0.3921+03	0.9521-05
		分散長2	0.503	0.167			
	3	湿潤辺長1	2.000	1.981		9 5055,05	0 0625 02
		湿潤辺長2	2.000	1.924		0.303E+03	0.002E-03
試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
-------	---------	---------	----------	----------	-----------	-----------	-----------
STT-1	1	断面積1	1.00E-03	4.48E-05		3 153E±12	1 066E-02
011 1		断面積2	1.00E-03	7.85E-05		5.155E+12	1.0002 02
	2	流速1	1.872	1.807			
		流速2	0.551	0.631	2 057E±14	1 583E±12	5 354E-03
		分散長1	0.468	0.555	2.33714	1.3032412	5.354E-03
		分散長2	0.468	0.265			
	3	湿潤辺長1	2.000	2.000		1 5605,12	5 208E 02
		湿潤辺長2	2.000	1.941		1.5092+12	5.300E-03

表 9-25 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1, STT-1, HTO)

表 9-26 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-1, STT-2, HTO)

試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
стт о	1	断面積1	1.00E-03	3.16E-05		7 2755 11	2 4215 02
011 2		断面積2	1.00E-03	1.41E-04		7.3752+11	2.4312-03
	2	流速1	0.936	0.956			
		流速2	0.195	0.208	3 033F±1/	1 2/6F+11	4 109E-04
		分散長1	0.468	0.167	3.033L+14	1.2402411	4.1092-04
		分散長2	0.468	0.134			
	3	湿潤辺長1	2.000	1.998		1 2425-11	1 0045 04
		湿潤辺長2	2.000	2.018		1.2422711	4.0942-04

表 9-27 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-1, STT-1b, HTO)

試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT_1b	1	断面積1	1.00E-03	9.07E-05		2 335E+14	2 334E-01
		断面積2	1.00E-03	2.52E-04		2.3352+14	2.3346-01
	2	流速1	1.437	1.081			
		流速2	0.261	0.788	1 000E+15	1 /35E+12	1 /35E-03
		分散長1	0.503	0.036	1.0002+13	1.4336412	1.435E-03
		分散長2	0.503	0.533			
	3	湿潤辺長1	2.000	1.976		1 4245112	1 4225 02
		湿潤辺長2	2.000	2.032		1.434E+12	1.433E-03



図 9-45 Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-1)



Uranine STT-2

図 9-46 Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-2)



図 9-47 Uranine の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-1b)



図 9-48 HTOの破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-1, STT-1)



図 9-49 HTO の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-2)



図 9-50 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-1, STT-1b)

9.2.8 STEP-4-2A(2経路モデル:収着特性の同定)結果-亀裂表面の収着を考慮しない場合

STEP-4-2Aでは収着特性をマトリックス内の収着のみに限定し,マトリックス内の収着による遅延係数を同定パラメータとし,逆解析を行った。なお,流速,分散長,湿潤辺長はSTEP-4-1のHTOの結果を用いて固定している。それぞれの値を表 9-28に示す。

対象試験ケース	経路	流速	分散長	湿潤辺長
STT-1	経路-1	1.807	0.555	2.000
811 I	経路-2	0.631	0.265	1.941
STT-2	経路-1	0.956	0.167	1.998
5112	経路-2	0.208	0.134	2.018
STT-1b	経路-1	1.081	0.036	1.976
51110	経路-2	0.788	0.533	2.032

表 9-28 STEP-4-2 で用いた流速,分散長,湿潤辺長

表 9-29 ~ 表 9-31に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差 二乗和を,図 9-51~図 9-62に STEP-4-2A の逆解析結果(破過曲線)を示す。全てのケースでパラメータ が同定されたが,STT-1の Cs については,図 9-55が示すように同定精度が悪い結果となっている。ま た,STT-1bの Rb については初期値を100 に設定しないとパラメータが同定できなかった。どの試験ケ ースとも,収着特性の大きい Ba, Rb, Cs については同定精度が悪い結果となっている。

1 経路モデルによる STEP-3A と比較すると, STT-1 と STT-2 については, 逆解析により求められた最 適値は小さくなる傾向にあるが STT-1b についてはほぼ同じ値となった。また 最終的な残差二乗和は, STT-1 と STT-2 の Na Sr Ba については STEP-3A よりも向上しているが STT-2 の Rb では同程度 STT-2 の Cs, STT-1b では逆に精度が低くなっている。こうした結果は,2 経路に割り当てたそれぞれの流量, 流速,分散長といった流れに依存するパラメータの精度に起因しているものと考えられる。

表 9-29 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2A, STT-1)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-1	Na	マトリクス遅延係数	1.00	4.6	1.98E+09	4.47E+07	2.26E-02
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	10.6	5.30E+09	4.53E+07	8.56E-03
	Ва	マトリクス遅延係数	1.00	102	3.98E+08	3.02E+05	7.61E-04
	Rb	マトリクス遅延係数	1.00	121	5.61E+10	1.98E+07	3.53E-04
	Cs	マトリクス遅延係数	1.00	7371	2.85E+10	4.47E+07	1.57E-03

表 9-30 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-2A, STT-2)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-2	Na	マトリクス遅延係数	1.00	3.9	3.42E+08	7.56E+06	2.21E-02
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	15.7	1.13E+10	1.11E+07	9.82E-04
	Ва	マトリクス遅延係数	1.00	93.6	2.06E+07	8.73E+04	4.23E-03
	Rb	マトリクス遅延係数	1.00	106	2.16E+09	5.63E+06	2.61E-03
	Cs	マトリクス遅延係数	1.00	1251	9.74E+08	5.94E+05	6.10E-04

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-1b	Na	マトリクス遅延係数	1.00	8.71	1.32E+10	9.26E+08	6.99E-02
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	75.8	1.09E+10	1.95E+08	1.79E-02
	Ва	マトリクス遅延係数	-	-	-	-	-
	Rb	マトリクス遅延係数	100.0	414	6.40E+08	1.72E+08	2.68E-01
	Cs	マトリクス遅延係数	-	-	-	-	_

表 9-31 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-4-2A, STT-1b)



図 9-51 Naの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1)



図 9-52 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2A, STT-1)



図 9-53 Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1)



図 9-54 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1)



図 9-55 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1)



図 9-56 Naの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-2)



図 9-57 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2A, STT-2)



図 9-58 Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-2)



図 9-59 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-2)



図 9-60 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-2)



図 9-61 Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1b)



図 9-62 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2A, STT-1b)



図 9-63 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2A, STT-1b)

9.2.9 STEP-4-2B(2経路モデル: 収着特性の同定)結果-亀裂表面の収着を考慮する場合

STEP-4-2B では亀裂表面とマトリックス内の収着双方を考慮し,それぞれの遅延係数を同定パラメータとし,逆解析を行った。

なお,流速,分散長,湿潤辺長はSTEP-4-2Aと同様にSTEP-4-1のHTOの結果を用いて固定している。 ここでは前節で示した表 9-28を再掲する。

対象試験ケース	経路	流速	分散長	湿潤辺長
STT-1	経路-1	1.807	0.555	2.000
5111	経路-2	0.631	0.265	1.941
STT-2	経路-1	0.956	0.167	1.998
5112	経路-2	0.208	0.134	2.018
STT-1b	経路-1	1.081	0.036	1.976
511-10	経路-2	0.788	0.533	2.032

表 9-28 STEP-4-2 で用いた流速,分散長,湿潤辺長

表 9-32~表 9-34に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差 二乗和を,図 9-64~図 9-76に STEP-4-2Bの逆解析結果(破過曲線)を示す。

遅延に関する同定パラメータを増やした本検討でも,STEP-4-2Aと同様に遅延特性が大きい核種については同定精度の低い結果となった。また,STT-2のCsについては,逆解析が異常終了しパラメータの同定が出来なかった。

本検討の同定パラメータはマトリック部と亀裂表面の遅延係数の2個であるが,STT-1とSTT-2については,亀裂表面の遅延係数がほぼ1のまま初期値から変化せず,従ってマトリックス部の遅延係数は STEP-4-2Aの値とほぼ同様な結果となっている。また,その同定精度もSTEP-4-2Aとほぼ同じである。 一方 STT-1bについては,亀裂表面の遅延係数も増加し,STEP-4-2Aに比べて同定精度が向上している。

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-1	No	マトリクス遅延係数	1.00	4.30	1 095,00	4.045+07	2 055 02
	Na	亀裂表面遅延係数	1.00	1.08	1.902+09	4.046+07	2.05E-02
	Sr	マトリクス遅延係数	1.00	11.4	5 30E±09	5 125,07	0 605 03
		亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	5.30E+09	5.13E+07	9.09E-03
	Ba	マトリクス遅延係数	1.00	112	2 095109	4.45E+05	1.12E-03
	Da	亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	0.90E+00		
	Ph	マトリクス遅延係数	1.00	121	5 61E+10	1 08E±07	3 53E-04
	RD	亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	5.012+10	1.900+07	3.03E-04
	Cs	マトリクス遅延係数	1.00	1214	2 85E+10	1 51E±08	5 32E-03
		亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	2.032410	1.512+00	5.32E-03

表 9-32 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-2B, STT-1)

表 9-33 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-2B, STT-2)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
STT-2	No	マトリクス遅延係数	1.00	3.49	2 425+08	6 805,06	2 025 02
	na	亀裂表面遅延係数	1.00	1.11	3.422+00	0.091+00	2.020-02
	Gr	マトリクス遅延係数	1.00	15.3	1 125,10	1 005,07	
	31	亀裂表面遅延係数	1.00	1.06	1.132+10	1.092+07	9.392-04
	Ba	マトリクス遅延係数	1.00	209	2.065.07	3.27E+05	1.58E-02
	Da	亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	2.001+07		
	Rh	マトリクス遅延係数	1.00	160	2 16F+09	1 68F+07	7 77E-03
		亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	2.102+03	1.002+07	1.112-03
	Cs	マトリクス遅延係数	1.00	10000	0.745.09	2 50E±06	2 66E-03
		亀裂表面遅延係数	1.00	1.00	9.742+00	2.392+00	2.00E-03

(注:Csは逆解析が正常に終了していない。)

表 9-34 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-4-2B, STT-1b)

試験ケース	核種	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	Na	マトリクス遅延係数	1.00	4.85	1 32E+10	3 27E±07	2.47E-03
	na	亀裂表面遅延係数	1.00	1.19	1.321+10	5.272+07	
	Gr	マトリクス遅延係数	1.00	39.1	1 005,10	1 715,07	1 575 02
	51	亀裂表面遅延係数	1.00	1.49	1.092+10	1.712+07	1.572-05
STT 1h	Ва	-	-	-		-	-
311-10		-	-	-	-		
	Dh	マトリクス遅延係数	100.0	229.6		2.46E+07	3.84E-02
	ΝŬ	亀裂表面遅延係数	1.00	10.46	0.402+00		
	C c	-	-	-			
	US	-	-	-	-	-	-



図 9-64 Naの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1)



図 9-65 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2B, STT-1)



図 9-66 Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1)



図 9-67 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1)



図 9-68 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1)



図 9-69 Naの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2)



図 9-70 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2B, STT-2)



図 9-71 Baの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2)



図 9-72 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2)



図 9-73 Csの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-2)



図 9-74 Na の破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1b)



図 9-75 Sr の破過曲線と逆解析結果 (STEP-4-2B, STT-1b)



図 9-76 Rbの破過曲線と逆解析結果(STEP-4-2B, STT-1b)

JNC TJ8440 2002-002

9.2.10 STEP-5(3経路モデル:非収着トレーサーを用いた同定)結果

STEP-5 においては,経路数を3本として逆解析を行い,その精度がどの程度向上するかの確認を行った。なお,STEP-5 では,STT-2の非収着トレーサー(Uranine,HTO)を用いた場合のみの検討とした。

表 9-35,表 9-36に同定パラメータの初期値と最適値及びそれぞれに対応する観測値と計算値の残差 二乗和を,図 9-77,図 9-78に STEP-5の逆解析結果(破過曲線)を示す。流速の初期値は STEP-4-1と 同じ値に加え,3本目の経路の流速については他の2本の平均値とした。他のパラメータの初期値は STEP-4-1と同じである。

逆解析後の破過曲線は,観測値のダブルピークを良好に表現しており,また残差二乗和は STEP-4-1 に比べて減少しており,その同定精度が向上していることが分かる。また,逆解析により求められた同 定パラメータは,STEP-4-1において求められた2種類の流速に加え,それらの中間にある流速が同定さ れており,その結果それぞれの分散長が小さくなる結果となっている。

試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	1	断面積1	1.00E-03	4.47E-05			
STT-2		断面積2	1.00E-03	2.25E-04		1.065E+05	1.039E-02
		断面積3	1.00E-03	2.87E-05			
	2	流速1	0.936	0.923			
		流速2	0.195	0.195			
		流速3	0.566	0.650	1 0245,07	5 9225,02	5 604E 04
		分散長1	0.468	0.151	1.0246+07	5.0322+03	5.0942-04
		分散長2	0.468	0.154			
		分散長3	0.468	0.028			
	3	湿潤辺長1	2.000	2.000			
		湿潤辺長2	2.000	1.918		5.588E+03	5.456E-04
		湿潤辺長3	2.000	1.991			

表 9-35 同定パラメータの初期値と最適値 (STEP-5, STT-2, Uranine)

表 9-36 同定パラメータの初期値と最適値(STEP-5, STT-2, HTO)

試験ケース	同定stage	変更パラメータ	初期値	最適値	初期残差二乗和	最終残差二乗和	残差低減率
	1	断面積1	1.00E-03	3.58E-05			
STT-2		断面積2	1.00E-03	1.66E-04		7.937E+11	5.221E-03
		断面積3	1.00E-03	2.71E-05			
	2	流速1	0.936	0.964			
		流速2	0.195	0.197			
		流速3	0.566	0.657	1.520E+14	1.170E+11	7.695E-04
		分散長1	0.468	0.121			
		分散長2	0.468	0.112			
		分散長3	0.468	0.020			
	3	湿潤辺長1	2.000	2.000			
		湿潤辺長2	2.000	1.961		1.162E+11	7.646E-04
		湿潤辺長3	2.000	2.000			







図 9-78 HTOの破過曲線と逆解析結果(STEP-5, STT-2)

JNC TJ8440 2002-002

10. 逆解析結果の評価

10.1 最適パラメータ値とその信頼区間

10.1.1 流れ依存パラメータ(移行経路数,流量,流速,分散長,湿潤辺長)の同定

(1) STT-2

図 10-1~図 10-4に STT-2の非収着核種(Uranine, HTO)を用いた試験ケースの逆解析結果をまとめる。それぞれの図には最適パラメータ値と逆解析の結果得られた 95%信頼区間の上限値と下限値を示している。また,図 10-1の流量比は,2経路モデル(STEP4-1A)の経路2の流速を1としたときの比を示している。

観測値と計算値の残差より得られるパラメータの95%信頼区間は十分小さく,本検討で得られた同定 値の不確実性が小さいことが分かる。

パラメータの同定値については,1経路モデルを用いた場合,Uranine,HTO両者の結果とも分散長が 6~7m程度と4.68mの移行経路長に対して大きな値をとっている。

一方,2経路モデルを用いた場合は,1経路モデルで同定された0.2m/hr.以下の流速を持つ流れに加えて,0.9m/hr.程度の早い流れが導入されたことにより両経路の分散長が小さくなり,また,湿潤辺長の 値もトレーサーに依存しない結果となり,物理的合理性の高い結果が得られていると考えられる。換言 すれば,1経路でモデル化した場合,小さい流速の流れだけで2経路分の流れを表現するために,分散 長で調整を行っていると言える。

図 10-5には逆解析結果と観測値との正規化誤差を示す。この誤差は,逆解析結果と観測値との残差二 乗和の平方根を,STT-2 試験時の全注入量で正規化している。1 経路モデルに対して 2 経路モデルの誤 差が格段に小さくなっていることが分かる。これは上述のように 2 経路によるモデル化が合理的である ことを証明するものと言えるが,2 経路モデルを用いた場合の誤差と,3 経路モデルの場合のそれとは, 大きな差異が認められず,STT-2 のケースの場合,2 経路モデルによるモデル化を行うことが合理的で あると考えられる。











図 10-3 分散長の同定結果まとめ(STT-2)







図 10-5 STT-2 における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)

JNC TJ8440 2002-002

(2) STT-1

図 10-6~図 10-9に STT-1の非収着核種(Uranine, HTO)を用いた試験ケースの逆解析結果をまとめる。図 10-6の流量比は,2経路モデル(STEP4-1)の経路2の流速を1としたときの比を示している。

また,図 10-10には逆解析結果と観測値との正規化誤差を示す。正規化の方法は図 10-5と同様である。 観測値と計算値の誤差に起因する信頼区間幅は非常に小さいこと,1 経路モデルと2 経路モデルを比 較したとき,2 経路モデルでは流速の大きな流れが追加されること,1 経路モデルで大きい値となった分 散長が小さくなり改善されること,観測値との誤差も小さくなり同定精度が改善されること,などの特 徴が挙げられ,その傾向は STT-2 の結果と同様のものである。また,STT-1 においては1 経路モデルで 10~12m 程度の同定値となった湿潤辺長も2m 程度となり2 経路モデルのほうが合理的な結果を得たと 判断できる。しかしながら,1 経路モデルと2 経路モデルの正規化誤差の変化は STT-2 の場合ほど大き くなく,経路数を増やすことによる精度向上は STT-2 ほど大きくないと言える。







図 10-7 流速の同定結果まとめ(STT-1)



図 10-8 分散長の同定結果まとめ(STT-1)







図 10-10 STT-1 における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)

(3) STT-1b

図 10-11 ~ 図 10-14に STT-1b の非収着核種(Uranine, HTO)を用いた試験ケースの逆解析結果をまと める。図 10-11の流量比は,他のケースと同様に2経路モデル(STEP4-1)の経路2の流速を1としたと きの比を示している。

また,図 10-15には逆解析結果と観測値との正規化誤差を示す。正規化の方法は図 10-5と同様である。 STT-1bの結果はSTT-1の結果とほぼ同様な結果を示しているが, Uranine を用いた場合については2 経路モデルの誤差が1経路モデルに比べて大きくなり,パラメータの同定値が必ずしも最適値ではない 可能性がある。

STT-1b は他の結果に比べ,試験結果が急峻なモノピークの応答を示しており,2 経路モデルを用いて も同定精度の向上を期待しにくいケースと言える。





図 10-11 流量比の同定結果まとめ(STT-1b)





図 10-13 分散長の同定結果まとめ(STT-1b)





図 10-14 湿潤辺長の同定結果まとめ(STT-1b)

図 10-15 STT-1b における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差)
(4) STT-1とSTT-2における流れの特性について

STT-1とSTT-2の試験条件で異なるのは,トレーサー回収側の取水量のみである。すなわち,STT-1とSTT-2では同じボーリング孔を用いてトレーサー試験を行っているが,STT-1の取水量はSTT-2の2倍となっている。

STT-1とSTT-2の試験結果を見ると,その応答には大きな違いが見られ,特にSTT-2にダブルピークが明瞭に表れている。

それぞれの逆解析結果を比較すると,2経路モデルにおける流量比が,STT-1においては1程度であ るのに対して,STT-2においては2程度の値をとり,STT-1においては流速の大きな流れが卓越してい ると考えられる。

以上のことから,本試験で使用されたボーリング孔間には,卓越する移行経路が2本あり,動水勾配 (取水量)が小さい場合は両者の流れがほぼ同量となり,トレーサー試験(STT-2)の結果にはダブル ピークが得られるが,動水勾配(取水量)が大きくなると,透水係数の大きな移行経路を通る流れ(流 速の大きな流れ)が卓越し,トレーサー試験(STT-1)の結果はモノピークを示したものと考えること が出来る。

10.1.2 収着パラメータの同定

(1) 亀裂表面の収着を考慮しない場合

JNC 第2次とりまとめの方針に従い行った亀裂表面の収着を考慮しない逆解析結果の結果をまとめる。 表 10-1,表 10-2に逆解析の結果求められた遅延係数とそれぞれの計算値と観測値の誤差に起因する 95%信頼区間の上限値と下限値を示す。試験ケースの違いによるばらつきに比べて,信頼区間が非常に 小さいことが分かる。

遅延係数からは,マトリックス部の間隙率と岩の比重を用いて分配係数 Kd の値を算出することが出 来る。表 10-3,表 10-4は逆解析の結果求められた Kd の値を,図 10-16,図 10-17には Kd の値と SKB より与えられている推奨値(MIDS)の対数をとり正負を反転させたものを比較している。MIDS の値は 亀裂表面の収着も考慮した場合の値であるので単純な比較は出来ないが,参考値として示している。ま た,図 10-18,図 10-19はそれぞれの解析結果と観測値との誤差を示している。この値は,非収着トレ ーサーの結果と同様な正規化を行っている。

1経路モデルと2経路モデルの同定値をそれぞれ比較すると、定性的な傾向はほぼ同様と見なせるが、 その同定値は収着特性の大きな Ba, Rb, Cs といった核種については2 経路モデルの同定値が若干小さ くなっている。

同定結果の精度については,図 10-18,図 10-19が示すように,STT-1,STT-2 については特に Na, Sr,Baといった核種の場合,2経路モデルの同定制度が1経路モデルに比べ向上している。しかしなが ら,STT-1bの結果は逆に2経路モデルの同定精度が悪くなっており,非収着トレーサーの場合と同様に 1経路モデルの方が適していると判断できる。

	STEP-3A	TEP-3A										
	STT-1			STT-2			STT-1b					
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限			
Na	12.1	12.2	12.1	21.9	22.0	21.8	9.1	9.1	9.0			
Sr	35.0	35.1	35.0	2.9	2.9	2.9	65.4	65.4	65.3			
Ва	683	683	683	1639	1639	1639	-	-	-			
Rb	797	797	797	2006	2006	2006	402	402	402			
Cs	19541	19541	19541	28812	28812	28812	-	-	-			

表 10-1 遅延係数 Rd の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-3A)

表 10-2 遅延係数 Rd の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-4-2A)

	STEP4-2A								
	STT-1			STT-2			STT-1b		
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限
Na	4.6	4.6	4.6	3.9	3.9	3.8	8.71	8.75	8.68
Sr	10.6	10.6	10.6	15.7	15.7	15.7	75.8	75.9	75.8
Ва	102	102	102	93.6	93.6	93.6	-	-	-
Rb	121	121	121	106	106	106	414	414	414
Cs	7371	7371	7371	1251	1251	1251	-	-	-

	STEP-3A								
	STT-1			STT-2			STT-1b		
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限
Na	1.65E-05	1.66E-05	1.64E-05	3.10E-05	3.11E-05	3.09E-05	1.20E-05	1.20E-05	1.19E-05
Sr	5.04E-05	5.05E-05	5.04E-05	2.84E-06	2.87E-06	2.80E-06	9.54E-05	9.54E-05	9.53E-05
Ва	1.01E-03	1.01E-03	1.01E-03	2.43E-03	2.43E-03	2.43E-03	-	-	-
Rb	1.18E-03	1.18E-03	1.18E-03	2.97E-03	2.97E-03	2.97E-03	5.94E-04	5.94E-04	5.94E-04
Cs	2.89E-02	2.89E-02	2.89E-02	4.27E-02	4.27E-02	4.27E-02	-	-	-

表 10-3 遅延係数 Rd から求めた分配係数 Kd (STEP-3A)

表 10-4 遅延係数 Rd から求めた分配係数 Kd (STEP-4-2A)

	STEP4-2A	TEP4-2A									
	STT-1			STT-2			STT-1b				
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限		
Na	5.35E-06	5.37E-06	5.32E-06	4.22E-06	4.24E-06	4.20E-06	1.14E-05	1.15E-05	1.14E-05		
Sr	1.42E-05	1.43E-05	1.42E-05	2.18E-05	2.18E-05	2.18E-05	1.11E-04	1.11E-04	1.11E-04		
Ва	1.49E-04	1.49E-04	1.49E-04	1.37E-04	1.37E-04	1.37E-04	-	-	-		
Rb	1.78E-04	1.78E-04	1.78E-04	1.55E-04	1.55E-04	1.55E-04	6.12E-04	6.12E-04	6.12E-04		
Cs	1.09E-02	1.09E-02	1.09E-02	1.85E-03	1.85E-03	1.85E-03	-	-	_		



図 10-16 Kd の同定結果のまとめ(STEP-3A, 1 経路モデル) (STT-1bのBa, Cs はデータなし)



図 10-17 Kd の同定結果のまとめ(STEP-4-2A, 2 経路モデル) (STT-1bのBa, Csはデータなし)



図 10-18 STEP-3A における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差) (STT-1bのBa, Cs はデータなし)



図 10-19 STEP-4-2A における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差) (STT-1bのBa, Csはデータなし)

(2) 亀裂表面の収着を考慮する場合

ここでは,亀裂表面の収着と,マトリックス部における収着の両者を考慮した場合の結果をまとめる。 表 10-5 ~ 表 10-8に逆解析の結果求められた遅延係数とそれぞれの計算値と観測値の誤差に起因する 95%信頼区間の上限値と下限値を示す。マトリックス部の遅延係数からは分配係数 Kd が,亀裂表面の 遅延係数からは亀裂開口幅を用いることにより分配係数 Ka を求めることが出来る。

表 10-9~表 10-12には,遅延係数から求めた分配係数の値を示す。

本検討の結果も,試験ケースの違いによるばらつきに比べて,信頼区間が非常に小さいことが分かる。 また,図 10-20~図 10-23に分配係数 Kd 及び Ka の値と SKB による MIDS の値の比較を,図 10-24, 図 10-25はそれぞれの解析結果と観測値との誤差を示している。この値は,非収着トレーサーの結果と 同様な正規化を行っている。

1経路モデルと2経路モデルの同定値をそれぞれ比較すると、定性的な傾向はほぼ同様と見なせるが、 その同定値は2経路モデルの同定値が若干小さくなっており、その値は MIDS に近づいている。

同定結果の精度については, 収着特性の小さな核種については2経路モデルの精度が1経路モデルに 比べて向上しているが, 収着特性が大きくなると経路数が増えても必ずしも精度が向上するとは言えな い。

	STEP-3B								
	STT-1			STT-2			STT-1b		
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限
Na	7.2	7.2	7.1	11.5	11.7	11.4	5.2	5.2	5.1
Sr	28.1	28.1	28.0	94.1	94.2	94.1	44.4	44.4	44.4
Ва	356	356	356	1089	1089	1089	-	-	-
Rb	364	365	364	1346	1346	1346	273	292	255
Cs	-	-	-	29743	30610	28870	-	-	-

表 10-5 遅延係数 Rd の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-3B)

(STT-1のCs は逆解析が異常終了)

表 10-6 遅延係数 Ra の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-3B)

	STEP-3B	31EP-3B										
	STT-1			STT-2			STT-1b					
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限			
Na	1.22	1.24	1.21	1.23	1.26	1.19	1.21	1.22	1.21			
Sr	1.13	1.15	1.12	1.76	1.79	1.74	1.29	1.30	1.29			
Ва	3.40	3.42	3.39	3.59	3.62	3.56	-	-	-			
Rb	9.85	9.88	9.82	6.30	6.36	6.25	6.48	6.96	6.01			
Cs	-	-	-	49.1	52.9	45.3	-	-	-			

(STT-1のCs は逆解析が異常終了)

- 表 10-7 遅延係数 RG の同定値と 95% 信頼区間の上下限値(STE
--

	STEP-4-2B	STEP-4-2B										
	STT-1			STT-2			STT-1b					
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限			
Na	4.3	4.5	4.1	3.5	3.7	3.3	4.8	5.0	4.7			
Sr	11.4	11.9	10.8	15.3	15.7	14.8	39.1	40.7	37.6			
Ва	112	117	108	209	209	209	-	-	-			
Rb	121	121	121	160	161	160	230	230	230			
Cs	1214	1214	1214	-	-	-	-	-	-			

(STT-2のCsは逆解析が異常終了)

表 10-8	遅延係数 Ra の同定値と 95% 信頼区間の上下限値	(STEP-4-2B)
--------	-----------------------------	-------------

	STEP-4-2B	TEP-4-2B										
	STT-1			STT-2			STT-1b					
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限			
Na	1.08	1.11	1.04	1.11	1.16	1.07	1.19	1.20	1.19			
Sr	1.00	1.05	1.00	1.06	1.13	1.00	1.49	1.52	1.47			
Ва	1.00	1.24	1.00	1.00	3.97	1.00	-	-	-			
Rb	1.00	1.18	1.00	1.00	4.84	1.00	10.46	10.48	10.44			
Cs	1.00	7.37	1.00	-	-	_	-	-	-			

(STT-2のCsは逆解析が異常終了)

	STEP-3B									
	STT-1	STT-1			STT-2			STT-1b		
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	
Na	9.17E-06	9.25E-06	9.10E-06	1.56E-05	1.58E-05	1.54E-05	6.17E-06	6.22E-06	6.12E-06	
Sr	4.01E-05	4.02E-05	4.01E-05	1.38E-04	1.38E-04	1.38E-04	6.42E-05	6.43E-05	6.42E-05	
Ва	5.26E-04	5.26E-04	5.26E-04	1.61E-03	1.61E-03	1.61E-03	-	-	-	
Rb	5.38E-04	5.39E-04	5.38E-04	1.99E-03	1.99E-03	1.99E-03	4.03E-04	4.31E-04	3.76E-04	
Cs	-	-	-	4.41E-02	4.53E-02	4.28E-02	-	-	-	

表 10-9 分配係数 Kd の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-3B)

(STT-1のCsは逆解析が異常終了)

表 10-10 分配係数 Ka の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-3B)

	STEP-3B								
	STT-1			STT-2			STT-1b		
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限
Na	2.19E-05	2.32E-05	2.06E-05	6.57E-05	7.51E-05	5.62E-05	1.81E-05	1.86E-05	1.75E-05
Sr	1.31E-05	1.46E-05	1.16E-05	2.22E-04	2.28E-04	2.15E-04	2.48E-05	2.53E-05	2.43E-05
Ва	2.36E-04	2.37E-04	2.34E-04	7.50E-04	7.58E-04	7.42E-04	-	-	-
Rb	8.68E-04	8.71E-04	8.65E-04	1.54E-03	1.55E-03	1.52E-03	4.65E-04	5.05E-04	4.24E-04
Cs	_	_	_	1.39E-02	1.50E-02	1.28E-02	-	-	_

(STT-1のCs は逆解析が異常終了)

表 10-11 分配係数 Kd の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-4-2B)

	STEP-4-2B								
	STT-1	STT-1		STT-2			STT-1b		
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限
Na	4.89E-06	5.19E-06	4.59E-06	3.69E-06	3.94E-06	3.45E-06	5.70E-06	5.87E-06	5.53E-06
Sr	1.53E-05	1.61E-05	1.46E-05	2.11E-05	2.18E-05	2.04E-05	5.65E-05	5.88E-05	5.41E-05
Ва	1.65E-04	1.71E-04	1.59E-04	3.08E-04	3.08E-04	3.08E-04	-	-	-
Rb	1.78E-04	1.78E-04	1.78E-04	2.36E-04	2.36E-04	2.36E-04	3.39E-04	3.39E-04	3.39E-04
Cs	1.80E-03	1.80E-03	1.80E-03	-	-	-	-	-	-

(STT-2のCs は逆解析が異常終了)

表 10-12 分配係数 Ka の同定値と 95% 信頼区間の上下限値 (STEP-4-2B)

	STEP-4-2B								
	STT-1	STT-1		STT-2			STT-1b		
	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限	同定値	上限	下限
Na	1.79E-06	2.51E-06	8.74E-07	1.79E-06	2.49E-06	1.09E-06	8.79E-06	9.04E-06	8.54E-06
Sr	0.00E+00	1.03E-06	0.00E+00	1.00E-06	2.00E-06	0.00E+00	2.26E-05	2.37E-05	2.16E-05
Ва	0.00E+00	5.36E-06	0.00E+00	0.00E+00	4.70E-05	0.00E+00	-	-	-
Rb	0.00E+00	4.08E-06	0.00E+00	0.00E+00	6.08E-05	0.00E+00	4.34E-04	4.35E-04	4.33E-04
Cs	-	-	-	-	-	-	-	-	-

(STT-2のCsは逆解析が異常終了)



図 10-20 Kd の同定結果のまとめ(STEP-3B, 1 経路モデル) (STT-1bのBa, Csのデータはなし。STT-1のCs は逆解析が異常終了)



図 10-21 Kaの同定結果のまとめ(STEP-3B, 1 経路モデル) (STT-1bのBa, Csのデータはなし。STT-1のCsは逆解析が異常終了)



図 10-22 Kd の同定結果のまとめ(STEP-4-2B, 2 経路モデル) (STT-1bのBa, Csのデータはなし。STT-2のCsは逆解析が異常終了)



Kaのばらつき (STEP4-2B)

図 10-23 Kaの同定結果のまとめ(STEP-4-2B, 2 経路モデル) (STT-1bのBa, Csのデータはなし。STT-2のCsは逆解析が異常終了)



図 10-24 STEP-3B における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差) (STT-1bのBa, Csのデータはなし。STT-1のCs は逆解析が異常終了)



図 10-25 STEP-4-2B における逆解析結果の同定誤差(正規化誤差) (STT-1bのBa, Csのデータはなし。STT-2のCsは逆解析が異常終了)

10.1.3 同定値の不確実性に関する考察

表 10-13 ~ 表 10-15に各逆解析ケースにより得られた流速,無次元化分散長(分散長をボーリング孔 間距離で無次元化した値),湿潤辺長を示す。ここでは,試験ケースSTT-2に対して1経路モデルで逆 解析を行ったSTEP-2を基本とし,試験条件として流量が変更されたSTT-1の結果,逆解析のモデル化 を1経路から2経路に変更したSTEP-4,同じく3経路としたSTEP-5,また異なる移行経路で試験が行 われたSTT-1bの結果に対して,同定パラメータがどのように変化したかを示している。以下,各パラ メータ毎に述べる。

(1) 流速の不確実性

流速の同定値は1経路モデルで同定した場合,STT-2の流速のみ小さくなっている。これは10.1.1でも 述べたように,流速の異なる卓越する2つの流れのうち,STT-2の逆解析結果では流速の小さい流れを モデル化しているためと考えられる。従って,経路数のモデル化の手法により,同定値が大きく変わる こととなる。しかしながら,依然その変動は大きくはなく,最大値(0.684)が最小値(0.133)の5倍 程度であり,不確実性は小さいと言える。これは,試験スケールが10m程度と小さく,また亀裂内の流 動特性が比較的単純であるために,同定結果の精度が高まったためと考えられる。

変更条件	基本ケース	試験条件変更 (流量)	2経路モデル	3経路モデル	試験条件変更 (移行経路)
試験ケース	STT-2	STT-1	STT-2	STT-2	STT-1b
解析ケース	STEP-2	STEP-2	STEP-4	STEP-5	STEP-2
			0.9240(経路1)	0.9228 (経路1)	
Uranine	0.15	0.71	0.2040(経路2)	0.1948 (経路2)	0.5608
				0.6503 (経路3)	
			0.9560(経路1)	0.9641 (経路1)	
HTO	0.12	0.56	0.2080(経路2)	0.1973 (経路2)	0.8075
				0.6571 (経路3)	
			0.940(経路1)	0.943 (経路1)	
2トレーサー			0.206(経路2)	0.196 (経路2)	
一 7-13				0.654 (経路3)	
全平均	0.133	0.635	0.5730	0.598	0.684

表 10-13 各種条件の違いとそれぞれの流速同定値

(2) 分散長の不確実性

分散長(無次元化)の平均値は試験条件の変化よりも逆解析のモデル化の選定によって大きく影響を 受ける結果となっており,3経路モデルでは2.1%となる分散長が1経路モデルでは最大135%となり, 約70倍の変化となる。3経路モデルの最小分散長は実質逆解析の同定精度に大きくは寄与していないが, ここでは不確実性を保守的に評価するものとして,本検討の結果,分散長は2.1%~135%の範囲の不確 実性を持つと結論できる。

JNC 第2次とりまとめでは,0.01~1の範囲で不確実性ケースを設定しており,それと比較しても本結 果は同等の不確実性を持つ結果と言える。しかしながら,JNC 第2次取りまとめで対象とするスケール に対して,本検討で対象とした原位置試験のスケールは10m 規模と小さく,スケールの違いを考慮した 上で不確実性を評価することが重要である。

変更条件	基本ケース	試験条件変更 (流量)	2経路モデル	3経路モデル	試験条件変更 (移行経路)
試験ケース	STT-2	STT-1	STT-2	STT-2	STT-1b
解析ケース	STEP-2	STEP-2	STEP-4	STEP-5	STEP-2
			0.0397(経路1)	0.0323 (経路1)	
Uranine	1.38	1.09	0.0391(経路2)	0.0330 (経路2)	0.0812
				0.0060 (経路3)	
			0.0357(経路1)	0.0259 (経路1)	
HTO	1.33	1.31	0.0286(経路2)	0.0239 (経路2)	0.0650
				0.0043 (経路3)	
2512-#-			0.038(経路1)	0.029 (経路1)	
			0.034(経路2)	0.028 (経路2)	
一十圴				0.005 (経路3)	
全平均	1.352	1.200	0.0358	0.021	0.073

表 10-14 各種条件の違いとそれぞれの無次元化分散長同定値

(3) 湿潤辺長の不確実性

本検討では湿潤辺長は亀裂中の流れと亀裂表面との接触面積を表す量として用いており, すなわちマ トリックス拡散あるいは亀裂表面やマトリックス内における収着挙動を数値的に決定付ける因子の一 つである。

数理モデル内での湿潤辺長の役割は上記のとおり明確であるが,その同定値の物理的整合性は判断が 難しい。本検討では湿潤辺長の初期値を2m(亀裂幅=湿潤幅=1m)とし同定を行っているが,亀裂内の 流路幅に関する詳細な検討は行っておらず,湿潤辺長の絶対値が現実の流路幅を示しているわけではな いことに注意する必要がある。

湿潤辺長は,複数経路モデルになると初期値からほぼ変動しないが,1 経路モデルでは試験条件により大きく変化している。

湿潤辺長のばらつきの範囲は最大値 10.783 は最小値 1.978 の 5.45 倍となっている。

変更条件	基本ケース	試験条件変更 (流量)	2経路モデル	3経路モデル	試験条件変更 (移行経路)
試験ケース	STT-2	STT-1	STT-2	STT-2	STT-1b
解析ケース	STEP-2	STEP-2	STEP-4	STEP-5	STEP-2
Uranine	0.88	11.35	1.9950(経路1) 2.0090(経路2)	<u>1.9997(経路1)</u> <u>1.9178(経路2)</u> 1.9915(経路3)	6.1370
НТО	3.45	10.22	<u>1.9970(経路1)</u> 2.0190(経路2)	<u>2.0003(経路1)</u> 1.9609(経路2) 1.9996(経路3)	11.7797
2トレーサー 平均			1.996(経路1) 2.014(経路2)	<u>2.000 (経路1)</u> <u>1.939 (経路2)</u> <u>1.996 (経路3)</u>	e e
全平均	2.163	10.783	2.0050	1.978	8.958

表 10-15 各種条件の違いとそれぞれの湿潤辺長同定値

(4) マトリックス拡散寄与面積率に関する考察

7.6に示される Feature Aの透水量係数から,(10.1)式を用いて亀裂開口幅を求めることが出来る。

$$2b = c\sqrt{T}$$

(10.1)

2b : 亀裂開口幅(m)

c :係数

これは,釜石鉱山で実施された単一亀裂内のトレーサー試験の解析においてその適用性を確認したものであり,釜石の結果に倣って *c*=2 とする。

上記の式より求めた亀裂開口幅と亀裂断面積を用いて,亀裂幅を求めることが出来る。図 10-16,表 10-17に本検討結果より求めた流路断面積及び亀裂幅を示す。前出の湿潤辺長と比較して非常に小さい値 となっている。

湿潤辺長を亀裂幅で除することによりマトリックス拡散寄与面積率を求めることが出来る。表 10-18 に各解析ケースにおけるマトリックス拡散寄与面積率を示す。その値のばらつきは 0.2~3.9 と広範であ り,特に 1.0 以上の非常に大きい値をとっている。これは,本検討において考慮している亀裂表面への マトリックス拡散以外に,亀裂内充填鉱物への拡散など,他の遅延要因を考慮しないと現実的な評価が 出来ないことを示唆しているものと考えられる。

変更条件	基本ケース	試験条件変更 (流量)	2経路モデル	3経路モデル	試験条件変更 (移行経路)
試験ケース	STT-2	STT-1	STT-2	STT-2	STT-1b
解析ケース	STEP-2	STEP-2	STEP-4	STEP-5	STEP-2
Uranine HTO	0.001	0.001	3.87E-05(経路1) 1.85E-04(経路2) 3.16E-05(経路1) 1.41E-04(経路2)	4.47E-05(経路1) 2.25E-04(経路2) 2.87E-05(経路3) 3.58E-05(経路1) 1.66E-04(経路2) 2.71E-05(経路3)	0.001
2トレーサー 平均 全平均	0.001	0.001	<u>3.52E-05(経路1)</u> 1.63E-04(経路2) 9.91E-05	4.03E-05 (経路1) 1.96E-04 (経路2) 2.79E-05 (経路3) 8 80E-05	0.001

表 10-16 各解析ケースにおける流路断面積

表 10-17 各解析ケースにおける亀裂幅

変更条件	基本ケース	試験条件変更 (流量)	2経路モデル	3経路モデル	試験条件変更 (移行経路)
試験ケース	STT-2	STT-1	STT-2	STT-2	STT-1b
解析ケース	STEP-2	STEP-2	STEP-4	STEP-5	STEP-2
			0.2(経路1)	0.25 (経路1)	
Uranine	5.59	5.59	1.0(経路2)	1.26 (経路2)	5.59
				0.16 (経路3)	
			0.2(経路1)	0.20 (経路1)	
HTO	5.59	5.59	0.8(経路2)	0.93 (経路2)	5.59
				0.15 (経路3)	
261			0.2(経路1)	0.225 (経路1)	
2ドレーリー 平均			0.9(経路2)	1.095 (経路2)	
1 20				0.156 (経路3)	
全平均	5.59	5.59	0.55	0.49	5.59

表 10-18 各解析ケースにおけるマトリックス拡散寄与面積率

変更条件	基本ケース	試験条件変更 (流量)	2経路モデル	3経路モデル	試験条件変更 (移行経路)
試験ケース	STT-2	STT-1	STT-2	STT-2	STT-1b
解析ケース	STEP-2	STEP-2	STEP-4	STEP-5	STEP-2
Uranine	0.08	1.02	<u>4.6(経路1)</u> 1.0(経路2)	<u>4.0(経路1)</u> 0.8(経路2) 6.2(経路3)	0.55
нто	0.31	0.91	<u>5.6(経路1)</u> 1.3(経路2)	<u>5.0(経路1)</u> 1.1(経路2) 6.6(経路3)	1.05
2トレーサー 平均			<u>5.1(経路1)</u> 1.1(経路2)	<u>4.5(経路1)</u> 0.9(経路2) 6.4(経路3)	•
全平均	0.2	1.0	3.1	3.9	0.80

(5) 分配係数の不確実性

表 10-19~表 10-21に各解析ケースにおける分配係数の同定値を示す。収着特性を示す分配係数は, 解析ケースによらずほぼ1オーダー~2オーダーの誤差しかなく,本検討では不確実性は小さい結果と なった。

しかしながら, 亀裂表面の分配係数 Ka については,2 経路モデルを用いた STEP-4-2A において, Ka=0 となるケースが収着の強い核種について多数見られた。収着の強い核種についてはパラメータ同定が不 安定な場合も多く,今後更に確認する必要がある。

Kd同定						
	STEP-3A			STEP4-2A		
	STT-1	STT-2	STT-1b	STT-1	STT-2	STT-1b
	同定値	同定値	同定値	同定値	同定値	同定値
Na	1.65E-05	3.10E-05	1.20E-05	5.35E-06	4.22E-06	1.14E-05
Sr	5.04E-05	2.84E-06	9.54E-05	1.42E-05	2.18E-05	1.11E-04
Ва	1.01E-03	2.43E-03	-	1.49E-04	1.37E-04	-
Rb	1.18E-03	2.97E-03	5.94E-04	1.78E-04	1.55E-04	6.12E-04
Cs	2.89E-02	4.27E-02	-	1.09E-02	1.85E-03	-

表 10-19 STEP-3A, STEP-4-2A における Kd 同定値

表 10-20	STEP-3B,	STEP-4-2B における Kd 同定値
---------	----------	-----------------------

Kd同定						
	STEP-3B			STEP-4-2B		
	STT-1	STT-2	STT-1b	STT-1	STT-2	STT-1b
	同定値	同定値	同定値	同定値	同定値	同定値
Na	9.17E-06	1.56E-05	6.17E-06	4.89E-06	3.69E-06	5.70E-06
Sr	4.01E-05	1.38E-04	6.42E-05	1.53E-05	2.11E-05	5.65E-05
Ba	5.26E-04	1.61E-03	-	1.65E-04	3.08E-04	-
Rb	5.38E-04	1.99E-03	4.03E-04	1.78E-04	2.36E-04	3.39E-04
Cs	-	4.41E-02	-	1.80E-03	-	-

表 10-21	STEP-3B .	STEP-4-2B における Ka 同定値

Ka同定						
	STEP-3B			STEP-4-2B		
	STT-1	STT-2	STT-1b	STT-1	STT-2	STT-1b
	同定値	同定値	同定値	同定値	同定値	同定値
Na	2.19E-05	6.57E-05	1.81E-05	1.79E-06	1.79E-06	8.79E-06
Sr	1.31E-05	2.22E-04	2.48E-05	0.00E+00	1.00E-06	2.26E-05
Ba	2.36E-04	7.50E-04	-	0.00E+00	0.00E+00	-
Rb	8.68E-04	1.54E-03	4.65E-04	0.00E+00	0.00E+00	4.34E-04
Cs	-	1.39E-02	-	-	-	-

10.2 最適モデル選定(情報量基準)

本検討ではSTEP-2,4,5において,非収着トレーサーを対象に経路数を1~3本に変化させ,その逆 解析によるパラメータの同定精度を確認した。経路数を増やすことはすなわちモデルの対象パラメータ 数(次数)を増やすことであるが,こうしたパラメータ数の増減による得失を客観的に示す量として, 3章に示したように情報量基準が上げられる。

ここでは情報量基準に従って,STT-1,STT-2,STT-1b それぞれのケース毎に最適モデル(最適経路数)を決定する。

図 10-26~図 10-31に STT-1, STT-2, STT-1bの情報量基準を Uranine, HTO それぞれのトレーサーに ついて示す。

STT-1 については, Uranine, HTOともに STEP-1>STEP-2>STEP4-1 の順に情報量基準が小さくなって おり,2 経路モデルが最適と判断できる。しかしながら,経路数を増やすことによる情報量基準の減少 量は大きくはない。

STT-2 については, Uranine, HTOともに STEP-1>STEP-2>STEP-4-1C>STEP-4-1B>STEP-4-1A>STEP-5 の順に情報量基準が小さくなっており,3経路モデルが最適と判断できる。しかしながら,2経路モデルの情報量基準と3経路モデルの情報量基準とではその差は大きくはなく,2経路モデルでも3経路モデルにほぼ同等の精度を持つと考えられる。

STT-1b については,HTO については STT-1 と同様の挙動を示すが,Uranine については STEP-4-1>STEP-1>STEP-2 の順に情報量基準が小さくなっている。したがって,1 経路モデルと2 経路 モデルの得失の判断は難しいが,2 経路モデルでモデル化するメリットは他の試験ケースに比べると小 さく,1 経路モデルで十分な同定精度を確保できると考えられる。











図 10-28 各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-2, Uranine)







図 10-30 各逆解析ケースにおける情報量基準 (STT-1b, Uranine)



図 10-31 各逆解析ケースにおける情報量基準(STT-1b, HTO)

11. 逆解析結果に基づく予測解析

11.1 同定パラメータの不確実性の JNC 第2次とりまとめ不確実性ケースとの比較

10章で述べたように,逆解析の結果得られるパラメータ値には種々の要因によるばらつきが生じる。 表 11-1に JNC 第2次とりまとめの不確実性ケースで考慮されたパラメータと今回の結果の比較を示す

流速の不確実性は小さいものの,分散長とマトリックス拡散寄与率の不確実性は大きく,特にマトリ ックス拡散寄与面積率は,今回の逆解析結果が1以上の数値を示していることに注意する必要がある。 こうした大きい寄与面積率が生じた原因には,亀裂内の核種の拡散現象を亀裂表面からのマトリックス 拡散のみで表現していることが考えられる。実際の亀裂内の流れでは,充填鉱物への拡散などマトリッ クス拡散以外の現象が関与している可能性があり,今後の検討課題と考えられる。

パラメータ	リファレンス	下限	上限	備考
流速	-	0.13	0.68	
分散長(無次元)	-	0.02	1.35	
湿潤辺長	-	1.98	10.78	逆解析
亀裂幅	-	0.49	5.59	
マトリックス拡散寄与面積率	-	0.20	3.90	
断層内動水勾配	0.01	0.001	0.1	
透水量係数	e-10:母岩、e-7:断層	リファレンスの1桁減	リファレンスの1桁増	H12Poport
分散長(無次元)	0.10	0.01	1.00	пігкероті
マトリックス拡散寄与面積率	0.50	0.10	1.00	

表 11-1 逆解析結果より得られたパラメータ不確実性と JNC 第2次とりまとめの比較

11.2 逆解析結果に基づくパラメータスタディ

ここでは,特に本検討で得られた分散長と同定した湿潤辺長より求めたマトリックス拡散寄与面積率 に注目し,それぞれ最大値1.35~最小値0.02及び最大値3.9~最小値0.2の範囲でパラメータがばらつく 際に,実際の評価計算結果がどの程度異なるかを検討した。

実施したケースは JNC 第2次とりまとめのリファレンスケースをもとに,その分散長あるいはマトリックス拡散寄与面積率のみを変化させ,最大線量とその発生時刻の確認を行った。

図 11-1,図 11-2にそれぞれの解析結果を示す。また,表 11-2には最大線量とその発生時刻を示す。

分散長が小さくなる場合には最大線量に大きな変化は見られないが,分散長が大きくなる場合には最 大線量が増加する。その比率は表 11-2に示すようにリファレンスケースに対して 2.46 倍程度である。 また,マトリックス拡散寄与面積率が小さくなる場合は 2.26 倍となるが,大きくなる場合は 0.17 倍と大 きく低下する。従って,亀裂中の核種移行を考える場合,亀裂内の拡散を適切に把握すれば,廃棄物処 分場の施設設計を行う場合,一層の合理化を図れる可能性があると考えられる。



図 11-1 JNC 第2次取りまとめリファレンスケースとの比較 (母岩からの核種移行率,縦方向分散長を変更)



図 11-2 JNC 第2次取りまとめリファレンスケースとの比較 (母岩からの核種移行率,マトリックス拡散寄与面積率を変更)

	発生時刻 (yr.)	最大線量(µSv/yr.)	線量比
JNC2 次取りまとめ	301000	0.00642	1.00
=1.35	301000	0.0158	2.46
=0.02	301000	0.00651	1.01
f=0.2	351000	0.0145	2.26
f=3.9	601000	0.00110	0.17

表 11-2 最大線量とその発生時刻

12. おわりに

本年度は昨年度作成された逆解析プログラムを用いて,原位置トレーサー試験の逆解析を行った。その結果得られた知見をまとめると以下のようになる。

- ・非収着トレーサーの破過曲線は、移流と分散を表現する亀裂内流速と分散長をパラメータとして 精度良く同定できる。また、マトリックス拡散も考慮して湿潤辺長を同定パラメータに加えると その精度は向上する。
- ・破過曲線を近似する場合、1経路モデル<2経路モデル<3経路モデルの順に精度が向上するが、その効果は破過曲線の形状により異なる。モノピークの破過曲線に対しては経路数を増やすことによる精度向上効果は小さく1経路モデルを用いるのが合理的と考えられる。一方、ダブルピークを持つ破過曲線に対しては2経路モデルを用いると1経路モデルに対して大きく精度向上が見込めるが、2経路モデルを3経路モデルに変更する効果は小さく、2経路モデルを用いるのが合理的と考えられる。また、こうしたことは情報量基準を用いることで定量的に優劣を判断できる。</p>
- ・流速,分散長といったパラメータは1経路モデルで同定した場合に比べて,経路数を大きくする とそのばらつきは小さくなる。
- ・同定された湿潤辺長は過大な値をとるが、これはマトリックス内の拡散係数の不確実性や充填鉱物内の拡散を考慮しないことに起因すると考えられ、亀裂中の核種の拡散現象に関しては今後の検討が必要と思われる。
- ・非収着トレーサーの破過曲線を用いて,流速,分散長,湿潤辺長,経路数が決まれば,収着核種の遅延係数はこれらのパラメータとは独立に同定パラメータとすることが出来る。しかし,収着特性が大きくなると,同定が困難な場合もある。
- ・分配係数の同定値は,経路数に関わらず同様の定性的傾向を示すが,定量的には1経路モデルを 用いた場合よりも2経路モデルの場合の方が小さく同定される傾向にある。
- ・本検討で同定対象とした全てのパラメータは,それぞれ観測値と計算値の誤差に起因する不確実 性を持つが,その不確実性は試験条件やモデル化の変更に伴うものに比較すると小さい。
- ・本検討で得られたパラメータのばらつきの範囲は,JNC第2次取りまとめのリファレンスケース に対して不確実性ケースとして設定されたパラメータの範囲内に概ね含まれるものであったが, マトリックス拡散寄与面積率のみ非保守側に大きい不確実性を示した。同定されたマトリックス 拡散寄与面積率を用いて,JNC第2次取りまとめのリファレンスケースを基準とした評価計算を 行ったところ,亀裂中の拡散を十分に評価すれば最大線量が0.17倍という値を示した。これは, 今後の処分場の施設設計を合理的に行う上で亀裂中の拡散の把握が重要であることを示唆するも のと考えられる。

参考文献

- 1) 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3地層処分安システムの安全評価",核燃料サイクル開発機構技術資料,JNC TN1400 99-023,(1999)
- Sudicky,E.A.: "The Laplace transform Galerkin technique for efficient time-continuous solution of solute transport in double-porosity media", Geoderma, 46, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, pp.209-232, 1990.
- De Hoog, F.R., Knight, J. and Stokes, A.: "An improved method for numerical inversion of Lapalace transform", SIAM J. Sci. Stat. Comput., 3(3), pp.357-366, (1982)
- Carrera, J. and Neuman, S.P.: "Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions: 1. Maximum Likelihood Method Incorporating Prior Information", Water resources Research, Vol.22, No.2, pp.199-210, (1986)
- 5) Carrera, J. and Neuman, S.P.: "Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions: 2. Uniqueness, Stability, and Solution Algorithms", Water resources Research, Vol.22, No.2, pp.211-227, (1986)
- 6) Carrera, J. and Neuman, S.P.: "Estimation of Aquifer Parameters Under Transient and Steady State Conditions: 3. Application to Synthetic and Field Data", Water resources Research, Vol.22, No.2, pp.228-242, (1986)
- 7) 中川徹,小柳義夫:最小二乗法による実験データ解析,東京大学出版会,(1982)
- 8) Bury, K.V.: Statistical Models in Applied Science, John Wiley, New York, (1975)
- 9) Bard, Y.: Nonlinear Parameter Estimation, Academic Press, (1974)
- Yeh, W.W-G. and Yoon, Y.S.: A systematic optimization procedure for the identification of inhomogeneous aquifer parameters, in Advances in Groundwater Hydrology, American Water Resources Association, Minneapolis, Minnesota, pp.72-82, (1976)
- 11) Shah, P.C., Gavalas, G.R. and Seinfeld, J.H.: "Error analysis in history matching: The optimum level of parameterization", Soc. Pet. Eng. J., 18, pp.219-228, (1978)
- 12) Yeh, W.W-G.: "Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem", Water Resources Research, Vol.22, No.2, pp.95-108, (1986)
- 13) Finsterle, F. and Pruess, K.: "Soving the estimation-identification problem in two-phase flow modeling", Water Resources Research, Vol.31, No.4, pp.913-924, (1995)
- Donaldson, J.R. and Schnabel, R.B.: "Computational Experience with Confidence Regions and Confidence Intervals for Nonlinear Least Squares", Technometrics, Vol.29, No.1, pp.67-82, (1987)
- 15) 東京大学教養学部統計学教室:統計学入門,東京大学出版会,(1991)
- 16) Winberg, A., Andersson, P., Hermanson, J., Byegård, J., Cvetkovic, V. and Birgersson, L. : "Final report of the first stage of the tracer retention understanding experiments", SKB Technical Report, TR-00-07, (2000)
- 17) Cvetkovic, V., Cheng, H. and Selroos, J.-O.: "Evaluation of Tracer Retention Understanding Experiments (first stage) at Äspö, SKB International Cooperation Report", ICR-00-01, (2000)