

核種移行解析コードMATRICSによる
解析の信頼性の検証
(研究報告)

2000年4月

核燃料サイクル開発機構
東 海 事 業 所

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)

2000

核種移行解析コード MATRICS による解析の信頼性の検証
(研究報告)

白川敏彦, 井尻裕二*, 長坂和佳**, 松本昌昭***

要旨

高レベル放射性廃棄物の地層処分研究における、第2次取りまとめの核種移行解析において使用した核種移行解析コード MATRICS の信頼性を検討した。

検討方法として MATRICS および解析解により核種移行パラメータについての感度解析を行い、各々の計算結果を比較した。また、MATRICS で使用している逆ラプラス変換法である Talbot 法と Crump 法、細野法に関して核種移行パラメータについての感度解析を行い、各々の逆ラプラス変換法による結果を比較した。

検討の結果、以下の事項が判明した。

- マトリクス拡散距離無限の場合における MATRICS による解析結果と解析解との比較の結果、Pe 数が 1.0~100 のとき、MATRICS による解析結果の誤差は、最大で約 0.4% であり、透水量係数が $1.0 \times 10^{-10} \sim 1.0 \times 10^{-5}$ (m²/s) のとき、MATRICS による解析結果との誤差は、最大で約 5.5% であった。
- マトリクス拡散距離有限 (0.03~1.0(m)) の場合における MATRICS による解析結果と解析解との比較の結果、Pe 数が 1.0~100 のとき、MATRICS による解析結果の誤差は、最大で約 0.7% であり、透水量係数が $1.0 \times 10^{-10} \sim 1.0 \times 10^{-5}$ (m²/s) のとき、MATRICS による解析結果の誤差は、最大で約 2.4% であった。
- 逆ラプラス変換法である Talbot 法を他の逆ラプラス変換法による結果と比較した結果、Talbot 法は、Pe 数が $5.0 \times 10^{-1} \sim 2.0 \times 10^3$ 、透水量係数が 1.0×10^{-7} (m²/s) 以下の場合は、計算結果は、Crump 法、細野法と同様の結果となった。

以上のことから、第2次とりまとめにおける Pe 数及び透水量係数の範囲においては、MATRICS による解析結果は信頼できるものであると結論づけられる。

東海事業所環境保全センター 処分研究部 システム解析グループ

* 大成建設株式会社 エンジニアリング本部 計画グループ

** 株式会社 三菱総合研究所 原子力システム研究部

April, 2000

Reliability Evaluation for Radionuclide Transport Analysis Code MATRICS

Toshihiko Shirakawa, Yuji Ijiri*, Kazuyoshi Nagasaka**, Masaaki Matsumoto***

Abstract

A reliability evaluation for radionuclide transport analysis code, MATRICS, used in radionuclide transport analysis in the natural barrier system PA in H12 report has been carried out.

Sensitivity analysis to radionuclide transport parameter in MATRICS and analytical solution has been performed, and the results of each analysis have been compared. Additionally sensitivity analysis using Talbot Method , Crump method and Hosono method has been carried out , and the results of each inverse Laplace transform method has been compared.

The conclusions obtained from the results of the evaluation are summarized as follows ,

- In case of the infinite matrix diffusion distance , an error among the results of each calculation is maximum about 0.4% in the range of Pe number from 1.0 to 100. And, an error among the results of each calculation is maximum about 5.5% in the range of transmissivity from 1.0×10^{-10} to $1.0 \times 10^{-5}(\text{m}^2/\text{s})$.
- In case of the finite matrix diffusion distance ($0.03 \sim 1.0(\text{m})$) , an error among the results of each calculation is maximum about 0.7% in the range of Pe number from 1.0 to 100. And, an error among the results of each calculation is maximum about 2.4% in the range of transmissivity from 1.0×10^{-10} to $1.0 \times 10^{-5}(\text{m}^2/\text{s})$.
- By comparing Talbot method with other inverse Laplace transform method, Talbot method is confirmed to give similar results with other inverse Laplace transform method in the range of Pe number from 5.0×10^{-1} to 2.0×10^3 , and that of transmissivity below $1.0 \times 10^{-7}(\text{m}^2/\text{s})$.

Therefore, it is concluded that the reliability of MATRICS are confirmed by conducting sensitivity analysis in the range of Pe number and transmissivity coefficient used in H12 report.

Waste Isolation Research Division, Tokai Works.

* Engineering Div. Taisei Corp.

** Mitsubishi Research Institute, Inc.

目次

要旨

Abstract

1.	はじめに	1
2.	支配方程式	2
3.	解析解との比較	6
3.1	マトリクス拡散距離無限の場合の解析解との比較	6
3.1.1	Pe 値の変化による比較解析	7
3.1.2	透水量係数の変化による比較解析	8
3.2	マトリクス拡散距離有限の場合の解析解との比較	9
3.2.1	Pe 値の変化による比較解析	10
3.2.2	透水量係数の変化による比較解析	10
4.	逆ラプラス変換法の比較	20
4.1	逆ラプラス変換	20
4.1.1	基礎方程式のラプラス変換	20
4.1.2	各数値逆ラプラス変換法の概説	22
4.2	Pe 数の変化による比較解析	24
4.3	積分点を変化させた比較解析	26
4.4	計算時間の比較解析	27
4.5	透水量係数の変化による比較解析	27
5	まとめ	59
6	謝辞	61
	参考文献	62
	付録 A	63

表目次

表3-1 Pe 数を変化させる比較解析における解析解の入力値	12
表3-2 Pe 数を変化させる比較解析における核種移行コード MATRICS の入力値	12
表3-3 Pe 数を変化させる比較解析における解析解と MATRICS の計算結果	13
表3-4 透水量係数を変化させる比較解析における解析解の入力値	13
表3-5 透水量係数を変化させる比較解析における核種移行コード MATRICS の入力値	14
表3-6 透水量係数を変化させる比較解析における解析解と MATRICS の計算結果	14
表3-7 解析解に入力したパラメータのうち変化させた値 (Pe 数の感度解析)	15
表3-8 MATRICS の入力パラメータのうち変化させた値 (Pe 数の感度解析)	15
表3-9 解析解と MATRICS による計算結果 (Pe 数の感度解析)	16
表3-10 解析解に入力したパラメータのうち変化させた値 (透水量係数の感度解析)	17
表3-11 MATRICS の入力パラメータのうち変化させた値 (透水量係数の感度解析)	18
表3-12 解析解と MATRICS による計算結果の比較	19
表4-1 Pe 数の変化による比較解析の解析条件	30
表4-2 積分点の個数と誤差の関係	30
表4-3 解析における核種のパラメータ	31
表4-4 数値逆 Laplace 変換法の計算時間	31
表4-5 透水量係数の変化による比較解析の解析条件	32

図目次

図4-1	移流拡散方程式解析における核種フラックス入力条件	33
図4-2	Talbot 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m ² /year]) Pe=1.0×10 ⁻¹ ~1.0×10 ² まで	34
図4-3	Talbot 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m ² /year]) Pe=2.0×10 ² ~1.0×10 ³ まで	34
図4-4	Crump 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m ² /year]) Pe=1.0×10 ⁻¹ ~1.0×10 ² まで	35
図4-5	Crump 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m ² /year]) Pe=2.0×10 ² ~1.0×10 ⁵ まで	35
図4-6	細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m ² /year]) Pe=1.0×10 ⁻¹ ~1.0×10 ² まで	36
図4-7	細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m ² /year]) Pe=2.0×10 ² ~1.0×10 ⁵ まで	36
図4-8	Talbot 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.1[m ² /year]) Pe=1.0×10 ⁰ ~1.0×10 ³ まで	37
図4-9	Crump 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.1[m ² /year]) Pe=1.0×10 ⁰ ~1.0×10 ³ まで	37
図4-10	細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.1[m ² /year]) Pe=1.0×10 ⁰ ~1.0×10 ³ まで	38
図4-11	Talbot 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.001[m ² /year]) Pe=1.0×10 ² ~1.0×10 ³ まで	38
図4-12	Crump 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.001[m ² /year]) Pe=1.0×10 ² ~2.0×10 ³ まで	39
図4-13	細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.001[m ² /year]) Pe=1.0×10 ² ~2.0×10 ³ まで	39
図4-14	Talbot 法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ¹)	40
図4-15	Talbot 法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ²)	40
図4-16	Talbot 法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ³)	41
図4-17	Crump 法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ¹)	41
図4-18	Crump 法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ²)	42
図4-19	Crump 法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ³)	42
図4-20	細野法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ¹)	43
図4-21	細野法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ²)	43
図4-22	細野法における積分点の個数と誤差の関係 (Pe=1.0×10 ³)	44

図4-23 Pe数と積分点の個数における誤差の関係 (Talbot法の場合)	45
図4-24 Pe数と積分点の個数における誤差の関係 (細野法の場合)	45
図4-25 Talbot法による解析結果 (CPU time=147.6[sec.])	46
図4-26 Crump法による解析結果 (CPU time=159.3[sec.])	46
図4-27 細野法による解析結果 (CPU time=110.4[sec.])	47
図4-28 Talbot法による Cs-135 の解析結果 (ケース1)	48
図4-29 細野法による Cs-135 の解析結果 (ケース1)	48
図4-30 Crump法による Cs-135 の解析結果 (ケース1)	49
図4-31 Talbot法による Cs-135 の解析結果 (ケース2)	49
図4-32 細野法による Cs-135 の解析結果 (ケース2)	50
図4-33 Crump法による Cs-135 の解析結果 (ケース2)	50
図4-34 Talbot法による Cs-135 の解析結果 (ケース3)	51
図4-35 細野法による Cs-135 の解析結果 (ケース3)	51
図4-36 Crump法による Cs-135 の解析結果 (ケース3)	52
図4-37 Talbot法による Cs-135 の解析結果 (ケース4)	52
図4-38 細野法による Cs-135 の解析結果 (ケース4)	53
図4-39 Crump法による Cs-135 の解析結果 (ケース4)	53
図4-40 Talbot法による Cs-135 の解析結果 (ケース5)	54
図4-41 細野法による Cs-135 の解析結果 (ケース5)	54
図4-42 Crump法による Cs-135 の解析結果 (ケース5)	55
図4-43 Talbot法による Cs-135 の解析結果 (ケース6)	55
図4-44 細野法による Cs-135 の解析結果 (ケース6)	56
図4-45 Crump法による Cs-135 の解析結果 (ケース6)	56
図4-46 細野法のパラメータと最大値誤差の関係	57
図4-47 Crump法のパラメータと最大値誤差の関係	57
図4-48 細野法のパラメータと誤差の関係	58
図4-49 Crump法のパラメータと誤差の関係	58

1. はじめに

第2次取りまとめの核種移行解析における1次元平行平板モデルの重ね合わせには、核種移行コード MATRICS が使用されている。MATRICS は、1次元亀裂中を移行する核種のフラックスを算出するコードであり、数値逆 Laplace 変換法を利用してフラックスを求めるところに特色がある。

本資料は、第2次とりまとめの核種移行解析の信頼性を検証することを目的として、MATRICS および解析解に対して核種移行パラメータについての感度解析を行い、各々の計算結果の比較に関して記述したものである。また、MATRICS で使用している逆 Laplace 変換法である Talbot 法と他の逆 Laplace 変換法に関する感度解析を行い、各々の逆 Laplace 変換法（Crump 法、細野法）による結果と比較することにより、MATRICS による解析結果の信頼性を検証した。

2. 支配方程式

物質移行コード MATRICKS における支配方程式は、以下のような亀裂媒体中の 1 次元の物質移行と、岩体マトリクス中の 1 次元の物質移行を連立したものである。

(亀裂方向)

$$\theta R_n \frac{\partial C_n}{\partial t} = D_L \theta \frac{\partial^2 C_n}{\partial x^2} - q \theta \frac{\partial C_n}{\partial x} + \sum_{i=1}^N P_i A_i \theta_i^m D_i^m \frac{\partial C_{n,i}^m}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} - \theta R_n \lambda_n C_n + \theta R_{n-1} \lambda_{n-1} C_{n-1}$$

(2.1)

ここで、添字 n は崩壊連鎖における n 番目の核種、i はマトリクスブロックタイプ、m はマトリクスを意味している。

R_n	: 核種 n の遅延係数 [-]
$C_n(x, t)$: 核種 n の濃度 [mol/m ³]
t	: 時間 [y]
q	: 水の流速 [m/y]
x	: 評価地点までの距離 [m]
D_L	: 亀裂方向の分散/拡散係数 (縦方向分散係数) [m ² /y]
D_i^m	: マトリクス方向の拡散係数 [m ² /y]
θ_i^m	: マトリクス m の間隙率 [-]
θ	: 岩体マトリクスの間隙率 [-]
P_i	: 岩体に対するマトリクス体積の割合 [-]
A_i	: マトリクスと亀裂の単位体積あたりの表面積 [1/m]
$C_{n,i}^m(x, \omega, t)$: マトリクス間隙水中の核種濃度 [mol/m ³]
ω	: 亀裂表面からの侵入深さ [m]
λ	: 崩壊定数 [1/y]

ここで、

$$R_n = 1 + \rho^m K_n (1 - \theta^m) A \delta / \theta \quad (2.2)$$

ρ^m	: マトリクス m の平均密度 [kg/m ³]
K_n	: 核種 n の分配係数 [m ³ /kg]
δ	: 表面吸着の有効深さ [m]

A : 岩体と亀裂の単位体積あたりの有効吸着表面積 [m²]

(マトリクス方向)

$$R_{n,i}^m \frac{\partial C_{n,i}^m}{\partial t} = D_i^m \nabla_m^2 C_{n,i}^m - R_{n,i}^m \lambda_m C_{n,i}^m + R_{n-1,i}^m \lambda_{n-1} C_{n-1,i}^m \quad (2.3)$$

ここで,

$$R_{n,i}^m = 1 + \rho_i^m K_{n,i} (1 - \theta_i^m) / \theta_i^m \quad (2.4)$$

である。

ただし、第2次取りまとめの核種移行解析において考慮されている体系においては、マトリクスブロックタイプは1種類であるため、 $i=1$ である。このことから、 $P_i=1$ となり、マトリクスの単位体積あたりのブロック表面積 A_i も1となる。このことから、(1)式は以下のように書き換えられる。

$$\theta R_n \frac{\partial C_n}{\partial t} = D_L \theta \frac{\partial^2 C_n}{\partial x^2} - q \theta \frac{\partial C_n}{\partial x} + \theta^m D^m \frac{\partial C_n^m}{\partial w} \Big|_{w=0} - \theta R_n \lambda_n C_n + \theta R_{n-1} \lambda_{n-1} C_{n-1} \quad (2.1)'$$

初期条件は、

$$C_n(x, 0) = 0 \quad (2.5)$$

$$C_n^m(x, w, 0) = 0 \quad (2.6)$$

境界条件は、

(亀裂内) 入口($x=0$, $t>0$)

$$\left[c_1 C_n - c_2 \frac{\partial C_n}{\partial x} \right]_{x=0} = \phi_{in}(t) \quad (2.7)$$

(亀裂内) X=L

$$\left[d_1 C_n - d_2 \frac{\partial C_n}{\partial x} \right]_{x=L} = 0 \quad (2.8)$$

(マトリクス内) 亀裂との境界

$$C_n^m(b, x, t) = C_n(x, t) \quad (2.9)$$

(マトリクス内) マトリクス拡散の終端

$$\left. \frac{\partial C_n^m}{\partial w} \right|_{w=\frac{p}{2}} = 0 \quad (2.10)$$

である。

ここで,

 c_1, c_2, d_1, d_2 : 濃度, Flux をコントロールするために利用者が指定する任意の値 [-] $\phi_{in}(t)$: 人工バリアからの核種流入率の時間変化を表す積分可能関数 [mol/y] $\frac{p}{2}$: マトリクス拡散深さ [m](2.1)式, (2.3)式を初期条件(2.5)式, (2.6)式および境界条件(2.7)式～(2.10)式のもとで解くと, $x=1$ における Flux として,

$$\phi_{out}(t) = A_s \left[e_1 C_n - e_2 \frac{\partial C_n}{\partial x} \right] \quad (2.11)$$

が得られる。

なお, 核種解析コード MATRICS は, 支配方程式を Laplace 変換して, Laplace 空間中で解析解を求めた後, 解析解を数値的に逆 Laplace 変換して, 核種のフラックスを算出するコードである。

3. 解析解との比較

核種解析コード MATRICS による解析結果の検証として既知の解析解との比較を行った。Tang et al. (1981) は、マトリクス拡散距離を無限と仮定して解析解を求めており、石原他 (1999) は、定常条件下において既知の有限のマトリクス拡散を仮定した解析解を求めている。本章では、各々の解析解と MATRICS コードとの比較を行う。

3.1 マトリクス拡散距離無限の場合の解析解との比較

Tang et al. (1981) の解析解は、亀裂入口濃度一定の条件及び亀裂表面への核種の吸着を無視することにより得られ、定常条件下において (2.1) 式を解くと以下のように与えられる。

$$\frac{\phi}{\Psi_0} = \exp \left[\frac{Pe}{2} - \left\{ \frac{Pe^2}{4} + \frac{Pe \cdot x}{b \cdot q} \left[b\lambda + \theta (\lambda \cdot R_n^m \cdot D_i^m)^{1/2} \right] \right\}^{1/2} \right] \quad (3.1)$$

ただし、 $b\lambda \ll \theta(\lambda \cdot R_n^m \cdot D_i^m)^{1/2}$ であることから、 $b\lambda$ の項を無視すると (3.1) 式は以下のようになる。

$$\frac{\phi}{\Psi_0} = \exp \left[\frac{Pe}{2} - \left\{ \frac{Pe^2}{4} + \frac{Pe \cdot x \cdot \theta}{b \cdot q} (\lambda \cdot R_n^m \cdot D_i^m)^{1/2} \right\}^{1/2} \right] \quad (3.2)$$

ここで、

Pe	: ペクレ数 ($= q \cdot x / D_L$) [-]
θ	: 岩体マトリクスの間隙率 [-]
x	: 地質媒体中の評価地点までの距離 [m]
$2b$: 亀裂開口幅 [m]
q	: 亀裂内流速 [m/y]
λ	: 崩壊定数 [1/y]
R_n^m	: 岩体マトリクス部の遅延係数 [-]
D_L	: 縦方向分散係数 [m^2/y]
ϕ	: 人工パリアからの核種移行率 [Bq/y]
Ψ_0	: 評価地点における核種移行率 [Bq/y]

であり、さらに亀裂内流速、縦方向分散係数は、

$$q = \frac{T \cdot \Delta H}{2b} \quad (3.3)$$

$$D_L = \frac{\alpha_L \cdot T \cdot \Delta H}{2b} \quad (3.4)$$

のように定義される。ここで、

T : 透水量係数 [m²/s]

ΔH : 動水勾配 [-]

α_L : 縦方向分散長 [m]

である。なお、第2次取りまとめにおいて亀裂開口幅は(3.5)式のような経験則(動燃事業団, 1994)算出している。

$$2b = c\sqrt{T} \quad (3.5)$$

$2b$: 開口幅 [m]

T : 亀裂の透水量係数 [m²/s]

c : 係数 (=釜石鉱山単一亀裂内トレーサー試験より 2.0)

次項以降、MATRICSによる解析結果を検証するために、(3.2)式の解析解中の核種移行パラメータに値を入れた数値解とMATRICSによる解析結果を比較した。比較においては、2次取りまとめのパラメータを考慮して、Pe数、透水量係数を変化させた。

3.1.1 Pe数を変化させる比較解析

本節では、Pe数を変化させて実施したMATRICSによる解析の結果と、(3.2)式の解析解中のPe数を変化させて算出した数値解の結果を比較し、MATRICSを使用した解析におけるPe数変化による影響を検討した。ここでPe数は、以下のように定義される量である。

$$Pe = \frac{\text{流速} \times \text{評価距離}}{\text{縦方向分散係数}} \quad (3.5)$$

解析において、Pe 数の値は、縦方向分散長を変えることで変化させた。

(3.2) 式の解析解は核種の崩壊連鎖を考慮していないことから、対象核種は 2 次取りまとめで支配的な核種の 1 つである Cs-135 とし、(3.2) 式の半減期、分配（遅延）係数には Cs-135 の値を代入した。一方、MATRICS において(3.2)式の解析解と同様の解析を行うため、亀裂表面の遅延係数を 1.0 と設定した。また、解析解では、マトリクス拡散深さを無限大と設定していることから、MATRICS においては、マトリクス拡散深さを 1.0×10^{10} (m)とした。さらに、(3.2)式の解析解は、亀裂入口濃度一定の条件によって得られたものであるから、MATRICS の解析に使用する核種ソースのファイルには、核種のフラックスが時間変化に対して一定のものを使用した。

解析は、Pe 数が 100, 20, 10, 2.0, 1.0 の 5 ケースを実施した。なお、各々のケースにおける縦方向分散長は、それぞれ 1.0, 5.0, 10, 50, 100 である。また、透水量係数は、第 2 次とりまとめで使用される範囲内の値である 1.00×10^{-8} (m²/s)、動水勾配は第 2 次とりまとめで使用されている値 0.01 を選択した。亀裂内流速、縦方向分散係数、亀裂システムの空隙率（=亀裂開口幅）は、各々 (3.3) 式、(3.4) 式、(3.5) 式から算出したものである。なお、マトリクス空隙率はレファレンスケースでの入力値 0.02 を使用した。以上の (3.2) 式に代入する核種移行パラメータを表 3-1 にまとめた。また、このときの MATRICS の入力データは表 3-2 のように設定した。

上記のように核種移行パラメータを設定して、解析解と MATRICS による解析結果を比較したものを表 3-3 に記載した。本表より、解析解と MATRICS による解析結果の誤差は、0.256%~0.372% である。

以上のことから、Pe 数の変化に着目した場合、 $1.0 \leq Pe \leq 100$ の範囲では、MATRICS による解析結果は信頼できるものであると考えられる。

3.1.2 透水量係数を変化させる比較解析

本節では、透水量係数を変化させて実施した MATRICS による解析の結果と、(3.2) 式の解析解中の透水量係数に関連する核種移行パラメータの値を変化させて算出した数値解の結果を比較し、MATRICS を使用した解析に対する透水量係数変化による影響を検討した。解析条件は、Pe 数を 10、評価距離を 100(m)に固定し、透水量係数を $1.0 \times 10^{-5} \sim 1.0 \times 10^{-10}$ [m²/s]まで 10 倍ずつ変化させた 6 ケースの解析を実施した。3.1 節と同様に亀裂システムの空隙率（=亀裂開口幅）、亀裂内流速、縦方向分散係数の値は、透水量係数の値から決定される。また、他の核種移行パラメータは、3.1 節と同様のものを使用した。以上の (3.2) 式に代入する核種移行パラメータを表 3-4 にまとめた。また、このときの MATRICS の入力データは、表 3-5 のように設定した。

上記のように核種移行パラメータを設定して、解析解と MATRICS による解析結果を比

較した結果を表 3-6 に記載した。本表より、解析解と MATRICS による解析結果の誤差は、0.180%～5.468%である。

以上の結果を考察すると、ケース1～ケース5において誤差は1%以下であり、解析解と MATRICS による計算結果はほぼ同一である。ケース6における誤差は5.468%と大きいが、解析解と MATRICS による計算結果の差は10⁻²⁷のオーダーであり、他のケースにおける誤差に比べるとはるかに小さいことから、解析解と MATRICS の計算結果はほぼ同一であると見なせる。

したがって、透水量係数の変化に着目した場合、透水量係数が1.0×10⁻⁵～1.0×10⁻¹⁰(m²/s)の範囲では、MATRICS による解析結果は信頼できると考えられる。

3.2 マトリクス拡散距離有限の場合の解析解との比較

本節では、マトリクス拡散深さの制限を考慮した解析解と MATRICS による解析結果の比較を実施し、MATRICS による解析に対するマトリクス拡散深さの変化による影響を検討した。

ここで比較する解析解は、亀裂性媒体における崩壊連鎖を考慮しないものであり、以下のように与えられる(石原他, 1999)。

$$\frac{\phi}{\Psi_0} = \exp\left(\frac{Pe}{2} - \sqrt{\frac{Pe^2}{4} + Pe \cdot \lambda \cdot T}\right) \equiv \gamma \quad (3.6)$$

ここで、

$$\begin{aligned} Pe &= \frac{q \cdot z}{D_L} \\ T &= \frac{z}{q} \cdot R_{eff} = \frac{z}{q} \left[R_f + \frac{F \cdot \varepsilon \cdot R_d}{b \cdot \alpha} \cdot \tanh\left(\alpha \cdot \frac{p}{2}\right) \right] \\ \alpha &\equiv \sqrt{\frac{\lambda \cdot R_n^m}{D_i^m}} \end{aligned}$$

ここで、

z : 評価地点までの距離 [m]

R_n^m : 岩体マトリクスへの吸着による遅延係数 [-]

D_i^m : 岩体マトリクス部の空隙中拡散係数 [m^2/y]

p : マトリクス拡散深さ [m]

F : マトリクス拡散に寄与する亀裂面積の割合 [-]

また、移行特性パラメータの組み合わせ T を核種移行時間と定義する(Nagra, 1994)。

次項以降、MATRICS による解析結果を検証するために、解析解(3.6)中の核種移行パラメータに値を入れた数値解と MATRICS による解析結果を比較した。比較においては、2 次取りまとめのパラメータを考慮して、Pe 数、透水量係数を変化させた。なお、比較においてマトリクス拡散に寄与する亀裂面積の割合 F を 1 とおいた。

3.2.1 Pe 数を変化させる比較解析

本節では、3.1.1 項と同様の MATRICS による解析結果と、解析解中の数値解の結果を比較し、マトリクス拡散深さが有限な場合における MATRICS による解析に対する Pe 数変化による影響を検討した。解析条件は、マトリクス拡散深さ以外は 3.1.1 項と同様の値を使用した。マトリクス拡散深さは、2 次取りまとめのレファレンスケースにおける解析で使用した 0.1[m] と、データ不確実性を考慮した範囲の上限値、下限値である 1.0[m] と 0.03[m] の場合を考慮した。以上の (3.6) 式に代入する核種移行パラメータのうち、変化させるものを表 3-7 にまとめた。また、このときの MATRICS の入力データ中で変化させるものを表 3-8 にまとめた。

上記のように核種移行パラメータを設定して、解析解と MATRICS による解析結果を比較したものを表 3-9 に記載した。本表より、解析解と MATRICS による解析結果の誤差は、0.114~0.672% である。

以上のことから、Pe 数の変化に着目した場合、 $1.0 \leq Pe \leq 100$ の範囲では、MATRICS による解析結果は信頼できるものであると考えられる。

3.2.2 透水量係数を変化させる比較解析

本節では、3.1.2 項と同様の MATRICS による解析の結果と、解析解中の数値解の結果を比較し、マトリクス拡散深さが有限な場合の MATRICS を使用した解析における透水量係数変化による影響を検討した。解析条件は、マトリクス拡散深さ以外は 3.3 節と同様の値を使用した。マトリクス拡散深さは、3.2.1 項と同様の値を使用した。以上の (3.6) 式に代入する核種移行パラメータのうち、変化させるものを表 3-10 にまとめた。また、これに対

応して行う MATRICS による解析で使用する入力データ中で変化させるものを表 3-11 に記載した。ここで、表 3-11 の縦方向分散係数は、表 3-10 中の亀裂内流速に縦方向分散長 10(m)をかけた量であることから、表 3-10 と表 3-11 の解析条件は同一になる。

上記のように核種移行パラメータを設定して、解析解と MATRICS による解析結果を比較した結果を表 3-12 に記載した。本表より、解析解と MATRICS による解析結果の誤差は、0.00~2.363%である。

以上の結果を考察すると、ケース 6c 以外において誤差は 1 %以下であり、ほぼ同一である。ケース 6c における誤差は 2.363%と大きいが、解析解と MATRICS による計算結果の差は 10^{-15} のオーダーであり、他のケースにおけるに比べるとはるかに小さいことから、解析解と MATRICS の計算結果はほぼ同一であると見なせる。

これより、透水量係数の変化に着目した場合、 $1.0 \times 10^{-5} \sim 1.0 \times 10^{-10} (\text{m}^2/\text{s})$ の範囲では、MATRICS による解析結果は信頼できるものであると考えられる。

これより、MATRICS による解析結果は、解析解とほぼ同一の値を算出することがわかった。したがって、MATRICS による計算結果は信頼できると考えられる。

表 3-1. Pe 数を変化させる比較解析における解析解の入力値

内容	単位	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5
半減期	[y]			2300000		
透水量係数	[m ² /s]			1.0E-8		
動水勾配	[·]			0.01		
ペクレ数	[·]	100	20	10	2.0	1.0
亀裂内流速	[m/y]			1.577E+0		
評価距離	[m]			100		
マトリクス拡散深さ	[m]			∞		
マトリクス空隙水中拡散係数	[m ² /y]			4.73E-3		
マトリクス空隙率	[·]			0.02		
マトリクス中遅延係数	[·]			6.62E+3		
亀裂システムの空隙率	[·]			2.00E-3		

表 3-2. Pe 数を変化させる比較解析における核種移行コード MATRICS の入力値

内容	単位	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5
出力開始時間, 出力終了時間	[y]			1.0E+0		
	[y]			1.0E+10		
核種名	[·]			Cs-135		
半減期	[y]			2300000		
縦方向分散係数	[m ² /y]	1.577E+1	7.884E+1	1.577E+2	7.884E+2	1.577E+3
亀裂表面の遅延係数	[·]			1.0		
動水勾配	[·]			0.01		
亀裂内流速	[m/y]			1.577E+0		
評価距離	[m]			100		
BLOCK タイプ ^①	[·]			slab		
亀裂間隔	[m]			1		
マトリクス拡散深さ	[m]			1.0E+10		
マトリクス空隙水中拡散係数	[m ² /y]			4.73E-3		
マトリクス空隙率	[·]			0.02		
マトリクス中遅延係数	[·]			6.62E+3		
BLOCK タイプ ^① の体積比	[·]			1		
亀裂表面/全体積	[·]			2.0		
亀裂システム空隙率	[·]			2.00E-3		
出口境界の位置	[·]			-1(=無限遠)		
mol -> Bq 単位変換ファクタ	[·]			=6.02 × 10 ²³ ln(2.0)/(半減期)		

表 3-3. Pe 数を変化させる比較解析における解析解と MATRICKS の計算結果

ケース名	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5
解析解 (-)	2.341E-02	3.550E-02	4.993E-02	1.402E-01	2.152E-01
MATRICKS による 計算結果 (-)	2.335E-02	3.539E-02	4.979E-02	1.397E-01	2.144E-01
誤差 (%)	0.256	0.310	0.280	0.357	0.372

表 3-4. 透水量係数を変化させる比較解析における解析解の入力値

内容	単位	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5	ケース 6
半減期	[y]			2300000			
透水量係数	[m ² /s]	1.0E-5	1.0E-6	1.0E-7	1.0E-8	1.0E-9	1.0E-10
ペクレ数	[·]			10.0			
亀裂内流速	[m/y]	4.99E+2	1.58E+2	4.99E+1	1.58E+1	4.99E+0	1.58E+0
評価距離	[m]			100			
マトリクス拡散深さ	[m]			∞			
マトリクス空隙水中拡散 係数	[m ² /y]			4.73E-3			
マトリクス空隙率	[·]			0.02			
マトリクス中遷延係数	[·]			6.62E+3			
亀裂システムの空隙率	[·]	6.32E-3	2.00E-3	6.32E-4	2.00E-4	6.32E-5	2.00E-5

表 3-5. 透水量係数を変化させる比較解析における核種移行コード MATRICS の入力値

内容	単位	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5	ケース 6
出力開始時間, 出力終了時間	[y]			1.0E+0			
	[y]			1.0E+10			
核種名	[・]			Cs-135			
半減期	[y]			2300000			
縦方向分散係数	[m ² /y]	4.99E+3	1.58E+3	4.99E+2	1.58E+2	4.99E+1	1.58E+1
亀裂表面の遅延係数	[・]			1.0			
亀裂内流速	[m/y]	4.99E+2	1.58E+2	4.99E+1	1.58E+1	4.99E+0	1.58E+0
評価距離	[m]			100			
BLOCK タイプ	[・]			slab			
亀裂間隔	[m]			1			
マトリクス拡散深さ	[m]			1.0E+10			
マトリクス空隙水中拡散係数	[m ² /y]			4.73E-3			
マトリクス空隙率	[・]			0.02			
マトリクス中遅延係数	[・]			6.62E+3			
BLOCK タイプの体積比	[・]			1			
亀裂表面/全体積	[・]			2.0			
亀裂システム空隙率	[・]	6.32E-3	2.00E-3	6.32E-4	2.00E-4	6.32E-5	2.00E-5
出口境界の位置	[・]			1(=無限遠)			
mol → Bq 単位変換ファクタ	[・]			=6.02×10 ²³ ln(2.0)/(半減期)			

表 3-6. 透水量係数を変化させる比較解析における解析解と MATRICS の計算結果

ケース名	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5	ケース 6
解析解 (-)	9.961E-01	9.619E-01	6.870E-01	4.993E-02	2.134E-07	9.529E-26
MATRICS による計算 結果 (-)	9.924E-01	9.556E-01	6.827E-01	5.002E-02	2.126E-07	1.005E-25
誤差 (%)	0.371	0.655	0.626	0.180	0.375	5.468

表 3-7. 解析解に入力したパラメータのうち変化させた値 (Pe 数の感度解析)

ケース名	マトリクス拡散深さ [m]	ペクレ数 [-]	縦方向分散係数 [m/y]
ケース 1-a	0.03	100	1.577E+1
ケース 1-b	0.1		
ケース 1-c	1.0		
ケース 2-a	0.03	20	7.884E+1
ケース 2-b	0.1		
ケース 2-c	1.0		
ケース 3-a	0.03	10	1.577E+2
ケース 3-b	0.1		
ケース 3-c	1.0		
ケース 4-a	0.03	2.0	7.884E+2
ケース 4-b	0.1		
ケース 4-c	1.0		
ケース 5-a	0.03	1.0	1.577E+3
ケース 5-b	0.1		
ケース 5-c	1.0		

表 3-8. MATRICES の入力パラメータのうち変化させた値 (Pe 数の感度解析)

ケース名	マトリクス拡散深さ [m]	縦方向分散係数 [m/y]
ケース 1-a	0.03	1.577E+1
ケース 1-b	0.1	
ケース 1-c	1.0	
ケース 2-a	0.03	7.884E+1
ケース 2-b	0.1	
ケース 2-c	1.0	
ケース 3-a	0.03	1.577E+2
ケース 3-b	0.1	
ケース 3-c	1.0	
ケース 4-a	0.03	7.884E+2
ケース 4-b	0.1	
ケース 4-c	1.0	
ケース 5-a	0.03	1.577E+3
ケース 5-b	0.1	
ケース 5-c	1.0	

表 3-9. 解析解と MATRICS による計算結果 (Pe 数の感度解析)

ケース名	解析解 [-]	MATRICS による計算 結果 [-]	誤差 [%]
ケース 1-a	0.963	0.961	0.208
ケース 1-b	0.881	0.880	0.114
ケース 1-c	0.299	0.298	0.334
ケース 2-a	0.963	0.961	0.208
ケース 2-b	0.882	0.880	0.227
ケース 2-c	0.315	0.314	0.317
ケース 3-a	0.963	0.961	0.208
ケース 3-b	0.883	0.881	0.227
ケース 3-c	0.333	0.332	0.300
ケース 4-a	0.963	0.959	0.415
ケース 4-b	0.888	0.883	0.563
ケース 4-c	0.425	0.424	0.235
ケース 5-a	0.964	0.959	0.519
ケース 5-b	0.893	0.887	0.672
ケース 5-c	0.490	0.488	0.408

表 3-10. 解析解に入力したパラメータのうち変化させた値（透水量係数の感度解析）

ケース名	マトリクス拡散深さ [m]	透水量係数 [m ² /s]	亀裂内流速 [m/y]	亀裂システムの空隙率 [—]
ケース 1-a	0.03	1.0E-5	4.99E+2	6.32E-3
ケース 1-b	0.1			
ケース 1-c	1.0			
ケース 2-a	0.03	1.0E-6	1.58E+2	2.00E-3
ケース 2-b	0.1			
ケース 2-c	1.0			
ケース 3-a	0.03	1.0E-7	4.99E+1	6.32E-4
ケース 3-b	0.1			
ケース 3-c	1.0			
ケース 4-a	0.03	1.0E-8	1.58E+1	2.00E-4
ケース 4-b	0.1			
ケース 4-c	1.0			
ケース 5-a	0.03	1.0E-9	4.99E+0	6.32E-5
ケース 5-b	0.1			
ケース 5-c	1.0			
ケース 6-a	0.03	1.0E-10	1.58E+0	2.00E-5
ケース 6-b	0.1			
ケース 6-c	1.0			

表 3-11. MATRICCS の入力パラメータのうち変化させた値（透水量係数の感度解析）

ケース名	マトリクス拡散深さ [m]	縦方向分散係数 [m ² /y]	亀裂内流速 [m/y]	亀裂システム空隙率 [—]
ケース 1-a	0.03	4.99E+3	4.99E+2	6.32E-3
ケース 1-b	0.1			
ケース 1-c	1.0			
ケース 2-a	0.03	1.58E+3	1.58E+2	2.00E-3
ケース 2-b	0.1			
ケース 2-c	1.0			
ケース 3-a	0.03	4.99E+2	4.99E+1	6.32E-4
ケース 3-b	0.1			
ケース 3-c	1.0			
ケース 4-a	0.03	1.58E+2	1.58E+1	2.00E-4
ケース 4-b	0.1			
ケース 4-c	1.0			
ケース 5-a	0.03	4.99E+1	4.99E+0	6.32E-5
ケース 5-b	0.1			
ケース 5-c	1.0			
ケース 6-a	0.03	1.58E+1	1.58E+0	2.00E-5
ケース 6-b	0.1			
ケース 6-c	1.0			

表 3-12. 解析解と MATRICKS による計算結果

ケース名	解析解 [-]	MATRICKS による計算 結果 [-]	誤差 [%]
ケース 1-a	1.000	0.998	0.200
ケース 1-b	1.000	0.994	0.600
ケース 1-c	0.999	0.991	0.801
ケース 2-a	1.000	0.998	0.200
ケース 2-b	0.999	0.997	0.200
ケース 2-c	0.988	0.982	0.607
ケース 3-a	0.996	0.994	0.201
ケース 3-b	0.987	0.986	0.101
ケース 3-c	0.886	0.884	0.226
ケース 4-a	0.963	0.961	0.208
ケース 4-b	0.883	0.881	0.227
ケース 4-c	0.333	0.332	0.300
ケース 5-a	0.694	0.692	0.288
ケース 5-b	0.321	0.321	0.00
ケース 5-c	7.991E-4	7.955E-4	0.451
ケース 6-a	5.323	5.331E-2	0.150
ケース 6-b	6.724E-4	6.762E-4	0.565
ケース 6-c	6.856E-14	7.018E-14	2.363

4. 逆ラプラス変換法の比較

核種移行解析コード MATRICS は、Laplace 変換した支配方程式の解析解を、数値逆 Laplace 変換して核種移行を計算するプログラムである。数値逆 Laplace 変換には Talbot 法 (Talbot, 1979), Crump 法 (Crump, 1976), 細野法 (細野, 1979) などが提案されているが、MATRICS では Talbot 法が採用されている。本章では、4.1 節において各数値逆 Laplace 変換法の概説を行い、4.2 節において MATRICS において採用された Talbot 法の信頼性を検討するために、MATRICS における数値逆 Laplace 変換計算に Crump 法、細野法を適用して、それぞれに対して解析を実施して得られた結果を、Talbot 法を適用した場合と比較した（長坂他, 2000）。比較においては、2 次取りまとめのパラメータを考慮して、Pe 数、透水量係数を変化させた。また、各数値逆 Laplace 変換法の積分点数を変化させた。さらに、実際の入力データを用いた計算時間の比較も行った。

4.1 逆ラプラス変換

4.1.1 基礎方程式のラプラス変換

2 章の基礎方程式が解析的な取り扱いが可能となるように、時間についての Laplace 変換を施すと、(2.1), (2.3) 式は、複素数 s を用いることにより、下記の式で表される (Worgan and Robinson, 1992)

$$[\epsilon^f R_n(s + \lambda_n) \bar{C}_n] = -q\epsilon^f \frac{\partial \bar{C}_n}{\partial x} + D_L \epsilon^f \frac{\partial^2 \bar{C}_n}{\partial^2 x} + A\epsilon^m D^m \frac{\partial \bar{C}_n}{\partial w} \Big|_{w=0} + \epsilon^f R_{n-1} \lambda_{n-1} \bar{C}_{n-1} \quad (4.1)$$

$$R_n^m (s + \lambda_n) \bar{C}_n^m = D^m \nabla^2 \bar{C}_n^m + R_{n-1}^m \lambda_{n-1} \bar{C}_{n-1}^m \quad (4.2)$$

なお、ここで \bar{C}_n は Laplace 空間での核種 n の濃度である。また、(2.7), (2.8), (2.9), (2.10) 式の境界条件は各々下記のように変換される。

$$A_s \left[c_1 \bar{C}_n - c_2 \frac{\partial \bar{C}_n}{\partial x} \right]_{x=0} = \bar{\phi}_{in} \quad (4.3)$$

$$A_s \left[d_1 \bar{C}_n - d_2 \frac{\partial \bar{C}_n}{\partial x} \right]_{x=L} = 0 \quad (4.4)$$

$$\bar{C}_n^m(x, \theta, s) = \bar{C}_n(x, s) \quad (4.5)$$

$$\left. \frac{\partial \bar{C}_n^m}{\partial w} \right|_{w=\frac{p}{2}} = 0 \quad (4.6)$$

(4.3)～(4.6)式より、(2.11)式の出力における Flux は(4.7)式のように書ける。

$$\overline{\phi_{out}} = A_s \left[e_1 \bar{C}_n - e_2 \frac{\partial \bar{C}_n}{\partial x} \right]_{x=I} \quad (4.7)$$

(4.7)式の Laplace 空間内における Flux を解析的に求めると以下のように表現される。

$$\overline{F}(s) = \overline{\phi}_n^0 = \sum_{m=1}^n U_{nm} [a_m^+ (e_1 + e_2 b_m^+) \exp(-b_m^+ I) + a_m^- (e_1 + e_2 b_m^-) \exp(-b_m^- I)] \quad (4.8)$$

なお、ここで a_m^\pm は境界条件によって決定される数であり、 b_m^\pm は以下のようないかである (Worgan and Robinson, 1992)。

$$b_m^\pm(s) = \frac{q}{2D} \left[-1 \pm \sqrt{1 + \frac{4D_L g_m(s)}{q^2 \epsilon}} \right] \quad (4.9)$$

ここで、

$$g_n(s) = \left[\epsilon R_n(s + \lambda_n) + A \epsilon^m D^m \frac{z_n^2}{a} B_n(z) \right] \quad (4.10)$$

であり、 z はブロックジオメトリ関数の変数である。

4.1.2 各数値逆ラプラス変換法の概説

(1) Talbot 法

Talbot 法による変換は以下の式で表される。

$$f(t) = \frac{\lambda}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \operatorname{Re}[(\nu + i\beta_k) e^{s_k t} F(s_k)] \quad (4.11)$$

ここで、

$$s_k = \lambda \alpha_k + \sigma + i \lambda \nu \theta_k$$

$$\beta_k = \theta_k + \frac{\alpha_k(\alpha_k - 1)}{\theta_k}$$

$$\theta_k = \frac{k\pi}{N}$$

$$\alpha_k = \theta_k \cot \theta_k$$

上式中の λ , ν , σ , N は Talbot パラメータであり、一般的に時間に依存している。しかし、実際には固定値を用いることが多く、MATRICSにおいては以下の値を使用する。

$$\lambda = \frac{6}{t_{max}} \text{ or } \frac{6}{t_{min}}$$

$$\nu = 1$$

$$\sigma = 0$$

$$N = 257$$

(2) Crump 法

α が(4.12)の関係を満たす連続な実数関数 $f(t), t > 0$ に対して逆 Laplace 変換は以下のように記述される。

$$|f(t)| \leq M e^{\alpha t} \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} e^{st} F(s) ds \\ &= \frac{e^{at}}{\pi} \int_0^\infty [Re\{F(s)\} \cos \omega t - Im\{F(s)\} \sin \omega t] d\omega \end{aligned} \quad (4.13)$$

ここで $s=a+i\omega$ であり, a は α よりも大きい任意の実数である。Fourier 級数を用いた(4.12)式の近似式を離散化したものには以下に示す 3 種類の記述方法がある。

$$f_1(t) = \frac{2}{T} \exp(at) \left[\frac{F(a)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} Re\left\{ F\left(a + \frac{ik\pi}{T}\right) \right\} \cos\left(\frac{k\pi t}{T}\right) \right] \quad (4.14)$$

$$f_2(t) = -\frac{2}{T} \exp(at) \sum_{k=1}^{\infty} Im\left\{ F\left(a + \frac{ik\pi}{T}\right) \right\} \sin\left(\frac{k\pi t}{T}\right) \quad (4.15)$$

$$f_3(t) = \frac{1}{T} \exp(at) \left[\frac{F(a)}{2} + \sum_{k=0}^{\infty} Re\left\{ F\left(a + \frac{ik\pi}{T}\right) \exp\left(\frac{ik\pi t}{T}\right) \right\} \right] \quad (4.16)$$

なお、係数 a は以下の式から求める。

$$a = \alpha - \log(E)/2T$$

ここで、 E は許容誤差であり、一般には $1.0 \times 10^{-6} \sim 1.0 \times 10^{-8}$ である。また、 T は解析を行う時間の最大値を t_{max} とすると、

$$T \approx 0.8t_{max}$$

で与えられるパラメータであり、利用者は解析する問題によって適切な値を選択する必要がある。

上記の 3 式のうち、(4.14)式中の級数を $2M$ (M は自然数) までの有限にした以下の式が Crump 法による変換である。

$$f(t) = \frac{2}{T} \exp(at) \left[\frac{F(a)}{2} + \sum_{k=1}^{2M} Re\left\{ F\left(a + \frac{ik\pi}{T}\right) \right\} \cos\left(\frac{k\pi t}{T}\right) \right] \quad (4.17)$$

なお、Crump 法は級数の和を求めるときにイプシロンアルゴリズム(epsilon-algorithm)

を用いてその収束を早めることができる。

イブシロンアルゴリズムは、以下に示す2つの漸化式(4.18)式、(4.19)式を使用して逆Laplace変換(4.17)式を(4.20)式のように計算するものである。

$$S_0 = \frac{F(a)}{2}, \quad S_k = S_{k-1} + \operatorname{Re} \left\{ F \left(a + \frac{ik\pi}{T} \right) \exp \left(\frac{ik\pi t}{T} \right) \right\} \quad k = 1, \dots, 2M \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{p+1}^{(m)} &= \varepsilon_{p-1}^{(m+1)} + [\varepsilon_p^{(m+1)} - \varepsilon_{p-1}^{(m)}]^{-1} \\ \varepsilon_{-1}^{(m)} &= 0, \quad \varepsilon_0^{(m)} = S_m, \quad m = 0, 1, \dots, 2M \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$f(t) = \frac{1}{T} \exp(at) \varepsilon_{2M}^0 \quad (4.20)$$

(3) 細野法

細野法は、数値逆Laplace変換の複素積分が容易に実行できるように指数関数部 e^{st} を近似する方法の1つであり、逆Laplace変換式は以下のように表される。

$$f(t) = \frac{e^{\sigma_0}}{2t} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \operatorname{Im} F \left(\frac{\sigma_0 + i(n-0.5)\pi}{t} \right) \quad (4.21)$$

ここで、 σ_0 は利用者によって決定されるパラメータであり、3~6の正数である。

4.2 Pe数の変化による比較解析

本節では、Pe数を変化させて、各々Talbot法、Crump法、細野法を使用して1次元移流拡散方程式の解析を実施し、各手法の解析に対するPe数変化による影響を検討した。ここでPe数は、(3.5)式のように定義され、解析において、Pe数の値は、評価距離を変えることで変化させた。なお、本解析では、1次元移流拡散方程式に対するPe数の影響を検討することを目的としたため、崩壊及びマトリクス中の遅延を考慮しない仮想的化学種の移行を扱った。

図4-1に示した入力波形の流入核種フラックスを与えて、流速0.01[m/y]、分散係数0.01[m²/y]の場合をケース1、ケース1の計算条件に対して拡散係数を10倍にした場合を

ケース2, 10分の1倍にした場合をケース3として解析を実施した。なお、各々のケースにおける評価距離の範囲は、それぞれ $1.0 \times 10^{-1} \sim 1.0 \times 10^3$ [m], $1.0 \times 10^0 \sim 2.0 \times 10^3$ [m], $1.0 \times 10^1 \sim 2.0 \times 10^2$ [m]である。以上の解析条件をまとめたものを表4-1に示す。

表4-1に示した解析条件に対して評価点における流出フラックスの時間分布結果に対する評価を行った。ケース1のTalbot法による解析結果を図4-2, 図4-3に示す。Pe数が1より大きくなるにしたがい、核種フラックスの大きさが小さくなっていくのがわかる。一方、Pe数を1より小さくすると、Pe数が 5.0×10^{-1} 以下においては安定に計算できているが、核種フラックスの大きさが小さくなっている。本解析においてはPe数の値は、流速および分散係数を一定にして評価距離を変えることにより変化させている。このことから、評価距離が小さくなるにしたがってPe数は小さくなる。これよりPe数が小さくなると、核種フラックスの値は入力フラックスの値に近づかなければならぬが、上記の結果はこれとは異なり、物理的な解を与えていたと言えない。なお、Pe数が 2.0×10^3 以上の計算を試みたが、得られた答えがすべて0となり、非物理的な解を与えたので図には記載しなかった。

ケース1のCrump法による解析結果を図4-4, 図4-5に示す。Talbot法に比べて、Pe数が小さい範囲において解は入力フラックスの値より大きく、得られたプロファイルが振動しており、解の不安定性が観察される。一方、Pe数が10以上の場合はTalbot法と変わらない結果が得られている。さらに、Talbot法では非物理的な解を与えるPe数が 2.0×10^3 以上の場合においても、Crump法による解析が可能である。

ケース1の細野法による解析結果を図4-6, 図4-7に示す。Pe数が 1.0×10^{-1} 以外のPe数に対して安定に計算が可能となっており、Talbot法と比較してもほとんど同様の解析結果が得られている。さらに、Talbot法では解析不可能であるPe数が 2.0×10^3 以上の場合においても、細野法による解析が可能である。

ケース2, ケース3の計算結果を図4-8～図4-13に示す。拡散係数が10倍あるいは10分の1になっても、計算結果の安定性の傾向は変わらない。

以上の解析結果について考察する。Pe数を小さくすることは評価距離を小さくする（あるいは分散長を大きくすることもある）ことであるから、Talbot法で得られるフラックスの値は、図4-1に示したような入力フラックスに近づくはずであるが、実際は入力フラックスに近づかない。図より、Pe数が 5.0×10^{-1} 程度までの計算結果は信頼できると予想できるが、H12レポートにおいて考慮したPe値の最小値は1.0であることから、実際の問題においてPe数がこれほど小さい値の場合における解析を行うことは考えられないで、重要な問題でないと考えられる。また、Crump法におけるPe数が小さい範囲における解の不安定性も、Pe数が10未満において観察されるものであり、実際の解析において問題となるPe数の範囲ではないと考えられる。

以上のことから、Pe数の観点からは、 $1.0 \times 10^{-1} \sim 2.0 \times 10^3$ の範囲のPe数に対して安定に計算が可能な細野法が他の数値逆Laplace変換法より優れていると考えられる。このこ

とから、広範囲の Pe 数を扱う解析及び 2.0×10^3 より大きな Pe 数を扱う解析においては、細野法の信頼性が高いといえる。ただし、H12 レポートで考慮されている Pe 数の範囲 1.0 ~ 100 ではいずれの数値逆 Laplace 変換法も信頼性の高い解を得ることができることが確認された。

4.3 積分点を変化させた比較解析

各数値逆 Laplace 変換式中には級数の和が含まれており、級数の和は積分であることから、和の項数を積分点の数と呼ぶことにする。本節では、積分点の数を変化させて、各々 Talbot 法、細野法を使用して 1 次元移流拡散方程式の解析を実施し、各手法における積分点数の変化による影響を検討した。

実施方法は、核種移行コード MATRICS で使用されている 257 点の積分点を用いて得られた Talbot 法の結果を基準にして、積分点数を減らした解析結果の影響を調査することにより解析結果の精度を検討した。他の解析条件は、前節で実施した解析と同じものを使用した。ここで、誤差を以下のように定義した。

$$Err = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i^{257} - x_i^k)^2}}{N \times \max_{1 \leq i \leq N} (x_i^{257})} \quad (4.22)$$

ここで、 x は各節点における濃度、上付き添え字 k は積分点の個数であり、下付き添え字 i は節点番号である。

Talbot 法、Crump 法、細野法による誤差解析の結果を、各々図 4-14~図 4-16、図 4-17~図 4-19、図 4-20~図 4-22 に記載した。図 4-14~図 4-16 より、Talbot 法においては、いずれの結果においても積分点が減少するにつれて誤差が増大していることがわかる。図 4-17~図 4-19 より、Crump 法においては、どの Pe 数に対しても積分点数と誤差の関係は、他の手法と比較して依存度は小さい。図 4-20~図 4-22 より、細野法においては、図に示されるように積分点数が減少すると誤差が増大する傾向にあることが確認される。しかし、表 4-2 に記載した各手法の積分点数と誤差の関係から、Talbot 法と比較して細野法の積分点数と誤差の分布傾向には統一性はない。

以上のことから、積分点数への依存度が小さいという観点からは、Crump 法による解析結果が信頼できると言える。しかし、積分点数を増大させた場合の誤差の値は、Talbot 法が最も小さく、積分点数と誤差は反比例関係にあることから、積分点数が 100 以上の場合、Talbot 法による解析結果が信頼できることが容易に推定できる。

また、Talbot 法と細野法に対して、誤差に対する Pe 数と積分点数との関係を求めた。図 4-23、図 4-24 に示した結果より、Talbot 法の場合、どの Pe 数に対しても誤差と積分点数の間には同様の傾向が見られる。また、Pe 数が増大するにしたがい、同程度の精度を保つには、積分点数を増加させる必要がある。一方、細野法の場合、Talbot 法のように Pe 数と誤差との関係に何らかの傾向があるようには考えられない。

以上のことから、細野法の場合、Pe 数と誤差との間の関係に傾向が見られないことから、Pe 数をパラメータとした扱いは慎重にすべきであると考えられる。

ただし、積分点数を 200 以上の値にすれば、いずれの数値逆 Laplace 変換法も、解析結果は信頼できると考えられる。

4.4 計算時間の比較解析

本節では、各数値逆 Laplace 変換法によって計算を実施して計算時間を評価した。解析条件は、流速 1.421×10^{-3} (m/y)、拡散係数 1.453×10^{-2} (m²/y)、評価距離 1.227×10^2 (m)、遅延、核種崩壊を考慮した体系であり、Cm-245 → Pu-241 → Am-241 → Np-237 → U-233 → Th-229 の系列を考慮し、各核種のパラメータは表 4-3 に記載した。なお、用いた計算機の CPU は、Pentium Pro 200MHz である。各数値逆 Laplace 変換法による計算結果を図 4-25～図 4-27 に示した。また、計算時間を表 4-4 に示した。本表には、Talbot 法による計算時間を 1 とした場合の他の手法による計算時間も記載した。ここで、同一手法、同一条件の計算を 3 回実施したうえでの平均値を計算時間とした。

以上の結果から、3 種類の数値逆 Laplace 変換法のうち、細野法が最も計算速度が速く、Talbot 法より 25% 程度計算速度が速い。一方、Crump 法は最も計算速度が遅く、Talbot 法より 10% 弱計算速度が増加している。

Crump 法の計算速度が最も遅いのは、Crump 法のアルゴリズムがフーリエ級数の和を求めるときに、収束を早めるためにイプシロンアルゴリズムを用いており、他の手法に比較して複雑なアルゴリズムとなっているためであると考えられる。

以上のことから、計算時間の観点からは、最も計算時間が短い細野法が他の数値逆 Laplace 変換より優れていると考えられる。しかし、計算速度は、数値逆 Laplace 変換法の信頼性を左右するものではない。

4.5 透水量係数の変化による比較解析

本節では、透水量係数を変化させて、各々 Talbot 法、Crump 法、細野法による 1 次元移流拡散方程式の解析を実施し、各手法における透水量係数の変化による影響を検討した。

実施方法は、Talbot 法による解析結果をベースケースとして、各々のケースに対して他

の手法で利用者によって決定されるパラメータを変化させて Talbot 法による結果と比較した。ここで、変化させたパラメータは、Crump 法は T 、細野法は σ_0 である。

各数値逆 Laplace 変換法の積分点を 257 点に固定して実施する。対象核種は、Cs-135 であり、崩壊連鎖は考慮せず、マトリクス中への拡散と遅延を考慮した核種移行解析を行った。解析条件は、Pe 数を 10 で固定し、透水量係数を $1.0 \times 10^{-5} \sim 1.0 \times 10^{-10}$ まで 10 倍ずつ変化させた 6 ケースの解析を実施した。以上の解析条件をまとめたものを表 4-5 に示す。

なお、3 種類の数値逆 Laplace 変換法による計算結果を比較する方法として、最大値の誤差を用いる方法と分布全体を L2 ノルムによる誤差で比較する方法を用いた。最大誤差の定義は、

$$Err = \frac{(f - f_i^{talbot})}{f_i^{talbot}} \quad (4.22)$$

である。また、L2 ノルムによる誤差の定義は、

$$Err = \frac{\sqrt{\sum_i^N (f_i^{talbot} - f_i)^2}}{N \times \max(f_i^{talbot})} \quad (4.23)$$

ここで、

N : 空間上の格子点

f_i^{talbot} : Talbot 法による格子点上の値

f_i : Talbot 法と比較される Crump 法あるいは細野法による格子点上の値

である。

3 種類の数値逆 Laplace 変換法による計算結果を比較したものを図 4-28～図 4-45 に記載した。図中凡例の係数は、Talbot 法と比較解析を実施するために変化させたパラメータを示している。また、Crump 法あるいは細野法のパラメータに対する最大値による誤差の分布を図 4-46 及び図 4-47、また、L2 ノルムによる誤差の分布を図 4-48 及び図 4-49 に示した。

以上の解析結果について考察すると、透水量係数が 1.0×10^{-6} 以上の場合、Crump 法、細野法の計算結果は、Talbot 法による結果と最大値を比較しても、分布全体を比較しても一致しない。これより上記の透水量係数の範囲では、Crump 法、細野法の結果の信頼性が

低いと考えられる。一方、透水量係数が 1.0×10^{-7} 以下の場合、最大値の誤差が 1.0×10^{-4} 未満または L2 ノルムによる誤差が 1.0×10^{-5} 未満となるケースがあり、Talbot 法とよく一致する。このことから、上記の透水量係数の範囲では、3 手法の結果が一致するので、3 手法の結果の信頼性は高いといえる。

以上のことから、Pe 数一定の時、透水量係数の変化に着目した場合、Talbot 法は、他の 2 つの手法に比べて計算可能範囲が広いことから、他の数値逆 Laplace 変換より優れないと考えられる。

表 4-1. Pe 数の変化による比較解析の解析条件

内容	単位	ケース 1	ケース 2	ケース 3
出力開始時間, 出力終了時間	[y]		1.0E+0 1.0E+10	
核種名	[・]		仮想化学種	
半減期	[y]		1.0×10 ⁺⁹⁹	
分散係数	[m ² /y]	0.01	0.1	0.001
Pe 数	[・]	1.0×10 ⁻¹ ~1.0×10 ³	1.0×10 ⁰ ~2.0×10 ²	1.0×10 ² ~2.0×10 ³
亀裂表面の遅延係数	[・]		1.0	
亀裂内流速	[m/y]		0.01	
評価距離	[m]	1.0×10 ⁻¹ ~1.0×10 ³	1.0×10 ¹ ~2.0×10 ³	1.0×10 ¹ ~2.0×10 ²
BLOCK タイプ	[・]		slab	
マトリクス空隙水中拡散 係数	[m ² /y]		1.0	
マトリクス空隙率	[・]		1.0	
マトリクス中遅延係数	[・]		1.0	
亀裂システム空隙率	[・]		1.0	
出口境界の位置	[・]		-1(=無限遠)	
mol → Bq 単位変換 フラクタ	[・]		5.57E+9	

表 4-2. 積分点の個数と誤差の関係

Talbot 法	N=16	N=32	N=64	N=96	N=128	N=160	N=192
Pe=10	—	8.93×10 ⁻³	7.46×10 ⁻⁵	2.30×10 ⁻⁶	5.76×10 ⁻⁸	3.44×10 ⁻⁹	0.00
Pe=100	—	7.91×10 ⁻⁴	3.15×10 ⁻⁵	1.24×10 ⁻⁴	4.86×10 ⁻⁸	0.00	0.00
Pe=1000	—	3.27×10 ⁻⁴	1.29×10 ⁻⁵	5.14×10 ⁻⁷	2.00×10 ⁻⁸	6.56×10 ⁻¹⁰	4.50×10 ⁻¹⁰
Crump 法	N=16	N=32	N=64	N=96	N=128	N=160	N=192
Pe=10	8.01×10 ⁻²	3.95×10 ⁻³	3.37×10 ⁻³	1.11×10 ⁻³	4.13×10 ⁻⁵	2.38×10 ⁻⁴	1.27×10 ⁻⁴
Pe=100	1.19×10 ⁻²	6.24×10 ⁻³	2.98×10 ⁻³	1.26×10 ⁻³	1.58×10 ⁻³	5.55×10 ⁻⁵	2.16×10 ⁻⁴
Pe=1000	5.76×10 ⁻³	1.30×10 ⁻³	3.58×10 ⁻³	2.54×10 ⁻³	3.25×10 ⁻³	1.75×10 ⁻³	1.17×10 ⁻³
細野法	N=16	N=32	N=64	N=96	N=128	N=160	N=192
Pe=10	—	4.16×10 ⁻⁴	4.57×10 ⁻⁵	6.99×10 ⁻⁶	4.61×10 ⁻⁷	0.00	0.00
Pe=100	1.84×10 ⁻⁴	9.67×10 ⁻⁶	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Pe=1000	—	1.98×10 ⁻⁴	1.86×10 ⁻⁵	6.13×10 ⁻⁸	0.00	0.00	0.00

表 4-3. 解析における核種のパラメータ

核種名	単位	Cm-245	Pu-241	Am-241	Np-237	U-233	Th-229
半減期	[y]	$8.50 \times 10^{+3}$	$1.44 \times 10^{+1}$	$4.32 \times 10^{+2}$	$2.14 \times 10^{+6}$	$1.59 \times 10^{+5}$	$7.34 \times 10^{+3}$
遅延係数	[‐]	$5.00 \times 10^{+5}$	$1.00 \times 10^{+4}$	$5.00 \times 10^{+4}$	$1.00 \times 10^{+4}$	$1.00 \times 10^{+4}$	$1.00 \times 10^{+4}$
マトリクス拡散係数	[m ² /y]				1.00×10^{-15}		
マトリクス空隙率	[‐]				0.2		

表 4-4. 数値逆 Laplace 変換法の計算時間

手法	計算時間[sec.]	正規化(Talbot を 1)
Talbot 法	147.6	1.00
Crump 法	159.3	1.08
細野法	110.4	0.75

表 4-5. 透水量係数の変化による比較解析の解析条件

内容	単位	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5	ケース 6
出力開始時間, 出力終了時間	[y]			1.0E+0			
	[y]			1.0E+10			
核種名	[・]			Cs-135			
半減期	[y]			2300000			
縦方向分散係数	[m ² /y]	4.99E+3	1.58E+3	4.99E+2	1.58E+2	4.99E+1	1.58E+1
亀裂表面の遅延係数	[・]			1.0			
亀裂内流速	[m/y]	4.99E+2	1.58E+2	4.99E+1	1.58E+1	4.99E+0	1.58E+0
評価距離	[m]			100			
BLOCK タイプ	[・]			slab			
亀裂間隔	[m]			0.2			
マトリクス拡散深さ	[m]			0.2			
マトリクス空隙水中拡散 係数	[m ² /y]			4.73E-3			
マトリクス空隙率	[・]			0.02			
マトリクス中遅延係数	[・]			6.62E+3			
BLOCK タイプの体積比	[・]			1			
亀裂表面/全体積	[・]			2.0			
亀裂システム空隙率	[・]	6.32E-3	2.00E-3	6.32E-4	2.00E-4	6.32E-5	2.00E-5
出口境界の位置	[・]			-1(=無限遠)			
mol → Bq 単位変換 ファクタ	[・]			5.57E+9			

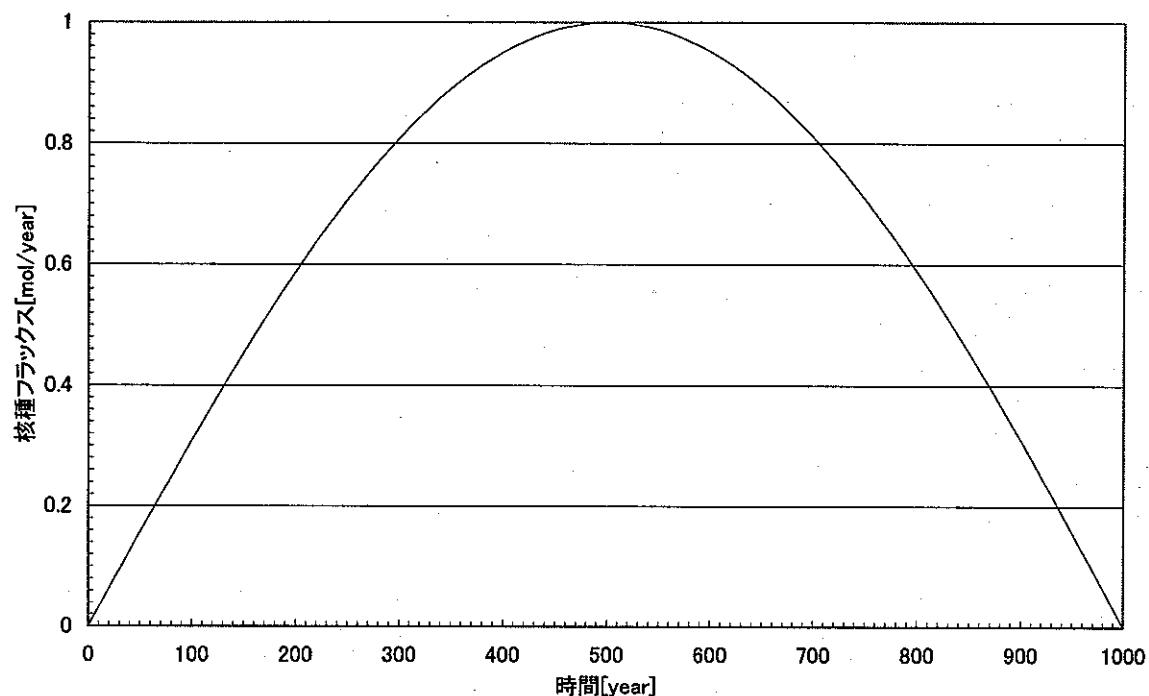


図 4-1. 移流拡散方程式解析における核種フラックス入力条件

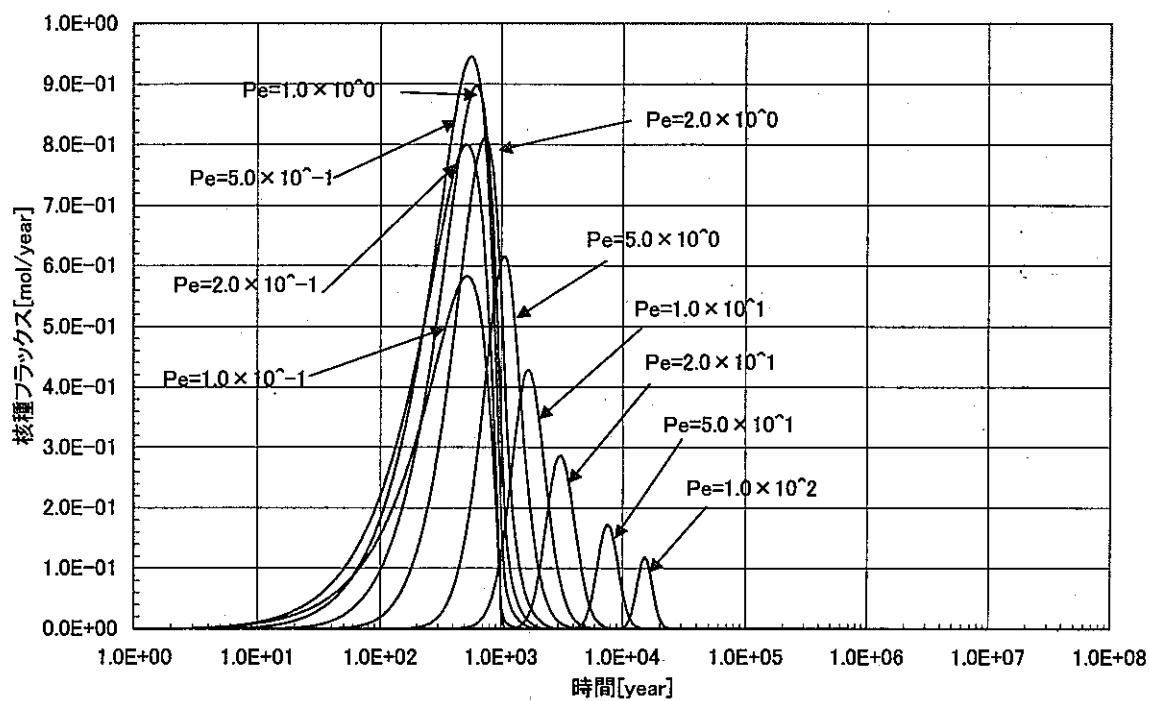


図 4-2. Talbot 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m²/year])
Pe=1.0×10⁻¹~1.0×10²まで (ケース 1)

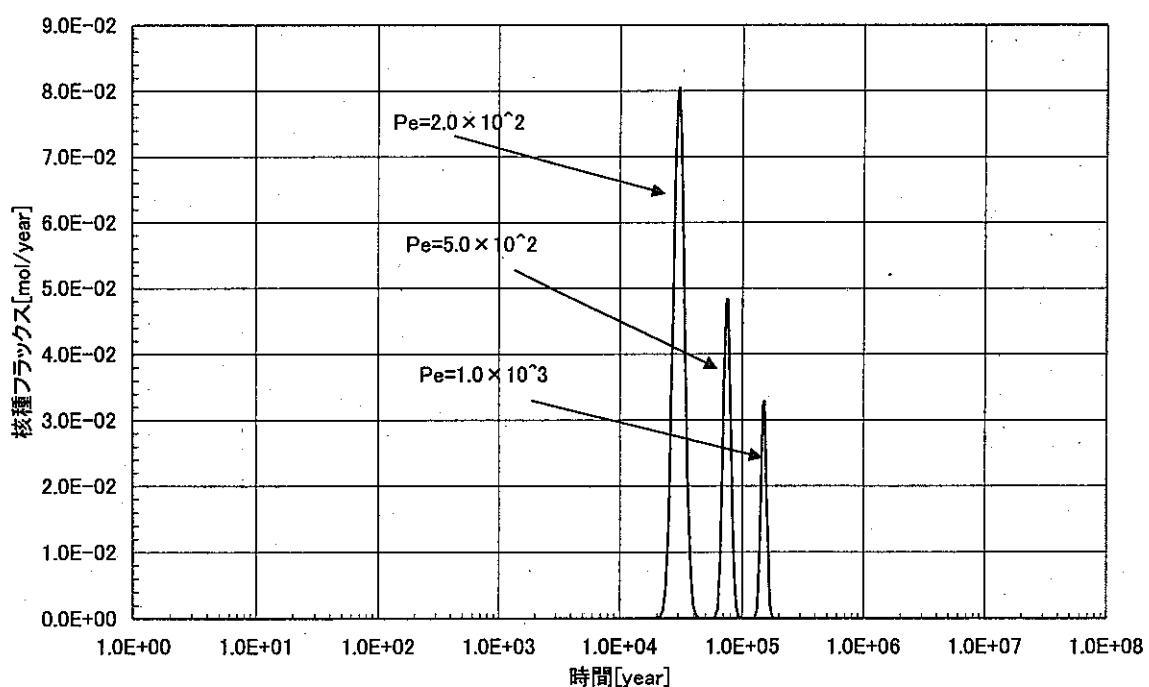


図 4-3. Talbot 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m²/year])
Pe=2.0×10²~1.0×10³まで (ケース 1)

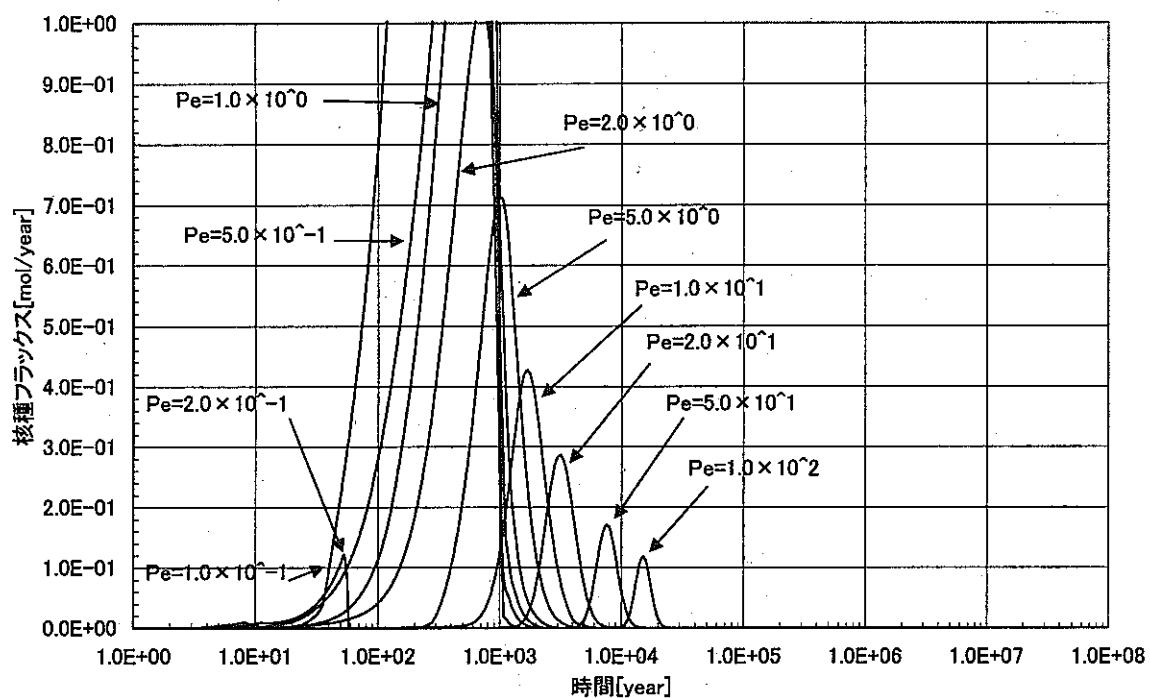


図 4-4. Crump 法による解析結果（流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m²/year]）
Pe=1.0×10¹～1.0×10²まで（ケース 1）

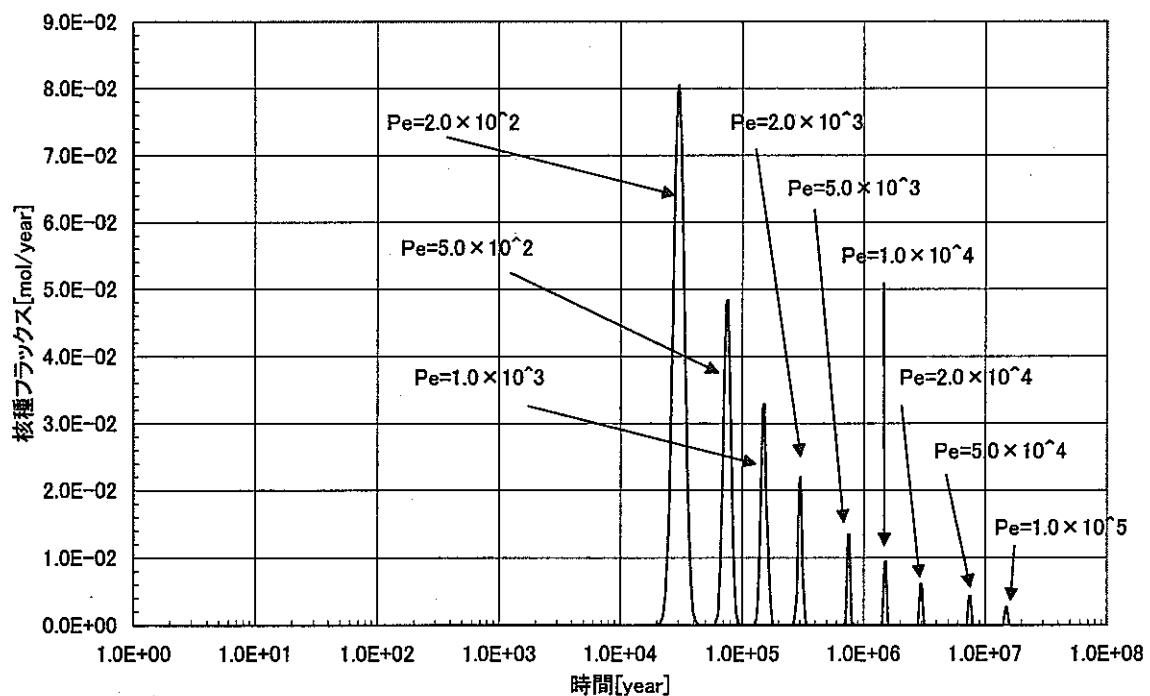


図 4-5. Crump 法による解析結果（流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m²/year]）
Pe=2.0×10²～1.0×10⁵まで（ケース 1）

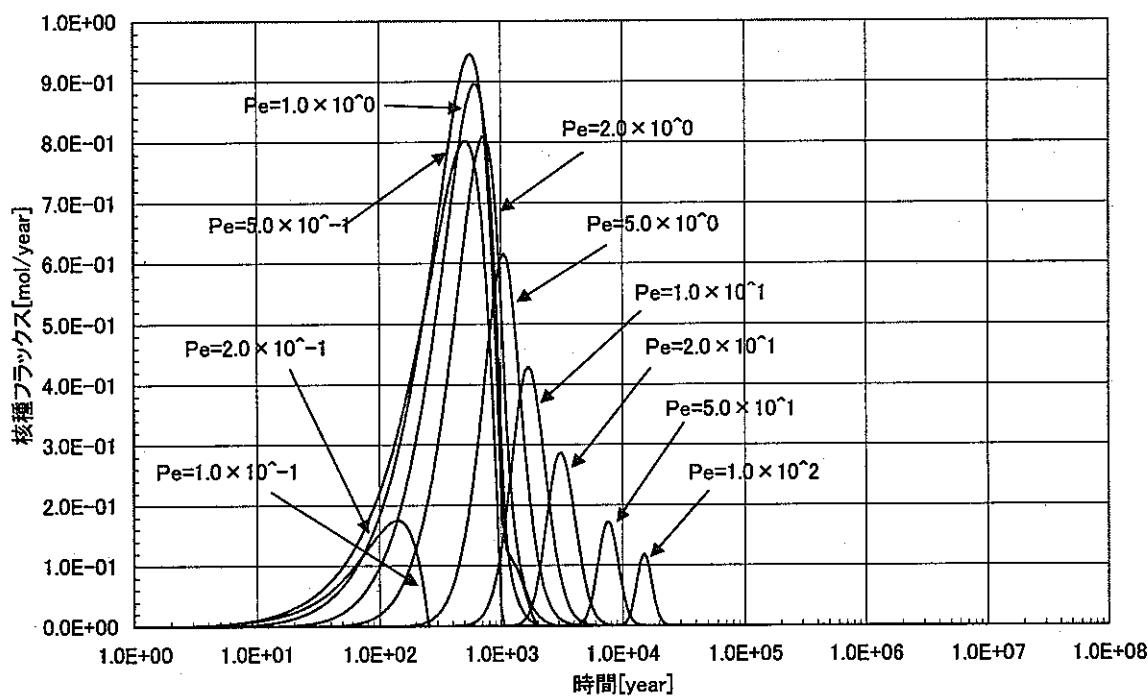


図 4-6. 細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m²/year])
Pe=1.0×10⁻¹~1.0×10²まで (ケース 1)

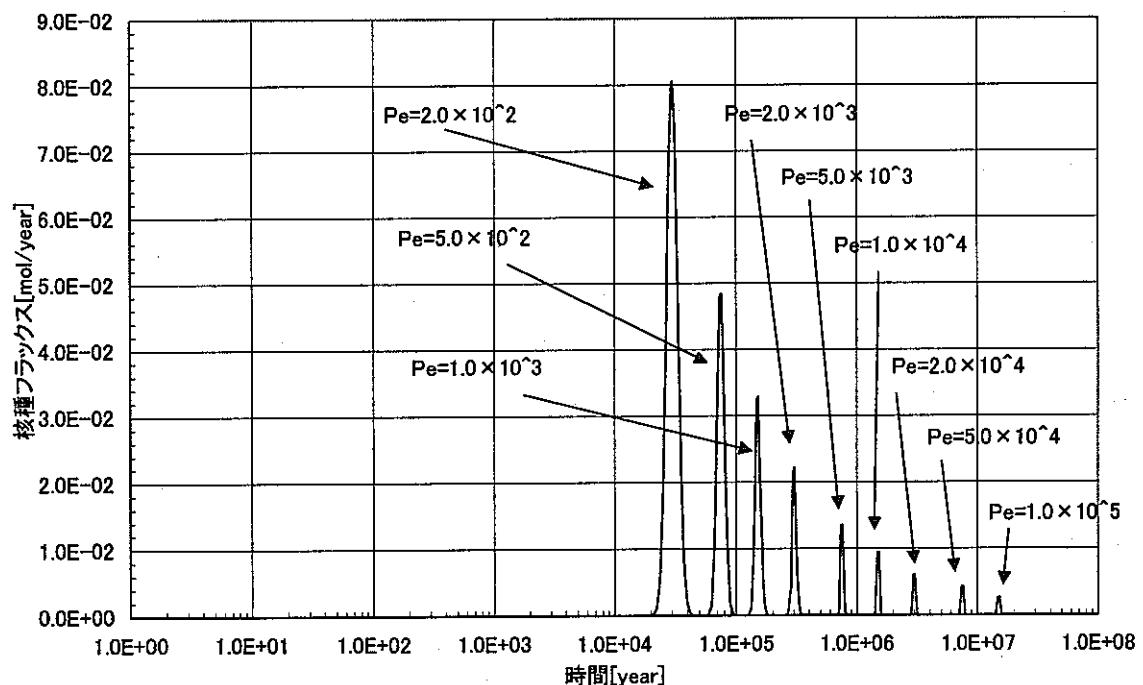


図 4-7. 細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.01[m²/year])
Pe=2.0×10²~1.0×10⁵まで (ケース 1)

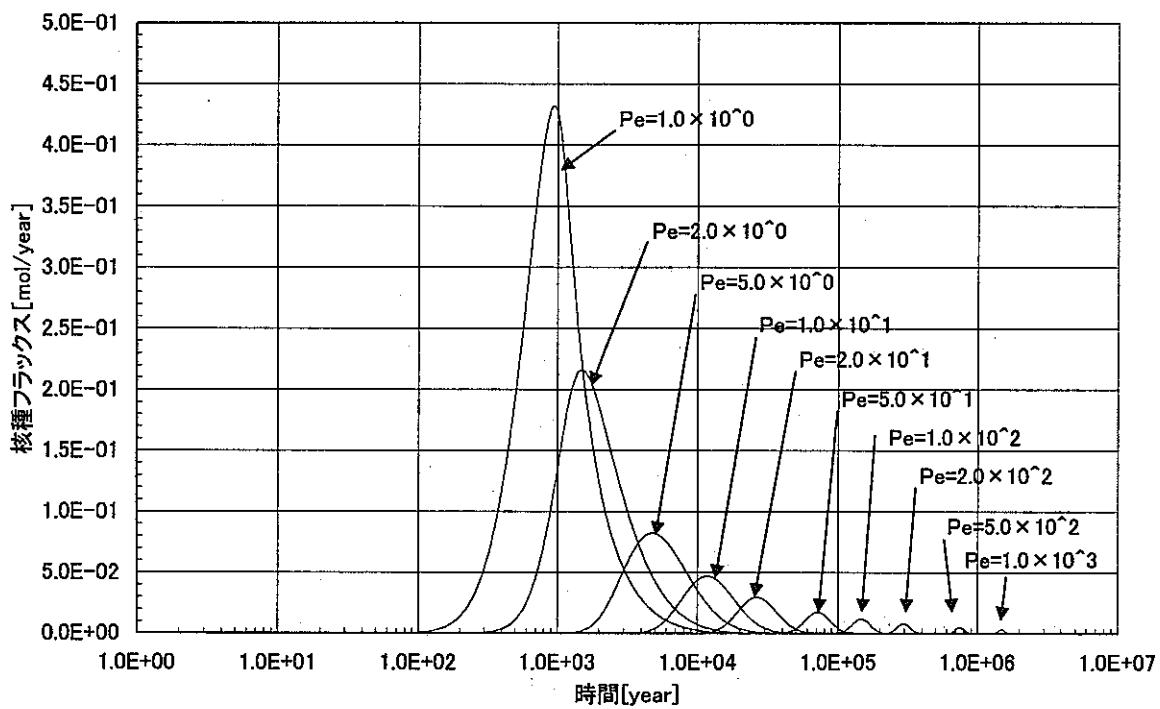


図 4-8. Talbot 法による解析結果（流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.1[m²/year]）
Pe=1.0×10⁰～1.0×10³まで（ケース 2）

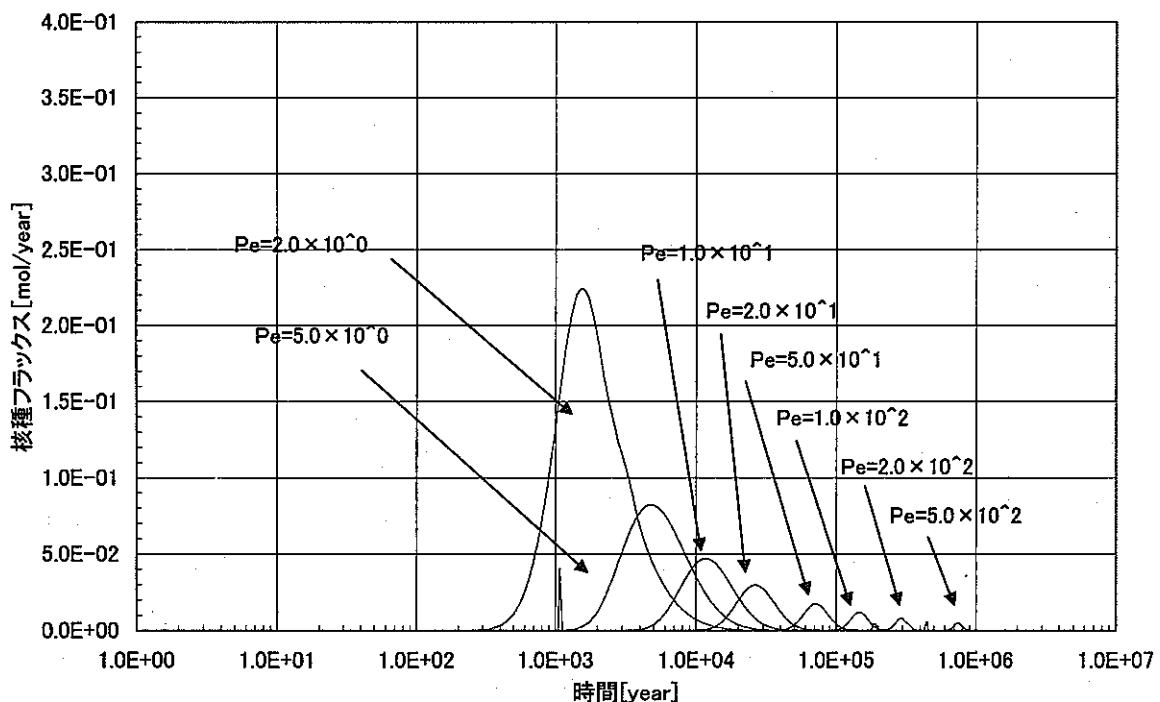


図 4-9. Crump 法による解析結果（流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.1[m²/year]）
Pe=1.0×10⁰～1.0×10³まで（ケース 2）

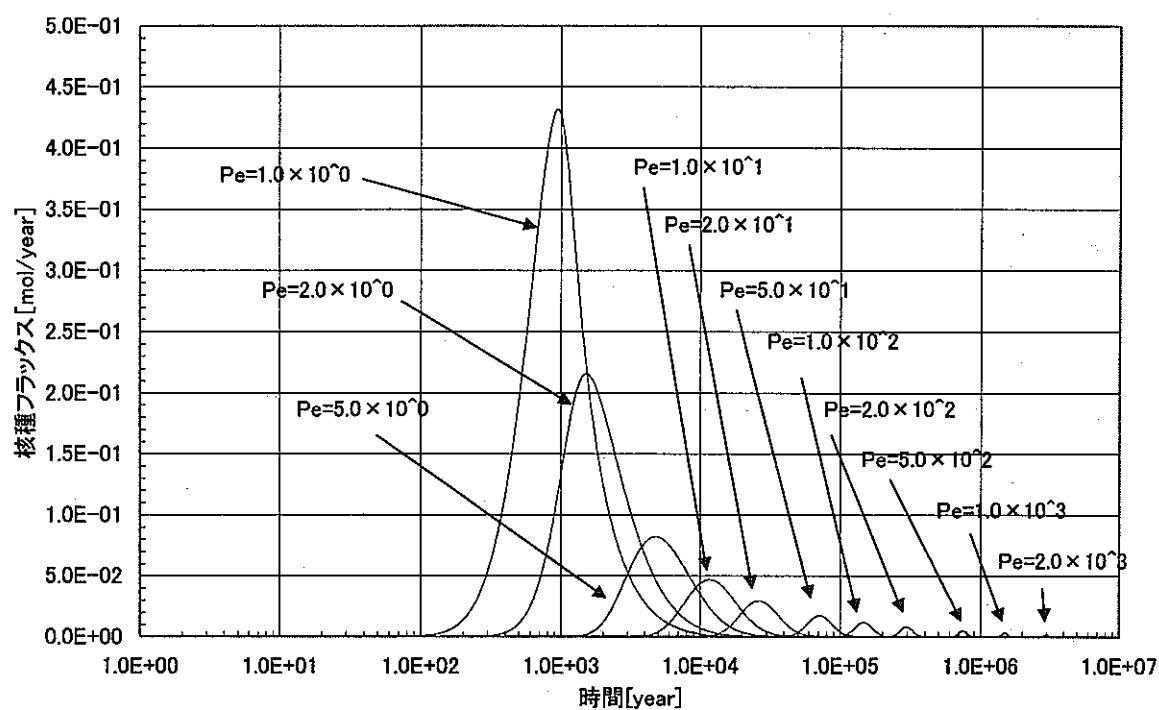


図 4-10. 細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.1[m²/year])
 $Pe=1.0 \times 10^0 \sim 1.0 \times 10^3$ まで (ケース 2)

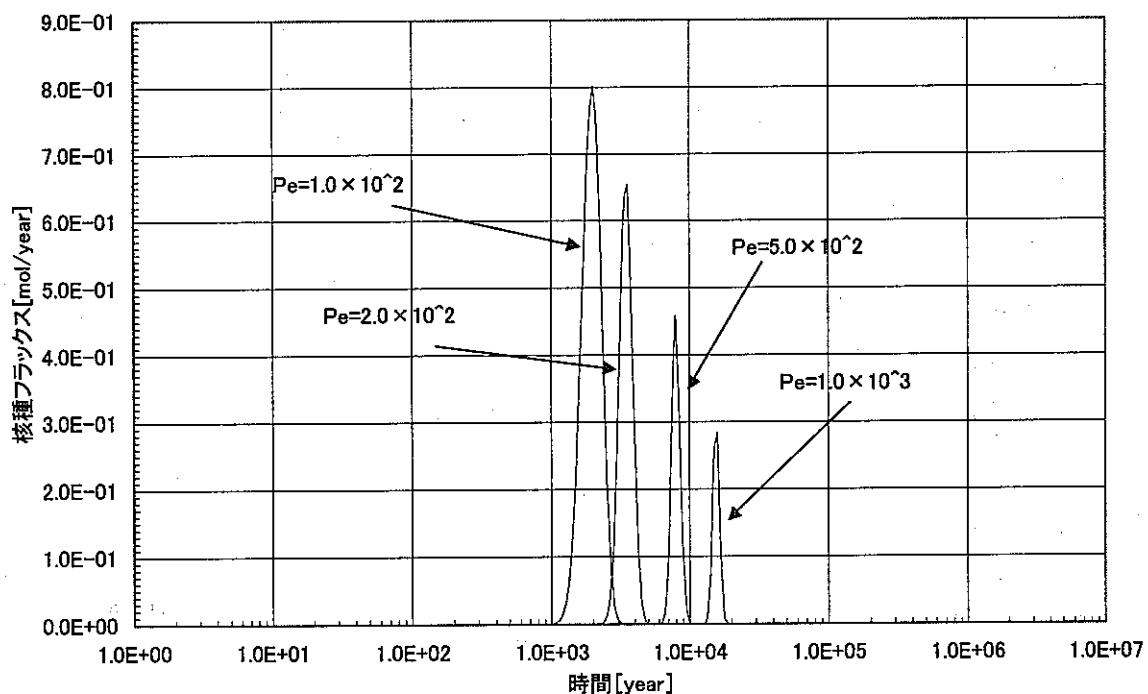


図 4-11. Talbot 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.001[m²/year])
 $Pe=1.0 \times 10^2 \sim 1.0 \times 10^3$ まで (ケース 3)

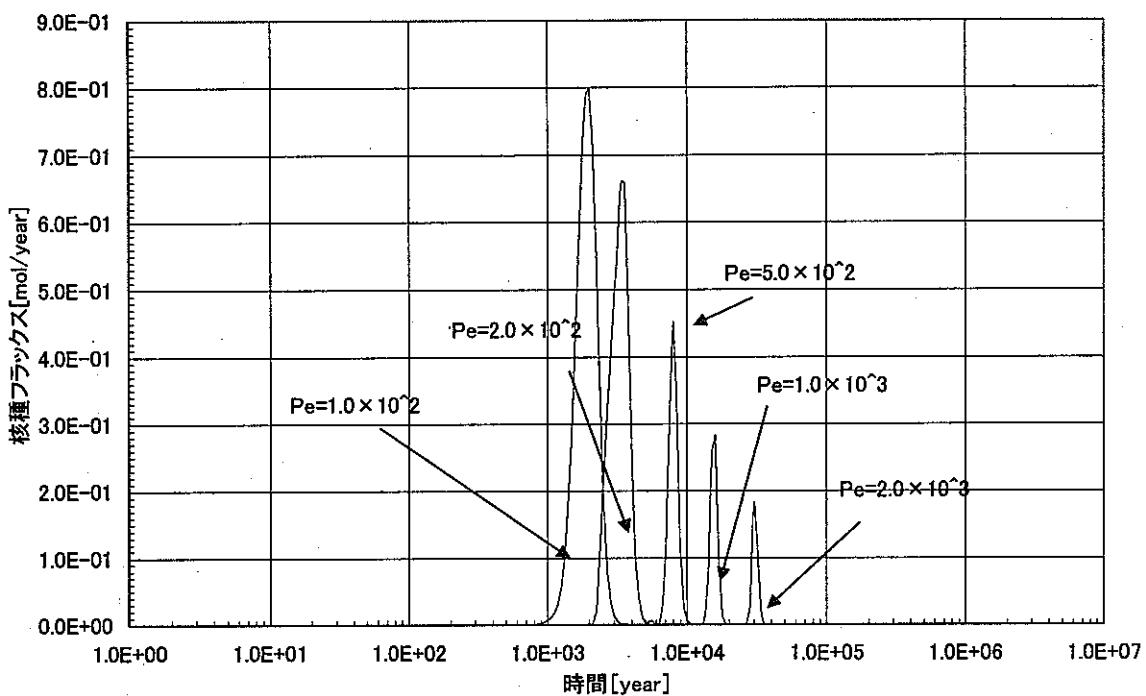


図 4-12. Crump 法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.001[m²/year])
 $\text{Pe}=1.0 \times 10^2 \sim 2.0 \times 10^3$ まで (ケース 3)

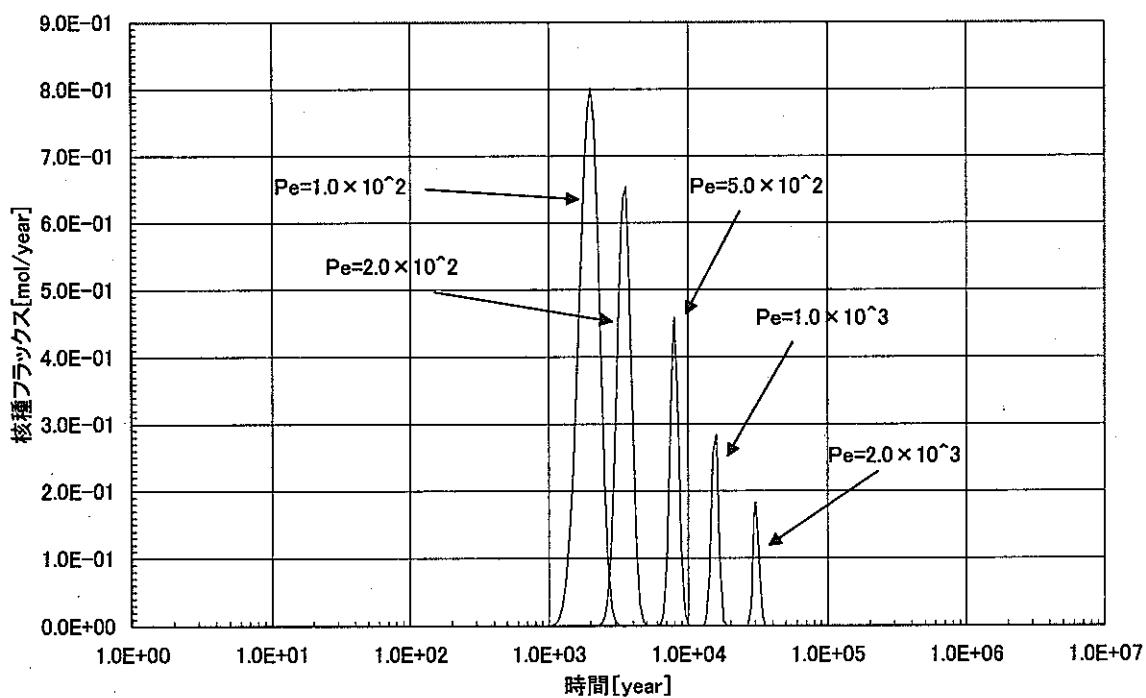


図 4-13. 細野法による解析結果 (流速=0.01[m/year], 拡散係数=0.001[m²/year])
 $\text{Pe}=1.0 \times 10^2 \sim 2.0 \times 10^3$ まで (ケース 3)

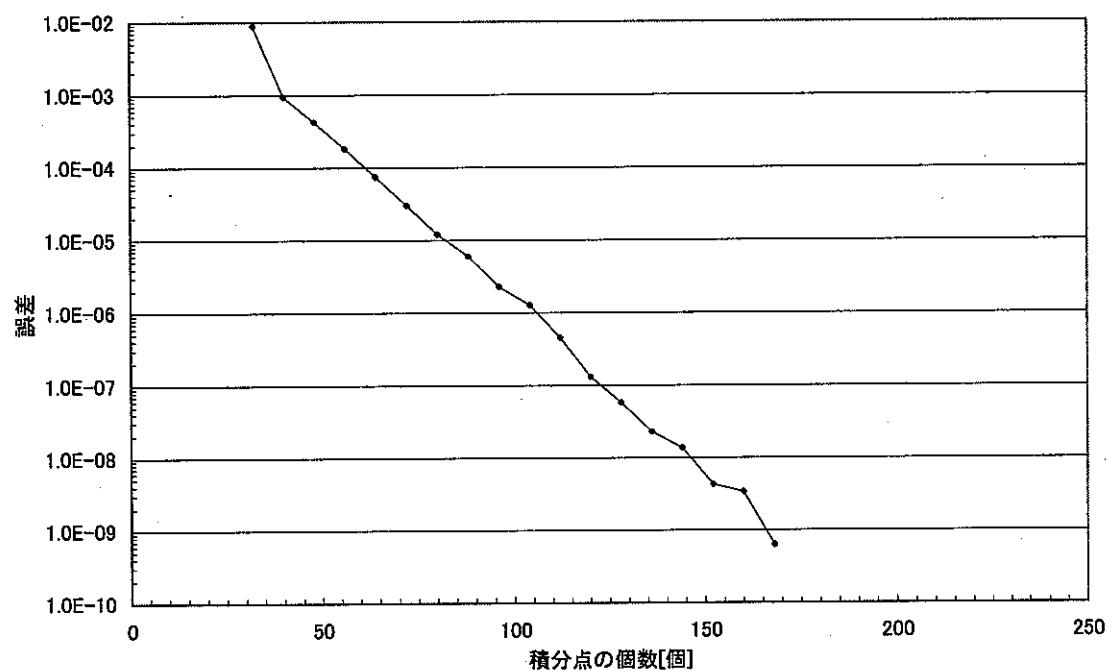


図 4-14. Talbot 法における積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^1$)

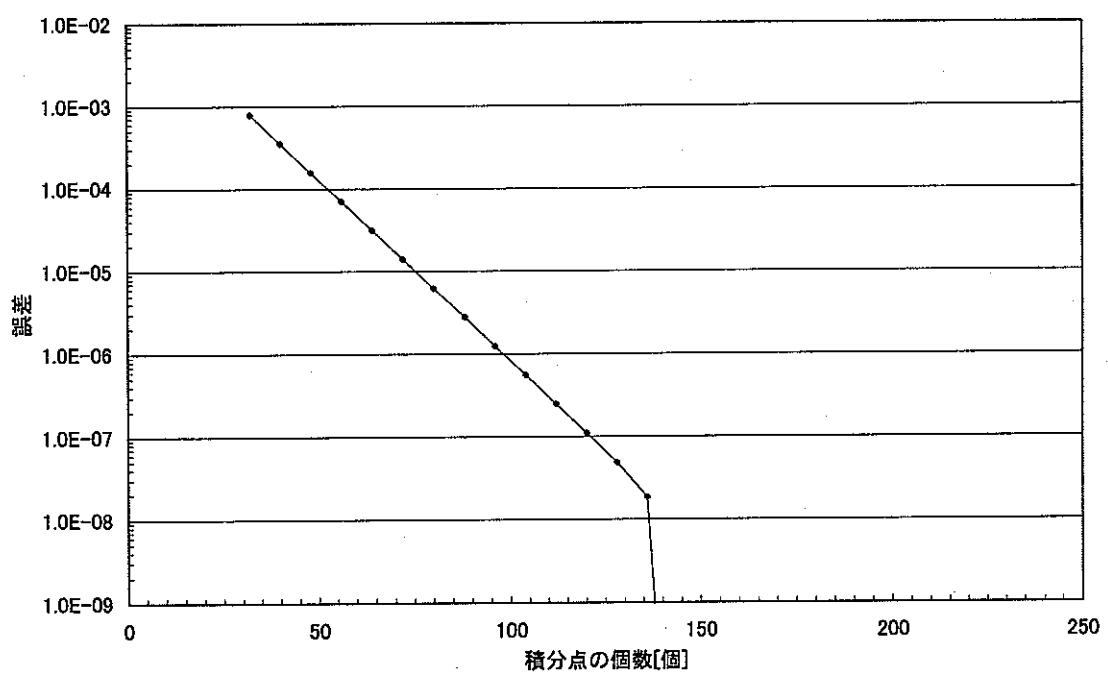


図 4-15. Talbot 法における積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^2$)

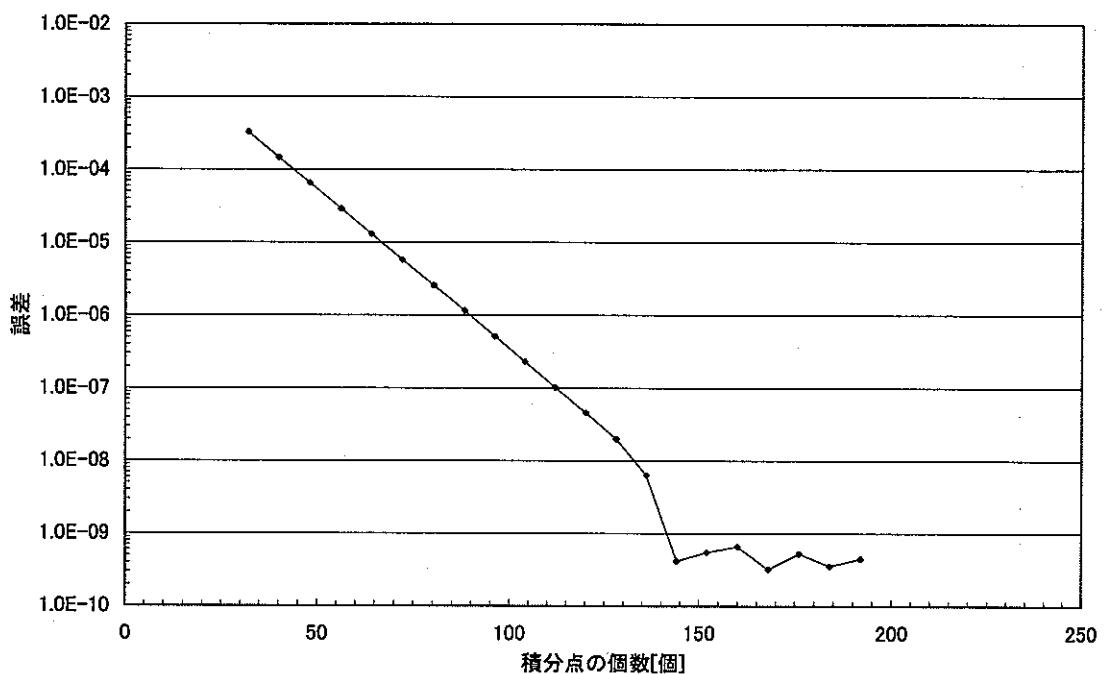


図 4-16. Talbot 法における積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^3$)

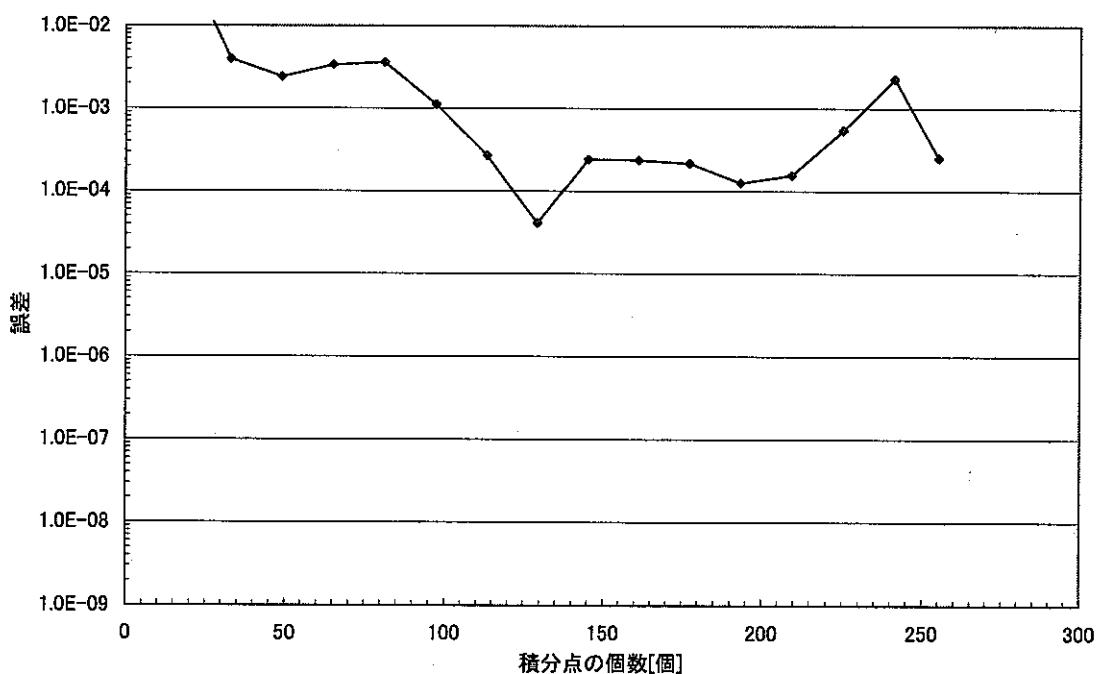


図 4-17. Crump 法における積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^1$)

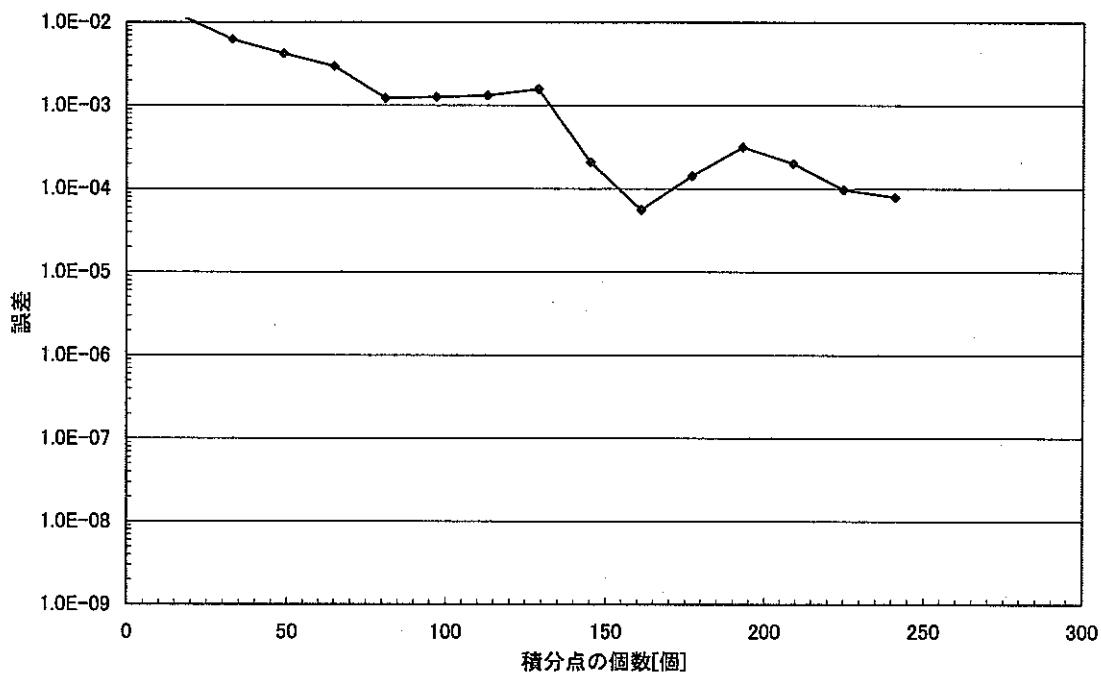


図 4-18. Crump 法における積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^2$)

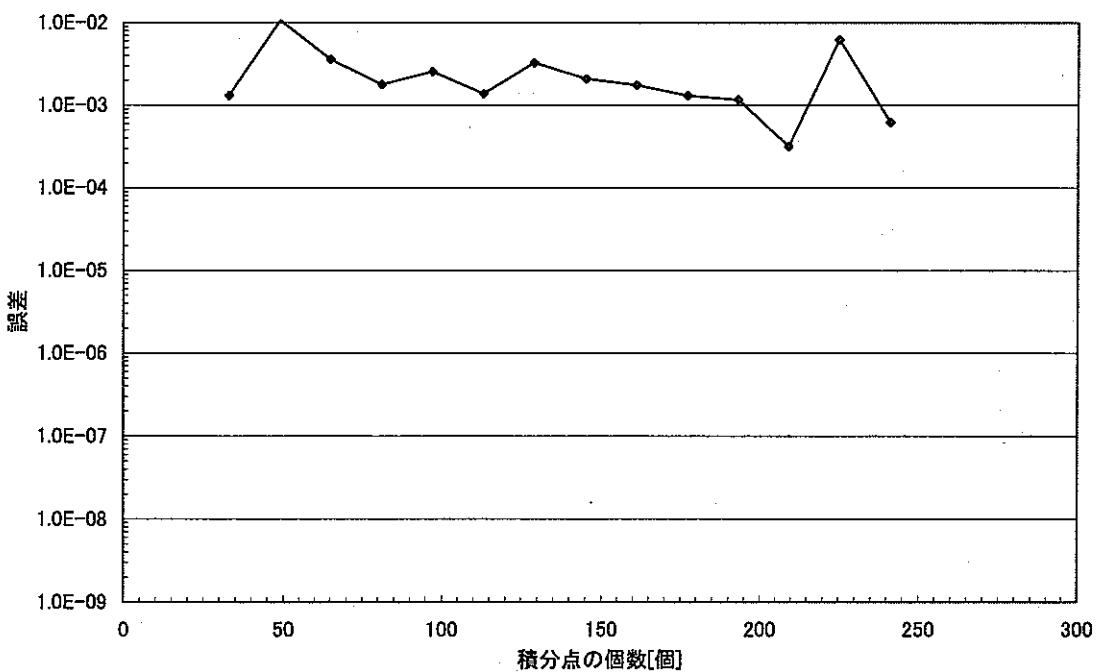


図 4-19. Crump 法における積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^3$)

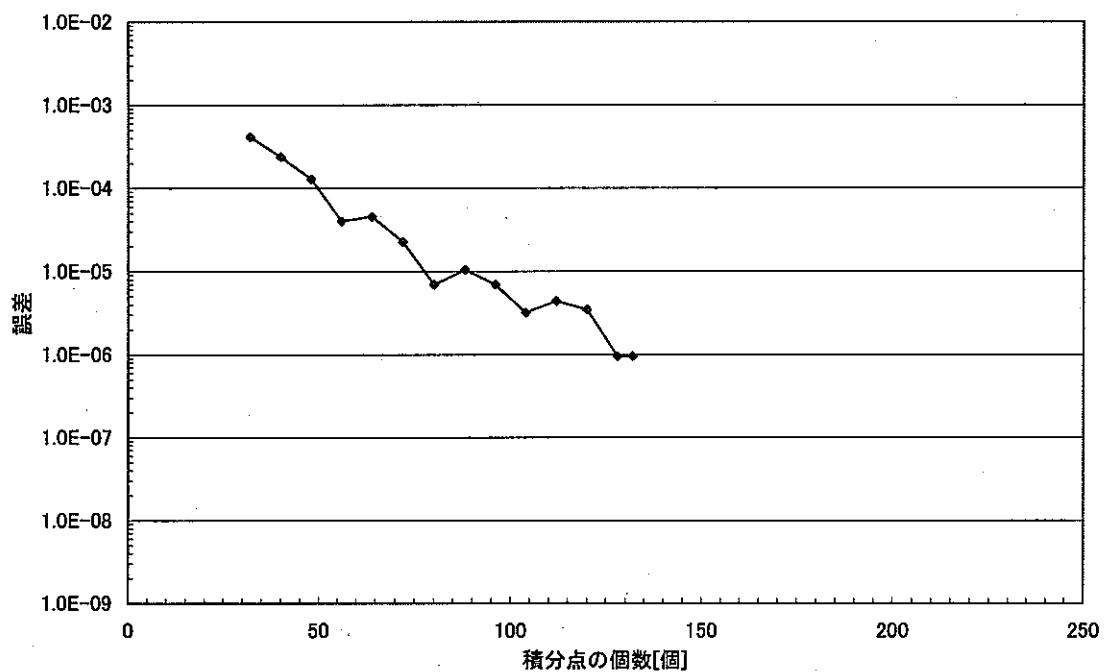


図 4-20. 細野法による積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^1$)

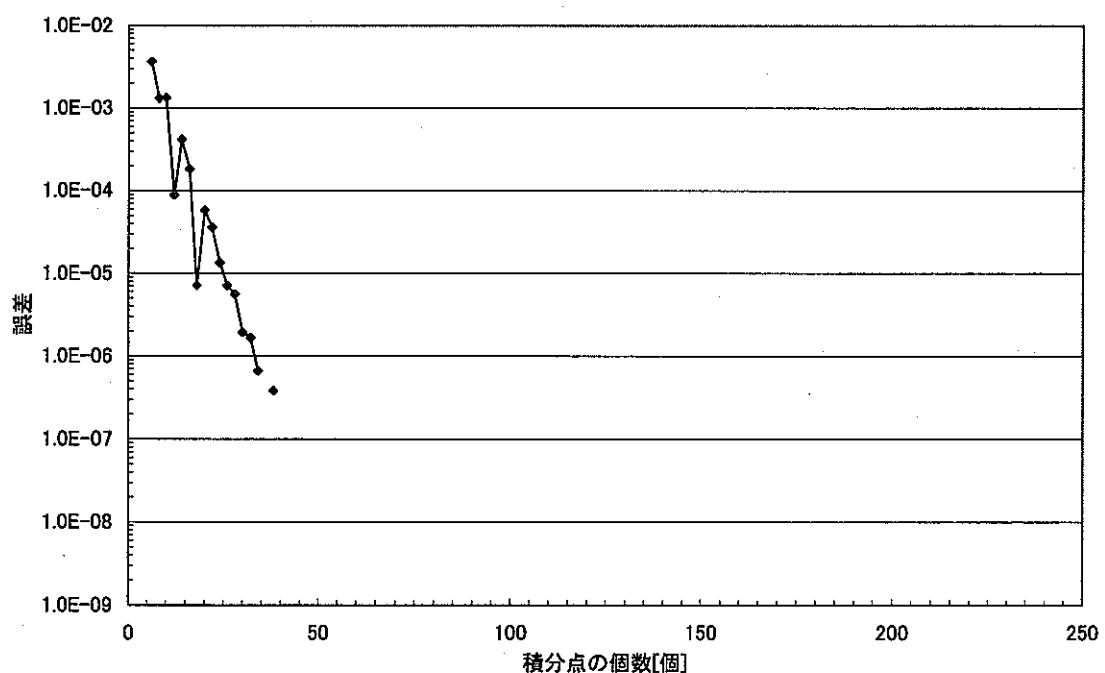


図 4-21. 細野法による積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^2$)

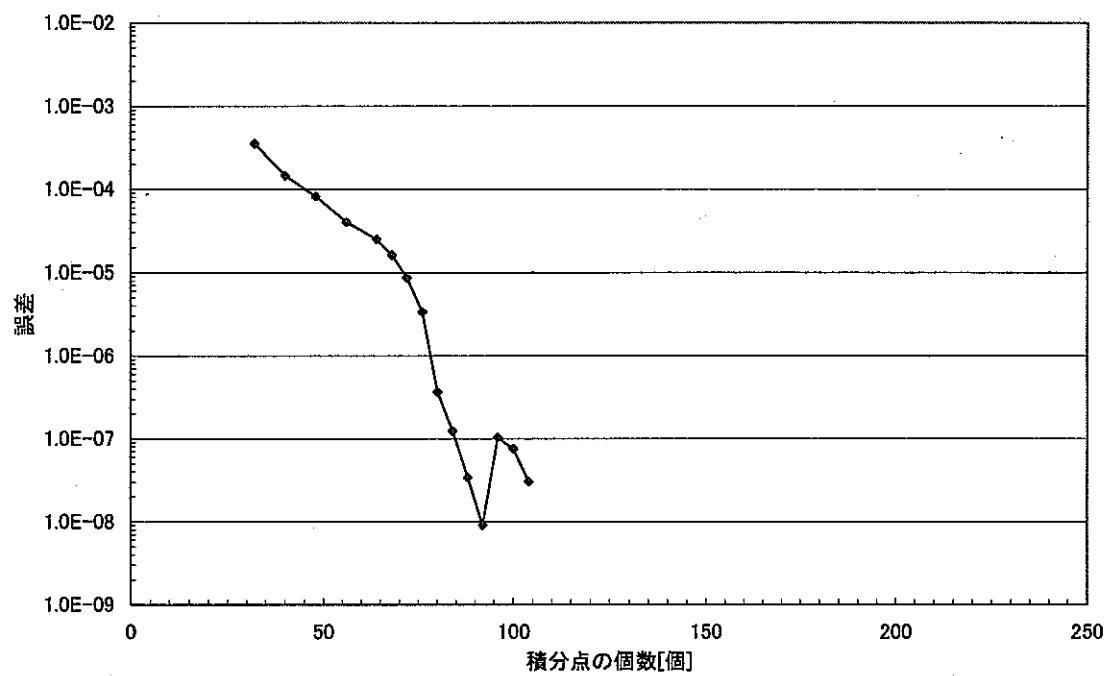


図 4-22. 細野法による積分点の個数と誤差の関係 ($Pe=1.0 \times 10^8$)

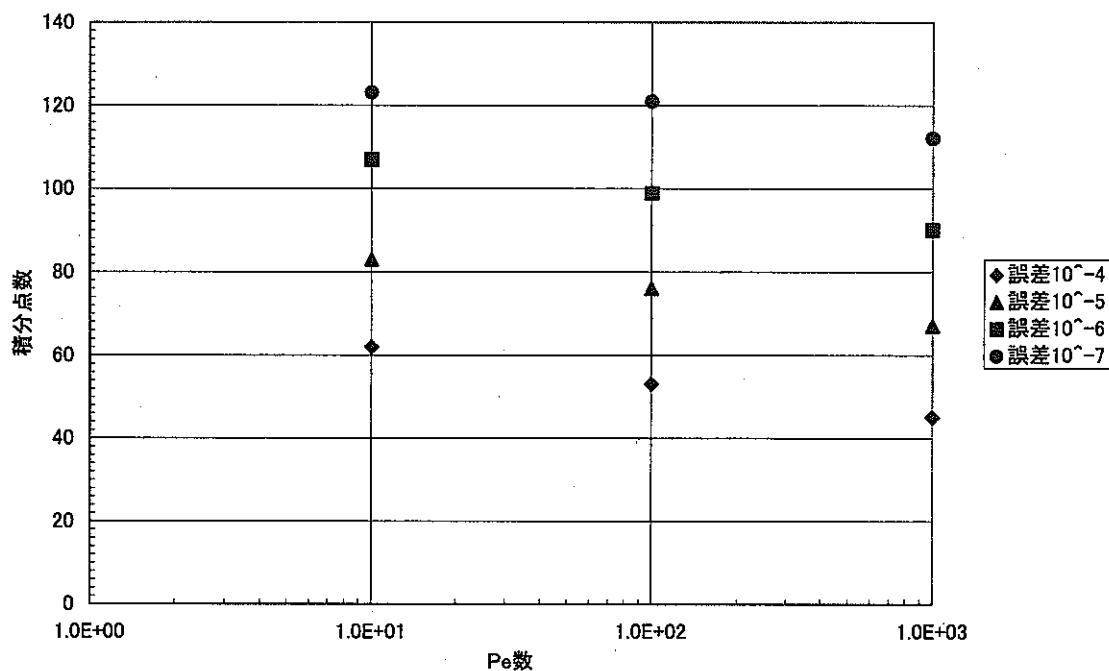


図 4-23. Pe 数と積分点の個数における誤差の関係 (Talbot 法の場合)

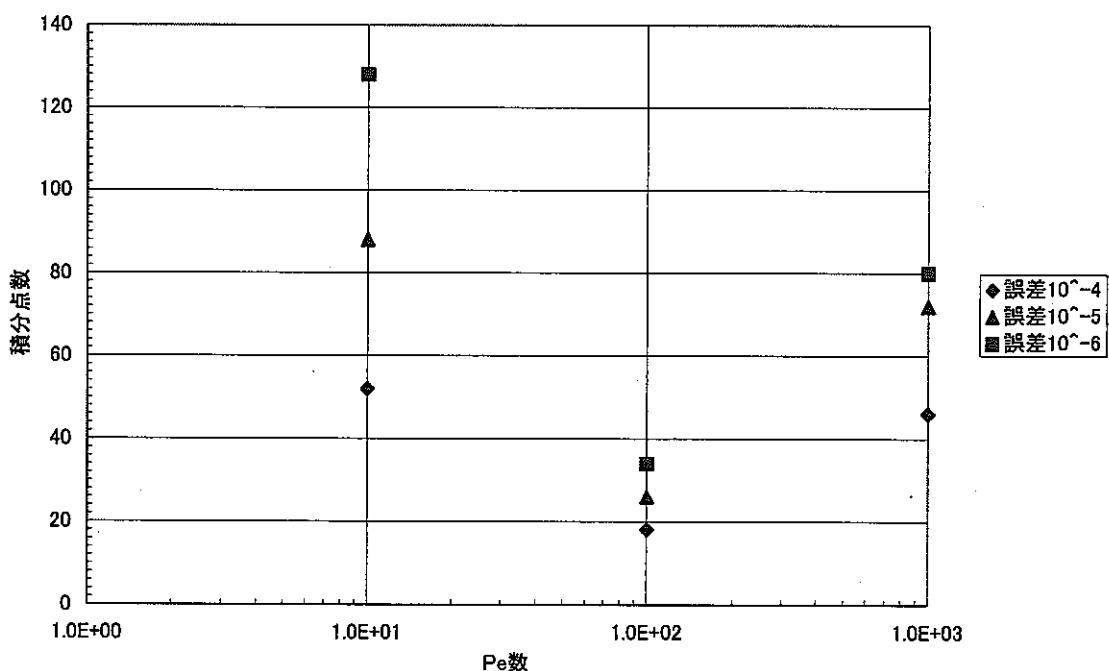


図 4-24. Pe 数と積分点の個数における誤差の関係 (細野法の場合)

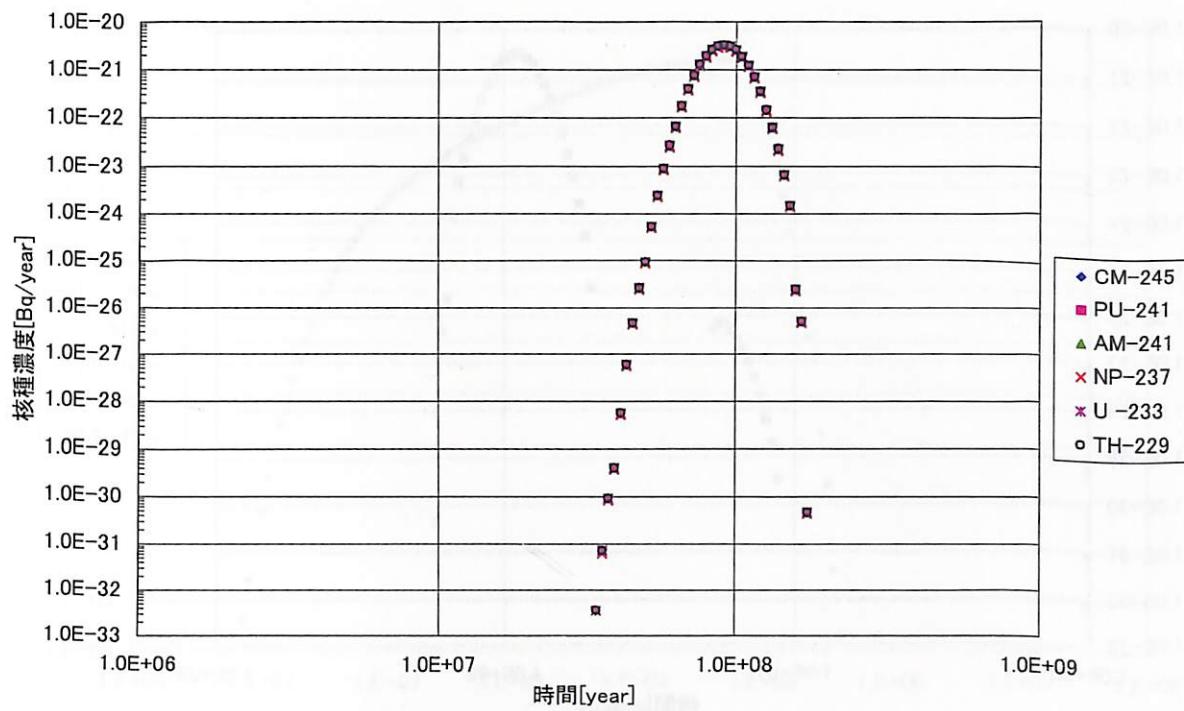


図 4-25. Talbot 法による解析結果 (CPU time=147.6[sec.])

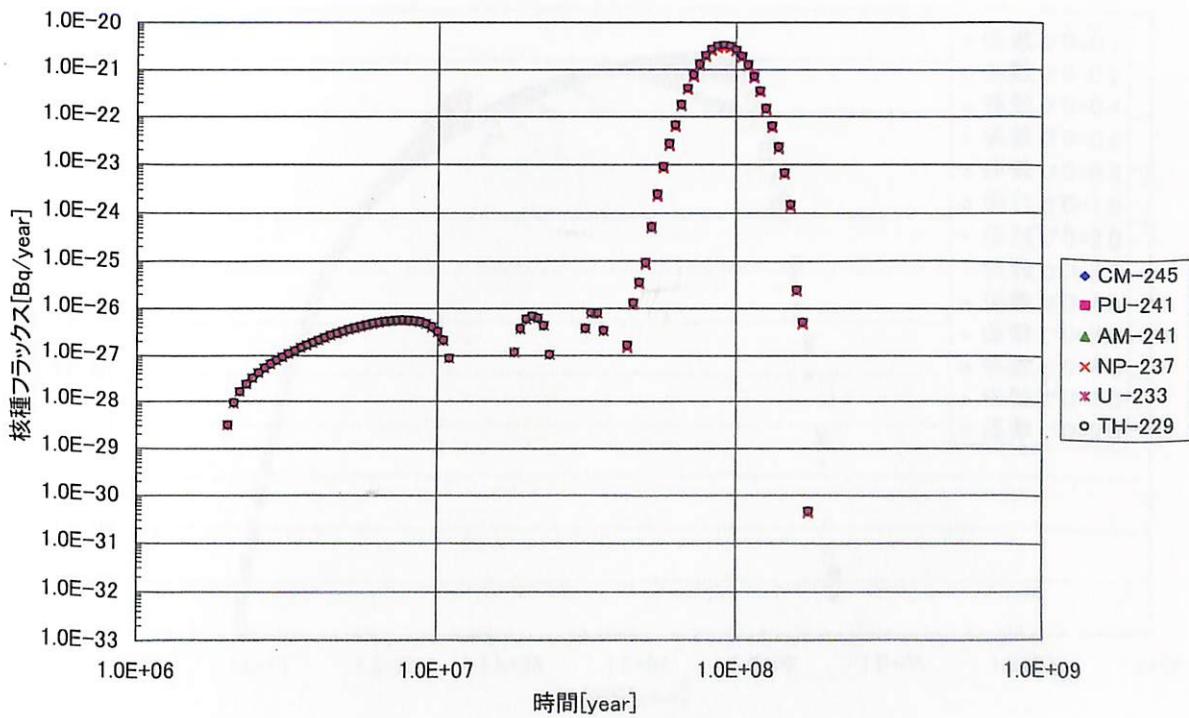


図 4-26. Crump 法による解析結果 (CPU time=159.3[sec.])

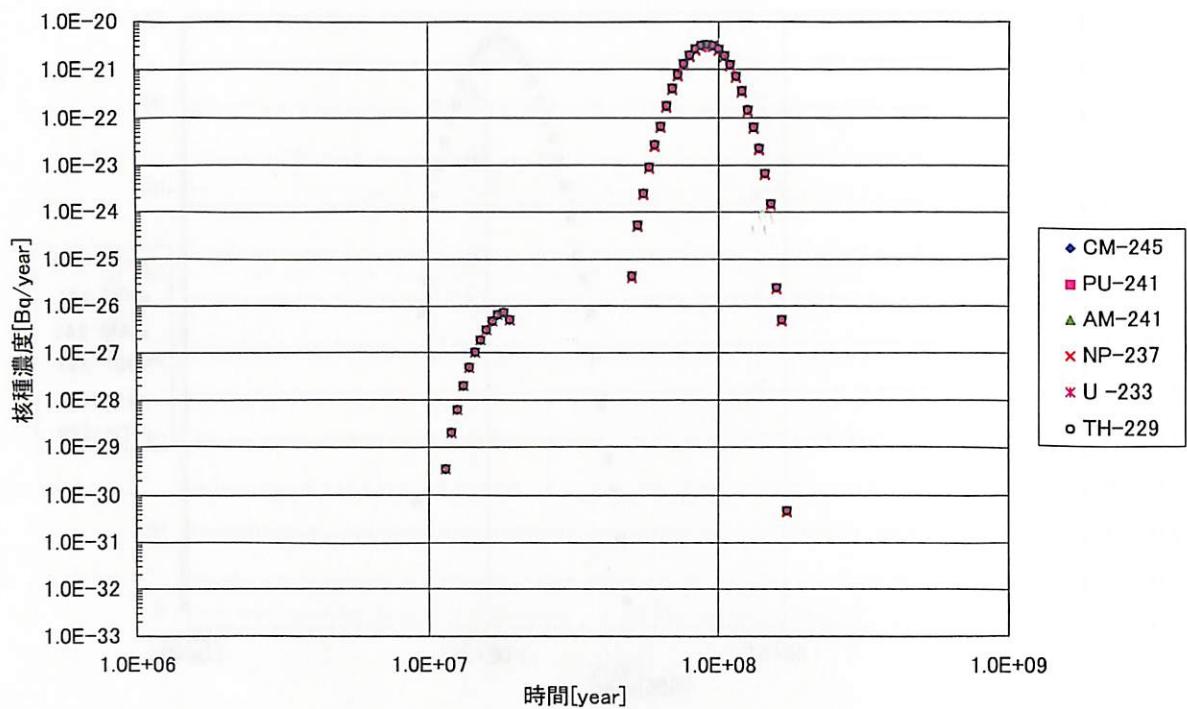


図 4-27. 細野法による解析結果 (CPU time=110.4[sec.])

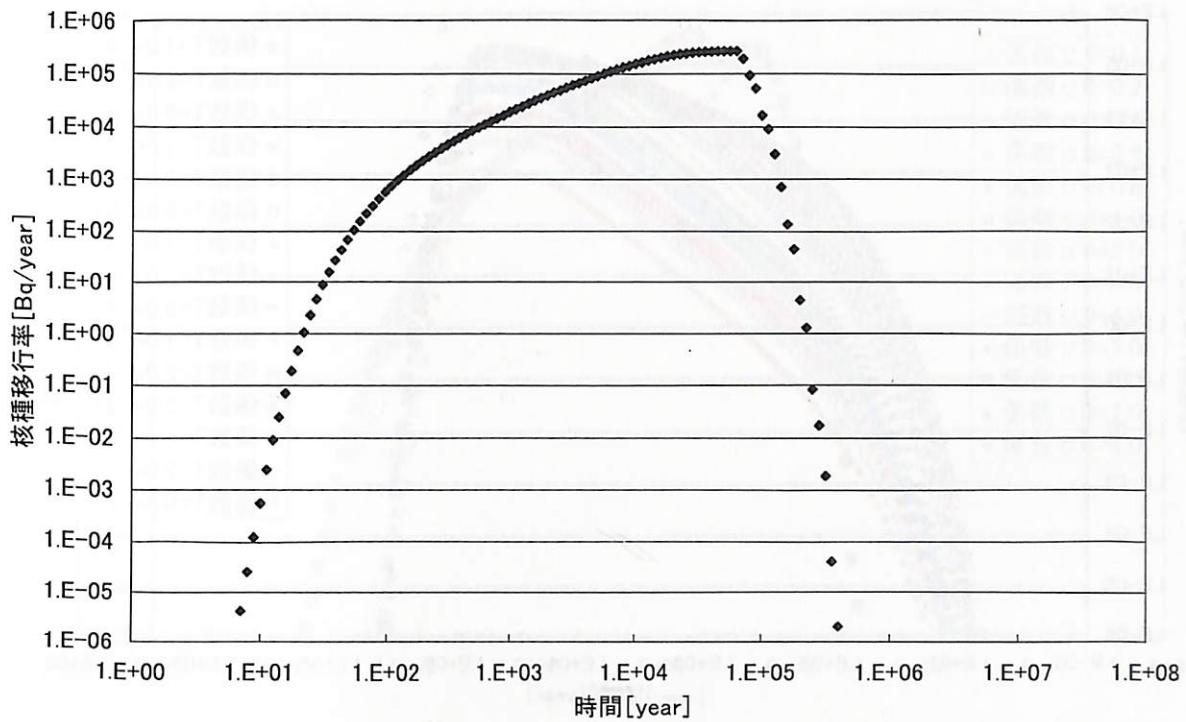


図 4-28. Talbot 法による Cs-135 の解析結果（ケース 1）

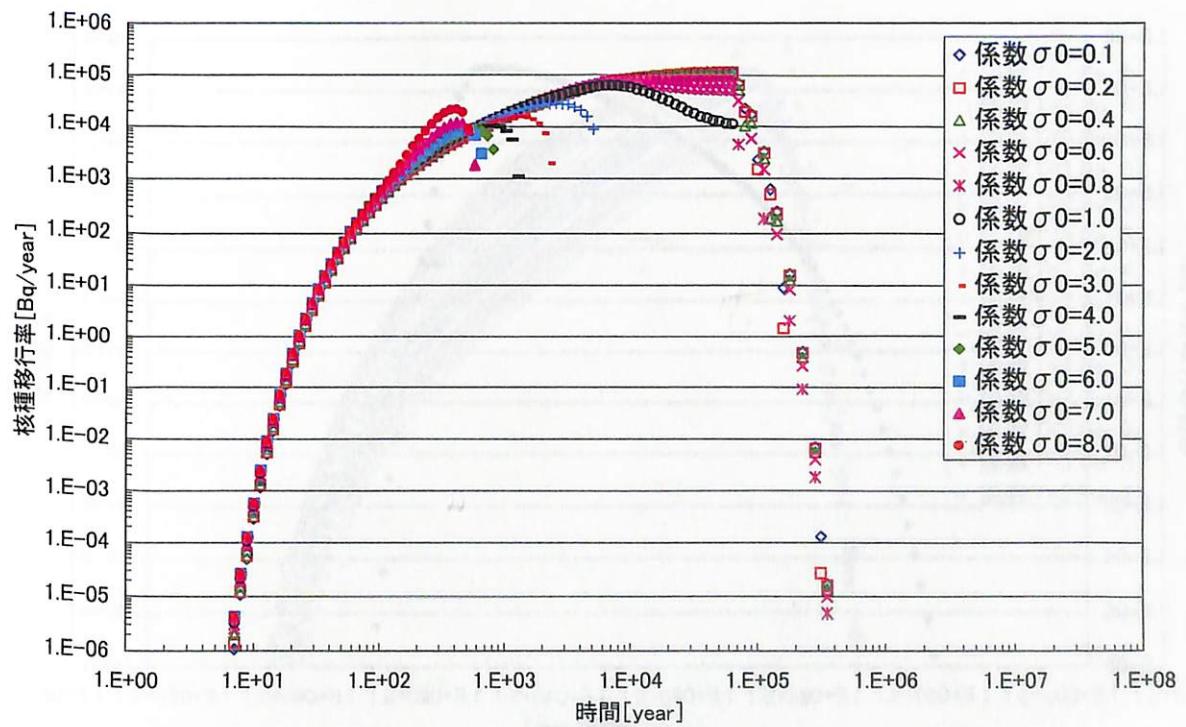


図 4-29. 細野法による Cs-135 の解析結果（ケース 1）

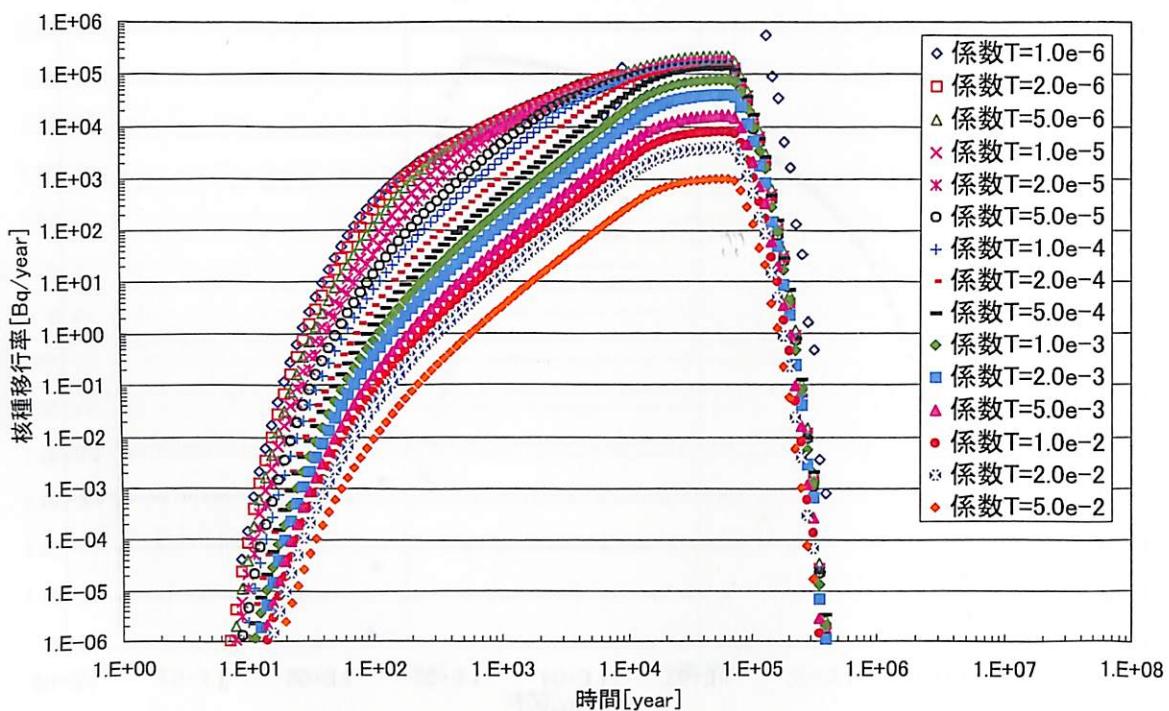


図 4-30. Crump 法による Cs-135 の解析結果（ケース 1）

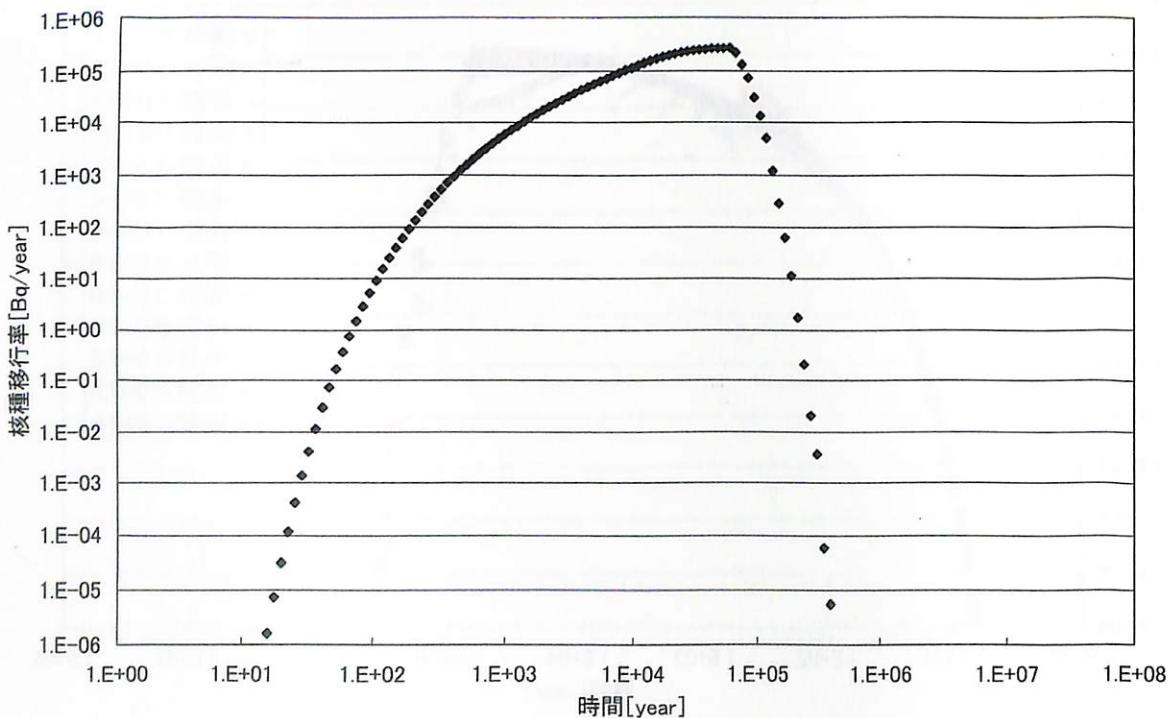


図 4-31. Talbot 法による Cs-135 の解析結果（ケース 2）

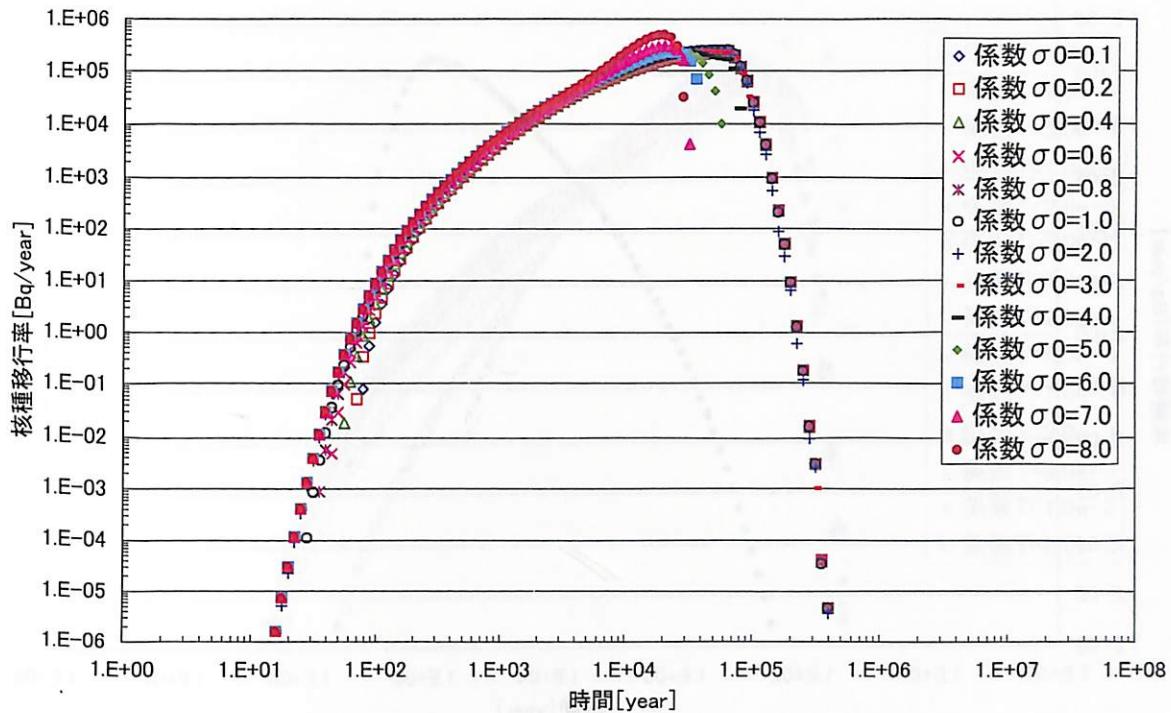


図 4-32. 細野法による Cs-135 の解析結果（ケース 2）

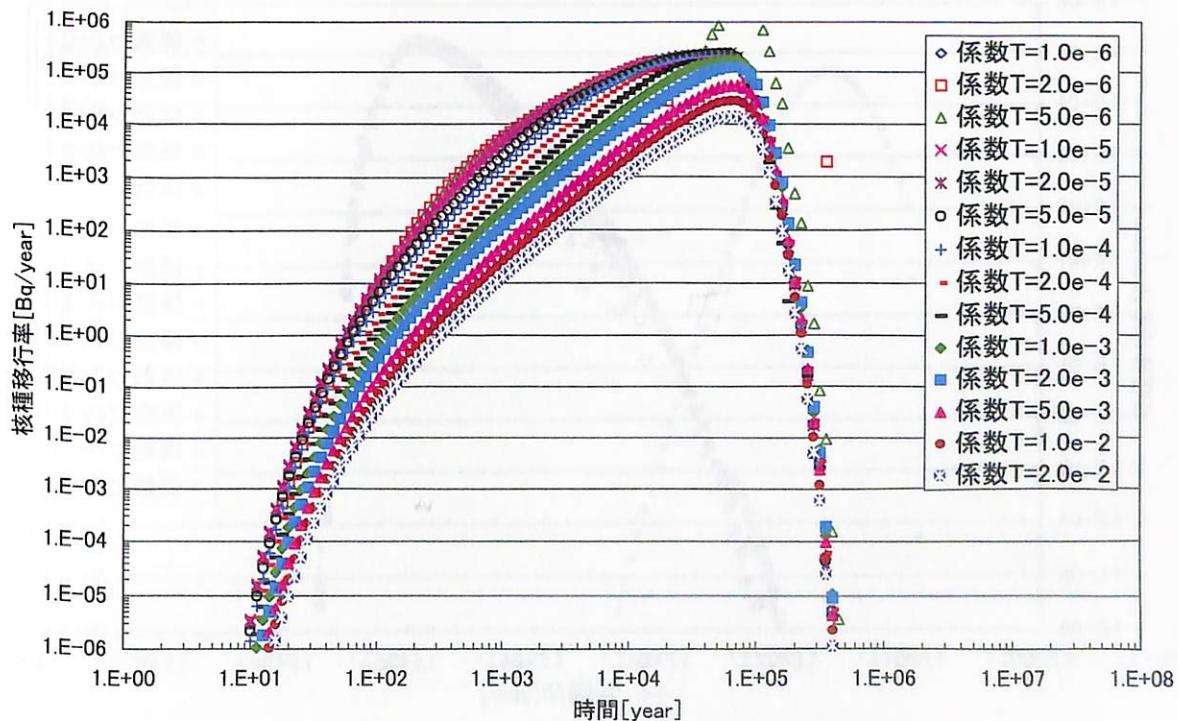


図 4-33. Crump 法による Cs-135 の解析結果（ケース 2）

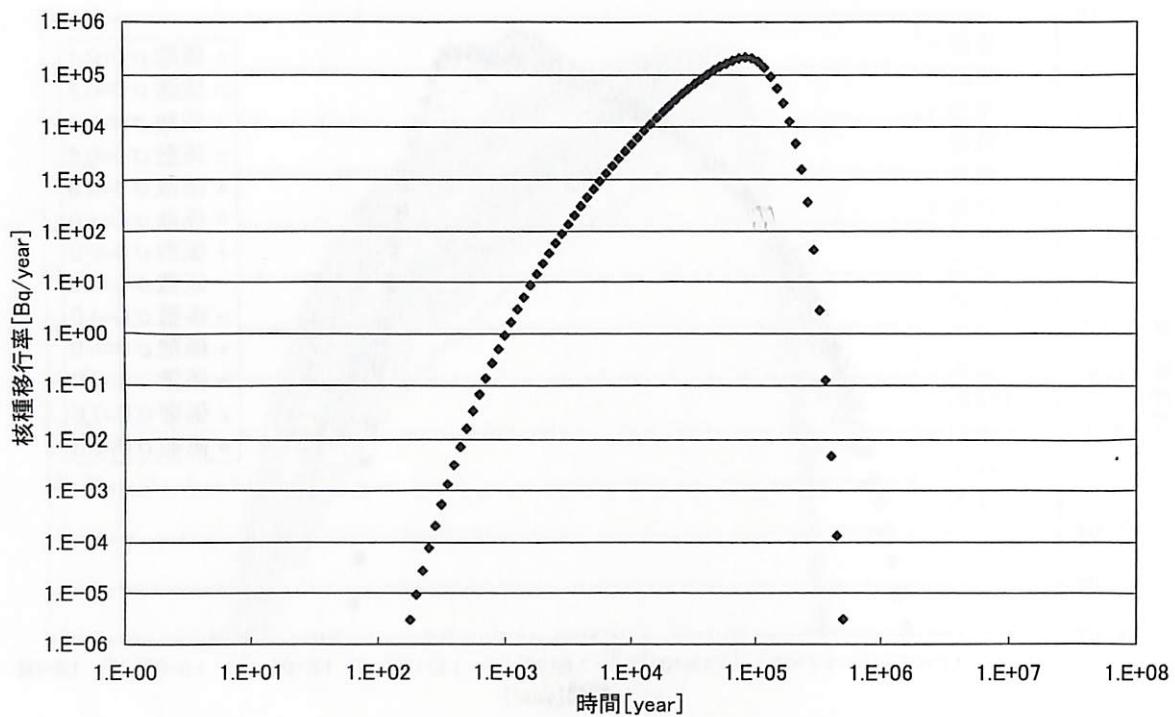


図 4-34. Talbot 法による Cs-135 の解析結果（ケース 3）

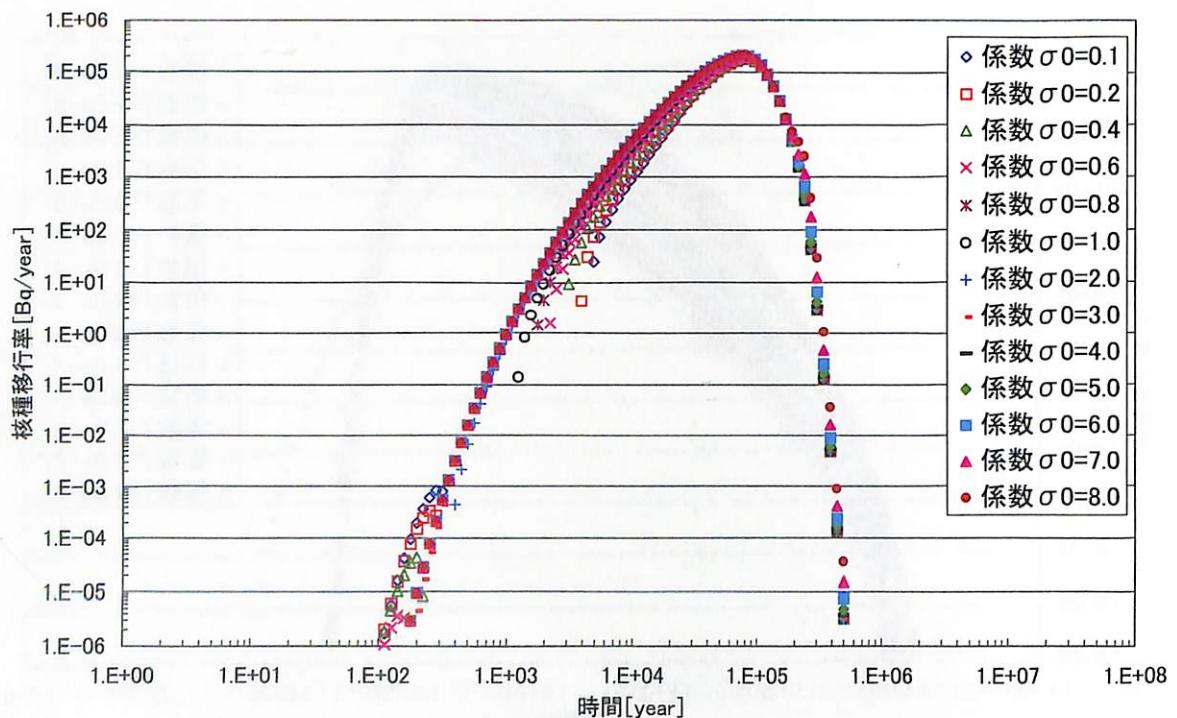


図 4-35. 細野法による Cs-135 の解析結果（ケース 3）

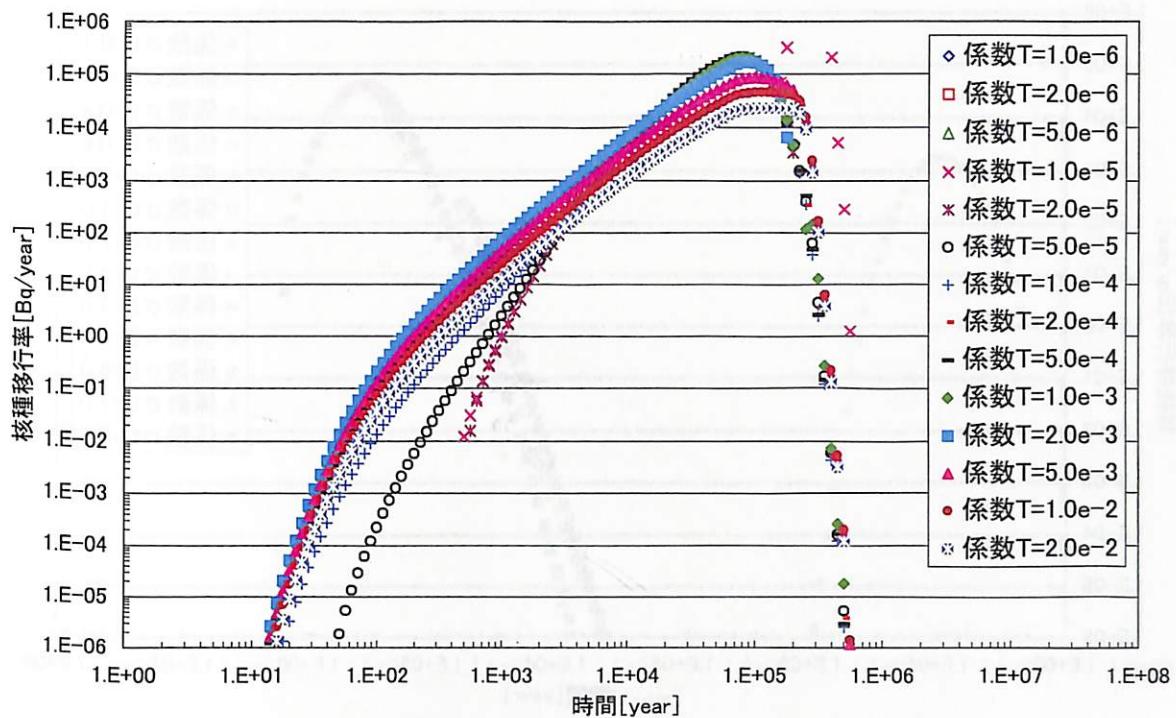


図 4-36. Crump 法による Cs-135 の解析結果（ケース 3）

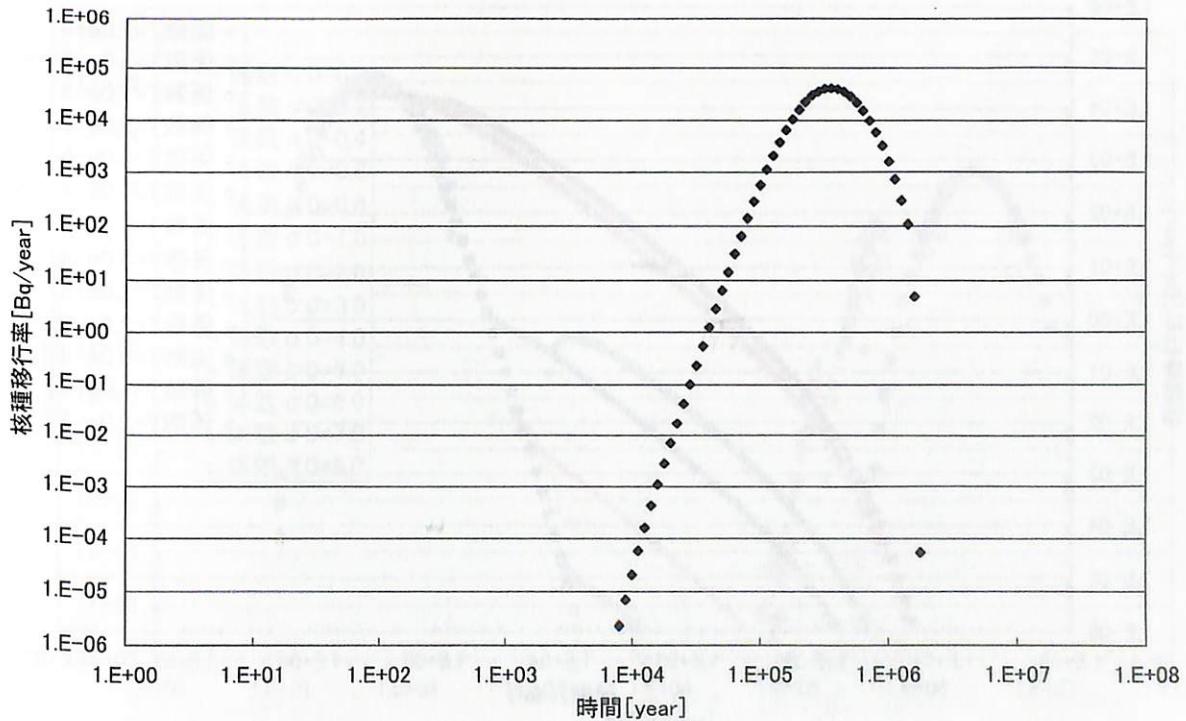


図 4-37. Talbot 法による Cs-135 の解析結果（ケース 4）

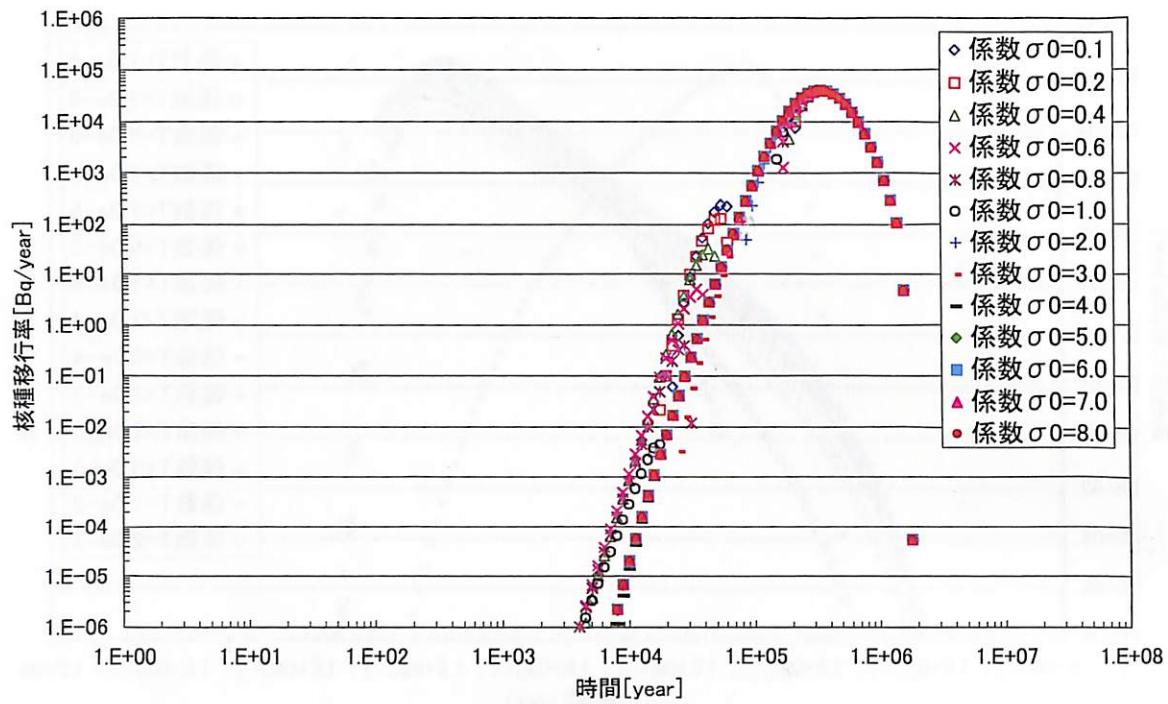


図 4-38. 細野法による Cs-135 の解析結果（ケース 4）

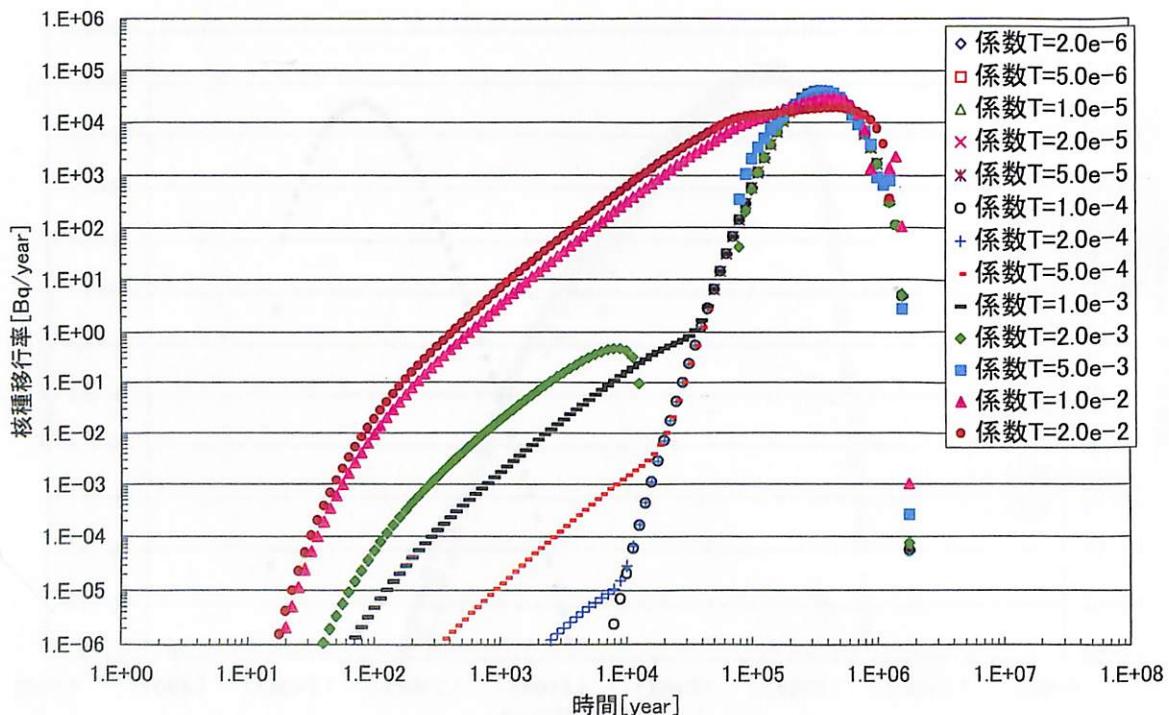


図 4-39. Crump 法による Cs-135 の解析結果（ケース 4）

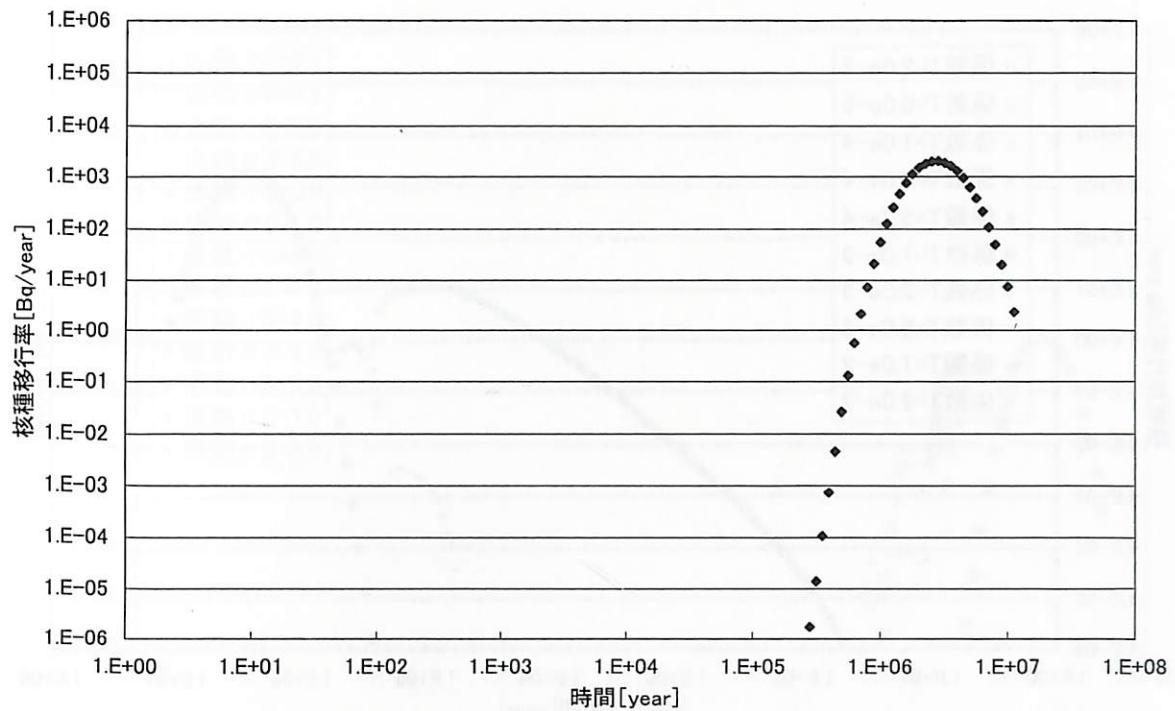


図 4-40. Talbot 法による Cs-135 の解析結果（ケース 5）

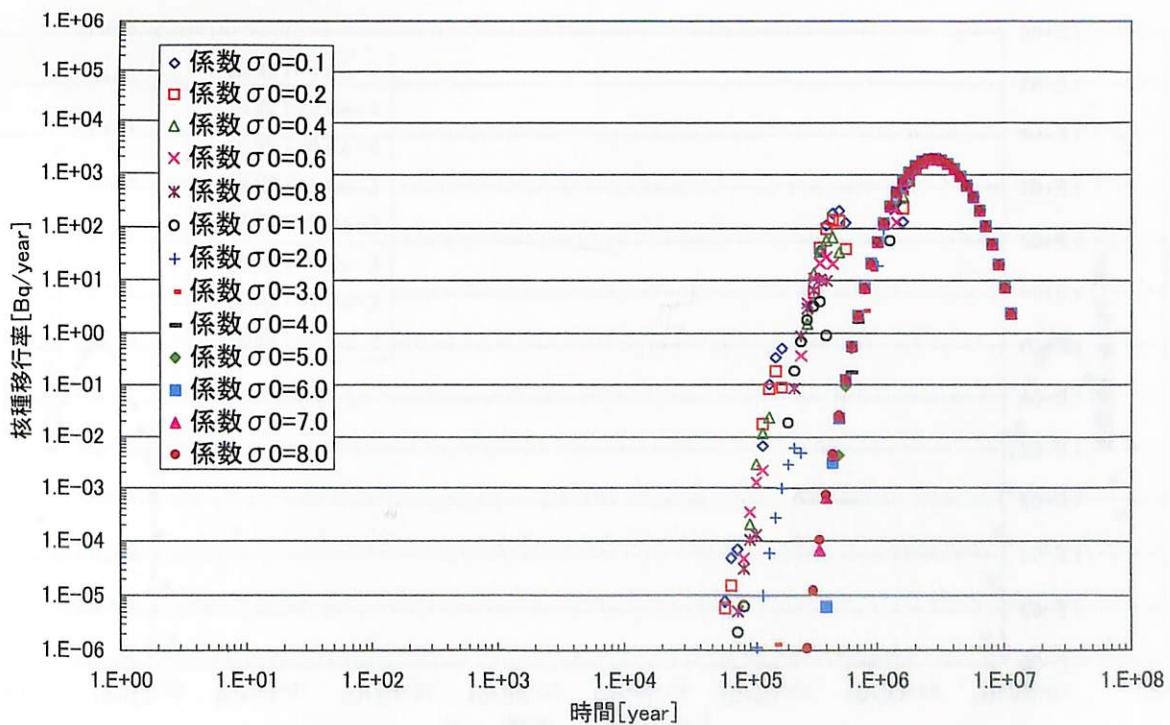


図 4-41. 細野法による Cs-135 の解析結果（ケース 5）

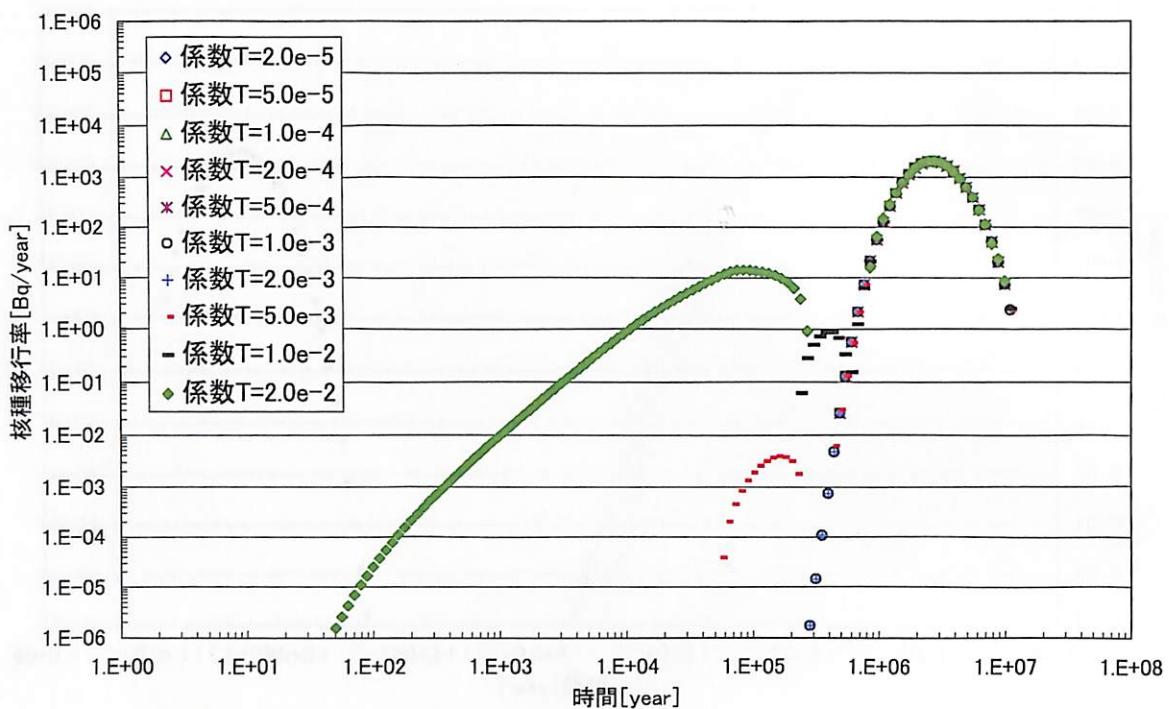


図 4-42. Crump 法による Cs-135 の解析結果（ケース 5）

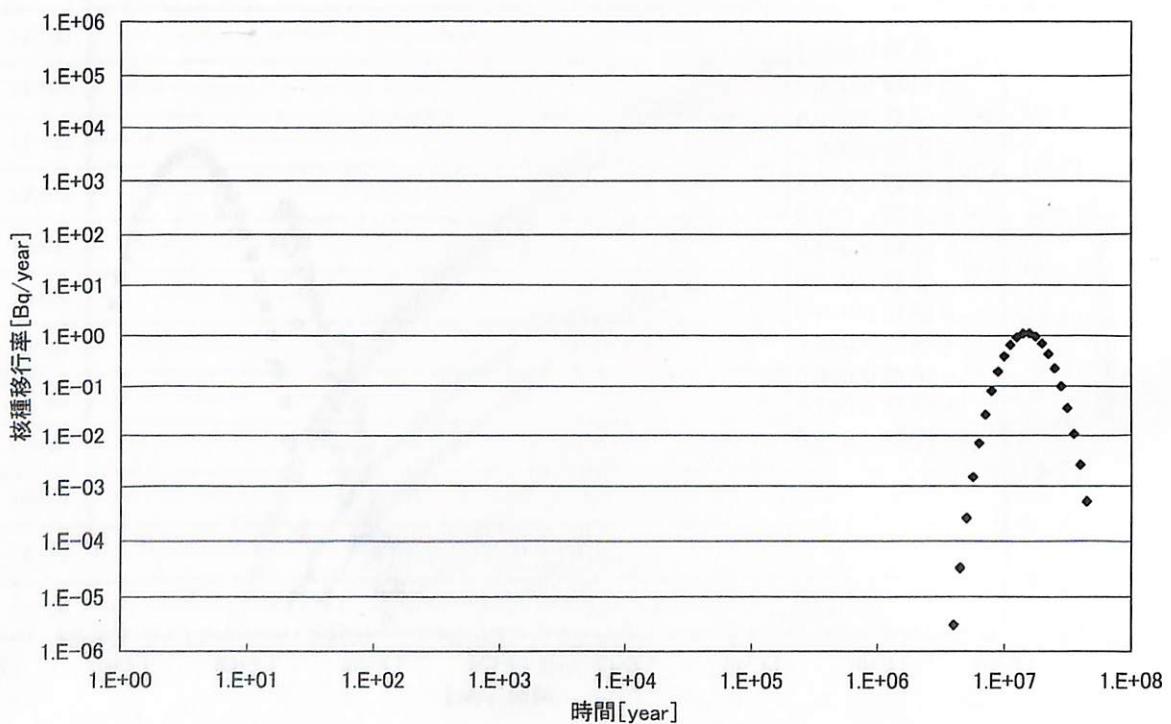


図 4-43. Talbot 法による Cs-135 の解析結果（ケース 6）

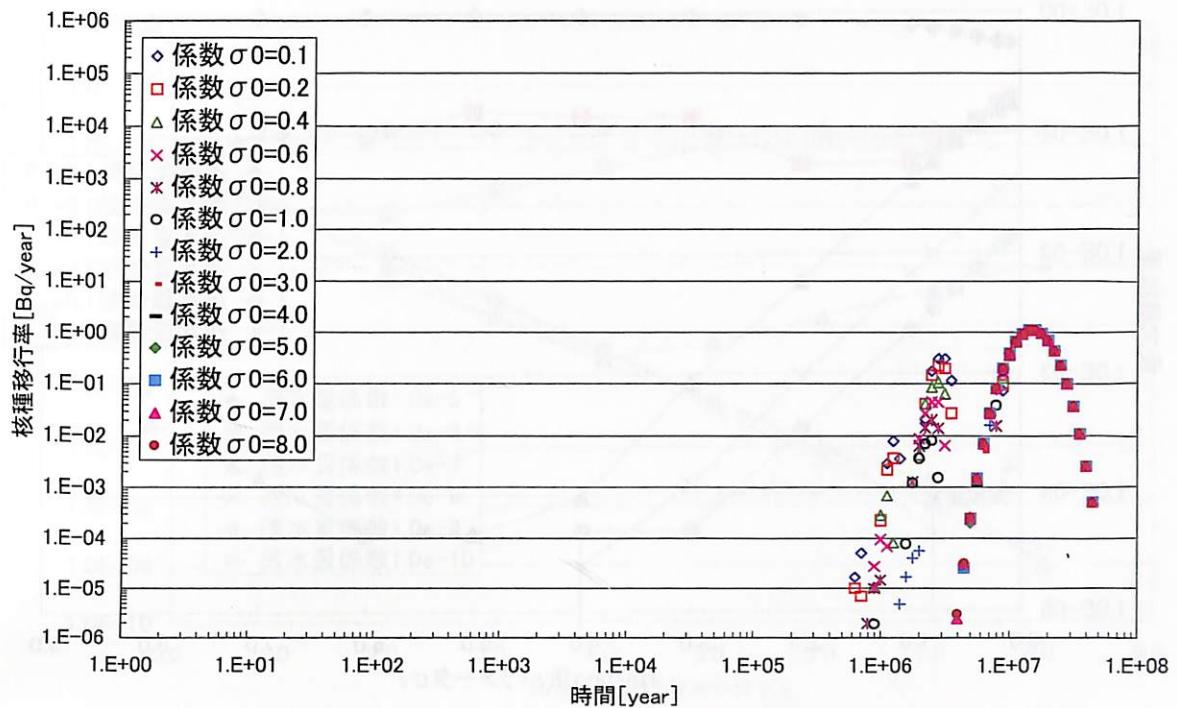


図 4-44. 細野法による Cs-135 の解析結果（ケース 6）

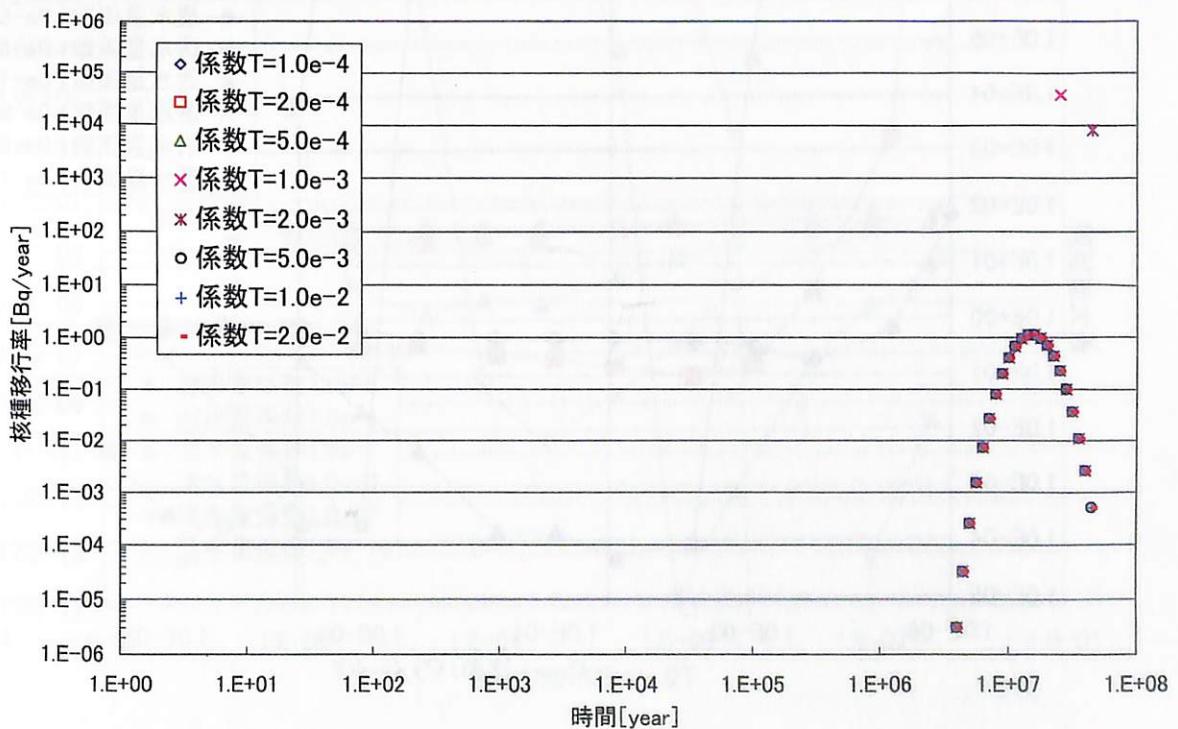


図 4-45. Crump 法による Cs-135 の解析結果（ケース 6）

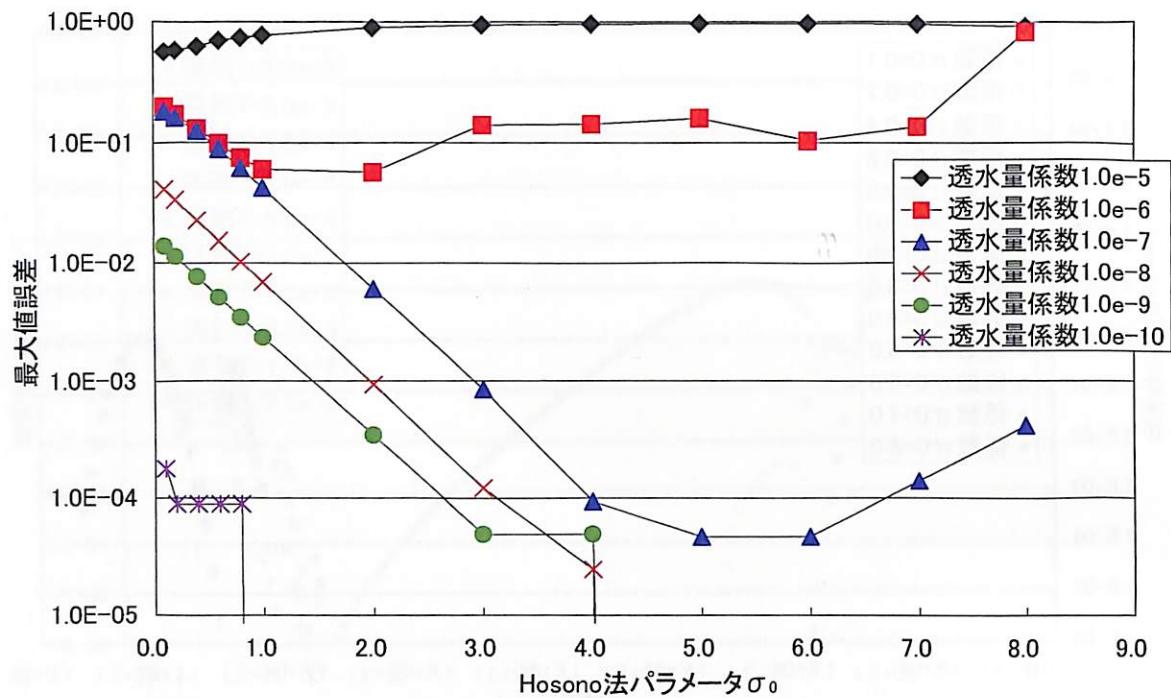


図 4-46. 細野法のパラメータと最大値誤差の関係

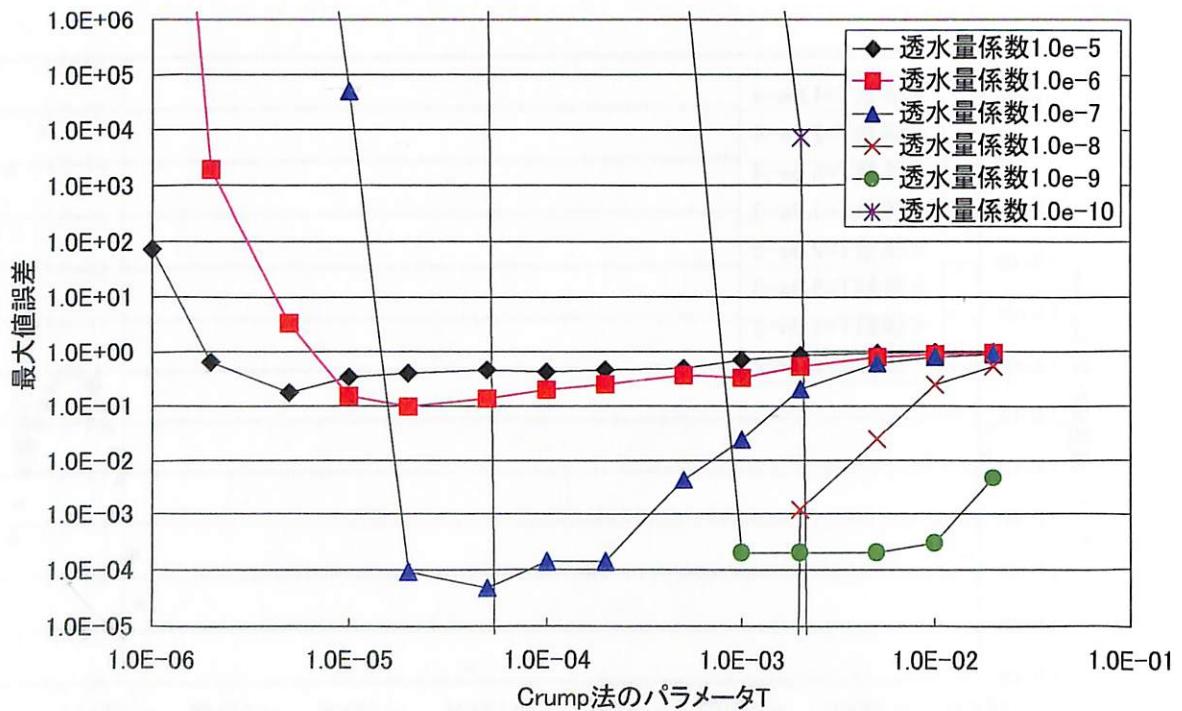


図 4-47. Crump 法のパラメータと最大値誤差の関係

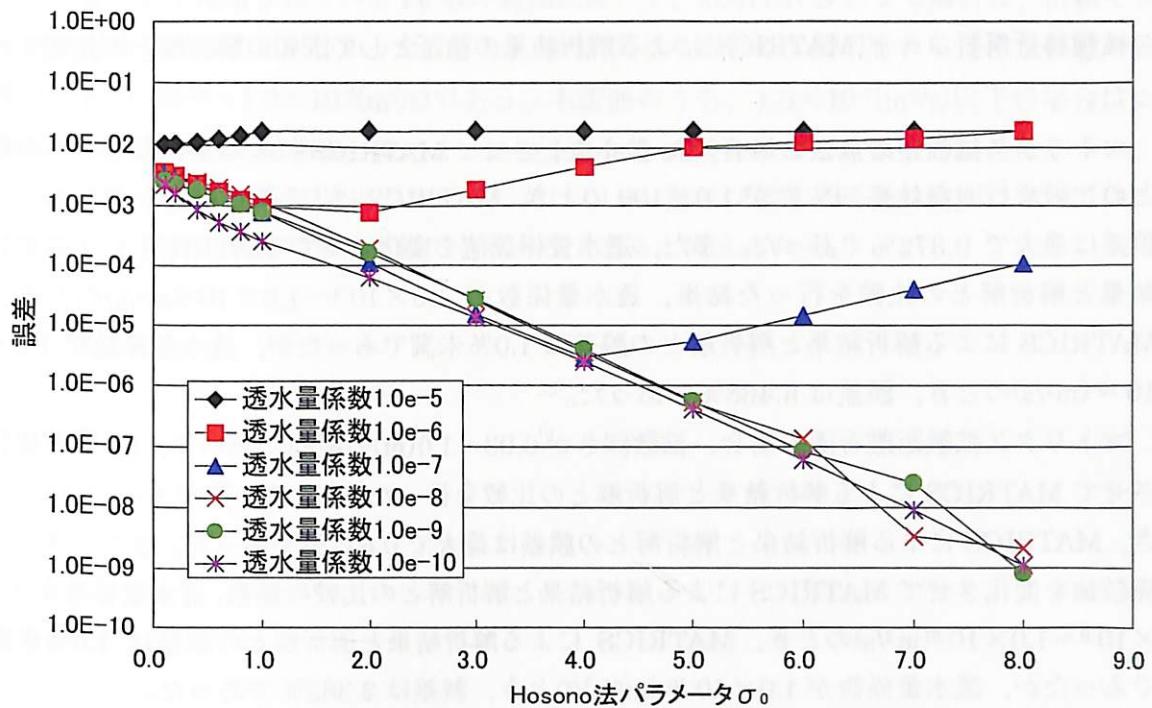


図 4-48. 細野法のパラメータと誤差の関係

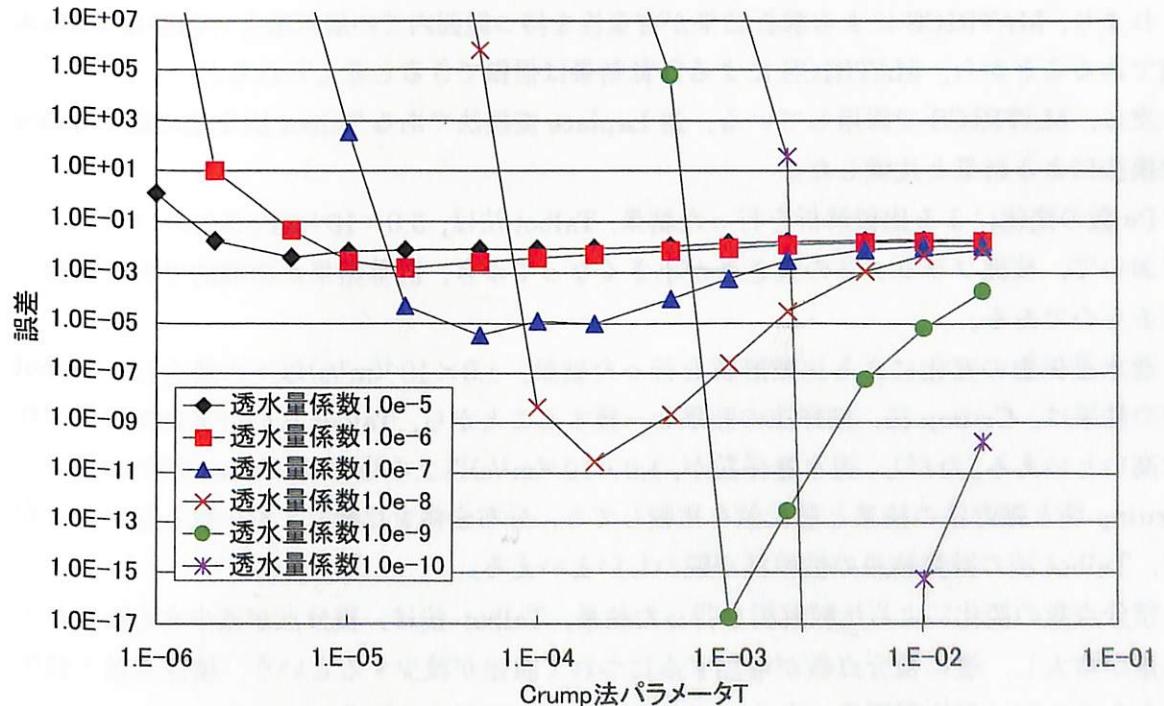


図 4-49. Crump 法のパラメータと誤差の関係

5. まとめ

核種移行解析コード MATRICS による解析結果の検証として既知の解析解との比較を行った。

マトリクス拡散距離無限の場合, Pe 数を変化させて MATRICS による解析結果と解析解との比較を行った結果, Pe 数が 1.0~100 のとき, MATRICS による解析結果と解析解との誤差は最大で 0.372% であった。また, 透水量係数値を変化させて MATRICS による解析結果と解析解との比較を行った結果, 透水量係数が $1.0 \times 10^{-9} \sim 1.0 \times 10^{-5}$ (m^2/s) のとき, MATRICS による解析結果と解析解との誤差は 1.0% 未満であったが, 透水量係数が 1.0×10^{-10} (m^2/s) のとき, 誤差は 5.468% であった。

マトリクス拡散距離有限の場合, 拡散深さが 0.03~1.0(m) の範囲において, Pe 数を変化させて MATRICS による解析結果と解析解との比較を行った結果, Pe 数が 1.0~100 のとき, MATRICS による解析結果と解析解との誤差は最大で 0.672% であった。また, 透水量係数値を変化させて MATRICS による解析結果と解析解との比較の結果, 透水量係数が $1.0 \times 10^{-9} \sim 1.0 \times 10^{-5}$ (m^2/s) のとき, MATRICS による解析結果と解析解との誤差は 1.0% 未満であったが, 透水量係数が 1.0×10^{-10} (m^2/s) のとき, 誤差は 2.363% であった。

以上の結果において, 透水量係数が 1.0×10^{-10} (m^2/s) の場合, 解析解と MATRICS による計算結果として得られた核種移行率は 10^{-25} オーダーで, 他のケースに比べてはるかに小さい量であることから, このときの誤差は信頼性を評価するのには問題にならない値である。これより, MATRICS による解析結果が有意性を持つ範囲内での解析解との誤差は 1.0% 未満であることから, MATRICS による計算結果は信頼できると考えられる。

次に, MATRICS で採用している, 逆 Laplace 変換法である Talbot 法を他の逆 Laplace 変換法による結果と比較した。

Pe 数の変化による比較解析を行った結果, Talbot 法は, $5.0 \times 10^{-1} \leq Pe \leq 2.0 \times 10^8$ の範囲において, 核種フラックスの大きさが小さくなつてゆき, 計算結果が物理的であり信頼できるものである。

透水量係数の変化による比較解析を行った結果, 1.0×10^{-7} (m^2/s) 以下の場合は, Talbot 法の結果は, Crump 法, 細野法の結果と一致することから, Talbot 法の計算結果の信頼性は高いといえる。ただし, 透水量係数が, 1.0×10^{-6} (m^2/s) 以上の場合は, Talbot 法の結果は, Crump 法と細野法の結果と最大値を比較しても, 分布全体を比較しても一致しないことから, Talbot 法の計算結果の信頼性が疑わしいといえる。

積分点数の変化による比較解析を行った結果, Talbot 法は, 積分点が減少するにつれて誤差が増大し, 逆に積分点数が増加するにつれて誤差が減少するという, 積分点数と誤差の大きさの間は反比例関係にある。このことから, 解析する場合には, 誤差が大きくならないように適切な積分点数を設定するように注意する必要がある。

以上の結果を考察すると, 第 2 次とりまとめで使用されている Pe 数の範囲は, $1 < Pe <$

800 であり、Talbot 法による解析結果が信頼できる値の範囲内である。このことから、第 2 次とりまとめで使用されている Pe 数の範囲において、MATRICS による解析は、信頼できる結果が得られることがわかった。また、第 2 次とりまとめで使用される透水量係数の範囲は、 $1.0 \times 10^{-13} \sim 1.0 \times 10^{-6}$ (m²/s)である。本範囲のうち、 1.0×10^{-7} (m²/s)以下の場合は、Talbot 法による解析結果は、他の 2 つの逆 Laplace 変換法による結果との誤差は小さい。

以上のことから、第 2 次とりまとめにおける Pe 数及び透水量係数の範囲においては、MATRICS による解析結果は信頼できるものであると考えられる。

6. 謝辞

本資料を作成するにあたり、株式会社三菱総合研究所原子力システム研究所の丸山殿、野邊殿に解析協力をお願ひいたしました。ここに記して感謝の意を表します。

参考文献

- Crump, K. (1976) : Numerical Inversion of Laplace Transform Using a Fourier Series Approximation, Journal of the Association for Computing Machinery, vol.23, No.1, pp.89-96.
- 動燃事業団(1994) : 地層処分研究開発の現状(平成5年度), PNC TN1410 94-094, pp.138-141.
- 細野敏夫(1979) : 数値ラプラス変換, 電気学会論文誌A, 99卷, 10号, pp.494-500.
- 石原義尚, 石黒勝彦, 梅木博之(1999) : Se-79 の半減期の長期化による地層処分システムの性能評価への影響, JNC TN8400 99-086.
- 長坂和佳, 丸山健太郎, 松本昌昭, 野邊潤(2000) : ニアフィールド水理／核種移行評価モデルの信頼性評価に関する研究, JNC TJ8400 2000-006, pp.147-179
- Nagra(1994) : Kristallin-I Safety Assessment Report, Nagra Technical Report 93-22
- Put, M.J. (1985) : A Unidirectional Analytical Model for the Calculation of the Migration of Radionuclides in a Porous Geological Medium, Radioactive Waste Management and Nuclear Fule Cycle, vol.6, pp.361-390
- Talbot, A. (1979) : The Accurate Numerical Inversion of Laplace Transform, Journal of the Institute of Mathematics and its Applications, vol.23, pp.97-120
- Tang, D.H., Frind, E.O. and Sudicky, E.A. (1981) : Contaminant Transport in Fractured Porous Media:Analytical Solution for a Single Fracture, Water Resources Research, vol.17, No.3, pp. 555-564
- Worgan, K. and Robinson, P. (1992) : CRYSTAL: A Model of Contaminant Transport in a Densely Fissured Geosphere 9105-1 Version 1, Intera Environmental Division

付録 A 多孔質媒体における核種移行コード MATRICES による解析の信頼性の検証

1. 解析モデル

多孔質媒体中の1次元核種移行を表す支配方程式は、(A-1)式のように表される。

$$\theta R_n \frac{\partial C_n}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C_n}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_n}{\partial x} - \theta R_n \lambda_n C_n + \theta R_{n-1} \lambda_{n-1} C_{n-1} \quad (\text{A-1})$$

ここで、

R_n	: 核種 n の遅延係数	[−]
C_n	: 核種濃度	[mol/m ³]
t	: 時間	[y]
V	: ダルシー流速	[m/y]
x	: 距離	[m]
D_L	: 多孔質媒体中の分散係数	[m ² /y]
θ	: 岩体の空隙率	[−]
λ	: 崩壊定数	[1/y]

ここで、

$$R_n = 1 + \rho^m K_n (1 - \theta^m) A \delta / \theta \quad (\text{A-2})$$

ρ^m	: 岩体の真密度	[kg/m ³]
K_n	: 核種 n の分配係数	[m ³ /kg]
δ	: 表面吸着の有効深さ	[m]
A	: 岩体と亀裂の単位体積あたりの有効吸着表面積	[m ²]

一方、多孔質媒体中の核種移行を亀裂性媒体における単一亀裂中の、マトリクス拡散を考慮しない1次元の核種移行と等価であると考え、(A-1)式の岩体の空隙率 θ は、MATRICES の基礎式である (1) 式中の亀裂幅 θ と同じであると仮定する。これより以下の関係が成立する。

$$V = q\theta \quad (\text{A-3})$$

$$D_L = \theta(\alpha_L q + D_p) = \theta D \quad (\text{A-4})$$

このとき、

D_p : 空隙水中における核種の拡散係数 [m²/y]

α_L : 縦方向分散長 [m]

以上のことより、(A-1)式と MATRICS が解法する (1) 式は同じである。これより、MATRICS を使って多孔質媒体中の核種移行を解析することができる。

核種移行解析コード MATRICS により、多孔質媒体中の核種移行を解析するためには、1 本の亀裂を扱うことから、亀裂頻度を 1 とする。また、マトリクス拡散を考慮しないことから、岩盤マトリクス空隙水中の拡散係数、岩盤マトリクスの空隙率を 0、岩盤マトリクス中の遅延係数を 1 と設定する。

2. 解析解との比較

核種移行解析コード MATRICS による多孔質媒体中の核種移行解析結果の検証として解析解との比較を行った。比較する解析解は、多孔質媒体における崩壊連鎖を考慮しない場合における定常解である(Put, 1985)。Put の解析解は、亀裂入口濃度一定の条件より得られ、以下のように与えられる。

$$\frac{\phi}{\Psi_0} = \exp \left[z \left\{ \frac{V}{2D_L} - \sqrt{\left(\frac{V}{2D_L} \right)^2 + \frac{\theta \cdot \lambda \cdot R_n}{D_L}} \right\} \right] \quad (\text{A-5})$$

ただし、(A-4)式における第 2 項を無視し、 $D_L = \alpha_L \cdot V$, $\alpha_L = L/10$ (L は評価距離) として (A-5)式を変形すると以下のようになる。

$$\frac{\phi}{\Psi_0} = \exp \left[L \left\{ \frac{5}{L} - \sqrt{\left(\frac{5}{L} \right)^2 + \frac{10\theta \cdot \lambda \cdot R_n}{L \cdot V}} \right\} \right] \quad (\text{A-6})$$

ここで、

- Ψ_0 : 地質媒体入口での一定の核種移行率 [–]
 ϕ : 多孔質媒体内の任意の位置における核種移行率 [–]

比較の方法として、(A-6)式の解析解中の核種移行パラメータに値を入れた数値解と MATRICS による解析結果を比較した。対象となる核種移行パラメータは透水量係数であり、上記パラメータを変化させて比較解析を行った。

2.1 透水量係数の変化による比較解析

本節では、透水量係数を変化させて実施した MATRICS による解析の結果と、(A-6)式の解析解中の透水量係数を変化させて算出した数値解の結果を比較し、MATRICS による解析における透水量係数の変化による影響を検討した。

(A-6)式の解析解は崩壊連鎖を考慮していないことから、対象核種は Cs-135 とし、(A-6)式の半減期、分配（遅延）係数には、Cs-135 の値を代入した。一方、MATRICSにおいて(A-6)式の解析解と同様の解析を行うためには、1章でも述べたように、1本の亀裂を扱うことから、亀裂頻度を1とする。また、マトリクス拡散を考慮しないことから、岩盤マトリクス空隙水中の拡散係数および岩盤マトリクスの空隙率を0、岩盤マトリクス中の遅延係数を1と設定する。一方、亀裂表面の遅延係数、崩壊定数には Cs-135 の値を設定した。さらに、(A-6)式の解析解は、亀裂入口濃度一定の条件によって得られたものであるから、MATRICS の解析に使用する核種ソースのファイルには、核種のフラックスが時間変化に對して一定のものを使用する。

解析条件は、透水量係数を $1.0 \times 10^{-5} \sim 1.0 \times 10^{-10}$ (m²/s)まで 10 倍ずつ変化させた 6 ケースの解析を実施した。ダルシー流速、縦方向分散係数の値は、透水量係数の値から算出した。また、亀裂システムの空隙率は 0.2 とした。以上の (A-6) 式に代入する核種移行パラメータを表 A-1 にまとめた。一方、このときの MATRICS の入力データは、表 A-2 のよう に設定した。

上記のように核種移行パラメータを設定して、解析解と MATRICS による解析結果を比較した結果を表 A-3 に記載した。本表より、解析解と MATRICS による解析結果の誤差は、0.000% ~ 0.257% である。

以上のことから、透水係数の変化に着目した場合、透水係数が $1.0 \times 10^{-5} \sim 1.0 \times 10^{-10}$ の範囲では、MATRICS による多孔質媒体中の解析結果は信頼できるものであると考えられる。

表 A-1. 透水量係数の変化による比較解析における解析解のパラメータに入力した値

内容	単位	ケース1	ケース2	ケース3	ケース4	ケース5	ケース6
半減期	[y]			2300000			
動水勾配	[·]			0.01			
透水量係数	[m ² /s]	1.0E-5	1.0E-6	1.0E-7	1.0E-8	1.0E-9	1.0E-10
ダルシー流速	[m/y]	3.154	3.154E-1	3.154E-2	3.154E-3	3.154E-4	3.154E-5
評価距離	[m]			100			
分散係数	[m ² /y]			0.0			
遅延係数	[·]			1.0			
亀裂システムの空隙率	[·]			0.2			

表 A-2. 透水量係数の変化による比較解析における核種移行コード MATRICS の入力パラメータ

内容	単位	ケース1	ケース2	ケース3	ケース4	ケース5	ケース6
出力開始時間、 出力終了時間	[y]			1.0E+0			
	[y]			1.0E+10			
核種名	[·]			Cs-135			
半減期	[y]			2300000			
縦方向分散係数	[m ² /y]	1.577E+2	1.577E+1	1.577	1.577E-1	1.577E-2	1.577E-3
亀裂表面の遅延 係数	[·]			5.41E+02			
亀裂内流速	[m/y]	1.577E+1	1.577	1.577 E-1	1.577E-2	1.577E-3	1.577E-4
評価距離	[m]			100			
BLOCK タイプ	[·]			slab			
亀裂間隔	[m]			1			
マトリクス拡散深さ	[m]			0.0			
マトリクス空隙水中 拡散係数	[m ² /y]			0.0			
マトリクス空隙率	[·]			0.0			
マトリクス中遅延係数	[·]			1.0			
BLOCK タイプの体 積比	[·]			1			
亀裂表面/全体積	[·]			2.0			
亀裂システム空隙率	[·]			0.2			
出口境界の位置	[·]			-1(=無限遠)			
mol -> Bq 単位 変換ファクタ	[·]			=6.02×10 ²³ ln(2.0)/(半減期)			

表 A-3. 解析解と MATRICS による計算結果の比較

ケース名	ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4	ケース 5	ケース 6
解析解 [−]	0.999	0.990	0.903	0.389	1.780E-03	1.093E-12
MATRICS による 計算結果 [−]	0.997	0.988	0.901	0.388	1.777E-03	1.093E-12
誤差 [%]	0.200	0.202	0.221	0.257	0.169	0.000