

地層処分性能評価用解析システムの統合化研究(VI)

- 概要 -

(動力炉・核燃料開発事業団 委託研究成果報告書)

技 術 資 料		
開示区分	レポ ー ト No.	受 領 日
ㇿ	J1216 95-001	1995.7.20
この資料は技術管理室保存資料です 閲覧には技術資料閲覧票が必要です 動力炉・核燃料開発事業団 技術協力部技術管理室		

1995年3月

三菱重工業株式会社

この資料は、動燃事業団の開発業務を進めるため、特に限られた関係者だけに開示するものです。ついては、複製、転載、引用等を行わないよう、また第三者への開示又は内容漏洩がないよう管理して下さい。また今回の開示目的以外のことには使用しないよう特に注意して下さい。

本資料についての問い合わせは下記に願います。

〒107 東京都港区赤坂1-9-13

動力炉・核燃料開発事業団

技術協力部 技術管理室

地層処分性能評価用解析システムの統合化研究 (VI)

房枝茂樹^{*1}、柳沢一郎^{*1}、鶴沢将行^{*1}
松本弘之^{*1}、笠井雅夫^{*1}、石原義尚^{*2}
土井英雄^{*3}、土井基尾^{*4}、江崎正弘^{*4}

要 旨

本研究では、ニアフィールドの複合現象を柔軟に解析できる連成解析用計算支援システム (CAPASA) の拡張と高度化を目的として、下記を実施した。

(1) 現象解析コードを連成解析システム上で連成させるための手順を、これまでの研究で得られた知見を基に、システム分析から連成実現にいたるステップ毎の手順としてまとめた。

(2) 今後の連成解析領域の拡張に関する作業効率と解析業務の効率向上のために、PLAN構築モジュールとPLAN実行モジュールの高機能化をプロトタイピングにより検討した。この結果、PLANにおけるデータフローならびに制御フローの表現について見直し、PLAN表現能力を拡張した高度化仕様を定めることができた。

(3) 複数の現象解析コードを連成した大型の解析を効率的に行うために、分散処理手法の導入について検討した。分散処理環境においては、PLANオブジェクト単位での並列処理により、解析の効率化が期待できるが、そのためにはオブジェクトの実行を制御するためのコントローラの実現が課題となる。

(4) ORIGEN2とHYDORGEOCHEMを対象とし、解析結果の登録、入出力、データのバージョン管理等の機能を拡張し、基本システムにおけるデータ管理機能の向上を図った。

本報告書は、三菱重工業株式会社が動力炉・核燃料開発事業団の委託により実施した研究の成果である。

契約番号：060D0383

事業団担当部課室および担当者：環境技術開発部地層処分開発室（牧野 仁史）

*1：新技術開発部、*2：原子力システム設計部、*3：原子力応用技術部、

*4：燃料サイクル技術部

Integration Study (VI) for Performance Assessment System of Geological Disposal

Shigeki Fusaeda*1, Ichiro Yanagisawa *1, Masayuki Uzawa*1,
Hiroyuki Matumoto*1, Masao Kasai*1, Yoshinao Ishihara*2,
Hideo Doi*3, Motoo Doi*4, Masahiro Ezaki*4

ABSTRACT

In this study, the following tasks have been carried out to upgrade and expand the demonstration system of a fully integrated near-field performance assessment system (called CAPASA) .

- (1) Based on lessons from PLAN object's design so far, procedure for incorporating new codes into CAPASA system has been summarized into a series of step-by-step processes.
- (2) In order to improve the flexibility of PLAN object's design, the specification of PLAN construction and execution modules have been restudied based upon the discussions on semantics of PLAN networks. These two modules were re-designed according to the upgrade specification by reflecting the result of prototyping.
- (3) Application of distributed computation techniques has been discussed as a promising approach to improving computing efficiency. It was concluded that the concurrent execution of PLAN objects could be a practical approach of reducing the computing time of complicated PLAN.
- (4) The demonstration system has been upgraded from a practical point of view. Data storage function, data retrieval function, and version control function for data, process and PLANs have been re-designed by considering the use of ORIGEN2 and HYDROGEOCHEM codes on the demonstration system.

Work performed by Mitsubishi Heavy Industries, Ltd. under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation.

PNC Liaison: Waste Technology Development Division, Geological Isolation Technology
Section, Hitoshi Makino.

*1:Advanced Technology Development Department, *2:Nuclear System Engineering Department
*3:Nuclear Application Technology Department, *4:Nuclear Fuel Cycle Engineering Department

目次

1. はじめに	----- 1
2. 連成解析システム上での現象解析コード連成における作業内容・基本手順の知識化	----- 2
2.1 ORIGEN2とHYDROGEOCHEM連成実現における作業内容の整理	----- 2
2.1.1 平成5年度作業の整理	----- 2
2.1.2 連成解析モデルの検討	----- 3
2.2 基本手順の作成	----- 6
3. 連成解析システムの基本フレーム機能の拡充に関する検討	----- 8
3.1 PLAN構築／実行モジュールの高機能化に関する検討・設計	----- 8
3.1.1 高度化の検討	----- 8
3.1.2 プロトタイピング	----- 9
3.1.3 モジュールの設計	----- 9
3.1.4 まとめ	----- 9
3.2 分散処理環境に関する検討	----- 10
3.2.1 クライアント／サーバ形式での利用	----- 10
3.2.2 マルチCPUによる分散処理環境	----- 10
3.2.3 PNC計算機環境での運用の検討	----- 11
3.2.4 まとめ	----- 13
4. 連成解析システム上でのデータ等の管理機能向上のための環境整備	----- 14
4.1 機能仕様の検討	----- 14
4.1.1 連成解析システムでのデータの体系的な管理方法について	----- 14
4.1.2 ユーザ支援環境	----- 16
4.2 アプリケーションの設計・製作	----- 17
4.2.1 データベース仕様	----- 17
4.2.2 ソフトウェア仕様	----- 17
4.2.3 動作確認	----- 19
4.2.4 拡張性について	----- 19
5. あとがき	----- 20

図リスト

図2.1.2-1 輸送－化学－崩壊－水理の連成評価におけるデータの接続方式

図2.2-1 連成解析コード連成のための基本手順

図3.2.2-1 分散環境におけるPLAN実行

図3.2.3-1 PNC計算機環境下でのCAPASA

図4.1.1-1 データベースに格納するデータ

図4.2.2-1 モジュール全体構成

1. はじめに

本研究では、これまでに、現象解析モデルの体系的な管理と結合を行う連成解析システムの開発を通じて、最終的にシステム評価モデルを中核とする性能評価用の統合化システムの拡充を推進するため、考慮すべき現象および使用するコードの調査、検証・確認の手法検討を一部実施し、モデル、コード、データの体系的な管理の手法検討、現象解析モデルの連成アルゴリズムの検討とそれに基づく連成解析システムの基本フレームの構築を行ってきた。

今年度の研究では、これまでの成果に基づき、下記項目を実施し、連成解析システムの基本システムの拡張と高度化を図った。

- (1)現象解析コード連成における作業内容・基本的手順の知識化
- (2)連成解析システムの基本フレーム機能の充実に関する検討
 - ・PLAN構築、PLAN実行モジュールの高機能化に関する検討・設計
 - ・分散処理に関する検討
- (3)連成解析システム上でのデータ等の管理機能向上のための環境整備

2. 連成解析システム上での現象解析コード連成における作業内容・基本手順の知識化

2. 1 ORIGEN2 と HYDROGEOCHEM 連成実現における作業内容の整理

2. 1. 1 平成5年度作業の整理

平成5年度の作業は、連成解析システムの概念を固めながら実施した作業であり、かならずしも最適な手順でアウトプットをまとめられたわけではなかったが、連成問題の設定から、PLANオブジェクトの実装、動作確認までの一連の作業を実施しており、そこでの問題点も整理しながら、作業の流れをまとめた。

2.1.2 連成解析モデルの検討

これまでの研究において、地下水シナリオに基づいた現象メカニズム／解析コード／データのハイアラキ、および現象メカニズム間の相互依存関係を整理したが、各解析コード間の制御関係およびデータの受渡し関係が、必ずしも明確に表現されていない。このため、連成解析を実現するためには、連成モデルのより一般的な分析を行い、連成モデル構築のための一連のアプローチを明確にしておく必要がある。

ここでは、解析コードおよびデータの具体的な接続関係をまとめるため、以下の項目について検討を行った。

(1) 解析内容／データの時間的・空間的分類

現象解析コードをデータを介して連成し、性能評価解析を実施するために、各解析コードで実施する解析内容、および使用するデータについて、時間的特徴と空間的特徴の観点から整理した。

解析内容については、時間的解析として、定常解析と非定常解析に分類でき、また、空間的解析としては、空間分布解析と点解析に分類できる。

同様に、連成に使用するデータについても、時間的領域では、一定値（定数）の時間不変データと、時間変化をする時間依存データに分類できる。また、空間領域では、基本的にはすべて空間分布データとなるが、点解析コードへの入出力データは、あるポイントに関するデータであり、点情報データとして分類する。

(2) データ接続の分類

昨年度開発した CAPASA システムに実装した HYDROGEOCHEM と ORIGEN コードによる連成解析を基に、連成に使用するデータの空間的特徴から、解析コードへ入力するデータの特徴を踏まえて、各データの接続方法について整理した。

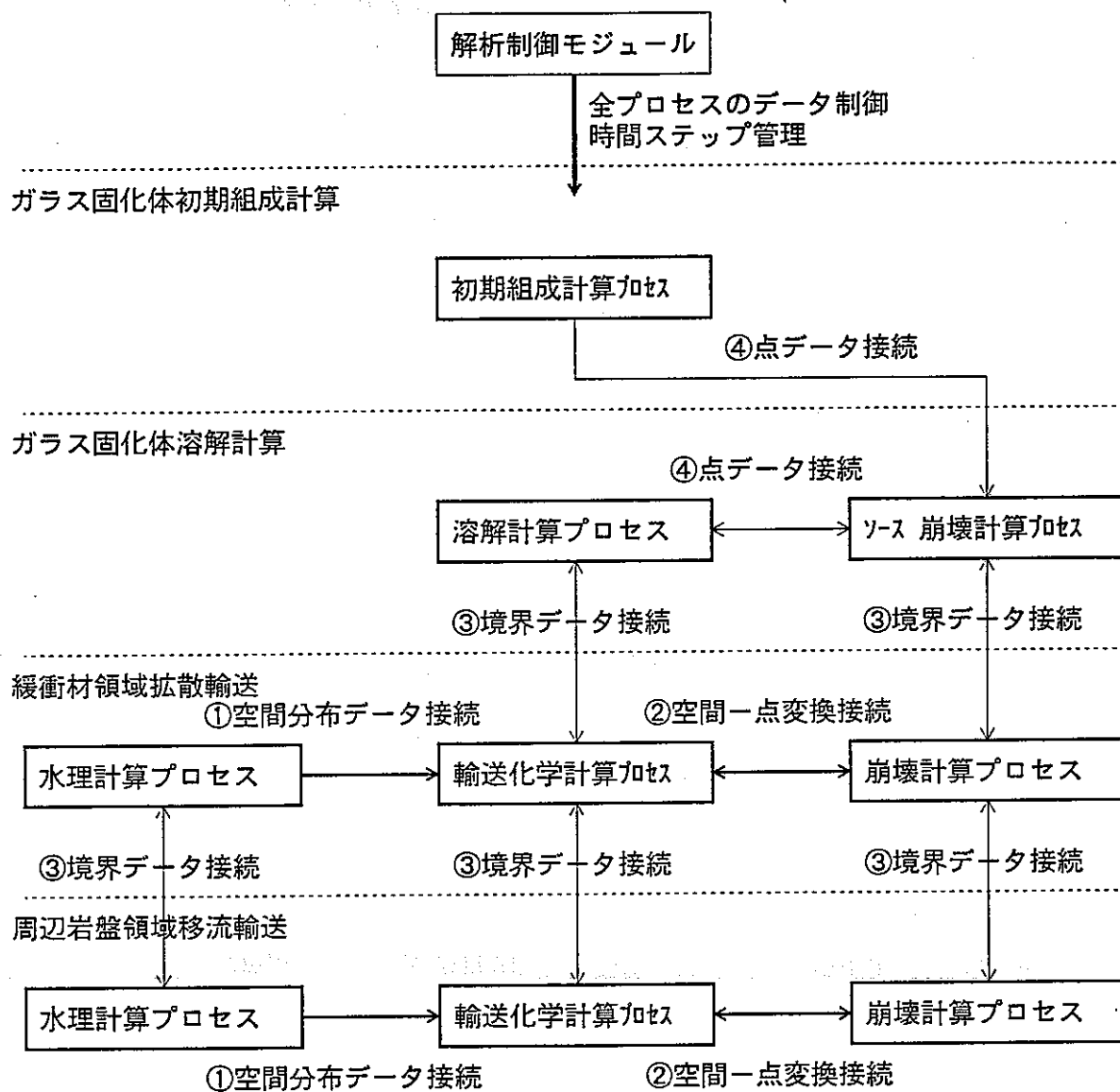
各評価コードの連成に必要なデータの受渡しの接続関係を図 2.1.2-1 に示す。解析制御モジュールは連成解析実行の全体を制御するモジュールとする。各計算プロセス間のデータの受渡しについては、各解析コードが必要とするデータの空間的分類、すなわち空間分布データと点情報データにより異なり、以下のケースが考えられる。

① 空間分布データ接続（水理－輸送化学間のデータ受渡し）

どちらのコードも空間分布データを入出力するため、空間分布データを全て受け渡す接続方式である。

② 空間－点変換接続（輸送化学－崩壊間のデータ受渡し）

空間分布解析コードと形状非依存解析コードを連成する場合には、空間メッシュ



- ①空間分布データ接続
- ②空間一点変換接続
- ③境界データ接続
- ④点データ接続

図 2. 1. 2 - 1 輸送-化学-崩壊-水理の連成評価におけるデータの接続方式

の各節点に対して、形状非依存コードを起動して計算を行う必要がある。

③境界データ接続（境界を接するコード間のデータ受渡し）

空間分布データおよび点情報データのいずれにおいても起こりうるデータ接続方式で、対応する境界節点データのみを受け渡す方式である。

④点データ接続

形状非依存解析コード間を連成する場合のデータ接続方式で、点情報データをそのまま受け渡す方式である。

(3)制御モジュールの接続関係の分類

次に、各評価コードの連成解析を実現するため、制御モジュールの接続関係について、データの受渡し関係および各プロセスの実行順序を考えて接続フローを整理した。

(4)データ・フローの分析

前項でまとめた連成評価におけるデータ接続関係および制御モジュールの接続フローに基づいて、輸送－化学－崩壊－水理の各プロセスを連成解析する場合の具体的なデータ・フローを整理した。

ガラス固化体部の連成解析については、ガラス固化体の初期組成計算、崩壊計算、および溶解計算における入出力関係をまとめた。緩衝材領域および周辺岩盤領域の輸送解析については、水理計算、輸送化学計算、および崩壊計算の入出力関係をまとめた。

(5)連成用計算制御モジュールの機能分析

輸送－化学－崩壊－水理の連成評価におけるモジュールの接続フローおよびデータ・フローから、各モジュールの必要機能について整理し、読み込みデータの種類、処理内容、および解析実行までの処理手順をまとめた。

2.2 基本手順の作成

前節までの議論に基づき、現象解析コード連成のための基本手順を図2.2-1に示すとおりに定めた。この手順は今後のCAPASAシステムへの新たな解析コードやデータの獲得プロセスの過程でさらに洗練されるべきものである。システムユーザが容易にプロセスならびにデータ獲得が可能となるステップ毎の手順としてまとめられるべきものである。

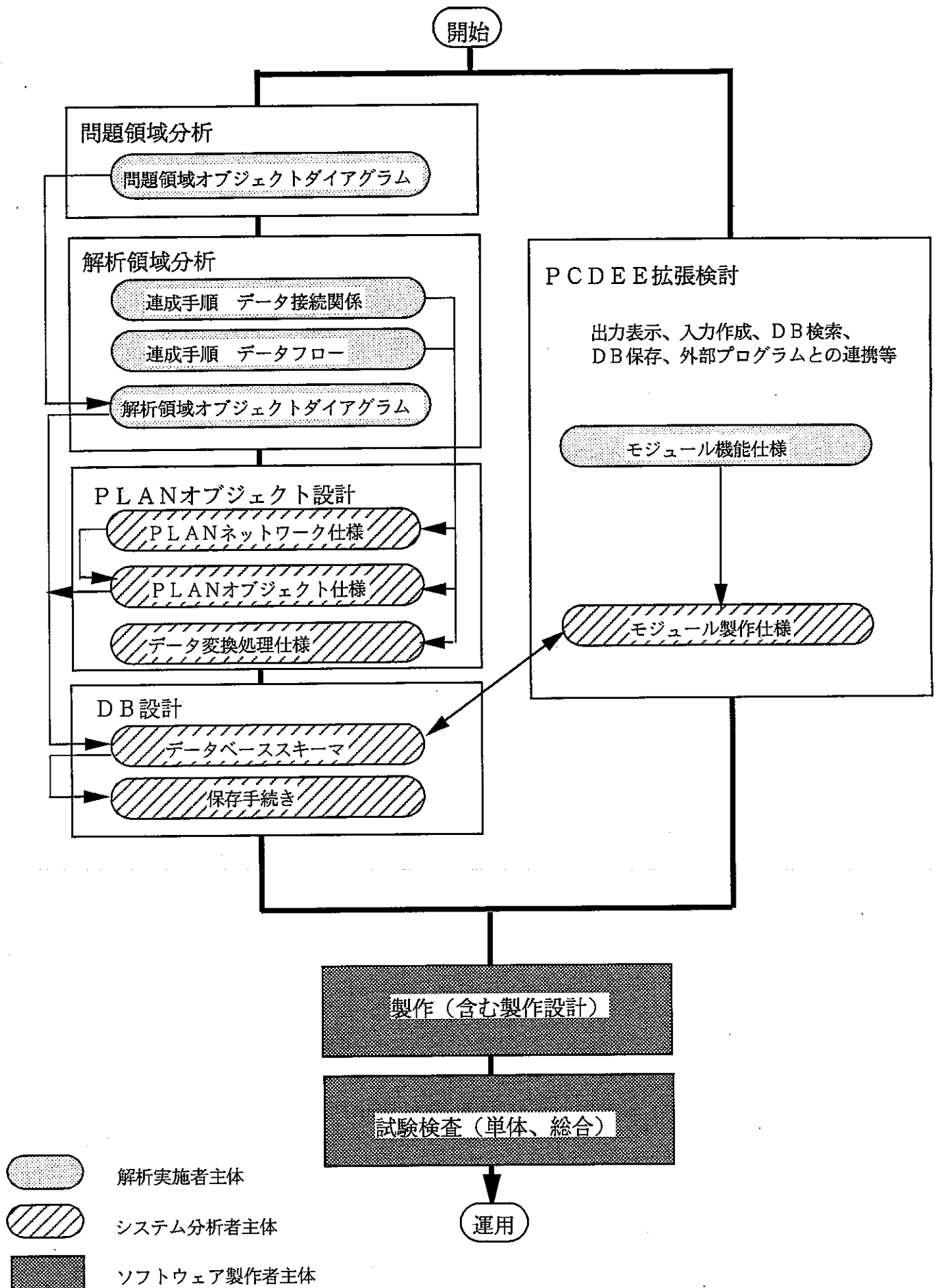


図2.2-1 連成解析コード連成のための基本手順

3. 連成解析システムの基本フレーム機能の拡充に関する検討

3. 1 PLAN構築／実行モジュールの高機能化に関する検討・設計

解析効率や拡張作業の効率の向上の観点から、PLAN構築／実行モジュールの高度化を検討した。

3. 1. 1 高度化の検討

平成5年度のシステムではAVSを使用したために、PLANの表現や操作上の制約があった。本節では、AVSの制約にとらわれることなく、解析効率や拡張作業の効率の向上の観点から、PLAN構築／実行モジュールの高度化を検討した結果について述べる。

PLANの表現方法について述べる。平成5年度のシステムでは、輸送－化学－水理の連成解析を行う際のデータの流れはグラフィカルには表現されずに、制御の流れのみが表現されていた。そして、データの流れはグローバル情報として定義された。このため、データの流れを直感的に理解することは難しく、また、データの受け渡し方法については何ら記述がされていなかった。本年度は、これらの制約を解決するため、データの流れを示すデータフローの概念を導入した。

データフローとは、複数のPLANオブジェクト間のデータの流れ、及び、データの受け渡し方法について記述したものである。データフローは以下の属性を持つ。

- ・上流PLANオブジェクト データを送るPLANオブジェクトの名称
- ・下流PLANオブジェクト データを受け取るPLANオブジェクトの名称
- ・フィルター データ変換を行うフィルタープログラムの名称

平成5年度までに検討してきたコントロールフローやPLANオブジェクトの表現方法を踏まえて、さらに今年度検討したデータフローの概念を加えたPLANは以下の3種類のアイテムより構成される。

- ・PLANオブジェクト
- ・コントロールフロー
- ・データフロー

PLANの作成、PLANオブジェクトに関連したデータの入力方法、データの表示方法について述べる。平成4年度以降、PLANの構築や実行、入出力データの参照は、3種類のモジュールで実現される機能として検討されてきた。本年度のシステムは、操作性向上の観点から、PLANの構築、実行、及び、各PLANオブジェクトに関連したデータの参照は、全て1つのインタフェース上に実現することを検討した。

今後は、連成解析に必要なPLANオブジェクトやデータ変換を行うフィルタープログラムについて検討することにより、より広範囲での解析を行える環境を準備していく必要がある。

3. 1. 2 プロトタイピング

3.1.1節のPLAN表現に従って、各PLANオブジェクトを実行するための手順を検討し、その実現性を検証するためにプロトタイピングを行った。

PLANの実行は、コントロールフローの上流側から下流側へと順次PLANオブジェクトを実行することにより行われる。このため、PLANオブジェクトが実行可能かどうかの判断は、該当するPLANオブジェクトが持つ全てのコントロールフローの上流側のPLANオブジェクトが実行済みかどうかを判定することにより行われる。また、PLANオブジェクトがデータフローをもつ場合は、通常はデータ変換プログラムが実行され、その後、PLANオブジェクトに関連付けられた解析コード等の外部プログラムが実行される。

本年度は上記の手順に従ってPLANを実行するプログラムをC++言語を用いてSUN SPARCstation上に製作した。そして、実現性、機能性を検討し、問題がないことを確認した。今後は、PLANの実行を高速に行うため分散環境等に対応したエンジンを検討する必要がある。

3. 1. 3 モジュールの設計

PLAN構築／実行モジュールの高度化仕様に基づき、プロトタイピングの成果を踏まえて、PLAN構築／実行モジュールの設計を行った。PLAN構築／実行モジュールは、操作性や理解力の向上のため、対象となるアイテムに対応したレイヤーや操作モードを用意し、これをユーザが自由に切り替える方式とした。ユーザはこれらのレイヤー、操作モードをで選択することにより、PLANの表示、編集を行う。

3. 1. 4 まとめ

本年度は、より柔軟なPLAN表現を行なうためにデータフローの概念を取り入れPLAN構築／実行モジュールの高機能化に関する検討を行った。そして、その実現性、機能性を確認するため、PLAN実行エンジンのプロトタイピングを行ない、実装上、大きな問題がないことを確認した。

今後は、分散環境上に対応したPLAN実行エンジンの実現性や拡張性について、検討を進める必要がある。

3. 2 分散処理環境に関する検討

複数の現象解析コードを連成した大型の解析を効率的に行っていくための方法として、分散処理手法の導入が考えられる。本節では、連成解析システムのクライアント／サーバ環境、分散処理環境への拡張に関して検討を行った。

3. 2. 1 クライアント／サーバ形式での利用

効率的に大規模な解析業務を行うには、ネットワークで接続された複数の計算機上で同時に複数の解析者が作業を行うことができる環境が必要である。

このような環境を構築する際にはデータの共有化や計算機資源の共有化といった問題が生じる。本節では、特にデータの共有化に焦点をあて、その実現方法について述べる。

データの整合性の管理や計算機のデータの送受信を行うには、クライアント／サーバ対応のデータベース管理システム（DBMS）を利用する。クライアント／サーバ対応DBMSとはクライアントからの要求に従って、サーバが処理を行い、その結果をクライアントに再び返すことを基本動作にしたモデルである。

以上からわかるように、検索条件の入力や検索結果の表示等のユーザのコミュニケーションはクライアント側で、データの検索はサーバ側で行われる。従って、クライアントは解析結果表示等を行うためグラフィック表示能力の優れたコンピュータ、サーバはデータ検索に優れたコンピュータといったように、必要とされる機能に適したコンピュータを配置することにより、コストパフォーマンスの優れたシステムを構築することができる。また、クライアント／サーバ形式の特徴として、処理と通信が完全に分かれているため、サーバ側のコンピュータの機種に依存せずにクライアント側の機種が決定することができ、柔軟性に富んだシステムを構築することができる。

3. 2. 2 マルチCPUによる分散処理環境

マルチCPUによる分散処理環境を検討するために、最初にCAPASAを構築する際に必要となるハードウェア的な側面について述べる。CAPASAの機能は3種類に大別され、それぞれ必要とする計算機的能力が異なる。

(1) PLAN実行機能

PLANを実行する機能。浮動小数点演算が高速な計算機や並列計算機が適する。

(2) データベースのアクセス機能

データベースへのデータの格納、検索を行う機能。ディスクI/Oのスループットが優れた計算機が適する。通常、サーバーマシンと呼ばれるものがこれにあたる。

(3) 解析結果表示機能

解析結果を視覚化する機能。グラフィック性能が優れた計算機が適する。

(4)入力データ作成機能

入力データ等を作成する機能。優れたデスクトップ環境を持つ計算機が適する。

これらの中で最もCPUの能力を必要とし、分散環境における長所が得られるPLAN実行機能について、詳しく述べる。PLAN実行機能は、個々のPLANオブジェクトの実行と解析コードの実行の2つの部分に分けられる。ここでPLANオブジェクトの実行は、多くの部分で並列化できる要素を含んでおり、分散環境での実行に適している。例えば、図3.2.2-1に示したPLANでは、プロセスAとプロセスBは同時に実行することができるため、これらのPLANオブジェクトの実行を、分散環境下で別々のCPUで実行することにより、全体のPLANの実行を単体の計算機で行うより短時間で実行することができる。

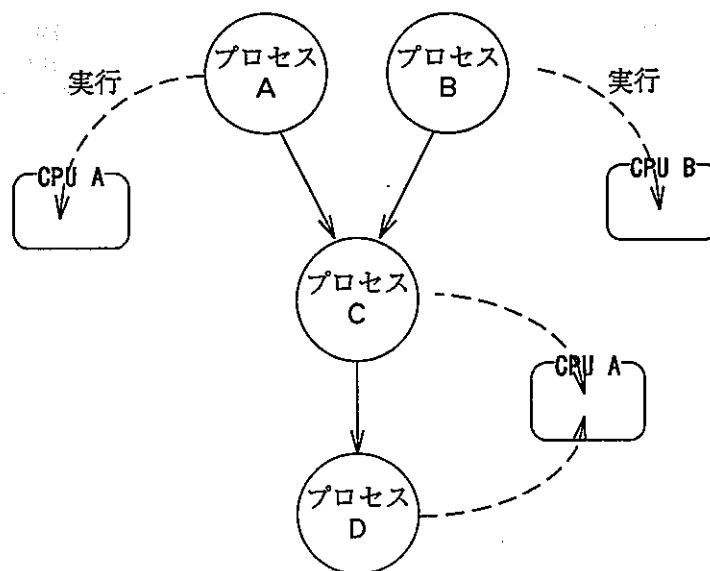


図3.2.2-1 分散環境におけるPLAN実行

3. 2. 3 PNC計算機環境での運用の検討

3.2.2節で述べたように、CAPASAの機能は3種類に大別され、それぞれ必要とする計算機的能力が異なる。このことを考慮しPNC計算機環境でのCAPASAの実装方法を検討した。図3.2.3-1にPNC計算機環境下でのCAPASAの実装例を示す。

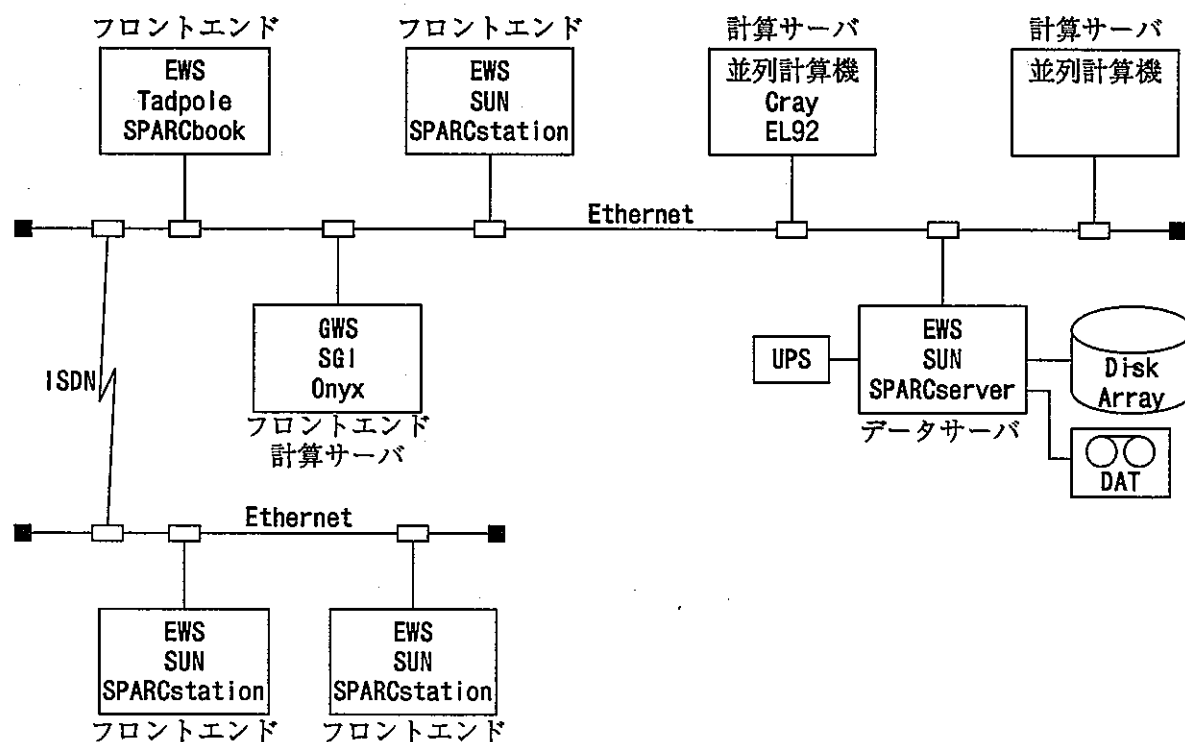


図3.2.3-1 PNC計算機環境下でのCAPASA

3. 2. 4 まとめ

本年度は、複数の現象解析コードを連成した大型の解析を効率的に実行するための方法として、CAPASAの分散処理環境への拡張に関して検討を行った。実際の実装段階では、さらに多くの検討、調査が必要ではあるが、現状では以下の点において分散処理環境が有効であることが分かった。

- ・グループワークを支援する環境として、クライアント／サーバモデルはネットワーク間でのデータ共有やコストパフォーマンスの観点から有効な手段である。

- ・CAPASAの機能を分類し、複数の異なった計算機にそれらの機能を割り当てることにより、解析を効率よく行うことができる。

- ・PLAN実行を複数の計算機上で並列に実行することは、PLAN実行時間を短縮する点では有効である。ただし、PLANオブジェクト実行のためのスケジューリングにはコスト算出方法等の多く課題を残している。

4. 連成解析システム上でのデータ等の管理機能向上のための環境整備

4. 1 機能仕様の検討

4. 1. 1 連成解析システムでのデータの体系的な管理方法について

ここでは、連成解析システムで扱う解析コードやデータを体系的に管理する方法について考察した。

(1) データベースでのデータ格納の考え方

最も簡単なデータ保持方式は、UNIXファイルとして保存するもので、ファイル保存の信頼性は低い、データ保存のための労力（システム開発に要する）は最も少ない。一方、ファイルのまま保存するため、データ量が大きくなる可能性がある。例えば、結果の再計算が容易であるなどデータの重要度が低く、かつ長期間保存する価値のない場合に適した形態である。

次のレベルは、データベースにファイル単位で格納する方式である。この場合には、UNIXファイルとして保存する場合と比べて、ファイルを長期間にわたり高い信頼度で保存可能である。データベースに格納するためには、そのためのデータベース設計を行わねばならず、また、データ量も大きくなるため、特にファイル単位での使用が可能であるもの（例えば、入力ファイルやリスタート・ファイル等）に限るべきであろう。

最もコストの高い方式は、データベースへ構造化して保存する方式である。この場合には、あらかじめ、データベースにクラス構造を定めておく必要がある。また、一度データを格納した後は、データ構造（スキーマ）の変更は、困難な場合もあり、あらかじめ十分な配慮が必要である。

(3) バージョン管理について

バージョン管理は、対象とするオブジェクトの改訂の履歴が重要となる場合に必要となる。例えば、解析コードの機能拡張を考えてみると、プログラムを少しずつ改訂しながら、解析コードが進展するのが通例である。その途中段階にても解析を実行するとすれば、どの段階の解析コードを使用したかにより、解析アルゴリズムに違いが生じることが考えられる。また、解析コードが使用するライブラリ・データも同様であり、ライブラリの改訂があれば、どの時点でのライブラリを使用したかは、解析結果の解釈に大きな意味を持つてくる。

このため、本来その内容が変わりにくいオブジェクトであるが、そのわずかな変更が大きな意味を持つ場合にバージョン管理の必要性が生じることになる。

そのような観点からバージョン管理が大きな意味を持つのは次のデータである。

- ・ プロセス（解析コード、ユーティリティ・プログラム）
- ・ ライブラリー・データ
- ・ 解析／設計データ
- ・ PLAN（入力データ、解析結果、手順）

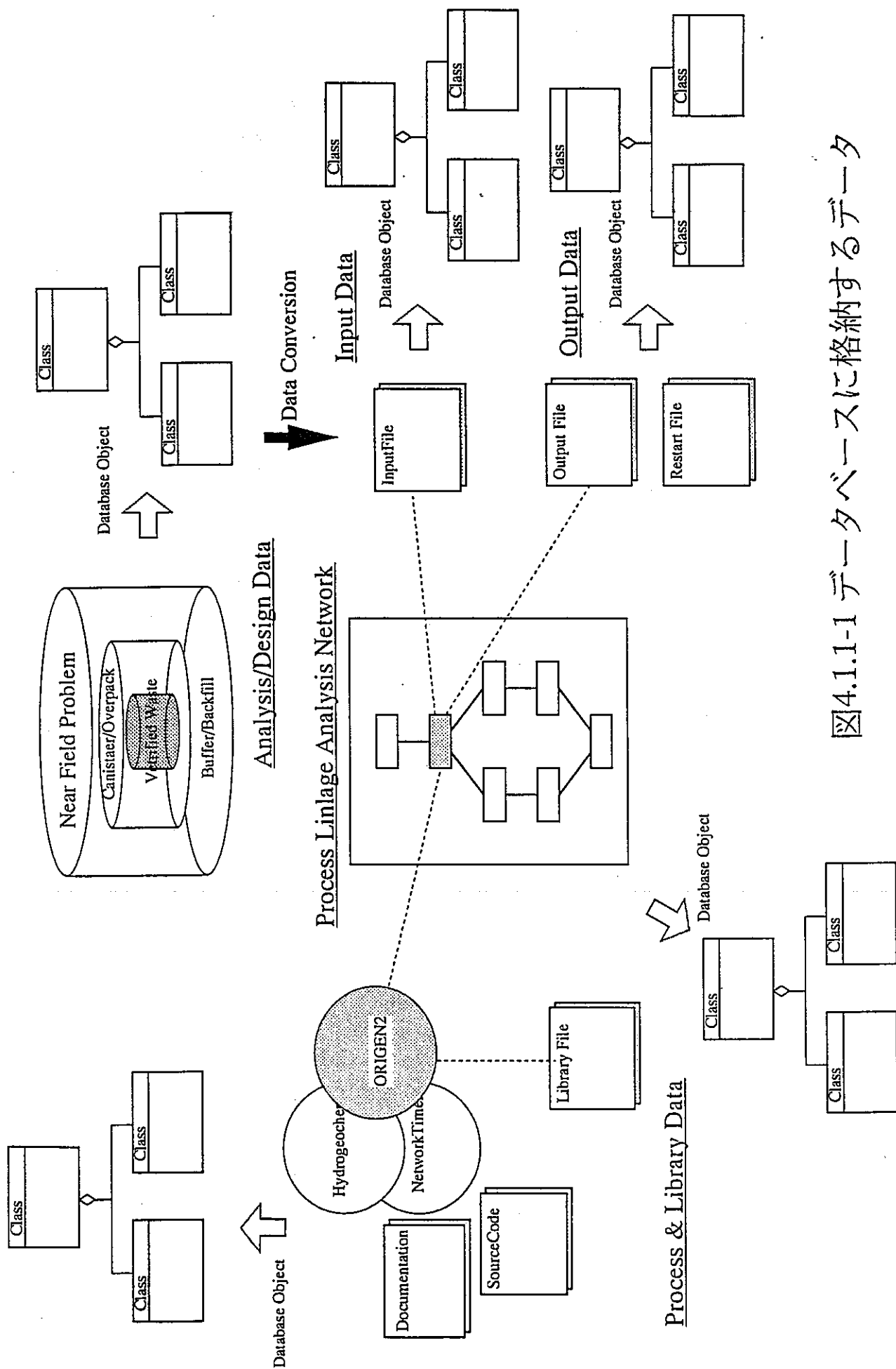


図4.1.1-1 データベースに格納するデータ

4. 1. 2 ユーザ支援環境

解析業務は入力データの作成、解析コードの実行、解析結果の参照といった作業を繰り返し行う。この際、入出力データ、解析コードの管理、データの表示・編集等を効率よく行うことが解析業務を円滑に行う上で重要なポイントとなる。このため、本システムは以下の特徴を持つ。

- ・ 入出力データや解析条件等を表わした情報をデータベースに集中管理することによる再利用性や品質保証の向上
- ・ グラフィカルユーザインタフェースを用いた操作性の優れた環境の提供
- ・ データ編集機能による外部ツールとの連携

この環境はORIGEN2とHydrogeochemの2種類の解析コードと以下の機能を持つ複数のToolから構成されている。

- ・ データ管理機能 データ全体の管理を行う。
- ・ 全体制御機能 解析コードの実行管理やシステム全体の管理を行う。
- ・ 入力データ作成機能 解析コードの入力データや解析条件等を表わした補助情報を作成しデータベースに保存する。
- ・ 出力データ保存機能 解析コードの出力データをデータベースに保存する。
- ・ データ参照機能 解析コードの入出力データをデータベースから検索し、表示する。
- ・ データ編集機能 解析コードの出力データをデータベースから検索し、特定のフォーマットでファイルに出力する。

4. 2 アプリケーションの設計・製作

4. 2. 1 データベース仕様

データベーススキーマを設計し、オブジェクト指向データベース管理システムVERSANTを用いて実装した。

4. 2. 2 ソフトウェア仕様

本システムは図4.2.2-1に示すように6種類のモジュール、2種類の解析コード、及び、5種類のデータストアから構成されている。

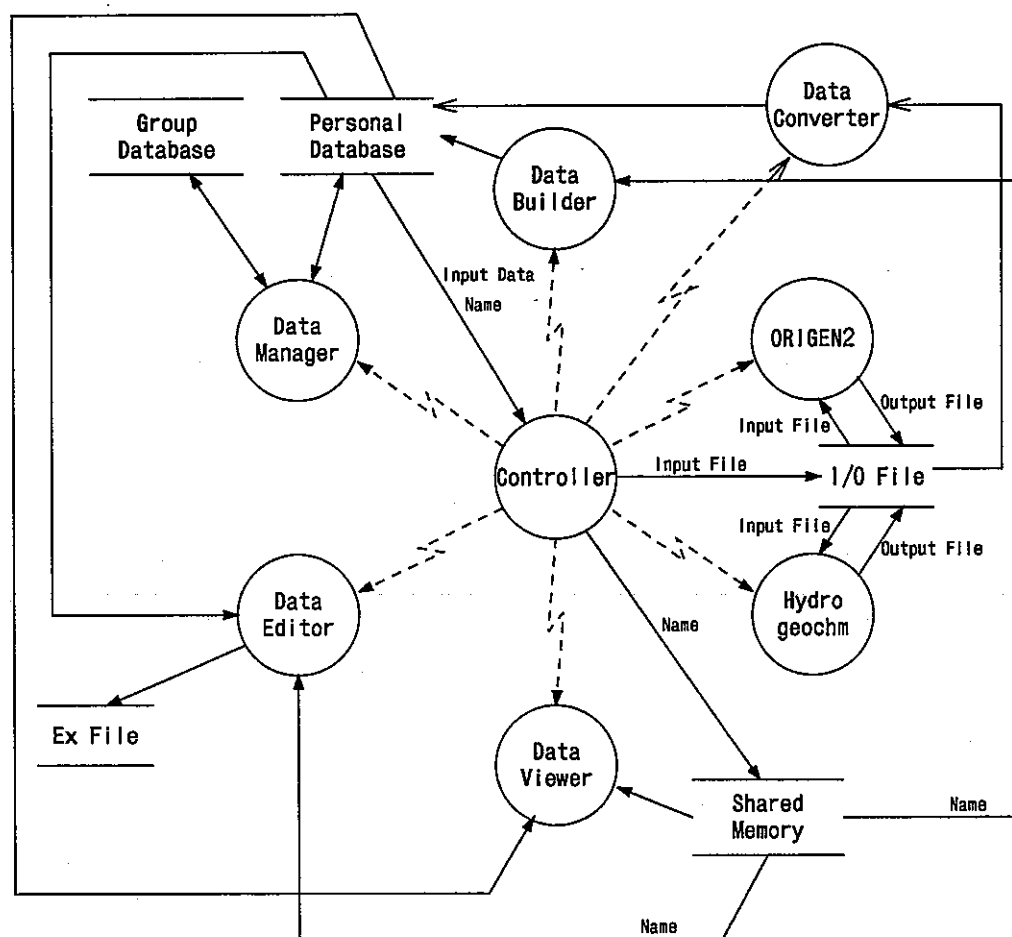


図4.2.2-1 モジュール全体構成

モジュール

- ・ 全体制御モジュール (Controller)

各モジュールの制御やモジュール間で共通で用いられるデータの管理を行う。

- ・ 入力データ作成モジュール (DataBuilder)

補助情報の作成や解析コードの入力データを作成する。

- ・ データ変換モジュール (DataConverter)

解析コードの入出力データをクラス構造に変換し、データベースに保存する。

- ・ データ表示モジュール (DataViewer)

解析コードの入出力データを表形式、グラフ形式、テキスト形式で表示する。

- ・ データ編集モジュール (DataEditor)

解析結果を特定のフォーマットでファイルに出力する。

- ・ データ管理モジュール (DataManager)

パーソナルデータベースとグループデータベースの管理やデータベース内のデータの削除を行う。

解析コード

- ・ ORIGEN2

- ・ Hydrogeochem

データベース

- ・ パーソナルデータベース (Personal Database)

一時的なワーク領域用のデータベース。解析対象となっているデータのみが保存される。

- ・ グループデータベース (Group Database)

永続的なデータベース。パーソナルデータベースのデータが複製されることにより保存される。

- ・ I/Oファイル (I/O File)

解析データの入出力ファイルが一時的に格納される。

- ・ 外部ファイル (Ex File)

外部アプリケーションが用いるファイルを格納する。

- ・ 共有メモリ (Shared Memory)

解析名称等のモジュール間の共通な情報が格納される。

4. 2. 3 動作確認

仕様の基づき、アプリケーションを製作し、動作を確認した。

4. 2. 4 拡張性について

WorkBenchでのデータベーススキーマ構築に当たっては、今後の新規解析コードの取り込みの際の作業量を軽減するため、以下の点を考慮した。

- ・抽象クラスの定義
- ・物性値の保存
- ・汎用的なデータ変換プログラムの開発

5. あとがき

本研究では、ニアフィールドの複合現象を柔軟に解析できる連成解析用計算支援システム（CAPASA）の拡張と高度化を目的として、下記の項目を実施した。

- ・現象解析コード連成における作業内容・基本手順の知識化
- ・連成解析システムの基本フレーム機能の拡充に関する検討
- ・連成解析システム上でのデータ等の管理機能向上のための環境整備

現象解析コード連成における作業内容・基本手順の知識化では、現象解析コードを連成解析システム上で連成させるための基本手順を、これまでの研究で得られた知見を基に、システム分析から連成実現にいたるステップ毎の手順としてまとめた。今後の連成解析システムの拡張を考えた場合には、連成実現のための標準的な手順をより具体的に定めることが重要であり、今後とも、連成実現の経験を積み重ねながら、知識の蓄積と手法の整備を進めて行く必要がある。

連成解析システムの基本フレーム機能の充実にに関する検討では、PLAN構築、PLAN実行モジュールの高機能化に関する検討・設計、分散処理に関する検討を実施した。

PLAN構築、実行モジュールの高機能化に関する検討では、今後の連成解析領域の拡張に関する作業効率と解析業務の効率向上のために、PLAN構築モジュールとPLAN実行モジュールの高機能化をプロトタイピングにより検討した。この結果、PLANにおけるデータフローならびに制御フローの表現について見直し、PLAN表現能力を拡張した高度化仕様を定めることができた。

また、分散処理に関する検討では、複数の現象解析コードを連成した大型の解析を効率的に行うために、分散処理手法の導入について検討した。分散処理環境においては、PLANオブジェクト単位での並列処理により、解析の効率化が期待できるが、そのためにはオブジェクトの実行を制御するためのコントローラの実現が課題となる。

高度化の検討結果をシステムに反映するのは、次年度以降の課題であるが、PLAN構築、実行モジュールについては、本年度に行った設計に従い、システムの実装が可能な段階となった。また、分散処理についても、現行の計算機環境での具体的な検討を実施すべきと思われる。

連成解析システム上でのデータ等の管理機能向上のための環境整備では、ORIGEN2 と HYDRGEOCHEMを対象とし、解析結果の登録、入出力、データのバージョン管理等の機能を拡張し、基本システムにおけるデータ管理機能の向上を図った。データ管理機能については、個別の解析コード固有の問題も多く、今後の連成領域拡張に伴い機能拡張を段階的に進める必要がある。

TABLE OF CONTENTS

1. Introduction	----- 1
2. Methodology Development for Process and Data Acquisition	----- 2
2.1 Review of FY94 PLAN Objects Development Process	----- 2
2.1.1 Work Flow of FY94 PLAN Development	----- 2
2.1.2 Coupling Model Analysis	----- 2
2.2 Basic Procedure for Process and Data Acquisition	----- 5
3. Extension of Basic Frame Function of CAPASA/PCDEE	----- 7
3.1 Design of Advanced PEM/PCM	----- 7
3.1.1 Functional Specification	----- 7
3.1.2 Prototyping	----- 8
3.1.3 Module Design	----- 8
3.1.4 Conclusion	----- 8
3.2 Application of Distributed Processing Technique	----- 9
3.2.1 Utilization of Client/Server model	----- 9
3.2.2 Application of Distributed Environment with Multi CPU	----- 9
3.2.3 Distributed Processing on PNC Computer Environment	----- 11
3.2.4 Conclusion	----- 12
4. Upgrade of PCDEE for improving Data Management Function	----- 13
4.1 Functional Specification	----- 13
4.1.1 Specification of Data Management Function	----- 13
4.1.2 Workbench Environment	----- 15
4.2 Design and Implementation	----- 16
4.2.1 Database Specification	----- 16
4.2.2 Software Specification	----- 16
4.2.3 Testing	----- 17
4.2.4 Extendability	----- 17
5. Summary	----- 18

LIST OF FIGURES

Figure 2.1.2-1 Data Connection Chart of Transport-Chemical-Decay-Flow Analysis

Figure 2.2-1 Basic Procedure for Data and Process Acquisition

Figure 3.2.2-1 PLAN Execution on the Distributed Environment

Figure 3.2.3-1 CAPASA on the PNC Computer Environment

Figure 4.1.1-1 Data in CAPASA System

Figure 4.2.2-1 Overall Architecture

1. Introduction

The Process Control Data Exchange Environment (PCDEE) and Computer Assisted Performance Assessment System Analysis (CAPASA) together form an integrated system for assembling and executing systems of analysis codes and data sets for the purpose of performance assessment (PA) of high-level radioactive waste disposal system.

Studies of processes and coupling have shown that for even simple scenarios a very complex integration of codes and data are needed for a realistic and adequate simulation of expected behavior of high-level waste disposal system over long time periods. The highly complex interactions of many processes which must be analyzed for typical PA problems makes necessary a capability for clear and effective assembly of integrated analysis technique.

In addition to that, such an integrated system must be responsible for Quality Assurance of performance assessment calculation, e.g. improvement in traceability of performance assessment and automation of data connections between processes.

Under these background, we have performed the following tasks to extend and upgrade the CAPASA/PCDEE demonstration system:

- (1) Methodology Development for Process and Data Acquisition
- (2) Investigation of Advanced Specification for CAPASA/PCDEE
 - a. Investigation of Advanced Specification for PLAN Construction and Execution Modules
 - b. Application of Distributed Processing Technique to CAPASA/PCDEE
- (3) Upgrading of PCDEE for Improvement of Data Management Function

2. Methodology Development for Process and Data Acquisition

2.1. Review of FY94 PLAN Objects Development Process

2.1.1 Work Flow of FY94 PLAN Objects Development

As the first step toward a methodology development for process and data acquisition, the work process of FY94 to implement ORIGEN2 and Hydrogeochem coupling calculation was reviewed and summarized.

2.1.2 Coupling Model Analysis

In the previous works, the schematic of the near field performance assessment was developed on the hierarchy of processes needed to analyze based on the groundwater scenario, the primary code recommendations in place of the processes, and the data which needs replacing the representative processes. And the flow diagram of the coupling processes which were shown on the schematic was also developed.

However, these schemata and flow diagram did not present explicitly the control flow of code modules and the data connections. To perform the coupling analysis using the several codes and external data connection, there is the need to clear the approach of modeling the coupling processes.

The objectives of this study is to analyze the connection diagram of codes and data of coupling model.

(1) Classification of analysis data

The contents of analysis and data which are used performance assessment of coupling processes are classified in the view point of a time and a space.

The analysis is divided in a steady state analysis and a transient analysis for a time. For a space, the analysis was classified into a distribution analysis by using the mesh and a pointwise analysis.

The data are considered in a constant data and a time dependent data for a time. For a space, the data are basically distribution data, but the data using pointwise analysis is classified into a point data.

(2) Connection of data for coupling calculation

The method of connecting data external code is summarized according to the classification of analysis and data for a time and a space. The data connection flow is shown as Figure 2.1.2-1. The analysis control module is to control the coupling calculation overall. The data connection is divided into for methods below.

- a. Distribution data connection
- b. Distribution-nodal point connection
- c. Boundary condition connection
- d. Point data connection

(3) Connection of process module for coupling calculation

The connection of module which controls to perform the code is summarized based on the relation of input/output data and the arrangement of code calculation.

(4) Analysis of data flow

The data flow which is intended to calculate the coupled transport, chemistry, hydrology and decay chain case is identified according to data and process module connections.

For the glass waste form, the data relation of input and output are summarized on inventory calculation, decay chain calculation and dissolved calculation. For the transport in a buffer and a rock region, the data relation of input and output are to summarize on calculation of hydrology, transport, chemistry and decay processes.

(5) Function of process module for coupling calculation

The functional diagram of process control module is identified according to the kinds of data supplied, the processing for data exchange and the code control in order to calculate the coupling model.

2.2 Basic Procedure for Process and Data Acquisition

Based on the discussions mentioned above, we have proposed a basic procedure for process and data acquisition as shown Figure 2.2-1. This procedure should be revised through further experience of process and data acquisition in future. The procedure should be defined as a step-by-step process, with which the user of CAPASA/PCDEE can acquire a new process and data easily.

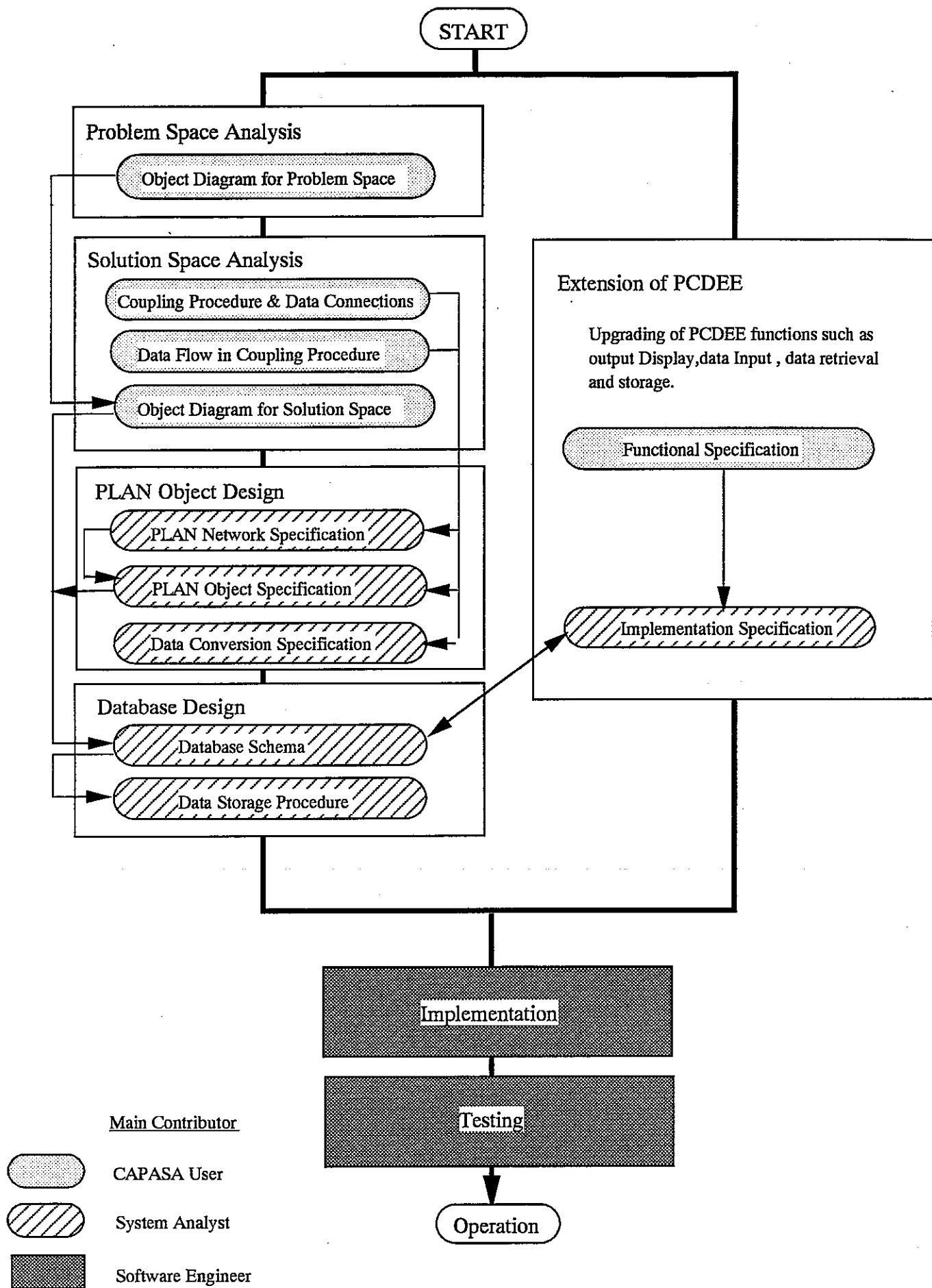


Fig. 2.2-1 Basic Procedure for Data and Process Acquisition

3. Extension of Basic Frame Function of CAPASA/PCDEE

3.1 Design of Advanced PEM/PCM

Extension of the PEM/PCM has been studied to improve the efficiency of the analysis work and the system modification.

3.1.1 Functional Specification

FY94 system had some restrictions in PLAN expression and operation, because it employed AVS. This section describes the result of the study for the extension of PEM/PCM. Problems for PLAN expression and new counter proposal against them are described below.

In the FY94 system, data flow of transport-chemical-hydrology coupling analysis is not expressed explicitly, though control flow is expressed graphically on the user-interface. The data flow is treated as global information for PLAN and is defined in the global information file. Therefore, it is difficult to understand data flow intuitively. The method of data delivery is also not expressed at all in FY94 system. This year, "Data flow" object is introduced as a class of PLAN network component in order to solve these problems.

A Data flow object expresses a data flow among PLAN objects and also method of data delivery. Data flow object should have the following attributes.

- a. Upper PLAN object the name of the PLAN object which sends data
- b. Lower PLAN object the name of the PLAN object which receives data
- c. Filter the name of the program which converts data

Based on discussions mentioned above, the following GUI objects are introduced in the design of advanced PEM/PCM.

- a. PLAN object
- b. Control flow
- c. Data flow

In the previous work, it has been considered that PLAN construction, PLAN execution, and Output display should be implemented as three different modules. However, we judged that the PLAN construction, the PLAN execution, and the Output display should be implemented on the same interface from a standpoint of improving the efficiency of operation.

3.1.2 Prototyping

According to the PLAN expression described in section 3.1.1, procedure of PLAN execution has been designed, and a prototype system has been developed to confirm the feasibility.

The PLAN execution is performed according to executing PLAN objects from upper stream to lower stream of Control flow. Therefore, whether a target PLAN object can be executed or not is judged from inspecting whether all of the upper PLAN objects connected to the target PLAN have been executed or not. If the target PLAN object is linked to a Data flow and a filter program is attached to the Data flow, the filter program is executed, and then an external program such as an analysis code related to the PLAN object is executed.

In this year, the prototype has been developed on a SUN SPARCstation by using C++ programming language. And it has been concluded that there is no problem in the realization and the functional specification.

3.1.3 Module Design

According to the functional specification of the PEM/PCM and the prototyping, the PEM/PCM has been designed. The PEM/PCM provides three layers related to target items and operation modes. The PEM/PCM allows users to display and edit PLAN by selecting the layers and the modes.

3.1.4 Conclusion

In this year, the concept of Data flow has been adopted to extend PLAN expression and the extension of PEM/PCM has been studied. Prototype of PLAN execution has been developed to recognize the realization and functionality. It has been concluded that there is no problem in the implementation.

In future, the realization and extendability of PLAN execution for distributed environment should be studied.

3.2 Application of Distributed Processing Technique

Distributed processing technique may be effective for performing large scale coupling analysis efficiently. This section describes application of client/server model and distributed processing technique to coupling analysis.

3.2.1 Utilization of Client/Server model

Environment where users can use computers connected by a network at the same time is necessary to perform large scale analysis efficiently. But there are some problems such as data and computer resource sharing when the environment is developed.

In this section, implementation method is described with emphasis on data sharing.

Database management system (DBMS) for client/server model is utilized to manage data consistency and to deliver data from a computer to another computer. Basic function of the DBMS for client/server model is that a server performs data processing according to requirement from a client and sends result of the data processing, and a client receives the result from the server and displays it.

As mentioned above, the client must provide user communication such as input of retrieval condition and display of data, and the server must perform data processing such as retrieving. Therefore, a computer which has good ability to display graphics is appropriate for the client, and a computer which has good ability to retrieve data is appropriate for the server. By locating computers suitable for necessary functions, system superior in cost can be created. Also, by adopting client/server model, computer model of a client can be decided independently of computer model of a server. Therefore, system superior in extendability can be created.

3.2.2 Application of Distributed Environment with Multi CPU

Requirements for computers are different for different functions of CAPASA system. Here the requirements for major three functions of CAPASA are summarized.

(1) PLAN execution

This function is to execute PLAN. Computer with high FPU or parallel machine is appropriate.

(2) Database access

This function is to store data in a database and retrieve data from the database. A computer with high I/O performance is appropriate. A computer called "server machine" ordinarily has the characteristics.

(3) Output display

This function is to visualize output of analysis codes. Computer with good graphic

performance is appropriate.

(4) Input data editor

This function is to edit input data. A computer which has good deskset tools is appropriate.

PLAN execution which needs CPU power will derive benefit from the distributed environment. PLAN execution is classified into two parts, execution of PLAN and execution of analysis codes. The execution of PLAN has much possibility of parallel processing and is appropriate to the distributed environment. For instance, PLAN shown in Figure 3.2.2-1 has Process A and Process B which can be executed simultaneously.

In this case, execution time of the PLAN on the distributed environment is shorter in comparison with single CPU system, if Process A and Process B are executed in parallel.

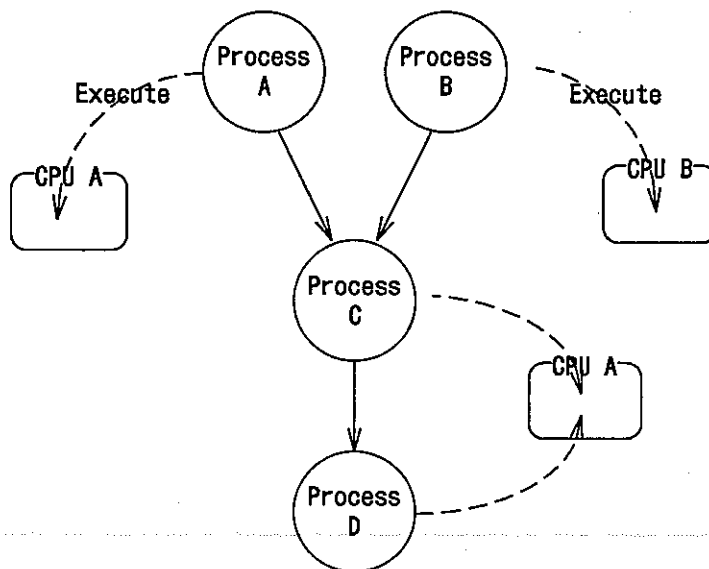


Figure 3.2.2-1 PLAN execution on the distributed environment

3.2.3 Distributed Processing on PNC Computer Environment

As mentioned in Section 3.2.2, requirements for computers are different for each CAPASA functions. Considering these requirements, implementation of CAPASA on PNC computer environment has been investigated. Figure 3.2.3-1 shows an example of the implementation of the PNC computer environment suitable for CAPASA..

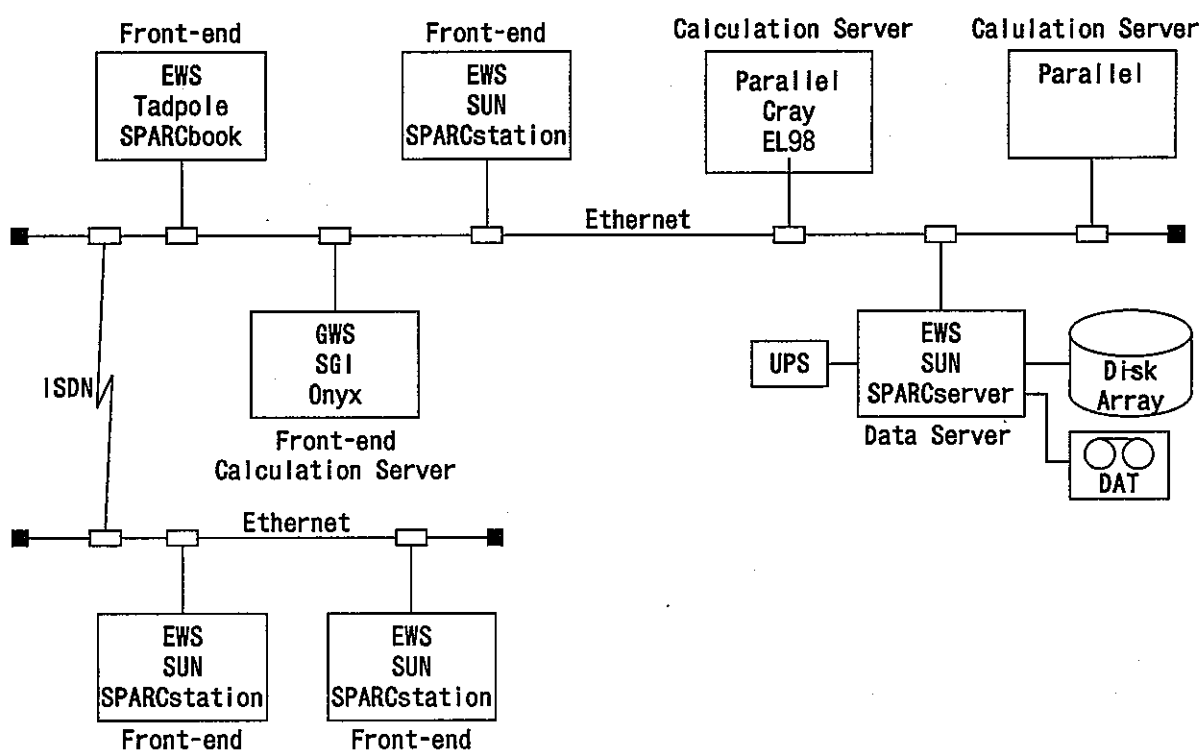


Figure 3.2.3-1 CAPASA on the PNC Computer Environment

3.2.4 Conclusion

Application of CAPASA on the distributed environment has been studied to improve efficiency of large scale analysis which couples analysis codes. It has been concluded that the distributed environment is effective on the following points.

- a. Client/Server environment which supports group-work is effective from a view point of data sharing and cost performance.
- b. To classify functions of CAPASA and allocate these functions on appropriate computers is effective to improve efficiency of analysis work.
- c. Parallel execution of PLAN objects will reduce the execution time. Some problems such as cost evaluation for scheduling of PLAN objects execution.

4. Upgrade of PCDEE for Improving Data Management Function

4.1 Functional Specification

4.1.1 Specification of Data Management Function

The following data are identified as ones which should be stored into CAPASA database:
(see Figure 4.1.1-1)

- a. "Process" Data
- b. PLAN (Process Linkage Analysis Network) Data
- c. Input Data
- d. Library Data
- e. Output Data
- f. Design Data

(1) Data Storage

There are three levels of data storage approach in CAPASA.

The simplest approach is to store data as UNIX files. The data will be retrieved by specifying its directory and file name. The reliability of this approach is rather low but the cost is cheap. This approach is appropriate to data storage in a short time.

Next simple approach is to store one UNIX file into database as a binary data. This approach allows CAPASA users for long-term data storage with high reliability. This approach will be justified, only if the file is likely to be used as a whole, e.g. restart files.

The most expensive approach is to store data into data structures of database. Well-designed data objects in Object-Oriented database can provide invariable and easy-to-understand data structures with CAPASA users.

(2) Versioning

Version management is a function to keep track of the history of data update. In order to verify the result of past analysis, it is necessary to identify what codes and data were used in the past calculation. So, the version management function is essential to quality assurance of performance assessment.

We have discussed the specification of version management necessary for CAPASA, and for what data the version management is necessary. It has been concluded that version management is especially important to the following data item:

- Process
- Library Data
- PLAN (including input and output data)
- Design Data

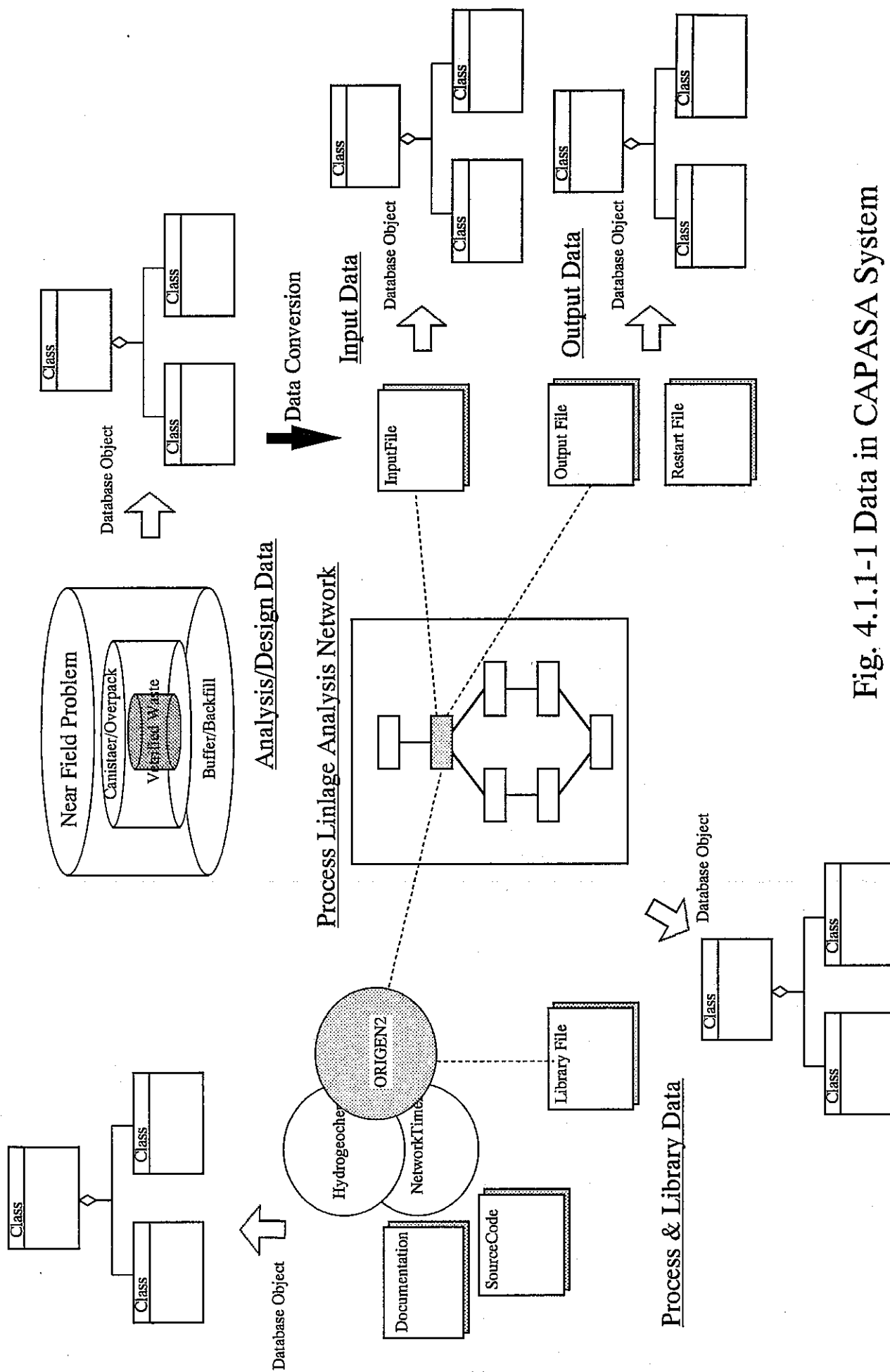


Fig. 4.1.1-1 Data in CAPASA System

4.1.2 Workbench environment

Analysis work consists of three work: editing input data, execution of analysis codes, and displaying output data and these work should be performed repeatedly and efficiently.

Environment where users can manage input/output data and analysis codes, and display and edit data efficiently is important for performing the analysis work smoothly. Therefore, Workbench environment is essential to the following characteristics.

- a. Improvement in reusability and quality by storing information such as I/O data and analysis condition in a database.
- b. User-friendly environment with graphical user interface.
- c. link to external tool.

The Workbench consists of two analysis code, ORIGEN2 and Hydrogeochem, and several tools which have the following functions.

- a. Data management function - manages all data.
- b. Control function - controls execution of analysis codes and the whole system
- c. Data input function - creates input data of analysis codes, auxiliary information describing analysis condition, and stores these data in a database
- d. Data reference function - retrieves input/output data of analysis code and display them.
- e. Data edit function - retrives output data from the database and prints out to a file in the form of special format.

4.2 Design and Implementation

4.2.1 Database Specification

Database schema has been designed and created with object-oriented database management system VERSANT.

4.2.2 Software Specification

Top-level data flow diagram of Workbench is shown in Figure 4.2.2-1. The Workbench consists of six modules, two analysis codes, and five data stores.

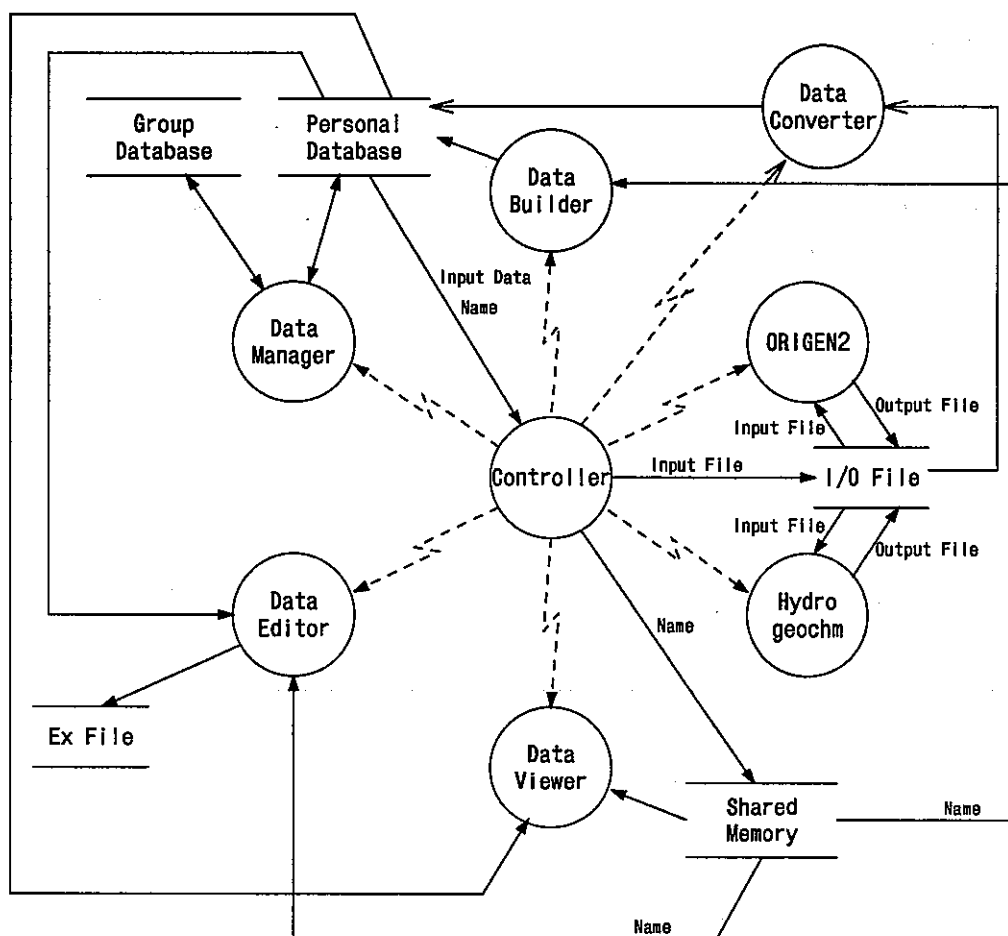


Fig4.2.2-1 Overall Architecture

Modules

a. Controller

Controller controls modules and manages commonly used data by modules.

b. DataBuilder

DataBuilder creates auxiliary information and input data of analysis codes.

c. DataConverter

DataConverter converts input/output data of analysis codes into class structures and stores them.

d. DataEditor

DataEditor prints out to a file in the form of special format.

e. DataManager

DataManager manages personal databases and group databases and deletes data in databases.

Analysis Code

a. ORIGEN2

b. Hydrogeochem

Database

a. Personal database

Personal database is a temporary database for working area.

b. Group database

Group database is a persistent database. Data in the Group database is created by duplicating data in the Personal database.

c. I/O file

I/O file stores input/output data of analysis codes temporarily.

d. Ex file

Ex file stores files used by an external application.

e. Shared memory

Shared memory stores information such as the name of the analysis which is used in common.

4.2.3 Testing

According to the specification, the Workbench has been implemented and tested.

The Workbench has been verified and confirmed to work correctly.

4.2.4 Extendability

The following items has been considered in order to build a new analysis code into CAPASA easily.

- a. introduction of abstract class in database schema.
- b. storage of material properties.
- c. development of general program to convert data.

5. Summary

In this study, the following tasks have been performed in order to extend and upgrade the CAPASA/PCDEE demonstration system:

- (1) Methodology Development for Process and Data Acquisition
- (2) Investigation of Advanced Specification for CAPASA/PCDEE
 - a. Investigation of Advanced Specification for PLAN Construction and Execution Modules
 - b. Application of Distributed Processing Technique to CAPASA/PCDEE
- (3) Upgrading of PCDEE for Improvement of Data Management Function

Procedure for incorporating new codes into CAPASA system was summarized into a series of step-by-step processes based on lessons from PLAN object's design so far. A standardized process is mandatory for effective maintenance of CAPASA system. We must refine the methodology through experience of new process acquisitions.

In order to improve the flexibility of PLAN object's design and GUI usability, advanced specification for PLAN construction and execution modules was investigated. New PLAN network specification allows the user to use data flows as well as control flows to define a Process Linkage Analysis Network.

Application of distributed computation techniques has been discussed as a promising approach to improving computing efficiency. It was concluded that the concurrent execution of PLAN objects could be a practical approach of reducing the computing time of complicated PLAN, if an efficient scheduler to control concurrent execution of PLAN objects could be realized.

The demonstration CAPASA system has been upgraded from a practical point of view. Data storage function, data retrieval function and version management function for data, process and PLANs have been re-designed by considering the use of ORIGEN2 and Hydrogeochem upon the CAPASA system. Since necessary data management functions are dependent on the usage of analysis codes, the management functions should be revised step by step according to the expansion of the problem field of CAPASA.