

地層処分システム性能評価の 品質保証に関する研究

(動力炉・核燃料開発事業団 研究委託内容報告書)

－ 研究概要 －

1997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

地層処分システム性能評価の品質保証に関する研究

前田 一人^{*2}、房枝 茂樹^{*1}、片岡 伸一^{*3}、根本 和明^{*2}
柳沢 一郎^{*1}、福井 裕^{*2}、土井基尾^{*2}、有川 浩^{*3}
上田 憲明^{*1}

要 旨

本研究では、性能評価で用いる解析コード及びデータを対象として、それらの品質を保証するための手順と品質に関する情報の管理・運用手法について、地層処分システムの性能評価結果の信頼性の保証という観点からの検討を行う。本年度は、地層処分システムの性能評価で考慮すべき品質保証項目に対する品質保証の手順を、国内外での品質保証の実績等を踏まえて整理するとともに、解析コードの検証手法やデータの分類手法を以下のとおり検討した。

(1)品質保証項目の抽出と既存の品質保証手法の調査・整理

- ・原子力分野、航空宇宙分野、YMP、WIPPの品質保証要求事項を調査・整理した。
- ・データ、解析コードの利用に於いて、エラー防止と品質保証の観点から確認を行うべき項目を抽出した。

(2)品質保証手続きのフレームワークの作成

- ・抽出した品質保証項目を確認項目と記録項目に分類し、性能評価解析における要求事項を管理フローとして示した。
- ・管理フローに基づき、計算機システムへ展開した場合における品質管理システム構築のための基本要件について検討した。

(3)解析コードの検証方法の構築

動燃殿のニアフィールド性能評価コードである、MESHNOTE、PHREEQE、MATRICSを対象とした検証マニュアルを作成した。さらに、検証結果を判定するための基準ならびに適用範囲の設定方針について検討した。

(4)データの分類管理手法の構築

- ・データの取得から処理段階の全過程のデータ管理を行うため、取得方法や中間処理方法及び信頼性に基づいたデータの階層構造を構築した。
- ・上記で構築した階層構造及びデータの性能評価計算への影響度を考慮したデータベース構造を検討した。

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：080D0314

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 石原義尚

*1:原子力プラント技術部 新製品開発課

*2:原子力プラント技術部 新型炉計画課

*3:新型炉・燃料サイクル技術部 ウェストシステム技術課

目 次

1. ま え が き	1
2. 品質保証項目の抽出と既存の品質保証の調査・整理	2
2.1 品質保証項目の抽出	2
2.1.1 コード開発／改良／運用時の品質保証項目	2
2.1.2 データの品質保証項目	7
2.2 品質保証手法の調査	9
2.2.1 原子力分野における品質保証	9
2.2.2 航空・宇宙分野における品質保証	9
2.2.3 ユッカマウンテンの品質保証	10
2.2.4 W I P P の品質保証	11
2.3 品質保証項目の整理	14
2.3.1 抽出した品質保証項目の網羅性	14
2.3.2 品質保証手続き構築のための整理	14
3. 地層処分システムの性能評価のための品質保証手順の検討	17
3.1 品質保証手続きのフレームワークの作成	17
3.1.1 フレームワークの設定方針	17
3.1.2 フレームワーク	17
3.1.3 計算機イメージの作成	19
3.2 解析コードの検証手法の構築	21
3.2.1 検証マニュアルの作成	21
3.2.2 判定基準の設定方針の検討	21
3.3 データ分類管理手法の構築	23
3.3.1 分類管理基準の検討	23
3.3.2 データ階層構造	25
3.3.3 他研究との整合性の確認	29
4. あ と が き	30
謝 辞	32

図 表 目 次

表 2.1.1-1 一般の品質保証プログラムにおける要求事項	5
表 2.1.1-2 コード開発／改良／運用時の品質保証項目	6
表 2.1.2-1 データの品質保証項目	8
表 2.2.3-1 ユッカマウンテンの品質保証項目	12
表 2.2.4-1 W I P P の品質保証項目	13
表 2.3.1-1 品質保証項目の網羅性の確認	15
表 2.3.2-1 性能評価研究における品質保証手続き（作成資料の役割）	16
図 3.1.2-1 全体フレームワーク	18
図 3.1.3-1 計算機イメージ	20
図 3.3.2-3 品質に基づくデータの階層構造	26

1. まえがき

本研究では、性能評価で用いる解析コード及びデータを対象として、それらの品質を保証するための手順と品質に関する情報の管理・運用手法について、地層処分システムの性能評価結果の信頼性の保証という観点からの検討を行う。それらを具体的に性能評価の枠組みに含まれる解析コードやデータに適用するために、既存の研究の成果である解析管理システムを基盤として、第2次取りまとめに反映できる品質保証のプログラムを整備し、評価結果の信頼性を保証する総合的な品質保証システムを開発することを目的とする。

以上の目標に基づき、本年度は、地層処分システムの性能評価で考慮すべき品質保証項目及びその項目に対する品質保証の一般的な手順を、動力炉・核燃料開発事業団殿（以下、事業団殿）における性能評価の枠組み及び国内外での品質保証の実績等を踏まえて整理するとともに、性能評価結果の信頼性を保証する観点からの解析コードの検証手法やデータの分類手法の検討を行う。

2. 品質保証項目の抽出と既存の品質保証の調査・整理

JIS Z 9900では、品質保証の規格を示しており、品質及び品質保証を定義している。これを、解釈すると品質保証とは、品質を確認するものに、どのような特性が完備されているかについて計画的かつ体系的に確認することと理解できる。

さらに、原子力委員会からは、“高レベル放射性廃棄物の地層処分研究開発等の今後の進め方について（案）”（平成8年11月）が提示されており、この添付資料においては、解析の品質を解析コードとデータに分けて定義している。

したがって、解析の品質保証を行う際には、解析コードとデータに対して、品質保証の体系を構築することが要求されると考えられる。そこで、本研究では、解析コードと解析に使用するデータに分けて、エラー要因分析を行い、品質の確認を実施すべき対象事項/確認を実施すべき対象物（品質保証項目）を整理することにより、品質保証体系であるフレームワークを構築する。

2.1 品質保証項目の抽出

ここでは品質を確認するソフトウェア及びデータに対して、確認の対象物となる物を抽出する。以下では、コードの開発／改良、運用時に分け、品質保証項目抽出の考え方と抽出結果について述べる。

2.1.1 コード開発／改良／運用時の品質保証項目

(1) コード開発／改良時の品質保証項目

a. 抽出の考え方

コード開発作業は、コードに対する計画作業、設計作業、製作作業、検証作業に大きく分類される。これらの具体的な作業は、それぞれ開発内容によって異なっており、容易に品質保証項目を抽出することは困難である。

そこで、本研究では、以下のソフトウェアの品質保証標準類に基づき、これら全てを包括するよう、品質保証項目を抽出する。

- ・ M H I におけるソフトウェアの品質保証
- ・ I S O - 9 0 0 0 におけるソフトウェアの品質保証

さらに、ソフトウェアについての品質保証ではないが、解析コードを製品として置き換えた場合の次の規格の品質保証についても合わせて調査し、品質保証項目として漏れのないよう検討する。

- ・ J I S 規格で定める品質保証
- ・ J E A G で定める品質保証

b. 抽出結果

表2.1.1-1は、上記の調査における品質管理を一覧表として整理したものであるが、MHIの品質管理は、基本的にJISやJ E A G、ISOなどの一般規格を包括している。

そこで、コードの開発時の品質保証項目を、MHIの品質管理をもとに、各管理段階毎に抽出する。抽出結果を、後述する“(2)コード運用時の品質保証項目”と合わせて表2.1.1-2に示す。

(2)コード運用時の品質保証項目

a. 抽出の考え方

性能評価解析では、以下に示すエラー要因が特徴として考えられ、コード運用時には、これらのエラー要因を排除する必要がある。

- ①超長期に渡る予測解析（誤差の蓄積等）
- ②核種濃度やフラックス等核種移行計算の出力値は非常に小さい。
（アンダーフローや丸め誤差等）
- ③複数のコードの連続的運用（データの一貫性、単位換算）
- ④天然現象モデルの選定と妥当性確認
- ⑤複合現象モデルの妥当性確認
- ⑥物理・化学データのバラツキ

これらのエラー要因は、解析コード開発からデータ取得・運用までの各ステップに内在し、コードの入出力情報に集約される。このため、コード運用時の品質保証項目には、ヒューマンエラーが重要な因子と考えられる。

そこで、以下では、上述の①～⑥のエラー要因にヒューマンエラーを加え、コード運用時の実績に基づくエラー要因の検討を行うとともに、品質保証項目を抽出する。

b. エラー要因分析と品質保証項目

以下の手順にて、コード運用時において考え得るエラーの発生要因を検討し、エラーを低減するための確認事項と品質保証項目を抽出する。

- 1)コード運用実績に基づくエラー発生事例の抽出
- 2)エラーが発生した原因（エラー要因）の分析
- 3)エラー要因を排除するための確認項目（品質保証項目）と対策の検討
- 4)品質保証マニュアルの概要等の具体的な作業へ展開

この考え方にに基づき品質保証項目を抽出すると、計算モデルや入力デー

タの設定根拠などを記載した計算書の他、解析計画書、入出力データが品質保証項目となる。

MHIの品質保証プログラム、性能評価コード運用時の情報に基づき抽出したコード開発、改良、運用時の品質保証項目を表2.1.1-2に示す。また、合わせて、それぞれの品質保証項目に対する品質特性を示す。個々の品質保証項目は、合目的性、正確性などの品質特性を担保しており、解析コードと解析結果に対して、これらの品質が確認できる結果となっている。

表2.1.1-1 一般の品質保証プログラムにおける要求事項

管理項目	MH I	J I S	ISO9000	J E A G
計画管理	開発計画書の作成	○	○	○
	関連部門のレビュー	○	○	○
設計管理	設計仕様書の作成	○	○	○
	関連部門のレビュー	○	○	○
製作管理	ソフトウェアの開発	○	○	○
	使用説明書の作成	×	○	○
	関連部門のレビュー	×	○	×
検証管理	検証結果の文書化	○	○	○
	関連部門のレビュー	○	○	×
出荷管理	検査報告書の作成	×	○	○
不適合管理	管理要領の策定	○	○	○
形態管理	バージョン管理	○	○	○
	文書の改訂管理	○	○	○
登録及び通知	管理台帳作成	○	○	○
使用管理	使用前の機能確認	×	×	×
	機密管理の実施	×	×	×
保管管理	保管要領の策定	×	×	×
調達管理	調達管理要領の遵守	○	○	○
廃棄管理	管理台帳への記録	○	○	×

表2.1.1-2 コード開発/改良/運用時の品質保証項目

管理項目	要求される確認内容	品質保証項目	品質特性
計画管理	<ul style="list-style-type: none"> ・ ユーザー要求の分析と定義化 ・ 開発計画の確認 (アプローチ方法、工程、体制等)	要求仕様書 開発計画書	合目的性 相互運用性
設計管理	<ul style="list-style-type: none"> ・ 設計範囲、コーディング方針・方法を明確化 	設計書	効率性 使用性
製作・実装管理	<ul style="list-style-type: none"> ・ 正常機能の確認 ・ 単位換算等の誤操作防止 	インストール報告書 機能・操作説明書	
検証／確証管理	<ul style="list-style-type: none"> ・ 数値誤差、適用範囲等の明確化 ・ 現象モデルの正確さ 	検証／確証計画書 検証確証完了書 検証／確証報告書	正確性 移植性
構成管理	<ul style="list-style-type: none"> ・ バージョン管理（解析コード、文書） 	管理台帳 不適合管理	使用性、追跡性 効率性、再現性
運用管理	<ul style="list-style-type: none"> ・ 影響評価管理 ・ 入出力データ確認 	解析計画 入力データ 解析結果	正確性 信頼性

2.1.2 データの品質保証項目

性能評価解析に用いるデータには、燃料条件や処分環境を示した幾何学条件などの解析上の設定条件となる入力データの他、室内試験や原位置試験から得られる試験データと、P H R E E Q Eから導出される溶解度等のような性能評価解析（連成解析）から導出される解析データが存在する。

そこで、ここでは、(1)試験データと(2)解析データの2つについて、品質保証項目を抽出する。

(1)試験データの品質保証項目抽出の考え方

室内試験や原位置試験から得られるデータは、試験を実施し測定値（1次データ）を得て、これを物理化学的に意味を持つ公知の値に変換（加工）することにより、溶解度や分配係数などの一般的な値（データ）となる。さらに、性能評価解析においては、これら一般的な値を収集（登録）し、これらの中から技術的に妥当であるとしたデータを解析コードに入力（選択）する。

そこで、試験データの品質保証項目を抽出するに当たっては、測定値の取得～解析コードへの入力までの次の段階に分け、コード運用時と同様にエラー発生要因を検討し品質保証項目の検討を行なう。

- ① 1次データの取得段階
- ② 1次データの加工段階
- ③ データ登録段階
- ④ データ選択段階

(2)解析データの品質保証項目抽出の考え方

解析データは、種々のデータを組み合わせて導出されるデータである。そこで、解析データの品質保証項目を抽出するに当たっては、データの構成要素を分析し、それぞれの構成要素に対する品質保証項目を検討する必要がある。

性能評価解析で取り扱う最も複雑な溶解度を対象とした場合、P H R E E Q Eから導出される溶解度は、熱力学データベースと原位置試験データ、室内試験データ、前段階の解析データから構成されている。

原位置試験データと室内試験データの品質保証項目は、前項(1)の試験データの品質保証項目であり、熱力学データは、試験データから導出されるものであるため、これについても品質保証項目は試験データのものと同等である。

したがって、解析データの品質保証項目は、用いられているデータに対する試験データの品質保証項目となる。

以上の考え方にに基づき、データの品質保証項目を抽出すると表2.1.2-1となる。

表2.1.2-1 データの品質保証項目

段階	要求される確認内容	品質保証項目	品質特性
1次データ取得	<ul style="list-style-type: none"> ・実験目的の理解徹底 ・実験者の訓練 ・実験方法の標準化 ・試験環境/条件の明確化 	①実験計画書 ②試験方法標準 ③試験報告書	合目的性 正確性 再現性
1次データ加工	データ変換算出根拠の明確化	④算出根拠書 ⑤技術資料	追跡性 一貫性
データ登録	<ul style="list-style-type: none"> ・データ補助情報の明確化 ・データの誤処理防止 	⑥データ補助情報 ⑦データベース	使用性 効率性
データ選択	データの選定プロセスの明確化	⑧スクリーニング基準	追跡性

2.2 品質保証手法の調査

本項では、2.1項で摘出した品質保証項目の妥当性を確認するため、以下の設計解析分野に用いられている品質保証手法を調査した。

1) 高度な解析が要求されている原子力分野、航空・宇宙分野

2) 実際の地層処分施設の品質保証手法を調査する目的からユッカマウンテン、WIPP

以下に調査結果について述べる。

2.2.1 原子力分野における品質保証

原子力分野の品質保証手法は、JEAGにより定められている他、品質保証計画策定指針（JEAG 4102）と設計管理指針（JEAG 4104）にて、コード運用段階の品質保証として、次のことを設計解析書に記載するよう要求している。

① 解析の目的

② 解析の方法

③ 解析する上で設定した仮定及び条件

④ 設計要求事項

⑤ 参考にした資料及びデータ

⑥ コンピュータのプログラム、インプット及びアウトプット

⑦ 単位系

さらに、安全審査においても解析結果の信頼性を向上させるため、解析に使用するデータや解析コード、安全性の判断基準などについて安全審査指針が原子力委員会から示されている。

2.2.2 航空・宇宙分野における品質保証

本項では、航空・宇宙分野で用いられている設計解析に関する品質保証方法として、NASAのプログラムを調査した。

NASAではソフトウェアの品質を保証するため、次の事項を要求している。

① どのソフトウェアが安全上、重要であるか安全解析により確認すること。

② 安全解析により、性能に影響する要素を確認すること。

③ ソフトウェアの設計と作成は、安全上の要求事項に適合すること。

④ ソフトウェアの検証／確認は、安全性の要求を満足するものであることを確認すること。

⑤ ソフトウェアの試験計画と手順は、検証を行うための要求事項を満足すること。

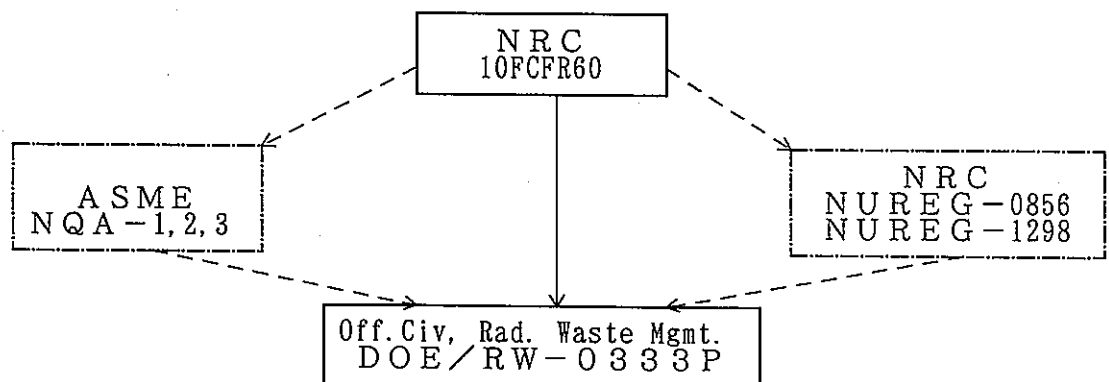
これらの最初のステップはソフトウェアの品質保証計画を策定することであり、ソフトウェアのライフサイクルの各段階を通して要求事項が文書化され、実行されている。そして、エラーが発見されれば修正が行われる。さらに、NASAでは、安全解析に基づいてソフトウェアをクラス分け（重要度分類）している。

NASAの品質保証プログラムはISO-9000に準拠しており、MHIの品質保証項目がISO-9000を包括するものであることから、本研究で抽出したコード開発／改良時の品質保証項目と、次のとおり、大差ない結果となる。

- ・ 要求仕様書
- ・ 開発計画書
- ・ ソフトウェア設計書
- ・ インストール報告書
- ・ 取扱説明書
- ・ 検証計画書
- ・ 検証報告書

2.2.3 ユッカマウンテンの品質保証

10CFR60では、品質保証を実施することを定めている他、ユッカマウンテンに対しては、米国エネルギー省（DOE）のOCRWM（Office of Civilian Radioactive Waste Management）から品質保証に関して要求事項がまとめられている。この要求文書（DOE/RW-0333P）は、次図のとおり、米国の規制、ガイドラインを統合化したもので、ユッカマウンテンにのみ適用されるものである。



■ ; 規制

□ ; ガイドライン

上図のASME NQA-1では、品質保証の全般事項を、NQA-2ではソフトウェアの品質保証事項を述べている。また、NQA-3ではデータの収集に関する要求を述べている。

NAREG-0856, 1298も同様に、NRCからガイドラインとして提示されたソフトウェアとデータに関する品質保証の要求事項である。

これらの要求事項をまとめ、DOE/RW-0333Pがユッカマウンテンの品質保証要求事項として作成されている。DOE/RW-0333Pにおけるソフトウェアとデータの品質上の要求事項と保証項目を表2.2.3-1に示す。

2.2.4 WIPPの品質保証

WIPP (Waste Isolation Pilot Plant) の品質保証プログラムは、主にNQA-1, 2, 3の要求事項を満足するよう、作成されており、概ね、ユッカマウンテンの品質保証プログラムの要求事項と大差ない。

また、WIPPはDOEに管理責任があり、安全審査は米国環境保護庁 (EPA) が行っている。さらに、性能評価解析はSNL (Sandia National Laboratory) が実施しており、性能評価解析の品質について申請している。

DOEからは、品質保証上の要求事項として品質保証プログラム (CA0-94-1012) を作成している。この品質保証プログラムの特徴は、一般的に管理対象物をクラス分類し、各クラスの重要度に応じて、管理レベルを変えて管理を行っていることである。

CA0-94-1012の品質保証上の要求事項と品質保証項目をまとめると表2.2.4-1となる。

表2.2.3-1 ユッカマウンテンの品質保証項目

	確認事項	文書内容の要求	品質保証項目
モデル	①モデルの開発内容が文書化 ②数学的再現性があること	①モデル開発内容	①モデル選定根拠 ②数学モデル
開発改良	①文書に右記の内容が記述されていること	①(機能要求情報) ソフトウェアの特徴と目的、使用上の要求事項 (取扱情報) 入出力オプション、データファイル、入出力データ、デフォルト、ファイルフォーマット、エラーと対応、ハード/ソフトウェア環境、サンプル問題、インストール手順 (要求仕様と設計仕様) 性能要求と設計条件、外部データ及びハード/ソフトのインターフェイス、言語バージョン、メンテナンス性、信頼性、効率 機能要求に対する物、内部インターフェイスや制御ロジック、データ構造・フローなどのソフトウェア構造、モデルと数学手法、ソースコード	①機能要求情報、ユーザー情報、設計情報
検証	①要求事項が満足されていること	①検証内容、検証方法、検証を達成したことの許容基準、結果	①検証問題、方法終了基準、許容基準
確証	①実験データなどとの比較、レビューを行うことにより確認	①確証内容、確証方法、確証問題、許容基準、結果	①確証問題、方法終了基準、許容基準
形態管理	①管理されていること ②バージョンと出力 ③各々のソフトウェア関連要素の対応	変更点、変更理由、影響するソフトウェア関連要素	①関連図書、変更点、変更理由、バージョン
運用	①結果が再現できること ②選定コードが適切であること ③確証範囲内であること	①使用の内容	①入出力データ ②選定理由 ③適用範囲
新規データ	①文書に右記の内容が記述されていること(再現できること) ②技術的な妥当性	①目的、実施内容、参照文書、試験手法、計算コード、サンプル、測定機器、手法の変更点、実施者、結果、日付	①試験内容 ②判断基準
既存データ	①追跡性 ②次の何れかで品質保証されていること。 ・品質保証計画が適切 ・確証データである ・試験により確認 ・技術的レビュー	②品質保証方法を決定した要因、許容基準、レビュー内容	①出典 ②-1品質保証方法

表2.2.4-1 WIPPの品質保証項目

	確認事項	文書内容の要求	品質保証項目
モデル	①F E P sの選定手順の確認	①品質保証記録	①F E P
開発	①設計と確証ができるよう十分詳細に文書化されていること	①(要求仕様) 機能(関数)、動作時間、制限、属性、外部インターフェイス (設計仕様) 主構成要素、理論、数学モデル、制御フロー、制御ロジック、データ構造、入出力範囲、コード変換方法 (ユーザー) セットアップ等のユーザー情報	①開発条件、ハードウェア構成、付随ソフトウェア構成、付随ソフトウェア制約条件、制御ルーチン、入出力データ、コーディング制約、エラーメッセージ、適用範囲、ユーザーマニュアル
改良	①出力結果に影響する想定外のエラーが発生しないこと ②右記の②が文書化されていること	②変更理由、変更点、F Dなど影響する物	①制御ルーチン ②変更理由、変更点、コード
検証	①要求事項が満足されていること	①検証/確証計画、検証確証の内容、レビュー・テスト結果、検証を達成したことの基準、ハードウェア、ソフトウェアの形態、確証範囲	①検証問題、適用範囲、検証されたことの基準、関連ハードウェア/ソフトウェア、レビュー結果
確証	①実験データとの比較、レビューを行うこと等により適用範囲を確認		①確証問題、適用範囲、確証されたことの基準、関連ハードウェア/ソフトウェア、レビュー結果
形態管理	①関連文書に追跡性があること。 ②変更範囲に対する検証/確証を行っていること。	②変更点	①バージョン ②変更点、変更理由
運用	①出力の定期的な確認を行っていること ②コンピュータ環境を変更した場合、確認を行うこと ③使用データ間に矛盾がないこと ④エラーの既解析への影響評価	①②④エラーを発生したソフトウェア、エラーのクラス、是正内容	①ソフトウェア確認問題 ②コンピュータ環境確認問題 ③データの一貫性 ④エラー
新規データ	①文書に右記の内容が記述されていること(再現できること) ②レビューなどによるデータの妥当性	①計画、目的、実施内容、試験手法、サンプル、測定機器、手法の変更点、試験パラメータ、誤差、実施者、結果、日付 ②確証方法、許容基準、レビュー結果	①試験目的、条件手法、誤差、測定値、 ②確証方法、判断基準、レビュー結果
既存データ	①追跡性 ②次の何れかで品質保証されていること。 ②-1品質保証計画が適切 ②-2確証データである ②-3試験により確認 ②-4技術的レビュー	②決定手順、品質保証方法の選定根拠、品質保証された根拠	①出典 ②確証方法

2.3 品質保証項目の整理

本項では、本研究で摘出した品質保証項目と原子力分野、航空宇宙分野、海外の地層処分施設における品質保証項目を比較し、その網羅性を確認するとともに、本研究における品質管理手続きを構築するための整理を行なう。

2.3.1 摘出した品質保証項目の網羅性

表2.3.1-1は、本研究で摘出した品質保証項目と原子力分野(JEAG)と航空宇宙分野(NASA)、地層処分施設(ユッカマウンテン、WIPP)の品質保証項目を比較することによる網羅性の確認を検討した結果である。

各分野によって、品質保証項目の表現の違いはあるものの、基本的には本研究で摘出した品質保証項目に全て包括されるものであり、本研究で摘出した品質保証項目は、一般的な品質保証プログラム及び海外の地層処分施設の品質保証プログラムで確認の対象となっている項目を包括していると考ええる。特に、本研究では運用段階の品質保証項目を導入している点が特徴的である。

2.3.2 品質保証手続き構築のための整理

表2.3.2-1は、本研究で摘出した品質保証項目をもとに性能評価体系における品質保証手続きを整理した結果であり、次の各管理項目に対する品質保証項目(作成資料)の役割(確認の視点)を示している。

- (1) 品質保証プログラムの管理
- (2) ソフトウェア管理
- (3) データセット全体の管理
- (4) 影響解析・性能評価

次項の品質保証手続き(フレームワーク)の検討においては、これらの作成資料が担う役割(確認の視点)を考慮し、作成項目、検査項目を踏まえ検討を実施する。

表2.3.1-1 品質保証項目の網羅性の確認

抽出した品質保証項目			原子力分野	N A S A	ユッカマウンテン	WIPP	網羅性
コード	開発／改良	要求仕様書 開発計画書 ソフトウェア設計書 インストール報告書 取扱い説明書	要求仕様書 開発計画書 ソフトウェア設計書 インストール報告書 取扱い説明書	要求仕様書 開発計画書 ソフトウェア設計書 インストール報告書 取扱い説明書	モデル選定根拠 数学モデル 機能要求情報 設計情報 ユーザー情報	FEP's 要求仕様 設計仕様 ユーザー情報 制御ルーチン 改良点、理由	○
	検証／確証	検証／確証計画書 検証／確証報告書	検証計画書 検証報告書	検証計画書 検証報告書	検証確証問題 検証確証方法 終了、許容基準	検証確証問題 検証確証方法 終了、許容基準 適用範囲 関連ソフト/ハード レビュー結果	○
	運用	入力データ 解析計画書 解析結果 管理台帳	解析目的 解析方法 仮定と条件 参考資料 プログラム 入出力データ 単位系	none	入出力データ コード選定理由 適用範囲 関連図書 変更点/理由 ハレーション	ソフトウェア確認問題 コンピュータ環境 データの一貫性 エラー ハレーション 変更点と理由	○
データ	取得加工	実験計画書 試験方法 試験報告書 算出根拠書	none	none	試験内容/試験方法 品質保証判断基準 データの出典	試験内容/試験方法 確認方法 品質保証判断基準 レビュー結果	○
	登録選択	データ補助情報 データヘッス スクリーニング基準	none	none	none	unknown	○

none : 品質保証プログラムで要求されていない。

unknown : 非公開として存在する可能性がある。

表2.3.2-1 性能評価研究における品質保証手続き（作成資料の役割）

品質管理項目	品質保証プログラム		作成資料：品質保証項目	記載要領チェック（確認の観点）
1. 品質保証プログラムの管理	1.1 使命の展開		性能評価品質保証要求	—
	1.2 品質保証項目の開発		品質保証プログラム	品質保証項目の網羅性
	1.3 品質保証手続き開発		品質保証手続き（マニュアル）	適合性、手続き方法の使用性、効率性
2. シナリオ管理				
3. ソフトウェア管理	3.1 ソフトウェア選定	3.1.1 ソフトウェア選定	ソフトウェア要求仕様票	ソフトウェアの合目的性
		3.1.2 ソフトウェア改良・開発計画	計画書or機能仕様書	改良・開発計画書の合目的性、要求仕様の網羅性
	3.2 ソフトウェア設計・ソフトウェア作成	3.2.1 ソフトウェア設計	ソフトウェア設計書	設計書の正確性、改良・開発計画書の網羅性
		3.2.2 コーディング、インストール	インストール報告書	ソフトウェアの移植性、再現性
		3.2.3 ソフトウェア文書	利用マニュアル、プログラムマニュアル	マニュアルの正確性・一貫性・使用性
	3.3 検証・確認	3.3.1 検証・確認計画	計画書、検査要領書	検査の合目的性、テストケースの網羅性・正確性
		3.3.2 検証・確認実施	完了書	ソフトウェアの完全性、入出力データ:正確性、計画書の網羅性、再現性
		3.3.3 報告	速報、技術資料	V&V:合目的性、コード、モデル:信頼性、科学的防御性、一貫性
	3.4 構成管理		データ・モデル取得改善要求票	変更要求の合目的性、ソフトウェアの追跡性
4. データセット全体の管理	4.1 データ入手方法		データ入手計画書	データ入手の合目的性、データ入手要求事項の網羅性
	4.2 新規データ取得	4.2.1 試験計画	試験実施計画書	試験の合目的性、試験手法の一貫性、再現性
		4.2.2 試験実施・データの加工	試験完了書	加工データの正確性、加工方法の一貫性、追跡性
		4.2.3 報告	速報、技術資料	試験の合目的性、試験の信頼性、科学的防御性、一貫性
	4.3 既存データ収集		収集完了書	収集の合目的性、入手計画書・既存データの網羅性
	4.4 試験データグループ データベースの管理	4.4.1 データの登録	登録完了書	登録作業の完全性、取得・収集データ:追跡性、補助情報:正確性
		4.4.2 データのスクリーニング	速報、技術資料	登録作業の完全性、スクリーニングデータ:科学的防御性、選定記述の一貫性
		4.4.3 データベースの変換	速報、技術資料	入出力データの正確性、補助情報:正確性、追跡性、一貫性
5. 影響解析・性能解析	5.1 パラメータセットの管理		パラメータセット登録完了書	登録作業の完全性、解析データの追跡性
	5.2 解析計画		解析計画書	解析の合目的性、設定条件の正確性・網羅性
	5.3 解析		解析完了書	出力データの正確性、解析の再現性、結果の妥当性
	5.4 報告		速報、性能評価報告書	解析の合目的性、解析の信頼性、科学的防御性、一貫性

3. 地層処分システムの性能評価のための品質保証手順の検討

3.1 品質保証手続きのフレームワークの作成

本項では、2.項で摘出／整理した品質保証項目をもとに、品質保証手続きを構築する。

3.1.1 フレームワークの設定方針

品質保証の活動とは、品質保証項目をもとにソフトウェアやデータに対して、品質特性（合目的性、正確性、信頼性、追跡性、保守性、移植性、科学的防御性）を担保するための作業である。また、品質特性を担保するためには、品質保証マニュアルまたは要領書で定めた文書管理などの管理要領に従い、確認を実施する必要がある。この考え方にに基づき、品質保証活動の構成要素を検討すると次の4項目となる。

- ・制約条件＝管理要領などの品質保証活動を支配するもの
- ・品質保証活動の入力＝ソフトウェア等の品質を確認する対象物
- ・資源＝品質保証済みのデータ等の品質を確認するための
検討材料
- ・品質保証活動の出力＝品質保証されたソフトウェア等

フレームワークは管理手順の相互関係を示すものであり、本検討においては、入出力と制約条件、及び、資源をフレームワークにて明確にすることとする。

3.1.2 フレームワーク

図3.1.2-1は、上記の設定方針にて作成した性能評価全体のフレームワークであり、各管理ブロックは、階層構造(品質保証の分野ではWBS:Work Breakdown structureと呼ぶ場合もある。)になっている。

下部階層の詳細については省略するが、各管理の制約条件となる品質保証プログラムは、安全確保の要求を受け、JEAGの設計管理指針等の制約から開発されている。さらに、ソフトウェアとデータは品質保証プログラムで定められた手順に基づき、品質特性を担保するための資料作成と検査が全てのブロックで規定され、最終的に品質保証されたソフトウェアとデータを用いた解析を実施し、解析時の検査が完了した後に、品質保証された性能評価レポートが作成される。

本フレームワークは、性能評価レポートを支援する技術資料の品質を保証できる
よう動燃殿の実態に配慮し、作成している。

したがって、本フレームワークは、動燃殿において運用が可能であると判断できる。

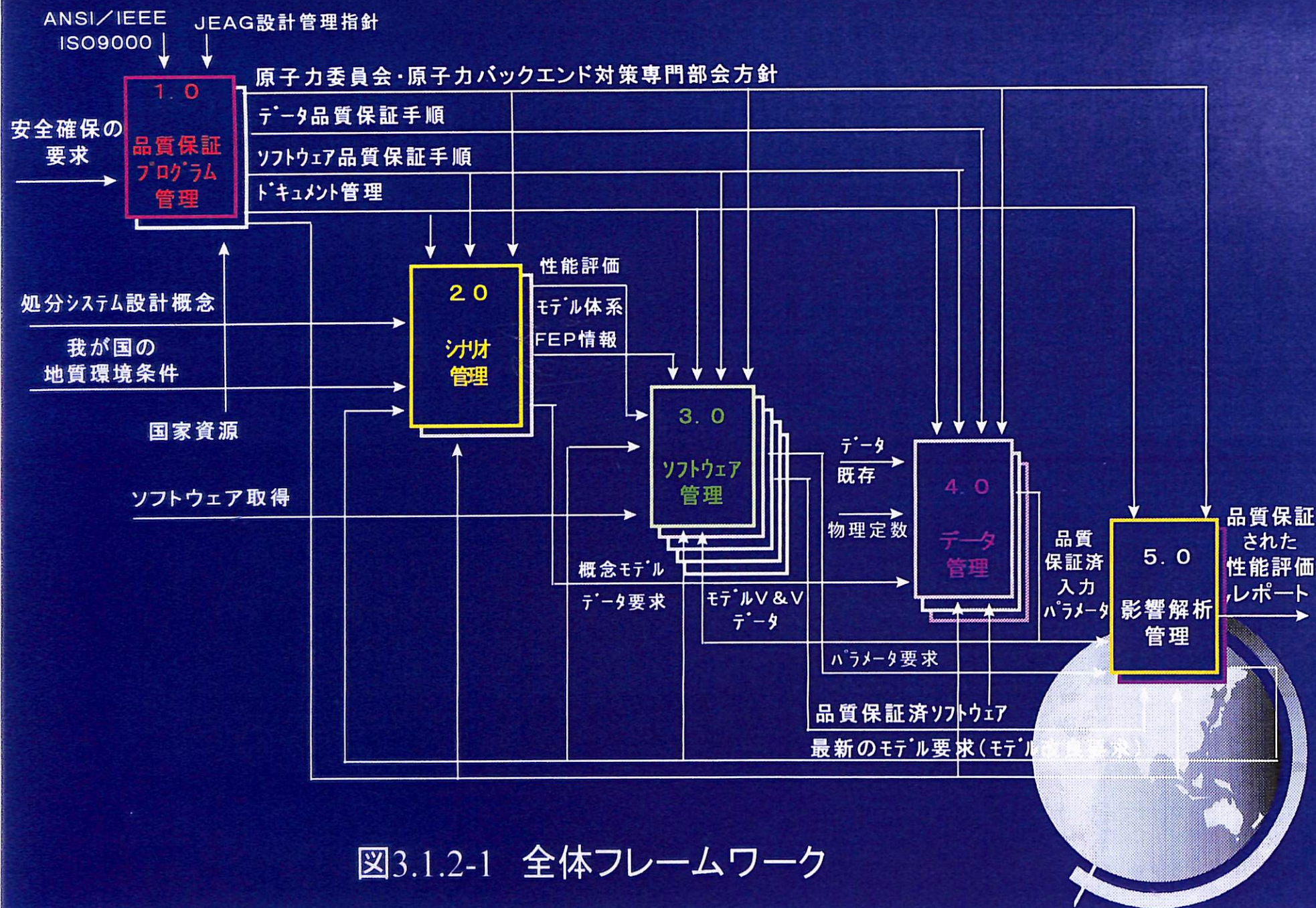


図3.1.2-1 全体フレームワーク

3. 1. 3 計算機イメージの作成

本節では、2章で検討したデータとコードの品質保証項目及びフレームワークを元に、品質管理を計算機へ展開した場合のイメージについて述べる。品質保証手続きを計算機に展開する場合、ヒューマンエラーが起こりやすい作業や試行錯誤的な作業等を対象に行うことが有効である。

計算機システムは、図3.1.3-1に示すように性能評価で用いるデータ（パラメータ、入出力データ）の品質管理を中心に、さらにソフトウェアの構成管理やフレームワークの表示を行う。本システムの構成は以下の通りである。

①変換データベース

変換データベースは、地球化学研究室等で取得されるデータを管理する。

②パラメータデータベース

パラメータデータベースは、変換データベースから性能評価用にスクリーニングされたデータセット等を管理する。

③入力データ作成インタフェース／知識ベース

入力データ作成インタフェースは、専門家より得られた知識ベースを元に、整合性のある入力データの作成を支援する。

④構成管理データベース

構成管理データベースは、解析コード及び仕様書等を管理する。

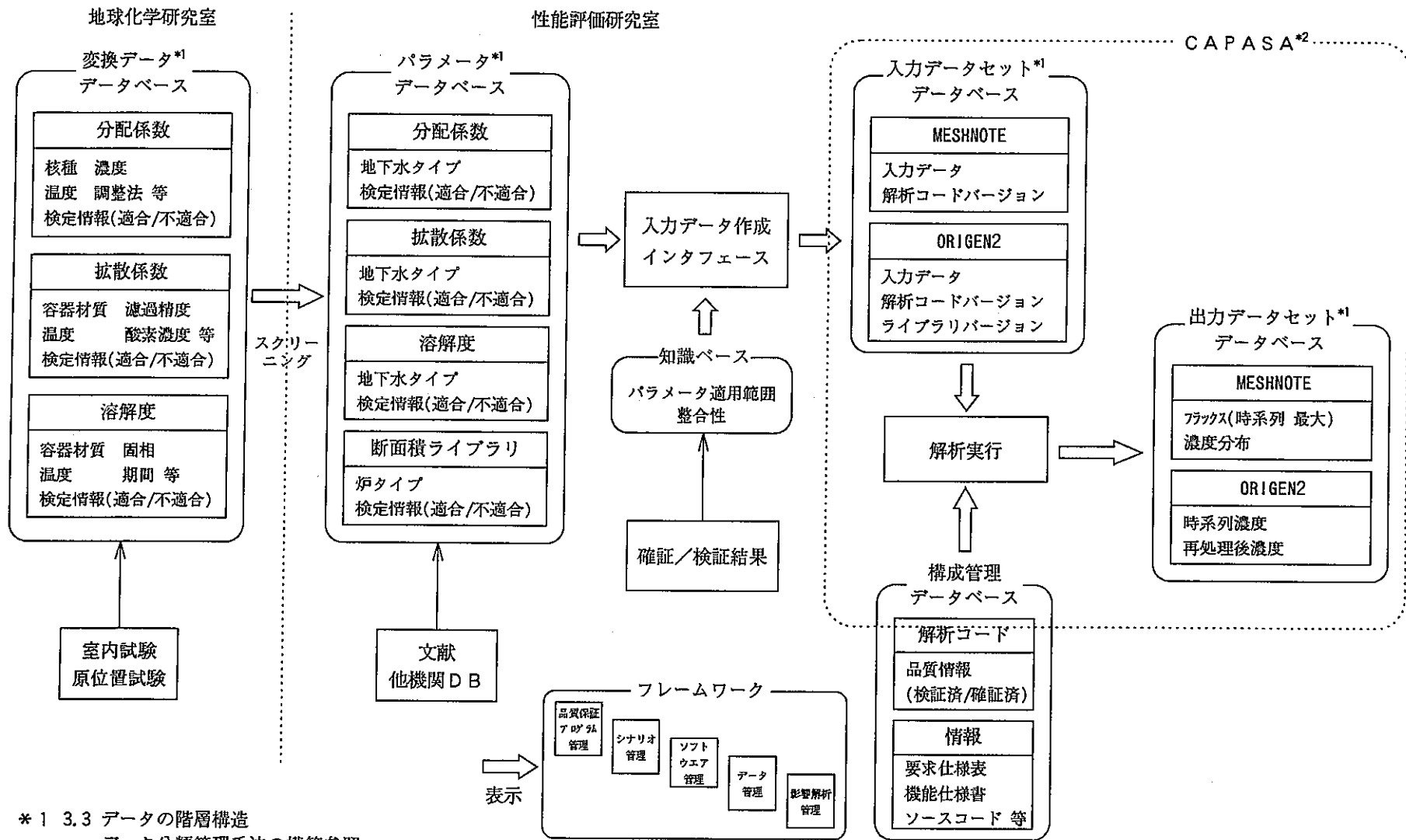
⑤入力データセットデータベース／出力データセットデータベース

本データベースは、解析コードの入出力データを管理する。

⑥フレームワーク

品質保証手続きの参考情報としてフレームワークを階層的に表示する。

なお、入出力データセット及び構成管理の一部は、他研究で開発した解析内容管理システム「CAPASA」にて管理済みである。



- * 1 3.3 データの階層構造
データ分類管理手法の構築参照
- * 2 解析内容管理システム

図3.1.3-1 計算機イメージ

3.2 解析コードの検証手法の構築

解析コードの品質を確保するためには、表 2.3.2-1 に示した品質特性を念頭に置いた段階的な資料の作成・検査が不可欠である。本章では、「3.1 品質保証手続きのフレームワークの作成」に基づき、本活動への入力情報、制約情報ならびに導入される資源を具体化し、より一般的に適用でき、かつ使用性を考慮した検証マニュアルを作成した。また、ここで作成した一般的な検証マニュアルを、以下に示す性能評価解析コードを例に展開し、それぞれのコードに固有の検証マニュアルを作成した。

- | | |
|----------------|------------|
| ① 地球化学コード | : PHREEQE |
| ② 多孔質媒体物質移行コード | : MESHNOTE |
| ③ 亀裂性媒体物質移行コード | : MATRICS |

また、解析コードの検証結果が受入れ可能か否かを判断する判定基準の設定方法について、原子力分野あるいは他の工学分野の現状を踏まえ検討した。

3.2.1 検証マニュアルの作成

解析コードの検証を行う主な目的は、当該コードの設計仕様がソースコードとして正しく実現されている事を確認し（解析コードの正確性）、その適用範囲（誤差の挙動）を明確にすることである。ここでは、「3.1 品質保証手続きのフレームワークの作成」で示したソフトウェアの検証手順が性能評価解析コード、あるいはその他のコードに適用できる一般的な検証マニュアルとなり得ることを示すことを目的に、以下に示す各活動の入力情報、制約情報および導入される資源を具体化した。また、一例として PHREEQE、MESHNOTE および MATRICS の 3 コードに対して具体例を検討した（成果報告書付録 6～8 参照）。

- ① 検証計画書の作成・チェック
- ② 検証作業の実施
- ③ 検証報告書の作成・チェック

3.2.2 判定基準の設定方針の検討

解析コードの検証結果が、受入れ可能か否かを判断する判定基準に関しては、例えば解析解や他コードの解析結果と定性的な傾向が一致していれば良いとすることが多く、比較的あいまいなものとなっている。しかしながら、コードの正確さを客観的に立証するには、物理的な根拠に基づいた定量的な判定基準の下で、これを満足することを示すのが最も適当である。ここでは、解析解、ベンチマーク解析結果等に内在する不確定性の定性的な傾向把握、ならびに他の工学分野での判定基準の設定事例調査等を通じ、性能評価解析コードの検証に用いる定量的な判定基準の設定について検討した。

本検討の結果、明確な根拠に基づいた定量的な判定基準を設定（標準化）することは事実上

困難であるという認識に立つ一方、判定基準を満足することは絶対的な制約ではなく、差異が生じる場合は定量的な考察を加え、例えば1%以内に収まる適用範囲（パラメータ範囲）を明確にすることが重要との結論を得た。これらの情報を解析コードとともに管理することで、コードの誤運用に伴う解析結果の品質低下を防止することが可能となる。現段階では、暫定的に解析解との比較の場合5%、動燃殿が実施するベンチマーク解析結果との比較の場合10%、ただし文献データならびに国際ベンチマークプロジェクトにおける解析結果との比較の場合は20%を一律、暫定的に採用することとした。

3. 3 データ分類管理手法の構築

性能評価で対象となるデータは、地下水地球化学、核種移行データ等から構成されており、各データの品質特性を確保するためには、段階的な資料の作成・検査並びに体系的なデータの管理が必要となる。

本章では、データに係わる品質保証活動を、解析によって生成されるデータ及び試験により取得されるデータへ適用するためのガイドラインを示すことを目的として、データ分類管理手法の検討を行った。

3. 3. 1 分類管理基準の検討

(1) 検討

試験データに係わる分類基準とは、品質保証活動の合否基準を与えることである。この合否基準は、データ取得からデータ加工をまとめた資料の記載項目のチェック並びに専門家レビューまでの時間を要する活動と、登録や選択などの計算機処理に基づく短時間な活動に分類することができる。また、解析によって算出されるデータに係わる分類基準は、各導出の段階で用いられるデータの合否基準として考えられる。

時間を要する品質保証の分類基準に関しては、データ取得からデータ加工に移行するための基準として、実験計画書・試験方法標準・試験報告書を作成し、グループ内の承認を得ることである。さらに、データ加工からデータ登録に移行するための基準としては、前記の報告書に加えて、加工データの算出根拠書並びに取得したデータの解釈を追記した資料を作成し、専門家のレビューを受けることである。以上の検査を受けた実験データについては、データベースへ登録することが可能となる。

一方、文献データについては、専門家レビューが既に実施されていると考えられるため、すぐさまデータ及び補助的な情報をデータベースへ登録することが可能となる。なお、試験データ並びに文献データの登録は手作業になることから、登録作業の完全性を確保するための検査が必要となる。

データの選択においては、データの検索並びに解析コードに依存した熱力学データベースの設定が含まれる。データの検索は、データ登録方法がシステム化され、かつ検索機能が装備されていれば、必ずしも資料による詳細な管理は必要としない。

また、熱力学データベースの設定に係わる選定では、解析に依存した熱力学データベースに変換するためのインタフェースプログラムを起動させることから、変換作業にともなう検査が必要となる。この検査に合格した後、熱力学データベースは性能評価側へ受け渡されることとなる。

解析によって生成されるデータの分類管理基準とは、データの生成手順を表わし各過程毎に品質保証項目を満足させるべく活動を行うことである。

(2) 結論

- ①一次データの分類基準はグループ内資料の作成、グループ内レビューを受けること。
- ②加工データの分類基準は①の内容に算出根拠、結果の解釈を加え、レビューを受けること。
- ③データの登録では、登録作業の完全性を確保するためのチェックを行うこと。
- ④解析によって生成されるデータについては、生成に関するデータ階層構造概に基づき各生成プロセス毎に管理すること。

3. 3. 2 データ階層構造

(1) 検討

データ取得段階から加工、選択段階および性能評価解析段階のデータに対して、品質の管理を行う階層構造およびその階層構造に基づいたデータの分類管理手法を構築すること目的として検討を実施した。以下に検討結果を述べる。

性能評価解析に用いるデータは、試験データや解析データ等の様々なデータがあり、また、試験データは、さらに取得段階、加工段階、登録・選択段階といったようにデータ自体もその状態を遷移する。よって、性能評価解析で扱うデータは、これらのデータ特性に応じた品質保証項目を管理することを目的として以下に示す 5 段階の階層に分類した。

①生データ

生データは、数学的な処理や変換を行うことなしに単純に実験装置等から得られる測定値を示す。これらのデータは、実験装置に接続されたコンピュータや実験者のノートに蓄えられる。

②変換データ

生データに対して、データを物理化学的に意味のある物性値にするため、補正や何らかのソフトウェアを用いて変換を行なったデータを示す。また、一般的に文献等から得られるデータも変換データとして考えられる。

③パラメータ

変換データや文献からのデータ等からなる性能評価で用いられるデータセットを示す。パラメータは、複数の変換データから作成された分布データとなる。

④入力データセット

入力データセットは、性能評価用解析コードの入力ファイルを示す。入力データセットは、様々なパラメータからデータを引用し、それを解析コード固有のフォーマットや単位に変換することにより作成される。

⑤出力データセット

性能評価解析コードの実行により得られた出力ファイルを示す。

上記に示した各階層に属するデータは、品質が保証されているデータである適合データ及び品質が保証されていないデータである不適合データに分類される。また、この不適合データは、フレームワーク「4.3 既存データの検定」に従って専門家レビューや確証試験を行うことにより適合データに変更することが可能である。ここで、不適合データから適合データに変更する作業を検定作業と呼ぶ。

図3.3.2-1に品質管理の定義を加えたデータの階層構造を示す。なお、最終的な性能評価解析を行う際には、出力データセット、入力データセットおよびパラメータに関しては、不適合データが存在することはないが、解析コードの予備検討や試運用の段階では存在することが考えられる。

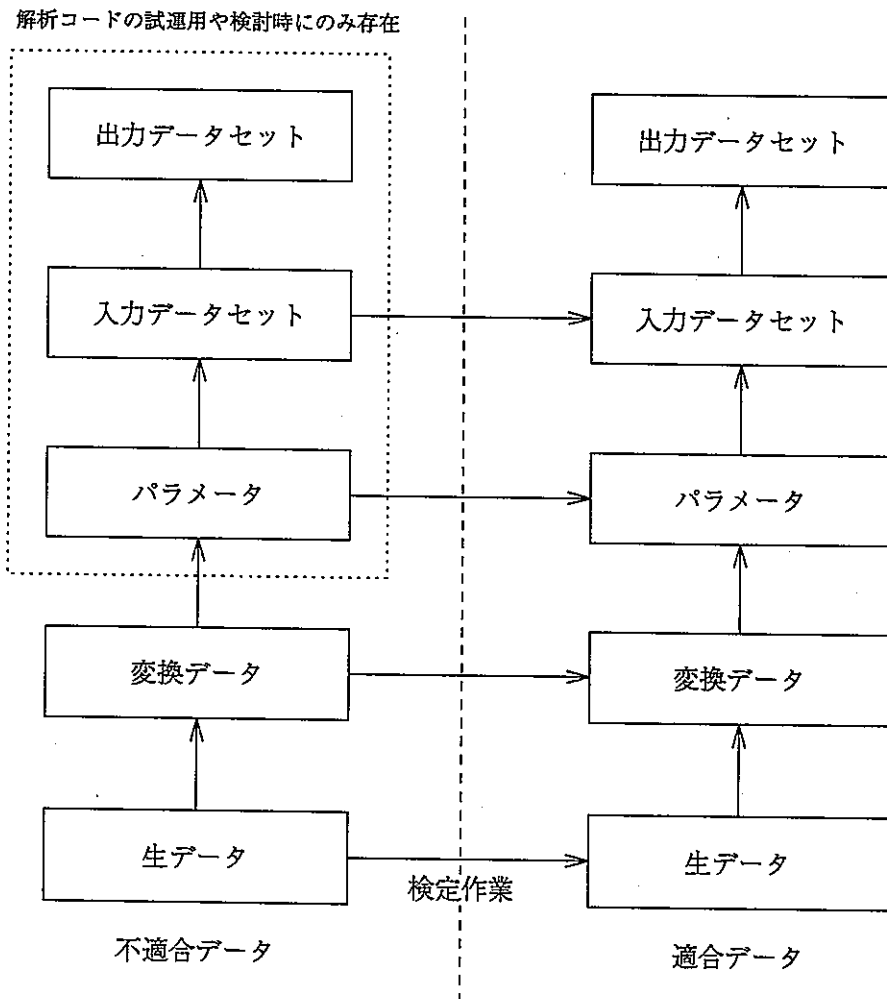


図3.3.2-3. 品質に基づくデータの階層構造

検定作業とは、検定対象となっているデータの起源となっているすべてのデータに対して、以下の手順を複数組み合わせで行うことである。

- (a) 既存データが何らかの別の品質保証要求に基づいた手順に沿って取得されたものであれば、その品質保証要求が品質保証プログラムと同等かどうかを判断する。
- (b) 検定作業の対象となっている不合格データと他の同一の条件で取得された適合データを比較することによりデータの確証を行う。
- (c) 確証試験を実施する。
- (d) 専門家によるレビューを実施する。

上記の検定作業やデータの品質管理を行う上で、データ（値）自体に加えて、品質保証項目を基本として様々な補助的な情報を管理することが必要となる。以下に各階層における管理すべき補助情報について述べる。なお、生データは、通常、データベースを用いて管理さ

れたないため除外する。

①変換データ

- ・ 取得者／実験装置／日付
- ・ 実験手法／条件
- ・ 算出根拠
- ・ 算出方法
- ・ 解釈
- ・ 文献情報（文献データの場合のみ）

②パラメータ

- ・ 作成者／作成日
- ・ 目的
- ・ 導出方法
- ・ 履歴管理
- ・ スクリーニング基準

③入力データセット

- ・ 作成者／作成日
- ・ 目的
- ・ 解析コード
- ・ 履歴管理

④出力データセット

- ・ 解析者／実施日
- ・ 結果の解釈

また、上記以外に、各階層に共通に存在する補助情報としてレビュー者等の検定情報がある。

性能評価で扱う全てのデータは、以上述べた階層構造に分類される。ここで、変換データより上位の階層に位置するデータは、データベースを用いて管理することがデータの品質を保証する上で必要である。データ管理の運用形態としては、集中管理と分散管理が考えられる。事業団では、様々なデータが各部門で取得、作成されていることから分散管理が適当と思われる。例えば、溶解度、熱力学データ等の変換データやパラメータは、地球化学研究室で管理され、性能評価解析コードの入力データセットは、性能評価解析室で管理されることが考えられる。そして、入力データセットを作成する場合には、地球化学研究室が管理しているデータから必要な情報を取得し、それを用いて入力データセットを作成することとなる。

このように、他のデータベースからデータを取得し、より上位の階層のデータを作成する場合には、データの品質を管理するために以下の点を着目する必要がある。

①追跡性

新規データ作成の際の元となったデータの所在を管理する。

②完全性

データの入力を完全なものとする。

③整合性の維持

各々のデータベースが協調してデータの整合性を維持・管理する。

④セキュリティの確保

データの削除等の禁止や特定データの参照不可等のセキュリティを確保する。

⑤データ運用時の使用性

利用者がデータの所在を意識することなく利用できる。

以上検討したデータの階層構造及びデータ管理方法に基づいたデータベースに要求される主要な機能は以下の通りである。

①階層機能

図3.3.2-1に示した階層構造に基づいたデータベース構造とすると共に、各階層間でのデータの遷移の履歴を管理する。

②補助情報機能

データ（値）自体に加えてデータ取得条件等の補助的な情報を管理する。

③品質情報機能

データの品質として適合データ、不適合データの区分および検定情報を管理する。

④分散機能

データは分散環境で管理し、検索機能や整合性維持に関する機能を設ける。

⑤追跡機能

データベース間でデータ移動等の履歴を管理する。

⑥セキュリティ機能

データアクセスの権限を設定し、不用意な修正や削除を避ける。

(2) 結論

①データは、特性に応じて生データ、変換データ、パラメータ、入力データセット、出力データセットの各階層に分類される。

②各階層では、品質保証項目を基本とした補助的な情報やデータ遷移の履歴を値と共に管理する。また、変換データより上位の層に位置するデータはデータベースシステムを用いて管理する。

③管理フローで定義されたデータに関する品質保証作業は、基本的に階層構造に分類されたデータを用いて行われる。

④事業団の運用形態を考慮すると、データは分散管理することが理想的である。

3. 3. 3 他研究との整合性の確認

(1) 検討

本研究で設定したデータに関する品質保証項目及びデータ分類管理手法が、地球化学研究室において管理されている分配係数、拡散係数および熱力学データに適用可能か否かの確認を行った。以下に検討結果を述べる。

①分配係数／拡散係数

分配係数や拡散係数は、既にスプレッドシートで管理されている。ここで、2章で述べた品質保証項目は、このスプレッドシートの各項目を包含しているものとなっている。データ分類に関しては、分配係数や拡散係数は、データの階層構造の「変換データ」として分類される。

②熱力学データベース

熱力学データの収集、解析コードに依存した熱力学データベースの作成・変換作業において、データベース変換コードの品質は、フレームワークにて管理可能である。また、変換作業における品質保証項目は、影響解析の項目の一部を適用することが可能である。

データ分類に関しては、熱力学データベースはデータ階層構造における「パラメータ」として分類される。また、熱力学データベースを構成している水溶性化学種や鉱物種などの各データは、変換データとして分類される。

(2) 結論

- ①「2.1.2 データの品質保証項目」で定義された品質保証項目は、事業団殿が運用している分配係数や拡散係数のデータベースの項目を包含している。
- ②データ階層構造は、熱力学データ及びデータベースに適用可能である。
- ③熱力学データベースの品質はデータの品質保証項目が適用可能である。また、データベース変換コードは、影響解析やソフトウェア管理の品質保証項目が適用可能である。

4. あとがき

本研究では、地層処分システムの性能評価で考慮すべき品質保証項目に対する品質保証の手順を、国内外での品質保証の実績等を踏まえて整理するとともに、解析コードの検証手法やデータの分類手法の検討を実施した。

(1) 品質保証項目の抽出と既存の品質保証手法の調査・整理

- ①設計解析に関する品質保証手法として、原子力分野においては主に安全審査指針、航空宇宙分野においてはNASAの実績、海外の地層処分施設においてはDOE（ユッカマウンテン、WIPP）の品質保証の要求事項を調査・整理した。
- ②データ、解析コードに対して、エラー要因と品質保証の観点から確認を行うべき項目として、入力データと解析モデルの適合性や適用範囲の明確化を行うこと等を摘出した。
- ③摘出した品質保証項目が、調査した設計解析の品質保証上の要求事項を満足するものであるか確認を行った。
- ④確認の結果、不十分な項目について、性能評価の品質保証要求事項としての必要性を検討し、必要な要求事項を動燃殿の性能評価の品質保証項目として補充した。

(2) 品質保証手続きのフレームワークの作成

- ①摘出した品質保証項目を確認項目と記録項目に分類し、性能評価解析における管理上の要求事項を管理フローとして整理した。
- ②解析コードについては、既存コードと開発改良コードに分け検討を行い、ライフサイクルを要求、設計と作成、V&V、運用、廃棄段階として設定した。
- ③データについては、既存データと新規取得データに分け検討し、さらに、解析パラメータを重要度分類し、各々のデータを管理することを提言した。
- ④管理フローに基づき、計算機へ展開した場合における品質管理システム構築のための基本要件について検討した。

(3) 解析コードの検証方法の構築

検証手法の構築に関する検討では、動燃殿のニアフィールド性能評価である、MESHNOTE、PHREEQE、MATRICSモデルを対象とした検証マニュアルを作成した。さらに、検証結果を判定するための基準ならびに適用範囲を設定するための方針について検討した。

(4) データの分類管理手法の構築

- ・ データの分類管理手法や信頼性保証手法の構築手順としてトップダウンアプローチによる方法とボトムアップアプローチによる方法を検討した。
- ・ データの取得方法や処理方法等の特性およびデータの品質に基づいたデータの階層構造を構築した。また、この階層構造間のデータの遷移方法について検討した。
- ・ ユッカマウンテンにおけるデータ管理手法の調査を実施した。また、そのデータ管理手法の適用性について検討した。
- ・ データの特性、品質及び性能評価計算への影響度に基づいたデータベース構造を構築した。また、このデータベース構造に具体的なデータを適用することにより、その網羅性を確認した。

謝 辞

本研究を実施するに当たり、種々の御指導、御助言を頂いた動力炉・核燃料開発事業団 環境技術開発部地層処分開発室の諸賢に感謝の意を表します。

The Study on the Quality Assurance of Performance Assessment for Geological Disposal System

Kazuto Maeda*², Shigeki Fusaeda*¹, Shinichi Kataoka*³
Kazuaki Nemoto*², Hiroshi Fukui*², Ichiro Yanagisawa*²
Motoo Doi*², Hiroshi Arikawa*¹, Noriaki Ueda*¹

Abstract

This paper discusses the quality control and operation procedure for guaranteeing the quality of analysis codes and data used in the performance assessment of geological disposal system, with a view to assuring the reliability of the performance assessment results. This year, we have summarized the quality assurance procedure corresponding to the quality assurance items to be taken into account in the performance assessment, based upon the results of survey of existing quality assurance procedures in and out of the country. Also we have discussed the methods for verifying the analysis codes and classifying the data.

(1) Identification of Quality Assurance Items, and Survey of Existing Quality Assurance Procedures

- Quality assurance requirements which have been used in the fields such as nuclear industries, aerospace industries and the YMP and WIPP in the United States, have been surveyed.
- Items to be checked in the use of analysis codes and data have been identified in regard of the error prevention and quality assurance.

(2) Development of Framework for Quality Assurance Procedure

- The Identified quality assurance items were classified into check items and record items, and the QA requirements in performance assessment analysis summarized as a control flow.
- The basic requirements were discussed to configure a computer-based quality control system based upon the control flow.

(3) Development of Verification Methodology

Verification manuals for MESHNOTE, PHREEQE and MATRICS, which are near field performance assessment codes of PNC, have been prepared. We have also studied the strategy to establish applicable limitation and criteria for each performance assessment codes.

(4) Development of Data Management Methodology

- In order to maintain various types of data used in performance assessment calculations, data hierarchy has been developed by considering data acquisition process, data processing methods, and reliability.
- Database structure based on the data hierarchy and influence in the performance assessment calculations has been investigated.

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,
Yoshinao Ishihara

*1: New Products Development Section, Nuclear Plant Engineering Department

*2: Advanced Nuclear Plant Engineering Section, Nuclear Plant Engineering Department

*3: Waste Systems Engineering Section, Advanced Reactor & Nuclear Fuel Cycle Engineering Department

CONTENTS

1. Introduction	1
2. Identification of quality assurance items and survey of existing quality assurance procedure	2
2.1 Identification of quality assurance items	2
2.1.1 Quality assurance items at the time of development, improvement and operation of codes	2
2.1.2 Quality assurance items of data	7
2.2 Survey of quality assurance procedure	10
2.2.1 Quality assurance in nuclear power field	10
2.2.2 Quality assurance in aerospace field	10
2.2.3 Quality assurance of Yucca Mountain	11
2.2.4 Quality assurance of WIPP	12
2.3 Summary of quality assurance items	17
2.3.1 Inclusiveness of identified quality assurance items	17
2.3.2 Organizing to construct quality assurance procedures	17
3. Examination of quality assurance procedure for Performance Assessment of geological disposal system	21
3.1 Development of framework for quality assurance procedures	21
3.1.1 Set-up policy of framework	21
3.1.2 Framework	21
3.1.3 Development of System Image	24
3.2 Verification Manual for the Performance Assessment Code	26
3.2.1 Development of the Verification Manual	26
3.2.2 Establish the Acceptance Criteria	26
3.3 Development of Data Management Methodology	28
3.3.1 Study on Criteria of Data Classification Management	28
3.3.2 Data Hierarchy	30
3.3.3 Applicability to Other Studies	34
4. Conclusion	35
Acknowledgement	37

List of figures / Tables

Table 2.1.1-1	Requirements in general quality assurance program	5
Table 2.1.1-2	Quality assurance items at the time of code development, improvement and operation	6
Table 2.1.2-1	Quality assurance items for data	9
Table 2.2.3-1(1/2)	Quality assurance items of Yucca Mountain	13
Table 2.2.3-1(2/2)	Quality assurance items of Yucca Mountain	14
Table 2.2.4-1(1/2)	Quality assurance items items of WIPP	15
Table 2.2.4-1(2/2)	Quality assurance items items of WIPP	16
Table 2.3.1-1	Confirmation of inclusiveness of quality assurance items	18
Table 2.3.2-1(1/2)	Quality procedures in performance assessment study (Role of Drawn-up data)	19
Table 2.3.2-1(2/2)	Quality procedures in performance assessment study (Role of Drawn-up data)	20
Figure 3.1.1-2	Whole framework	23
Figure 3.1.3-1	System Image	25
Figure 3.3.2-3	Data Hierarchy based on the Quality Control	31

1. Introduction

This paper discusses the quality control and operation procedure for guaranteeing the quality of analysis codes and data used in the performance assessment with a view to assuring the reliability of the Performance Assessment results of geological disposal system. It also aims at consolidating the quality assurance program applicable in the secondary progress report based upon the results of current studies, namely analysis control system, in an attempt to apply such things actually for the analysis codes and data involved in the framework of Performance Assessment, and also aims at developing a comprehensive quality assurance system to guarantee the reliability of the evaluation results.

Based upon such purpose as above-mentioned, this fiscal year, we will arrange the quality assurance items to be included in the Performance Assessment of geological disposal system, and the general procedure for such quality assurance, based upon the framework of Performance Assessment at Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation (PNC) and the results of quality assurance in and out of the country. In the meantime, the verification method for analysis codes and the data management method will also be discussed with a view to guaranteeing the reliability of the Performance Assessment results.

2. Identification of quality assurance items and survey of existing quality assurance procedure

In JIS Z 9900, the term of “quality” and “quality assurance” are defined, and the standards of the quality assurance are shown. To interpret this, the quality assurance is understood to confirm intentionally and systematically as to what kind of characteristics have been completed for the one confirming the quality.

Furthermore, "Guidelines on Research and Development Relating to Geological Disposal of High-Level Radioactive Waste To Japan (draft)" (NOV. 1996) is being presented by Atomic Energy Commission, and the quality of analysis is defined in this attached report separating the analytical code from the data.

Therefore, when the quality assurance of the analysis is performed, it is considered that the system of the quality assurance is required to be built for analysis codes and data. Accordingly, in this study, the framework for the quality assurance system has been constructed by performing error factors analyses separating analytical codes data used in analysis, organizing the object matters for confirmation of quality and the object to be confirmed (quality assurance items).

2.1 Identification of quality assurance items

Here, the object of confirmation is identified for the software and the data which the quality is confirmed. The following describes the way of thinking of the quality assurance item identification and the identification results dividing the time of the development/ improvement and operation of codes.

2.1.1 Quality assurance items at the time of development, improvement and operation of codes

(1) Quality assurance items when the code is developed, improved

a. The way of thinking as to identification

The development work of codes is roughly grouped into the planning work, the design work, the implementation work and the verification work for codes. Since these concrete works are different depending on development contents, it is difficult to identify the quality assurance items easily.

Thus, in this study, the quality assurance items are identified so as to include all of them on the basis of the following quality assurance standards for softwares.

- The software quality assurance in MHI
- The software quality assurance in ISO-9000

Furthermore, the following standard quality assurance are investigated when the analysis code is replaced as the product, and studied as the quality assurance items without fail, though these are not quality assurance for software.

- The quality assurance stipulated by JIS standard
- The quality assurance stipulated by JEAG

b. Results

Table 2. 1. 1-1 shows the arranged list of the quality control in the above investigation, but the quality control of MHI basically includes the universal standards such as JIS, JEAG, ISO, etc.

Thus, the quality assurance items at the time of developing codes are identified each control stage on the basis of the quality control of MHI. The results are shown in the table 2. 1. 2-2 together with "(2) Quality assurance items at the time of code operation" described below.

(2) Quality assurance items at the time of code operation

a. The way of thinking as to identification

The error factors shown below are considered to be characteristics in the Performance Assessment and so these errors should be eliminated at time of the code operation.

- ① Prediction analysis over the long period (Accumulation of errors, etc.)
- ② Output values of the nuclide transport calculation such as concentration and flux is very small.
(Underflow, rounding error, etc.)
- ③ Successive execution of multiple codes (Consistency of data and unit conversion)
- ④ Selection of natural phenomenon model and its validation
- ⑤ Validation of compound phenomenon model
- ⑥ Discrepancy of physical/ chemical data

These error factors have relationship with each other from the analysis code development to the data acquisition/ operation, and it is summed up into the input/ output data of codes. For this reason, the human errors are considered as important factors in the quality assurance at the time of the code operation.

Thus, adding up the human errors to the error factors of above-mentioned ①～⑥ in the following, the quality assurance items are identified together with studying the error factors on the basis of the results when the code is operated.

b. Error factor analysis and quality assurance items

As shown in the following procedures, the occurrence factors of a possible error when the code is operated are examined, and the confirmation matters to reduce the errors and the quality assurance items are identified.

- 1) Extraction of error occurrence examples based on the code operation experiences
- 2) Analysis of causes which the errors occurred (Error factors)
- 3) Study for confirmation items to eliminate the error factors (Quality assurance items) and measures
- 4) Development into a concrete work such as outlines of the quality assurance manual

When identifying the quality assurance items based on this way of thinking, in addition to the calculation sheets mentioning set-up grounds of the calculation model and the input data, the analysis plan

sheets and input/ output data become the quality assurance items.

Sampled quality assurance items when the code is developed, improved and operated on the basis of the information at the time of operation of the quality assurance program of MHI and the Performance Assessment code are shown in the Table 2.1.1-2. And also, the quality characteristics against each quality assurance item are shown. Each quality assurance item offers the quality characteristics, such as security of reasonable existence, accuracy, etc., and these quality can be confirmed as a result for the analysis code and the analysis results.

Table 2. 1. 1-1 Requirements in general quality assurance program

A Control item	MHI	JIS	ISO9000	JEAG
Plan control	Preparation of development plan document	○	○	○
	Review of related departments	○	○	○
Design control	Preparation of design specifications	○	○	○
	Review of related departments	○	○	○
Manufacturing control	Development of software	○	○	○
	Preparation of operation manual	×	○	○
	Review of related departments	×	○	×
Verification control	Documentation of verified results	○	○	○
	Review of related departments	○	○	×
Delivery control	Preparation of inspection report	×	○	○
Non-conformity control	Planning of control procedures	○	○	○
Configuration control	Version control	○	○	○
	Control for revision of documentation	○	○	○
Registration and notice	Preparation of control ledger	○	○	○
Use control	Confirmation of function before use	×	×	×
	Execution of confidential control	×	×	×
Storage control	Planning of storage procedures	×	×	×
Procurement control	Observance of procurement control procedures	○	○	○
Disposal control	Recording into control ledger	○	○	×

Table 2. 1. 1-2 Quality assurance items at the time of code development, improvement and operation

Control item	Required confirmation contents items	Quality assurance	Quality characteristics
Planned control	<ul style="list-style-type: none"> • Analysis and definition of user's demand • Confirmation of development plan (Approach method, process, organization, etc.) 	Requirement specification Development plan document	Suitability Interoperability
Design control	<ul style="list-style-type: none"> • Clarification of design scope, coding policy and method 	Design document	Efficiency Usability
Manufacturing and installation control	<ul style="list-style-type: none"> • Confirmation of normal function • Prevention of miss-operation such as unit conversion, etc. 	Report of installation Instruction for function and operation	
Verification/ Validation control	<ul style="list-style-type: none"> • Clarification of numerical errors, applicable range, etc. • Accuracy of phenomenon model 	Verification/ Validation plan document Completion document for verification/ Validation Verification/ Validation report	Accuracy Portability
Configuration control	<ul style="list-style-type: none"> • Version control (Analytical code & documentation) 	Control ledger Non-conformity control	Usability, Traceability Efficiency, Reproducibility
Operation control	<ul style="list-style-type: none"> • Influence evaluation control Confirmation of input/ output data 	Analysis plan Input data Analysis results	Accuracy Reliability

2. 1. 2 Quality assurance items of data

In the Performance Assessment analysis, there are two types of data; i. e. one is the test data obtained from the laboratory test and the field test other than the input data that will become set-up conditions on the analysis such as geometry condition which shows the nuclear fuel condition and disposal environment, and the other is the analysis data derived from the Performance Assessment (compound analysis) such as solubility drawn from PHREEQE.

Thus, here the quality assurance items are extracted in both (1) test data and (2) analysis data.

(1) The way of thinking as to the quality assurance item identification of the test data

As far as the data obtained from the laboratory test and the field test are concerned, after obtaining the measured value (primary data) through the test, the general value (data) such as the solubility, K_d value or so on is obtained by converting (processing) this into public known value which has the meaning physically and chemically. Furthermore, after collecting (registering) these general values, the technically verified data out of these are input (selected) into the analysis code in the Performance Assessment.

Thus, when the quality assurance items of the test data are identified, they are divided into the following stages from acquisition of the measured data to input into the analysis code, the error occurrence factors are examined similarly to the time of the code operation, and the quality assurance items are studied.

- ① Primary data acquisition stage
- ② Primary data processing stage
- ③ Data registration stage
- ④ Data selection stage

(2) The way of thinking as to the quality assurance item identification of the analysis data

The analysis data are the data which are drawn with the combination of various data, Thus, when the quality assurance items of the analysis data are identified, the quality assurance items for each composition factor are necessary to be examined analyzing the composition factors of the data.

When the most complicated solubility handled in the Performance Assessment is focused on, the solubility calculated by the PHREEQE consists of thermodynamics database, field test data, laboratory test data and pre-stage analysis data.

The quality assurance items of the field test data and the laboratory test data are those of the former paragraph(1) test data. On the other hand, since the thermodynamics data are derived from the test data, the quality assurance items for them are equivalent to the test data.

Therefore, the quality assurance items of the analysis data is equivalent to the quality assurance items

of the test data to be used for the derivation of the analysis data.

Based upon the above-mentioned way of thinking, the quality assurance items of the data are identified as shown in Table 2. 1. 2-1.

Table 2. 1. 2-1 Quality assurance items of data

Stage	Required confirmation contents	Quality assurance items	Quality characteristics
Primary data planning of acquisition	<ul style="list-style-type: none"> · Through understanding experimental purpose · Training of experimenters · Standardization of experimental method · Clarification of test environment/ conditions 	① Experiment document ② Test method standard ③ Test report	Suitability Accuracy Reproducibility
Primary data processing	<ul style="list-style-type: none"> · Clarification of grounds for data conversion calculation 	④ Calculated grounds document ⑤ Technical report	Traceability Consistency
Data registration	<ul style="list-style-type: none"> · Clarification of data auxiliary information · Prevention of mis-processing of data 	⑥ Data auxiliary information ⑦ Database	Usability Efficiency
Data selection	Clarification of selection process of data	⑧ Screening standard	Traceability

2. 2 Survey of quality assurance procedure

In this section, the quality assurance procedure which are used in the following design analysis fields were investigated in order to confirm validation of the quality assurance items extracted in 2. 1.

- 1) Nuclear power and aerospace fields in which the high quality analysis is required.
- 2) Yucca Mountain and WIPP from the purpose of investigating the quality assurance procedures of the actual geological disposal facilities .

The investigation results are shown in the following.

2. 2. 1 Quality assurance in nuclear power field

The quality assurance procedures for the nuclear power field requires to list the following in the design analysis document as the quality assurance of the code operation stage, as stipulated in the quality assurance planning guide (JEAG 4102) and the design control guide (JEAG 4104) other than JEAG.

- ① Purpose of analysis
- ② Method of analysis
- ③ Assumption and condition set up when analyzing
- ④ Design requirement
- ⑤ Report and data for reference
- ⑥ Computer program, input and output
- ⑦ Unit

Furthermore, in order to improve the reliability of the analysis results in the safety examination, the data and analysis code used in the analysis and the safety examination guide as to the judgment criteria of the safety are presented from Atomic Energy Commission.

2. 2. 2 Quality assurance in aerospace field

The NASA program was investigated as the quality assurance procedure concerning the design analysis being used in the aerospace field.

In NASA, the following matters are required to assure the quality of the software.

- ① To confirm through the safety analysis which software is the most important in safety.
- ② To confirm the factors affecting performances through the safety analysis.
- ③ The design and implementation of software should be suitable for the safety requirements.
- ④ The safety requirements should be confirmed to be satisfactory in verification / validation of the software.
- ⑤ The test plan and procedures of the software should satisfy the requirements to perform the verification.

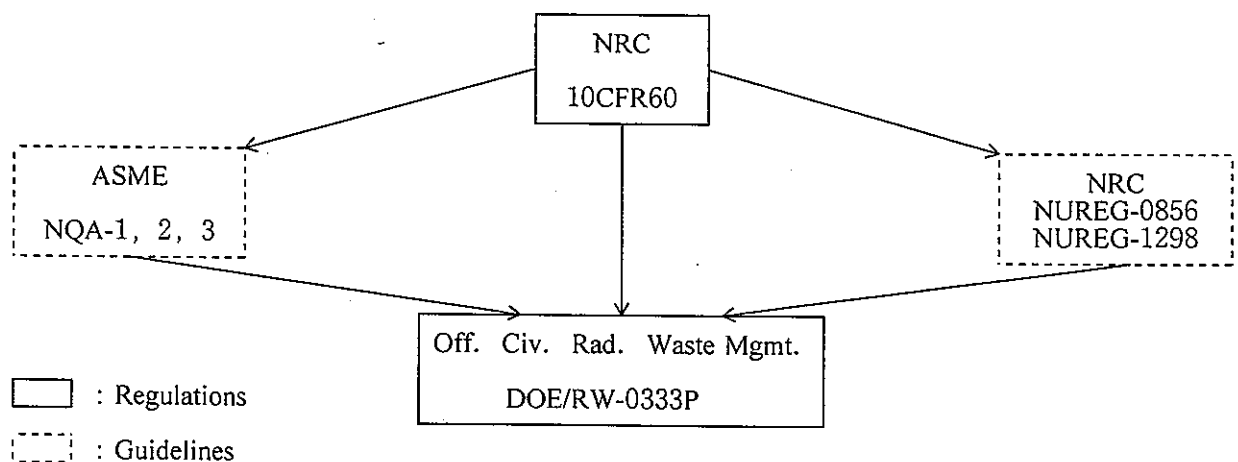
The first step is to make the quality assurance plan of the software, and the requirements are documented and performed through each stage of the life cycle of the software. And if an error is found, it will be modified. Furthermore, in NASA, the software is classed (as classified in important level) based on the safety analysis.

NASA's quality assurance program is in accordance with ISO-9000, and since the quality assurance items of MHI includes ISO-9000, there is not much difference as follows from the quality assurance items extracted in this study during code development/ improvement.

- Requirement specifications
- Development planning document
- Software design document
- Installation report
- Instruction
- Verification planning document
- Verification report

2. 2. 3 Quality assurance of Yucca Mountain

In 10CFR60, in addition to stipulation of execution of the quality assurance, the requirements concerning the quality assurance from OCRWM (Office of Civilian Radioactive Waste Management) of U. S. Department of Energy (DOE) for Yucca Mountain are summarized. This requirement document (DOE/RW-0333P), as shown in the following diagram, is the one which was integrated with American regulations and guidelines, and only Yucca Mountain is applicable.



In the above diagram (ASME NQA-1), the general items of the quality assurance are described, and in NQA-2, the quality assurance items of the software are described. In NQA-3, the requirements concerning the acquisition of the data are described. NUREG-0856, 1298 are also the requirements of the quality assurance concerning the software and the data which were presented by NRC as the guidelines.

These requirements are summarized and drawn up as the quality assurance requirements of Yucca Mountain in DOE/RW-0333P. The requirements on the quality of the software and the data and the assurance items in DOE/RW-0333P are shown in the Table 2.2.3-1.

2.2.4 Quality assurance of WIPP

The quality assurance program WIPP (Waste Isolation Pilot Plant) has been drawn up so as to mainly satisfy the requirements of NQA-1, 2, 3. It is not almost much different from requirements of the quality assurance program of Yucca Mountain.

And also, DOE has the responsibility to control WIPP, and the safety examination is performed by EPA (Environmental Protection Agency). Furthermore, the performance assessment analysis is performed by SNL (Sandia National Laboratory), and it applies for the quality of the Performance Assessment.

DOE has drawn up the quality assurance program (CAO-94-1012) as the requirements on the quality assurance. The characteristics of this quality assurance program are to generally classify control objects, and are to perform the control changing the control level according to the importance level each class.

The requirements on the quality assurance and the quality assurance items of CAO-94-1012 are summarized in Table 2.2.4-1.

Table 2. 2. 3-1(1/2) Quality assurance items of Yucca Mountain

	Confirmation items	Requirements of document contents	Quality assurance items
Model	<ul style="list-style-type: none"> ① Development contents of model are to be documented ② Mathematical reproducibility should be available 	<ul style="list-style-type: none"> ① Contents of model development 	<ul style="list-style-type: none"> ① Grounds of model selection ② Mathematical model
Development and improvement	<ul style="list-style-type: none"> ① Contents described in the right should be described in document 	<ul style="list-style-type: none"> ① (Functional requirements information) Characteristic and purpose of software Requirements in use (Handling information) Input/ output option, Datafile, Input/output data, Default, File format, Errors and countermeasures Hardware/software environment, Sample problem, Procedures for installation (Requirement specification and design specification) Performance requirements and design conditions, External data and hardware/ software interfaces, Version, of computer language Maintainability, Reliability, One for efficient function requirements, Internal interface and control logic, Software structure such as data structure/ flow, Model and mathematic technique, source codes 	<ul style="list-style-type: none"> ① Functional requirements information User information, Design information
Verification	<ul style="list-style-type: none"> ① Requirements should be satisfied 	<ul style="list-style-type: none"> ① Acceptance criteria and results for accomplishment of the verification contents, verification method and verification 	<ul style="list-style-type: none"> ① Verification problem, Standards for method finish, Acceptance criteria

Table 2. 2. 3-1(2/2) Quality assurance items of Yucca Mountain

	Confirmation items	Requirements of document contents	Quality assurance items
Validation	① Confirmed by the comparison with the experiment data and reviewing	① Contents of Validation, Validation method, Validation problem, Acceptance criteria, results	① Validation problem, Standards for method finish, Acceptance criteria
Configuration control	① To be controlled ② Version and output ③ Relation among software elements	Changed point, Changing reason, Affected software-related software	① Related document, Changed point, Changing reason, Version
Operation	① Results should be reproducible ② Selected codes should be appropriate ③ It should be within the range of confirmation	① Contents of use	① Input/ output data ② Selection reason ③ Applicable range
New data	① Contents described in the right should be described in the document (To be reproducible) ② Technical validation	① Purpose, Performed contents, Reference books, Test method, Calculation codes, Sample, Measurement equipment, Changing points of technique, Performer, Results, Date	① Test contents ② Judgment Criteria
Existing data	① Traceability ② Quality assurance should be secured by any of the following items. · Quality assurance plan is appropriate · It should be the confirmed data · Confirmation by the test · Technical review	② Factors which determined the quality assurance method, Permissible standards, Review contents	① Source ② Quality assurance method

Table 2. 2. 4-1(1/2) Quality assurance items of WIPP

	Confirmation items	Requirements of document contents	Quality assurance items
Model	① Confirmation of selection procedures of FEPs	① Quality assurance record	① FEP
Development	① It should be documented in full detail so that the design and confirmation can be carried out	① (Requirement specification) Function, Execution time, Limitations, Attributes, External interfaces (Design specification) Main configuration factors, Theory, Mathematical model, Control flow, Control logic, Data structure, Input/ output range, Code conversion method (User) User information, such as setup, etc.	① Development conditions, Hardware configuration, Attached software constraint, Control routine, Input/output data, Coding constraint, Error message, Applicable range, User's manual
Improvement	① Unexpected errors which affect output results should not occur ② Described in the right should be documented	② Affecting items, such as changing reason, changed point and FD	① Control routine ② Changing reason, Changed point, Code
Verification	① Requirements should be satisfied	① Verification/ Validation plan, Contents of verification and Validation, Review, Test results, Standard for having accomplished the verification, Form of hardware/ software, Scope of Validation	① Verification problem, Applicable range, Standard for having been verified, Related hard/ soft, Review results
Validation	① Confirmation of applicable range by comparison with the experiment data and reviewing		① Validation problem, Applicable range, Standard for having been confirmed Related hard/ soft, Review results

Table 2. 2. 4-1(2/2) Quality assurance items of WIPP

	Confirmation items	Requirements of document contents	Quality assurance items
Configuration control	<ul style="list-style-type: none"> ① Traceability should be available in the related documents ② Verification/confirmation for the changed range should be performed 	<ul style="list-style-type: none"> ① Changed points 	<ul style="list-style-type: none"> ① Version ② Changed point, Changing reason
Operation	<ul style="list-style-type: none"> ① Periodical confirmation of the output should be performed ② If the computer environment is changed, confirmation should be made ③ There should be no inconsistency between data used ④ Impact evaluation on the existing analysis of errors 	<ul style="list-style-type: none"> ①②④ Software which occurred the error, Class of errors, Corrected contents 	<ul style="list-style-type: none"> ① Confirmation problem of the software ② Confirmation problem of the computer environment ③ Consistency of the data ④ Errors
New data	<ul style="list-style-type: none"> ① Contents described in the right should be described in the document (To be reproducible) ② Validation of the data by reviewing, etc. 	<ul style="list-style-type: none"> ① Plan, Purpose, Performed contents, Test method, Sample, Measurement equipment, Changed point of technique, Test parameter, Error, Performer, Results, Data ② Confirmation method, Acceptance criteria Results of review 	<ul style="list-style-type: none"> ① Purpose of test, Condition, technique, Error, Measured value ② Confirmation method, Judgment criteria, Results of review
Existing data	<ul style="list-style-type: none"> ① Traceability ② Quality assurance should be secured by any of the following items ② -1 Quality assurance plan is appropriate ② -2 It should be the confirmation data ② -3 Confirmation by the test ② -4 Technical review 	<ul style="list-style-type: none"> ② Determined procedures, methodSelected grounds of the quality assurance method, rounds in which the quality assurance was made 	<ul style="list-style-type: none"> ① Source ② Confirmation

2.3 Summary of quality assurance items

In this paragraph, organizing is to be done in order to build up the quality control procedures in this study together with confirming its inclusiveness through comparing the quality assurance items extracted from this study with the quality assurance items in the nuclear power field, the aerospace field and the overseas geological disposal facilities.

2.3.1 Inclusiveness of identified quality assurance items

The table 2.3.1-1 demonstrates the results having examined the confirmation of the inclusiveness by comparing the quality assurance items identified in this study with those of the nuclear power field (JEAG), the aerospace field (NASA) and the geological disposal facilities (Yucca Mountain & WIPP).

Although the difference in expression of the quality assurance items depends on catch field, basically they are all included in the quality assurance items identified in this study, and the quality assurance items identified in this study cover all the items focused on the confirmation in the general quality assurance program and the quality assurance program of the overseas geological disposal facilities. In particular, it is characteristic that the quality assurance items of the operational stage has been introduced in this study.

2.3.2 Organizing to construct quality assurance procedures

The table 2.3.2-1 shows the results that the quality assurance procedures in the Performance Assessment based on the quality assurance items extracted from this study are organized, and the role (a viewpoint of confirmation) of the quality assurance items (drawn up data) for the following control items is indicated.

- (1) Quality assurance program control
- (2) Software control
- (3) Whole data set control
- (4) Influence analysis & performance assessment

In the examination of the quality assurance procedures (framework) of the next paragraph, taking into consideration the role (a viewpoint of confirmation) played by these drawn-up data, the examination considering the drawn-up items and inspection items will be performed.

Table 2. 3. 1-1 Confirmation of inclusiveness of quality assurance items

Identified quality assurance items			Nuclear power field	NASA	Yucca Mountain	WIPP	Inclusiveness
Code	Development/ Improvement	Requirement specification document Development plan document Software design document Installation report Instruction manual	Requirement specification document Development plan document Software design document Installation report Instruction manual	Requirement specification document Development plan document Software design document Installation report Instruction manual	Grounds for model selection Mathematic model Function requirement information Design information User information	FEP's Demand specification Design specification User information Control routine Improved points & reasons	○
	Verification/ Validation	Verification/ Validation planning document Verification/ Validation report	Verification planning document Verification report	Verification planning Validation document Verification report	Verification/ problem erification/ Validation method Finish & Permissible standards	Verification/ Validation problem Verification/ Validation method Finish & Permissible standards Applicable range Related soft/ hard Results of review	○
	Operation	Input data Analysis planning document Analysis results Control ledger	Analysis purpose Analysis method Assumption and conditions Reference data Program Input/ output data Unit system	none	Input/ output data Code selection reason Applicable range Reference library Changed point/ Reason Version	Software confirmation problem Computer environment Consistency of data Error Version Changed point and reason	○
Data	Acquisition & processing	Experiment planning document Test method Test report Calculated ground sheet	none	none	Test contents/ Test method Quality assurance criteria Source of data	Test contents/ Test method Confirmation method Quality assurance criteria Results of review	○
	Registration/ selection	Data auxiliary information Data base Screening criteria	none	none	none	unknown	○

none : It is not required in the quality assurance program.

unknown : It is possible to be existed as closed.

Table 2. 3. 2-1(1/2) Quality procedures in performance assessment study (Role of Drawn-up data)

Quality control items	Quality assurance program		Drawn-up data : Quality assurance items	Check for listing procedures (Viewpoint of confirmation)
1. Control of quality assurance program	1. 1 Development of mission		Requirements performance evaluation/ equality assurance	_____
	1. 2 Development of quality assurance items		Quality assurance program	Inclusiveness of quality assurance items
	1. 3 Development of quality assurance procedures		Quality assurance procedures (Manual)	Conformity, Usage of procedure method & Efficiency
2. Scenario control				
3. Software control	3. 1 Software selection	3. 1. 1 Software selection	Software requirement specification slip	Reasonable existence of software
		3. 1. 2 Software improvement/ development plan	Planning document or Function specification document	Reasonable existence of improvement / development planning document/ Inclusiveness of demand specification
	3. 2 Software design/ software drawn-up	3. 2. 1 Software design	Software design document	Accuracy of design document, Inclusiveness of improvement/ development planning document
		3. 2. 2 Coding, Installation	Installation report	Portability/ Reproducibility of software
		3. 2. 3 Software document	Used manual, Program manual	Accuracy/ Consistency/ Usage of manual
	3. 3 Verification/ Validation	3. 3. 1 Verification/ Validation plan	Planning document/ Inspection procedures	Reasonable existence of inspection & Inclusiveness/ Accuracy of test case
		3. 3. 2 Verification/ Validation performance	Completion document	Perfection of software, Input/ output data; Accuracy, inclusiveness of planning document & reproducibility
		3. 3. 3 Report	Prompt report/ Technical data	V & V; Reasonable existence, Code & Model; Reliability, Scientific protection & Consistency
	3. 4 Configuration control		Data/ model acquisition improvement requirement slip	Reasonable existence of changed requirements & Traceability of software

Table 2. 3. 2-1(2/2) Quality procedures in performance assessment study (Role of Drawn-up data)

Quality control items	Quality assurance program		Drawn-up data : Quality assurance items	Check for listing procedures (Viewpoint of confirmation)
4. Whole data set control	4. 1 Data acquisition method		Data acquisition planning document	Reasonable existence of data acquisition & Inclusiveness of data acquisition requirements
	4. 2 New data acquisition	4. 2. 1 Test plan	Test performance plan document	Reasonable existence of test, Consistency of test technique & Reproducibility
		4. 2. 2 Test performance/ Data processing	Test completion document	Accuracy of processed data, Consistency of processing method & Traceability
		4. 2. 3 Report	Prompt report/ Technical report	Reasonable existence of test, Reliability of test, Scientific protection & Consistency
	4. 3 Existing data acquisition		Acquisition Completion document	Reasonable existence of acquisition, Acquisition planning documents, Inclusiveness of existing data
	4. 4 Test data group, Data base control	4. 4. 1 Data registration	Registration completion document	Perfection of registration work, Acquisition data; Traceability, Auxiliary information; Accuracy
		4. 4. 2 Data screening	Prompt report/ Technical report	Perfection of registration, Scientific protection of screening data & Consistency of selected description
		4. 4. 3 Data base conversion	Prompt report/ Technical report	Accuracy of input/ output data, Auxiliary information; Accuracy, Traceability & Consistency
5. Influence analysis/ Performance Assessment	5. 1 Control of parameter set		Registration completion document of parameter set	Perfection of registration work & Traceability of analysis data
	5. 2 Analysis plan		Analysis planning document	Reasonable existence of analysis, Accuracy/ Inclusiveness of set-up conditions
	5. 3 Analysis		Analysis completion document	Accuracy of output data, Reproducibility of analysis & Validation of results
	5. 4 Report		Prompt report/ Performance Assessment report	Reasonable existence of analysis, Reliability of analysis, Scientific protection & Consistency

3. Examination of quality assurance procedure for Performance Assessment of geological disposal system

3.1 Development of framework for quality assurance procedures

In this section, the quality assurance procedures are developed, being based on the quality assurance items which were identified and organized in section 2.

3.1.1 Set-up policy of framework

The activity of the quality assurance is the work to secure the quality characteristics (suitability, accuracy, reliability, traceability, conservativeness portability & scientific defendability) against the software and the data on the basis of the quality assurance items. And also, in order to secure the quality characteristics, the confirmation should be performed in accordance with the control procedures such as the quality assurance manual or the document control stipulated in the document control. Based on this way of thinking, when the configuration factors of the quality assurance activity are examined, there are 4 items available.

- Constraint = It is the one which controls over the quality assurance activity such as the control procedures.
- Input of quality assurance activity = It is the object which confirms the quality of the software, etc.
- Resources = The examined material to confirm the quality of the data of the finished quality assurance and so on.
- Output of quality assurance activity = Software, etc. which were assured by the quality assurance

The framework shows the interrelations of the control procedures, and in this paragraph, the input/output and its constraint and resources are clarified in the framework.

3.1.2 Framework

Fig 3.1.2-1 shows the whole framework of the Performance Assessment which was drawn up in the above set-up policy, and each control block is of the hierarchical structure (it may be called WBS: Work Breakdown Structure in the field of the quality assurance.)

Although the detail of lower hierarchy is omitted, the quality assurance program which becomes restraint of each control has been developed due to the restraint of JEAG design control guideline by receiving the requirements of the safety security.

Furthermore, the software and data are based on the stipulated procedures in the quality assurance program, and the data preparation and inspection to secure the quality characteristics are stipulated in all

blocks, the analysis which used the software and the data assured by the quality assurance are carried out finally, and after the inspection at the time of the analysis completion, the Performance Assessment report which was assured by the quality assurance is drawn up.

Therefore, this framework can be judged that the operation is possible in Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corp.

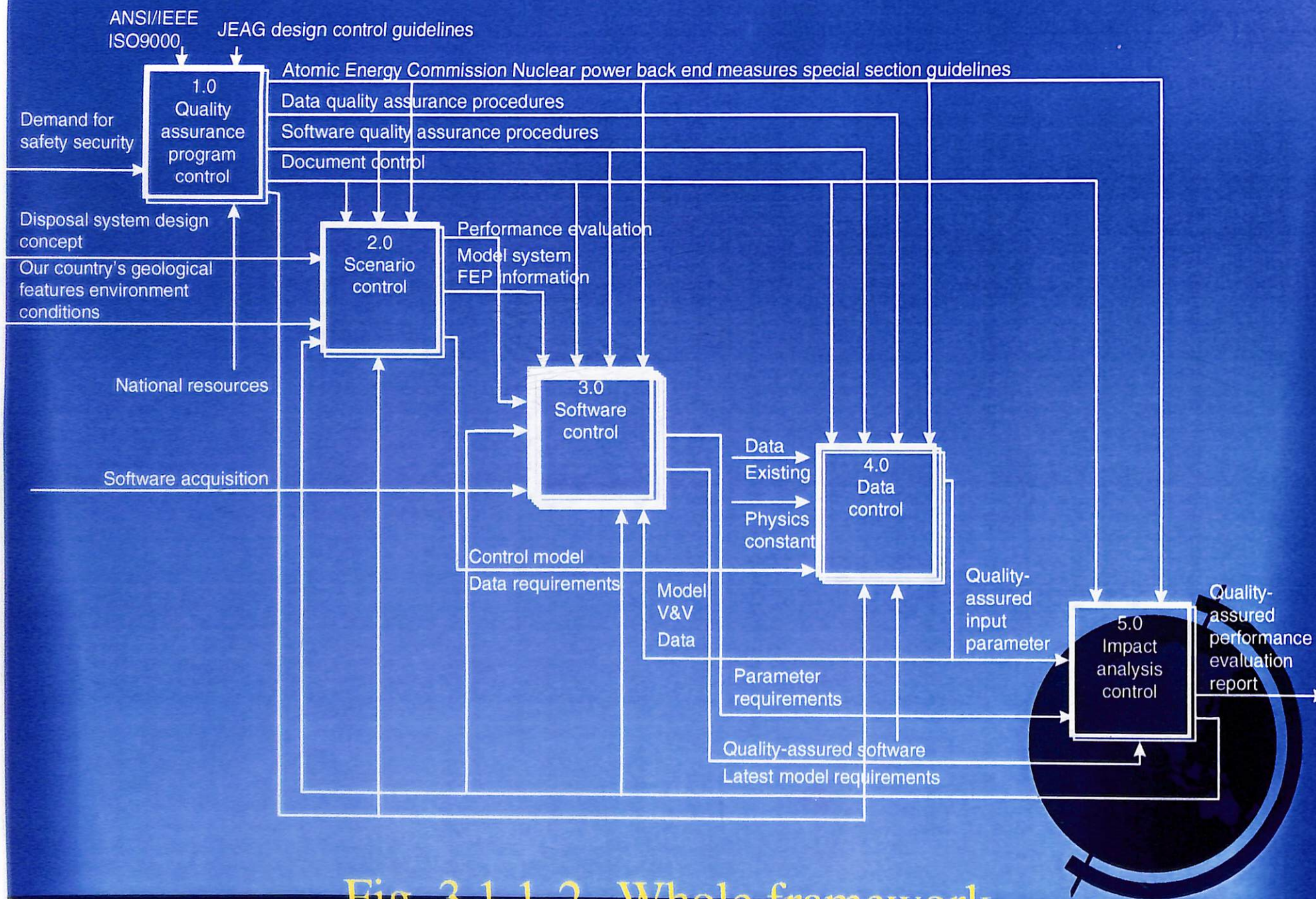


Fig. 3.1.1-2 Whole framework

3.1.3 Development of System Image

This section discusses a system image if the quality control based on the quality assurance items and the framework of data and codes shown in Sec. 2 will expand into a computer system. The expansion of the quality assurance procedure into the system is effective for environments where human error may occur and work by trial and error.

The system mainly controls the quality of data used in the performance assessment as shown in Figure 3.1.3-1. In addition, it controls the configuration of software and also it allows users to display the framework. The system consists of the following items.

① Reduced Data Database

Reduced data database controls data obtained from the geochemical laboratory.

② Parameter Database

Parameter database controls data sets which have been screened from the reduced data database.

③ Input Data Interface / Knowledge Base

Input data interface supports users to make input data according to knowledge base obtained from experts.

④ Configuration Database

Configuration database controls analysis codes, specifications and so on.

⑤ Input Set Database / Output Set Database

These databases control input and output of analysis codes.

⑥ Framework

Framework allows users to display the framework of the quality assurance procedure as reference.

A part of the control of the input/output set and the configuration has been maintained by analysis control system CAPASA developed in another study.

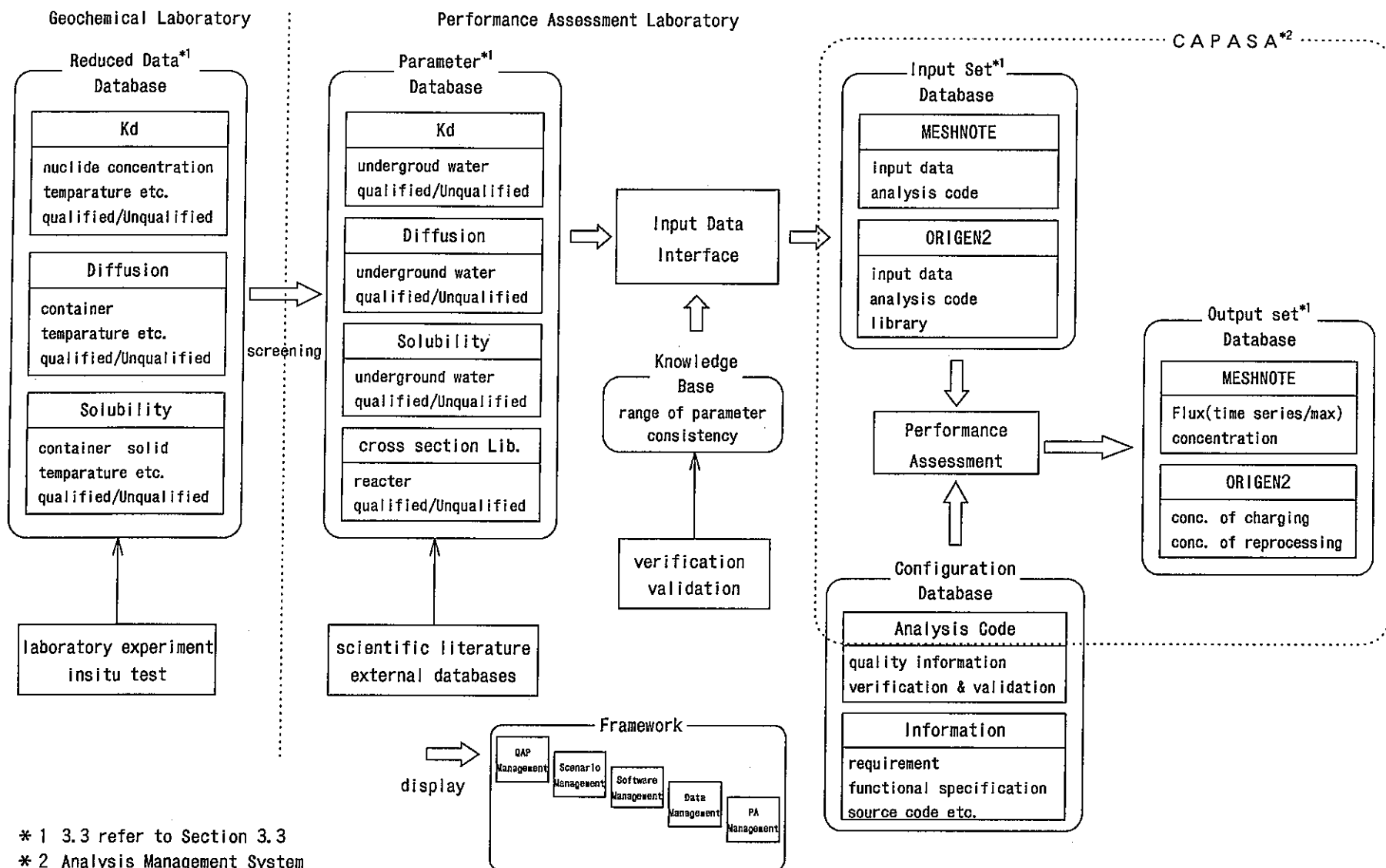


Figure 3.1.3-1 System Image

3.2 Verification Manual for the Performance Assessment Code

In order to guarantee the quality for the performance assessment code, it is necessary to produce the documentation at each stage in software life cycle and to review it from the viewpoint of the quality property shown in Table 2.3.2-1. In this section, we have substantiated the input information, constraints information and resources associated with this software verification stage and developed the general verification manual for the typical performance assessment code. As case study, we have applied this verification manual to the performance assessment code as follows.

- (1) Geochemical Code : PHREEQE
- (2) Mass Transport code for the buffer material : MESHNOTE
- (3) Mass Transport code for the fracture media : MATRICS

Next, we have discussed about an acceptance criteria, which judge whether that verification results are acceptable or not, based on the present other engineering field condition.

3.2.1 Development of the Verification Manual

The main purpose to verify the performance assessment code is to show the correctness in realizing the specification of interest code as source program(i.e. accuracy of the Performance Assessment Code) and recognize the application limits (i.e. the behavior of numerical error). In this section, we have clarified the input information, constraints information and resource to some verification activities as below. And we have developed the examples for the generic verification manual for the PHREEQE, MESHNOTE and MATRICS(See Appendices 6,7 and 8 of the final report).

- (1) Development of the Verification Plan & Check
- (2) Implementation of the Verification
- (3) Development of the Verification Report & Check

3.2.2 Establish the Acceptance Criteria

With regard to the acceptance criteria, in many case, we had showed the accuracy of the interest code by showing the good agreement of the qualitative tendency with other reference values (i.e. analytical solutions, benchmark results, etc.). So it become unclear measures. However, the most appropriate approach in showing the accuracy of the performance assessment code objectively is satisfying the quantitative acceptance criteria based on the physical meaning. In this section, we have studied the qualitative uncertainty

including an analytical solution and the results of the benchmark analysis, and we have investigated some literature associated with acceptance criteria in the other engineering field. And we have tried to establish the quantitative acceptance criteria for the performance assessment code.

As results, we have stood with viewpoint of that it is difficult to establish(standardize) the quantitative acceptance criteria based on clear physical meaning and satisfying acceptance criteria is not an absolute limitation in this verification process. If some acceptance criteria is not satisfied, it is important to clarify that cause and applicable limitation, for example an applicable limitation within 1% error range. Controlling this information with interest code, we can remove the quality reduction associated with application of performance assessment code. In present, we suggest the acceptance criteria as below.

Comparison with Analytical solution	:	5 %
Comparison with Benchmark results		
conducted by PNC	:	10%
conducted by other organization	:	20%

3.3 Development of Data Management Methodology

Data used in performance assessment consists of various data such as geochemical data and nuclide transport data. In order to secure the characteristics of the quality of these data, to make documents and perform tests gradually, and systematic data management are necessary.

In this section, data management methodology has been studied in order to clarify guidelines for applying the quality assurance activity to data obtained from experiments and analyses.

3.3.1 Study on Criteria of Data Classification Management

(1) Consequence

To make the criteria of data classification management for experimental data are to make the standard of the result (success or failure) of the quality assurance activity. The criteria are classified into two groups. One group is for long term activities such as checks of mentioned items of documents describing the data acquisition and the data processing, and review by experts. Another group is for short term activities based on a computer processing such as data registration and data selection. The criteria for data computed by analysis codes are considered as a set of the criteria for data in the middle of computation stage.

Concerning the long term activities, the criteria for procedures from the data acquisition to the data processing are to make documents describing a schedule and a method of an experiment and technical reports, and to obtain approval of the documents and the reports from other stuffs. And the criteria for procedures from the data processing to the data registration are to make documents describing the authority of the data derivation and interpretation upon the derived data in addition to the documents and the reports mentioned before, and to carry out the expert review. Data which have passed in the criteria can be registered into databases.

On the other hand, about data obtained from scientific literature, the data and auxiliary information can be registered into the databases at once, since the expert review has been already carried out. Since the data is registered in the manner of manual, tests must be carried out in order to assure the completeness of the data registration.

Concerning the data selection, data retrieval and the selection of thermodynamic databases dependent on the type of an analysis code should be considered. The data retrieval need not be maintained in detail by documents, if a database system is employed. About the selection of the thermodynamic databases, since interface programs are used to build the thermodynamic databases dependent on an analysis codes, tests of the data conversion must be carried out. After passing the tests, the thermodynamic databases are delivered to the performance assessment group.

The criteria of data computed from analysis codes are to perform activities which can satisfy the quality assurance items in the middle of the computation stage.

(2) Conclusion

- ① Criteria of the data acquisition are to make documents and to obtain approval of the documents from other stuffs.
- ② Criteria of the data processing are to make documents describing the authority of the computation and the interpretation of the result in addition to ①.
- ③ Concerning the data registration, checks for the assurance of completeness must be carried out.
- ④ Data obtained from analyses must be maintained in each processing in accordance with the data hierarchy describing the procedure of processing.

3. 3. 2 Data Hierarchy

(1) Consequence

In order to create a data hierarchy to maintain the quality of data used in an acquisition phase, a processing phase, a selection phase and a performance assessment phase, and to create the data management methodology based on the data hierarchy, study has been carried out.

Various data such as experimental data and analysis data are used in the performance assessment. In addition, the characteristics of the experimental data will change in accordance with the acquisition phase, the processing phase and a registration/selection phase. Consequently, data to be used in the performance assessment are classified into the following five categories to maintain the quality assurance items based on the characteristics of the data.

① Raw Data

Raw data are the primary measurements from an experiment, without any analysis or interpretation. The raw data are stored in a computer connected to an experimental device or notebooks.

② Reduced Data

Reduced data are the interpretation of the raw data as a physically relevant quantity. This interpretation may involve calibration factors or may involve a model and associated software to convert the raw data into a physically meaningful quantity. Physical constants from handbooks or data in the scientific literature will generally be considered reduced data.

③ Parameter

Parameter is a quantity that will be used in the performance assessment. It is based on the available data sets including reduced data.

④ Input Set

Input set consists of input files. It is gathered from parameters and reduced for being suitable to the format and the units of an analysis code used.

⑤ Output Set

Output set consists of output files produced from performance assessment calculations.

Data in each level of the hierarchy described above are classified into qualified data and unqualified data. The qualified data are data gathered under a QA program, and the unqualified data are all other data. Unqualified data sets can become qualified through expert review or confirmatory testing based on the framework "4.3 Qualification of Existing Data"

Figure 3.3.2-1 shows data hierarchy based on the data qualification. Although unqualified data can not exist in output sets, input sets and parameters in the final

performance assessment stage, they may exist in the trial stage or the preparatory stage.

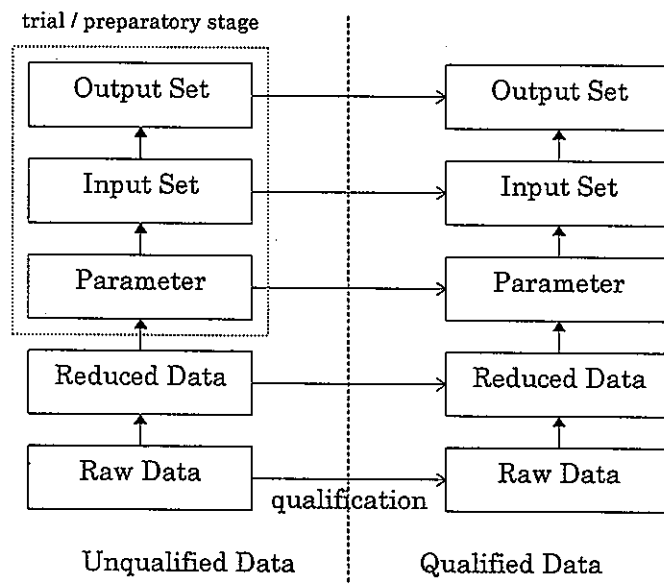


Figure 3.3.2-3 Data Hierarchy based on the Quality Control

Procedure of the data qualification consists of the following methods, which will be carried out toward all data which are the origins of a target data to be qualified.

- ① Determination that the controls under which the data were generated are similar to the QA program
- ② Rationale for selection one set of data to corroborate another set of unqualified data shall be clearly explained and justified
- ③ Confirmatory testing
- ④ Expert review

Auxiliary information should be maintained in order to carried out the data qualification and to control the quality of data in addition to data(quantities). The auxiliary information for each level of the data hierarchy are as follows. Raw data is omitted because it may not necessarily be controlled by a database system.

- ① Reduced Data
 - the name of the person who did data acquisition / experimental devices / date
 - experimental methods / conditions
 - the authority and the method of the reduction
 - the interpretation of the result

- information of the scientific literature (only for data obtained from the literature)

② Parameter

- the name of the person who did making / date
- purposes / uses
- the method of the derivation
- history
- the standard of screening

③ Input Set

- the name of the person who did making / date
- purposes / uses
- the name of the analysis code
- history

④ Output Set

- the name of the person who did calculation / date
- the interpretation of the result

As mentioned above, all data used in the performance assessment can be classified into the data hierarchy. Each level of the hierarchy above reduced data should be controlled by a database system for the quality assurance. Central management and distributed management will be considered as the method of the data management. In the case of PNC, the distributed management shall be suitable because various types of data are being obtained in several departments of PNC. For instance, reduced data and parameters such as solubilities and thermodynamic databases are controlled in the geochemical laboratory, and input data sets of performance assessment codes are controlled in the performance assessment laboratory. And if input data sets will be made, data controlled in the geochemical laboratory are retrieved and input data sets are made according to the retrieved data.

If data in upper level of the hierarchy will be made by retrieving data controlled in other departments as described above, the followings are essential in terms of the quality control.

- | | |
|----------------|---|
| ① tracability | maintains the history of the data acquisition |
| ② completeness | completes the data registration |
| ③ consistency | secures the consistency of data stored in plural databases. |
| ④ security | restricts data modification and fully controlled data access. |
| ⑤ usability | provides a convenient reference. |

Database based on the data hierarchy and the methodology of the data management mentioned above shall requires the following abilities.

① Data hierarchy function

Structure of the database is based on the data hierarchy shown in figure 3.3.2-1 and the history of data evolution between each level of the hierarchy is controlled.

② Auxiliary information function

Auxiliary information is maintained in addition to data (quantities).

③ Qualification function

Identifiers of the quality of data (qualified or unqualified) and information about the data qualification are maintained.

④ Distributed data management function

Data are controlled under distributed environment and the database management system provides the ability to conveniently retrieve data and to maintain the consistency of data.

⑤ Data history function

The system is capable of tracking changes to the location of data

⑥ Security function

Privilege of data access is provided to prevent data from deleting and modifying illegally.

(2) Conclusion

① Data used in the performance assessment are classified into raw data, reduced data, parameter, input set and output set according to the characteristics of the data.

② The data hierarchy should maintain auxiliary information based on the quality assurance items in addition to data (quantities). And data in the hierarchy except the raw data should be controlled by a database system.

③ Procedure of the quality control about data defined in the framework will be carried out with data classified into the data hierarchy.

④ Taking practical use of the database system into consideration, distributed data management is suitable for PNC.

3. 3. 3 Applicability to Other Studies

(1)Consequence

Applicability of the quality assurance items about data and the data management methodology to Kd, diffusion coefficient and thermodynamic data has been studied.

① Kd/diffusion coefficient

Kd and diffusion coefficient have been already controlled in the form of spread sheet. The quality assurance items shown in Section.2 can involve the items of the spread sheet. Concerning the data management, Kd and diffusion coefficient are classified into reduced data in the data hierarchy.

② thermodynamic data

As for acquisition of thermodynamic data and creation of a thermodynamic database dependent on the type of an analysis code, the quality of database conversion programs can be controlled by the framework. And the quality assurance items in the conversion can be applied a part of items of the performance assessment calculations. Concerning the data management, the thermodynamic databases are classified into parameter in the data hierarchy and aqua species and minerals of which the thermodynamic database consists are classified into reduced data.

(2)Conclusion

- ① The quality assurance items shown in Section 2.1.2 can involve the items of databases for Kd and diffusion coefficient used in PNC.
- ② The data hierarchy can be applicable to thermodynamic data and databases.
- ③ The quality assurance items for data can be applicable to the thermodynamic database. And the quality assurance items for performance assessment and software management can be applicable to database conversion programs.

4. Conclusion

This paper summarized the quality assurance procedure for the quality assurance items to be considered in the Performance Assessment of geological disposal system, according to the results of quality assurance in and out of the country, and also discussed the methods for verifying the analysis codes and the data management method.

(1) Identification of Quality Assurance Items, and Survey of Existing Quality Assurance Procedure

- ① For the quality assurance procedure for design analysis, we have mainly surveyed/summarized the safety review guide lines in the field of nuclear power, the results by NASA in the field of aerospace, and the requirements for quality assurance by DOE (Yucca Mountain, WIPP) in the field of overseas geological disposal facilities.
- ② As the items of the data and analysis codes to be confirmed from the view point of error elements and quality assurance, the consistence of input data and analysis model and the range of application should be specified, so it is pointed out here.
- ③ It is checked if the detected quality assurance items meet the quality assurance requirements of the surveyed design analysis.
- ④ Upon the check results, the necessity of insufficient items as the quality assurance requirements for the Performance Assessment was discussed, while necessary requirements were added to the quality assurance items for Performance Assessment by PNC.

(2) Development of Framework for Quality Assurance Procedure

- ① By classifying the identified quality assurance items into the check items and record items, the control requirements in Performance Assessment were summarized as a control flow.
- ② Analysis codes were discussed respectively as the current codes and development/improvement codes, and the life cycle was specified in the stages of requests, design and preparation, V & V, operation and disposition.
- ③ Data were discussed respectively as current data and newly obtained data, and it is proposed that the analysis parameters be classified according to its importance, and that each data be controlled accordingly.
- ④ Based upon the control flow, the basic requirements for configuring a quality control system were discussed in case they are developed into computer system.

(3) Development of the Verification Methodology for Performance Assessment Code

We have prepared verification manuals for MESHNOTE, PHREEQE and MATRICS which are near

field performance assessment codes of PNC. And we have studied on the strategy to establish an applicable limit and acceptance criteria for each performance assessment models.

(4) Studies on Data Management Methodology

- ① Top down approach and bottom up approach were studied in order to construct data management process.
- ② Data hierarchy were constructed, based on characteristics for the method of data acquisition and data treatment etc., and the quality for data. In addition, the transfer of data in data hierarchy were studied.
- ③ The research were carried out about Yucca Mountain Project. And its management were evaluated the availability.
- ④ The database structure were built based upon characteristics and the quality, the sensitivity of data in performance assessment. And we were confirmed the validity by applying the practical data for the database.

Acknowledgement

Staff members at PNC, Waste Technology Development Division, Geological Isolation Technology Section have been extremely helpful in providing guidance and assistance throughout this study.