

地層処分システム性能評価の 品質保証に関する研究（Ⅱ）

（動力炉・核燃料開発事業団 研究委託内容報告書）

－研究概要－

1998年2月

技 術 資 料		
開示区分	レポ ー ト No.	受 領 日
Ⅱ	J1216 98-007	1998.7.9
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		

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（Ⅱ）

房枝茂樹*¹、柳沢一郎*¹、片岡伸一*³、島田隆*²、前田一人*²、渥美至弘*¹
惣万芳人*¹、上田憲明*¹、山崎順子*¹、井田俊雄*¹、井上雅彦*¹、有川浩*¹
高浦勝寿*¹、武田博幸*¹、北尾秀夫*⁴、立川博一*⁴

要旨

地層処分システムの性能評価においては、データ、評価モデルおよび解析コードの個々の品質を保証すると共に、解析者によるコードの運用やデータ取得に係わるプロセスについても十分な信頼性を持たせ、総合して評価結果の品質を保証していく必要がある。

本研究では、性能評価で用いる解析コードおよびデータを対象として、これらの品質を保証していくための手順と信頼性に関する情報の管理・運用手法の体系的な構築を目的として、以下の検討を実施した。

- (1) 昨年度にまとめた品質保証手続きのフレームワークに基づき、性能評価モデルの検証手法、データ分類管理手法、データの処理プロセスに対する管理項目や静的／動的管理項目の検討を行い、これらを反映した品質保証要領書を作成した。
- (2) 性能評価解析コードを対象としてコードの選定または開発・改良、検証・確認に関する全情報を集約し、品質保証要領書に基づき、資料の再整理をするとともに、これらの情報に基づき動的な管理を半自動的に実施することを念頭に置いて、知識化情報の抽出を行なった。また、動的な品質保証活動を対象として、ここで抽出された知識化情報に基づいて計算機により解析者の支援を行うことを目的とした品質保証システムの仕様を検討し、システムを製作した。
- (3) 第2次取りまとめにおける性能評価を念頭におき、これまでの運用より得られた知見および品質保証システムを考慮して、解析管理システムの機能の高度化を実施した。
 - 生物圏評価コードを新規に導入するとともに、これと核種移行解析コードとの連成方法を検討し、解析コード間のデータ接続を行うインタフェースプログラムを開発した。
 - 解析業務の増大に対応するため、複数の解析者が同時に解析管理システムを運用できるようにシステムを拡張した。また、様々な計算機への移植や大規模計算コードの導入に向けてのシステムの拡張性について検討した。
 - これまでの運用を踏まえて、インタフェースの高度化およびデータベースの拡張を実施した。

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内容結果である。

契約番号 090D0267

事業団担当部課室：環境技術開発部 処分システム解析室 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エストシステム技術課

* 4 原子力応用技術部放射化学グループ

The Study on the Quality Assurance of Performance Assessment for Disposal System (II)

Shigeki Fusaeda*¹, Ichiro Yanagisawa*¹, Shinichi Kataoka*³, Takashi Shimada*²

Kazuto Maeda*², Yoshihiro Atumi*¹, Yoshindo Souman*¹, Noriaki Ueda*¹

Jyunko Yamazaki*¹, Toshio Ida*¹, Masahiko Inoue*¹, Hiroshi Arikawa*¹

Katsutoshi Takaura*¹, Hiroyuki Takeda*¹, Hideo Kitao*⁴, Hirokazu Tachikawa*⁴

Abstract

We have carried out the following studies in order to create the systematic methods for the control and operation relating to the procedure and reliability for guaranteeing the quality of analysis codes and data to be used in performance assessment (PA).

- (1) Based upon the framework describing the procedure of quality assurance (QA) developed in the last fiscal year, the validation methods for PA models, the methods for data classification, management items for data processing, and static/dynamic management items were studied. And a QA manual reflecting them has been created.
- (2) Based upon the QA manual, information about selection, development/modification, verification/validation of PA codes was collected and put in order. And keeping the dynamic QA activity in mind, knowledge information has been extracted. Furthermore the specification of QA system, which can support analysts in the dynamic QA activity according to the knowledge information extracted here, was studied and the system has been developed.
- (3) Keeping PA calculations for the second progress report in mind, analysis management system CAPASA has been enhanced in consideration of the experience through the practical use and the requirement as a QA system.
 - A biosphere code has been introduced into the CAPASA. Moreover the methods of coupling analysis using the code and nuclide transfer codes have been studied and an interface program for data connection between the analysis codes has been developed.
 - To cope with the increase of the PA calculation tasks, the CAPASA has been improved to allow simultaneous use. Moreover extendibility such as the conversion to the various type of computers and the introduction of large size codes has been studied.
 - Based upon the practical use, the enhancement of interfaces and the expansion of databases have been carried out.

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

PNC Liaison Waste Technology Development Division, 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

* 4 Radiochemistry Application Group, Nuclear Application Technology Department

目次

1. まえがき	1
2. 品質保証要領書の作成	2
2. 1 データ分類管理手法の検討	2
2. 1. 1 データ登録の際の補助情報整理／詳細化	2
2. 1. 2 データの処理手順／管理項目の検討	2
2. 1. 3 データの登録方法のレビュー	2
2. 2 解析コード、データに係わる確証手法の構築	2
2. 2. 1 YMP、WIPP 情報の収集	3
2. 2. 2 公開情報の収集	3
2. 2. 3 一般的な確証マニュアルの作成	3
2. 2. 4 性能評価解析コードの確証マニュアルの作成	4
2. 3 品質保証要領書の作成	4
2. 3. 1 静的／動的管理項目の検討	4
2. 3. 2 動的管理項目の詳細	5
2. 3. 3 品質保証要領書の作成	5
2. 3. 4 品質保証要領書のレビュー / 試運用	5
3. 品質保証システムの開発	5
3. 1 解析コードの運用に係わる情報の知識ベース化	5
3. 1. 1 性能評価解析コードの知識化情報の収集	5
3. 1. 2 知識化情報の整理／検討	6
3. 2 品質保証システムの構築	9
3. 2. 1 核種移行用データセット管理機能の開発	9
3. 2. 2 共用データ機能の開発	12
3. 2. 3 入出力データ確認機能の開発	12
3. 2. 4 まとめ	13
4. 解析管理システムの高度化	14
4. 1 新規解析コードの導入	14
4. 1. 1 解析コードの分析	14
4. 1. 2 解析管理システムへの導入	15
4. 1. 3 総合的な解析を実現するための インタフェースプログラムの開発	16
4. 2 機能拡張	17
4. 2. 1 複数計算機への展開	17
4. 2. 2 インタフェース機能の高度化	17

4. 3 他機種・大規模解析コードへの展開	18
4. 3. 1 他機種への拡張性	18
4. 3. 2 大規模解析コードの導入	18
5. あとがき	20

謝辞

図目次

図 3. 1. 2-1 知識化情報の利用に関するシステム概念	8
図 3. 2. 1-1 核種移行用データベースのデータ構造	11
図 4. 1. 1-1 AMBER の制御フロー	15

表目次

表 4. 3. 1-1 CAPASA の他機種への拡張	19
-----------------------------	----

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、これらの品質を保証するための手順、手法等について検討を行うと共に、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、第二次とりまとめに反映できる品質保証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体系を構築することを目的とする。

この研究の一貫として、昨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（フレームワーク）を、動力炉・核燃料開発事業団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共に、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管理手法の検討を行ってきた。

本年度は、さらに、これらの成果を踏まえて、性能評価で用いる解析コード及びデータを対象として、これらの品質を保証していくための具体的な手順と品質に関する情報の管理・運用手法の体系的な構築を目的として、以下の検討を実施した。

- (1) 性能評価に係わるモデル・データ・コードに関する品質保証活動の手順、手続きを具体的に記述した品質保証要領書を作成する。
- (2) 解析管理システム「CAPASA」を基盤として、解析コードおよび解析用データの統合的運用手法の高度化、ならびに解析に使用するデータの品質情報を付加することにより、解析結果の信頼性を保証していくためのシステムを構築する。

2 品質保証要領書の作成

本章では、品質保証要領書を作成する上で放射性廃棄物処分において特有な要素に位置づけられると考えられるデータ分類管理手法、検証・確証手法の検討を行なった後、品質保証要領書の作成を行なった。

2.1 データ分類管理手法の検討

本節では、データの系統的な管理を実現するため、分類管理手法、管理項目、管理項目の適切性・網羅性について検討した。

2.1.1 データ登録の際の補助情報整理 / 詳細化

本研究では、CAPASA のプロパティデータベースに核種移行データを登録する際に必要となる付随情報について検討した。ここでは、MESHNOTE, MATRICS コードで必要とする入力情報(溶解度、分配係数、拡散係数、ガラスデータ、幾何形状情報、物理データ、化学データ、水理情報、地下水組成情報)について補助情報を整理した。各データの補助情報は、名称、作成日、作成者、追跡情報、コメント(技術的な情報を含む)に分類した。

2.1.2 データ処理手順 / 管理項目の検討

本検討では、データに対して階層構造を持たせた上で、各データの処理手順・管理項目について分析を行なった。その結果、管理項目としては、前年度に作成した品質保証手続きの新規データ取得、既存データ取得ならびに解析管理に展開することが出来た。

2.1.3 データの登録方法のレビュー

米国では、すでにユッカマウンテンならびに WIPP プロジェクトにおいて技術データベースを開発・運用している。本研究では、各データの補助情報に対する網羅性の確保を目的として、補助情報のレビューを米国の SAIC に依頼した。その結果、特に問題の無いことを確認した。

2.2 解析コード、データに係わる確証手法の構築

昨年度には、ソフトウェアのライフサイクルに応じた段階的な品質保証活動を規定したフレームワークに基づき、各種解析コードに適用可能な一般的な検証マニュアルを作成した。また、PHREEQE、MESHNOTE および MATRICS の4コードに対して具体的な検証マニュアルを作成した。これに引き続き、本年度は一般的な確証マニュアルを作成し、同じく PHREEQE、MESHNOTE および MATRICS の4コードに対して具体例を展開した。

本研究では、一般的な確証マニュアルの作成に先立ち、米国 YMP,WIPP の確証に関する調査・整理を行い、海外の動向や確証事例を把握した。また、INTRACON、INTRAVAL などの国際確証プロジェクトの調査を行い、そこで採用された確証問題、確証プロセス等を把握した。これらの情報にもとづき、昨年度に作成したフレームワークを念頭に置きつつ、一般的な確証マニュアルを作成し、さらに前記4つのモデルについて具体的な確証マニュアルを作成した。

2.2.1 YMP,WIPP 情報の収集

性能評価解析コードに係わる確証マニュアルを作成するにあたり、先行する米国 YMP、WIPP の確証事例を調査した。

調査の結果、両機関では以下の核種移行解析コードが用いられていることが判った。

① YMP ; FEHM (Finite Element Heat and Mass transport code)

② WIPP ; NUTS、SECOPT2D

WIPP の2つの核種移行解析コードは、それぞれ水理解析コード BLAGFLO、SECOFL2D と組になって使用され、処分場周辺の移行媒体によって使い分けがなされている。YMP,WIPP とともに、これまでに各コードの検証や関連ドキュメントの整備が精力的に行われているものの、確証に関しては近年着手したに過ぎないようである。従って、本節では YMP,WIPP の確証計画に関する現状を整理した。

2.2.2 公開情報の収集

昨年度と同様に、公開文献検索データベース JICST を利用した情報収集を試みた。本年度は、INTRACON、INTRAVAL などの国際プロジェクトで採用された確証手順、確証問題および確証用データに関する情報収集を目的とした文献検索を行った。

調査の結果、INTRACON に関してはレベル2およびレベル3、INTRAVAL に関してはフェーズ1およびフェーズ2で採用されたテストケースを核種移行解析コードの確証問題として参考にできることが明らかになった。そこで、各プロジェクトで採用された確証問題と各参加機関の確証手順を把握する観点から調査結果の整理を行った。また、動燃殿の所有する核種移行解析コード MESHNOTE および MATRICS への上記確証問題の適用可能性も併せて検討した。

2.2.3 一般的な確証マニュアルの作成

4つの性能評価解析コードに対して具体的な確証マニュアルを作成することを念頭に置くとともに、これまでの調査結果を反映しつつ、一般的な確証マニュアルを作成した。確証マニュアルの概略は、昨年度に作成した検証マニュアルと大きな相

違はない。すなわち、ソフトウェアの検証・確認に関するフレームワークに準拠している。検証・確認の一般的なマニュアルとして共通に規定できるものは、昨年度に作成したフレームワークに取込み、若干の改訂を加えた。また、検証・確認の解析作業を進める上での具体的な手順については、それぞれ個別に規定した。本マニュアルでは確認手順として、以下のプロセスを規定した。

- ① モデルのレビュー
- ② データのレビュー
- ③ テストケースの選定
- ④ 試験系のモデル化
- ⑤ 容認基準の設定
- ⑥ キャリブレーション
- ⑦ 予測解析
- ⑧ 食違いの分析
- ⑨ 候補モデルの比較
- ⑩ 試験方法の改善・新規提案

これらの手順は、他の諸機関で行われているものと概ね同様である。ただし、解析結果と実測値の一致は、対象とする試験系を如何にモデル化したかに強く依存するため、試験系をモデル化の際の考え方を明文化するよう規定した。また、これらの手順は絶対的なものではなく、対象とするテストケースと利用可能な実測値の内容に応じて個別に検討すべきものである。本確認マニュアルでは、これらの手続きを取捨選択し、必要に応じて繰り返し実施するよう規定した。

2.2.4 性能評価解析コードの確認マニュアルの作成

本年度調査した確認問題のうち、MESHNOTE および MATRICS に適用可能と考えられるケースが幾つかある。一般的な確認マニュアルに基づき、それぞれの解析コードの確認マニュアルを作成した。

2.3 品質保証要領書の作成

2.3.1 動的 / 静的管理項目の検討

昨年度は、表 - 1 に示すようにソフトウェア管理、データセットの管理、解析の管理に分類された品質保証項目を設定した。本検討では、反復性・規則性のある作業については、動的品質管理と定義し、また、反復性・規則性の無い作業については静的品質管理と定義し、各項目をそれぞれ分類した。

2.3.2 動的管理項目の詳細化

反復性・規則性が高い作業については、チェックシートによる検査や計算機上での管理について検討した。本検討では、解析終了段階での一般的なチェックシートに加え、性能評価コードの検査シートを作成した。また、計算機上での管理は、解析コードの入力データ作成段階ならびに解析終了段階での半自動化検査方法について検討した。本検討では、報告書の作成段階の動的管理についても検討した。

2.3.3 品質保証要領書の作成

本検討では、データ分類管理手法の検討・検証 / 確証手法の検討、静的 / 動的管理手法の検討結果に基づき品質保証要領書を作成した。

2.3.4 品質保証要領書のレビュー / 試運用

本研究で作成した品質保証要領書を米国の SAIC 社がレビューし、以下のコメントがあった。

- ・体制の明確化。
- ・構成管理を加えること。
- ・承認システムを導入すること。
- ・簡単な文書で要領書を作成すること。
- ・米国は半自動管理の概念が無い。

以上のコメントを反映し、品質保証要領書の再作成を行なった。

3.1 解析コードの運用に係わる情報の知識ベース化

3.1.1 性能評価解析コードの知識化情報の収集

これまでに動燃殿で蓄積されてきた知見に基づき、燃焼計算コード ORIGEN2、地球化学コード PHREEQE、緩衝材中の核種移行解析コード MESHNOTE 2 および亀裂媒体中の核種移行解析コード MATRICES に関する知識化情報の調査を実施した。

調査の結果、以下に示す知識化項目が抽出され、それぞれの解析コードについて現状の知見を整理した。

(1) ORIGEN 2

① 入力データのミスに関する不具合事例

- ② ORIGIN 2 コードのバージョンの違いによる結果への影響
- ③ ORIGIN 2 解析結果の妥当性の検証

(2) PHREEQE

- ① 熱力学データベースの制限
- ② 収束回数情報
- ③ 変形 Davies 情報
- ④ pe 変化オプション情報
- ⑤ 検証：手計算
- ⑥ 検証：ベンチマーク解析
- ⑦ 検証：既存データとの比較
- ⑧ 検証：実測データとの比較
- ⑨ 入力データのミスに関する不具合事例
- ⑩ モデル化のミスに関する不具合事例

(3) MESHNOTE 2

- ① 緩衝材の空間分割数の精度に対する影響
- ② リザーバ体積、ミキシングセル体積の解析結果に対する影響
- ③ 溶解度、インベントリ、分配係数の変化に対する最大放出率への影響
- ④ ガラスの溶解速度の精度に対する影響
- ⑤ 短半減期核種を考慮した場合の解析結果への影響
- ⑥ パラメータの時間・空間変化の精度に対する影響
- ⑦ 想定外の沈殿フロントの進展
- ⑧ 溶解度制限モデルと一次溶解反応モデルの内側境界条件としての支配関係

(4) MATRICS

- ① 出力開始時刻の解析結果への影響
- ② ワーニングメッセージ
- ③ 簡略化モデルによる影響解析

3.1.2 知識化情報の整理／検討

各解析コードについて収集された知識化情報に基づき、今後の解析作業への反映事項と知識化情報の具体的な利用方法の整理／検討を行った。本研究では、これら

の知見を利用する際に枠組みとなる共通の考え方を示し、4つの解析コードの知識化情報を具体的に利用する方法を検討した。すなわち、収集された知識化情報はそれぞれが個別に検討されたものであり、幅広い内容を含むものである。これらの全てについて知見の充実や品質確保を目的とした再計算を実施することは現実的に困難である。また、これらの全てに対して個別にシステム化を行うことは、システム側の機能が複雑になると同時に、それぞれの機能自体が知識化情報に強く依存した固有なものとなり、将来的な研究開発の進捗に伴う知見の更新・見直しを反映することが困難になる。そこで本年度は、図 3.1.2-1 に示す概念を各解析コードの知識化情報の整理・集約を行うに際して共通の枠組みとし、システムとしての拡張性・汎用性を考慮した。すなわち、システム側で何らかの処理を行うものとシステム内で単純に参照するものと大きく分類することとした。

これらの枠組みをシステム上に展開するには、以下の諸機能が必要となる。

- ① 解析実施者による入力条件の確認を行うためのサマリ表示機能
- ② 指定された入力パラメータが予め設定された適用範囲を逸脱する場合等の 警告表示機能
- ③ 解析解との比較機能
- ④ 既存の解析結果との比較機能
- ⑤ 既存の知識化情報の閲覧機能

これに基づき、当面の優先度を踏まえつつ、前節で抽出した知識化項目を4つの性能評価解析コードについて集約・整理した。

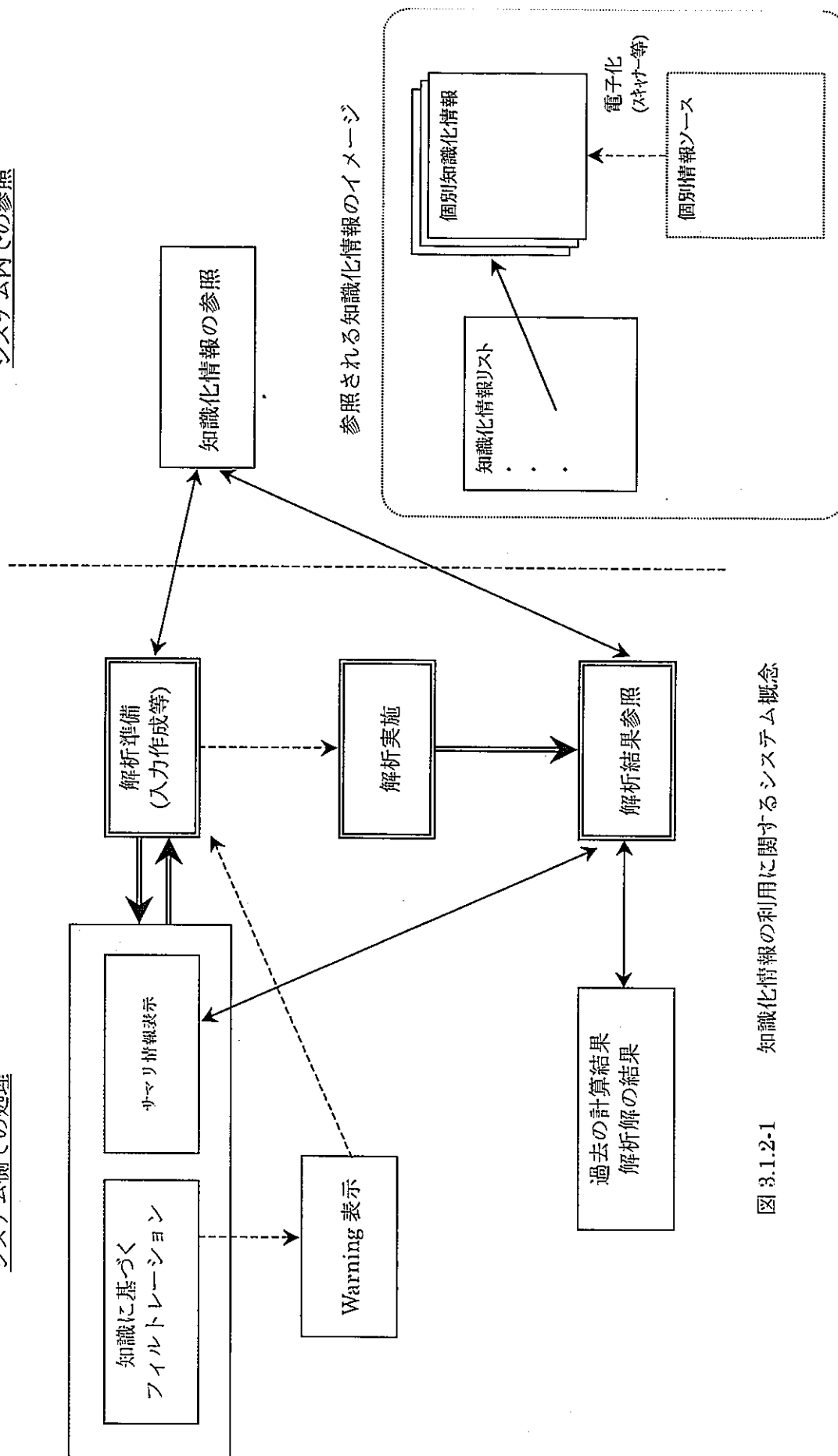


図 3.1.2-1 知識化情報の利用に関するシステム概念

3. 2 品質保証システムの構築

解析作業の多くは、動的品質に基づいたものであり、解析者に多大な労力や時間を要求すると共に、ヒューマンエラーが介在しやすい作業が多く含まれる。このため、解析作業に係わる品質保証活動を行う際には、計算機により支援し、如何に解析者の負担を減らし、正確に行うかが重要となる。本研究では、CAPASA 上で行なわれる解析の結果の品質向上を目的として、解析コードの入力データの妥当性や整合性確認および解析結果の評価支援等を行う品質保証システムを開発した。

品質保証システムは、「性能評価手法の統合的運用に関する研究」において構築してきた解析管理システム「CAPASA」を基盤として、品質保証要領書および知識ベースに基づき開発された。

3. 2. 1 核種移行用データセット管理機能の開発

核種移行用データセット管理機能は、核種移行解析において、解析コードの入力データ中に設定されるパラメータを対象として、データ（値）およびその品質情報を管理することを目的とする。

(1) データベースの開発

データ分類管理手法の検討結果に基づき、核種移行解析において重要となる以下のデータセットを対象として、データ（値）およびデータの処理手順や履歴等の補助情報を管理するプロパティデータベースを開発した。

(a) 元素情報データセット

核種移行解析に用いられる核種の半減期や被爆量換算時に用いられる濃度限度値を管理する。データは、ORIGEN2 のライブラリから作成される。

(b) インベントリデータセット

ガラス固化体内の核種のインベントリを管理する。データセットは、ORIGEN2 の解析結果から作成される。

(c) 溶解度データセット

元素の溶解度を管理する。データは、他部門より受け渡されたファイルを用いて作成する。

(d) 分配係数データセット

元素の分配係数を管理する。データは、他部門より受け渡されたファイルを用いて作成する。

(e) 拡散係数データセット

元素の拡散係数を管理する。データは、他部門より受け渡されたファイルを用いて作成する。

図 3.2.1-1 に、上記データセットのデータ構造を示す。なお、プロパティデータベースは、品質管理および運用の観点から以下の制約を設けることとする。

- ① プロパティデータベースには、原則として専門家のレビュー等により、品質が保証されているデータのみを格納する。
- ② データの新規登録は、本システムの管理者のみが行うことができる。
- ③ 全ての解析者が、データの参照および共用データ機能を用いて性能評価解析へ利用することができる。
- ④ 解析の再現性を確保するため、一度登録されたデータは、一切削除することはできない。

(2) ユーザインタフェースの開発

プロパティデータベースへのデータセットの登録および参照を行うユーザインタフェースを各パラメータの種類毎に開発した。本ユーザインタフェースを用いたデータセット登録は以下の手順に従う。

(a) インベントリデータセット

データセットの登録は、あらかじめ CAPASA を用いて、品質保証要領書に記載された手順に従い ORIGIN2 の解析および結果の評価を行い、これをグループデータベースに格納する。この後に、本研究にて開発したユーザインタフェースを用いて、データセットの作成元となる解析結果の選択および補助情報の設定を行い、データベースに格納する。

(b) 元素情報データセット

元素情報データセットは、本研究で開発したユーザインタフェース上で、CAPASA のデータベースに格納された ORIGIN2 の DECAY ライブラリの選択、ならびに補助情報の設定を行うことにより、データベースに登録する。

(c) 溶解度データセット

溶解度データセットは、他部門からフロッピーディスクまたは電子メールの添付ファイル等にて受け渡された溶解度および補助情報を格納したファイルを、本研究で開発したユーザインタフェース上で読み込み、内容を確認した後に、データベースに登録する。

(d) 分配係数データセット

分配係数データセットは、溶解度データセットの登録と同様な方法で登録する。

(e) 拡散係数データセット

拡散係数データセットは、溶解度データセットの登録と同様な方法で登録する。

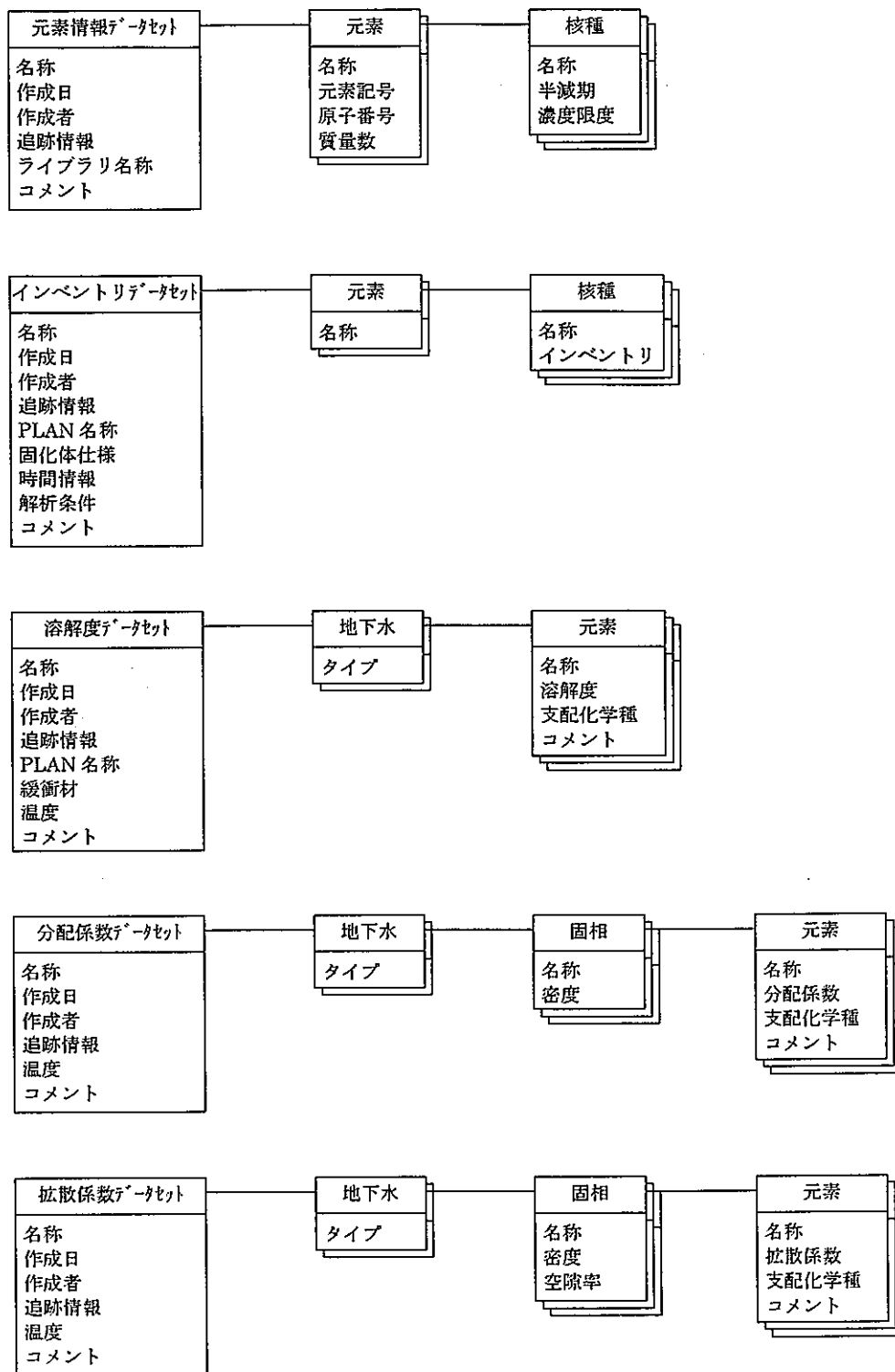


図 3.2.1-1 核種移行用データベースのデータ構造

3. 2. 2 共用データ機能の開発

複数の解析コードの入力データ中に共通して設定されるパラメータの整合性を維持することが、性能評価結果の品質を保証する上で重要である。一方、パラメータの整合性を維持するためには、複数の入力データを同時に、参照する必要があり、ヒューマンエラーが発生する可能性が高く、また、多大な労力を必要とする。また同様に、コード単体を用いた解析においても、パラメータ入力時にヒューマンエラーの発生が考えられる。

共用データ機能は、ヒューマンエラーの防止や入力データ間のパラメータの整合性確保を目的としており、プロパティデータベース内のデータを、解析コードの入力データに自動的に転送する機能である。本機能は、CAPASA で扱う PLAN の機能を拡張し、新規に追加したプロパティデータベース内のデータと解析コードを関連付けるデータストアオブジェクトおよび既存のデータフローオブジェクトとデータフィルターにより実現されている。

データストアオブジェクトは、データフローを用いて解析コードを表現した PLAN オブジェクトと接続される。そしてデータストアから PLAN オブジェクトへのデータの転送は、PLAN オブジェクト間に定義されたデータフローの処理と同様に、フィルターに関連付けられた外部のデータ接続プログラムによりプロパティデータベース内のデータセットが PLAN オブジェクトの入力データに転送される。

3. 2. 3 入出力データ確認機能の開発

入力データの作成、解析実行、結果の評価といった一連の解析作業を、正確かつ効率的に実施するため、解析コードの運用に係わる情報の知識ベース化および品質保証要領書に基づき、以下の機能を開発した。

(1) 入力データの整合性確認機能

知識化情報は、データの新規取得および解析コードの開発・改良、検証等により、更新されるため、入力データの作成は、常に最新の情報に基づいて行う必要がある。よって、本機能は、汎用的なデータ整合性確認用のプログラムを作成し、これに各パラメータの整合性確認を行う知識化情報をデータとして登録する方法により開発された。具体的には、知識化情報を表現する特定の文法（簡易言語）により記述された知識ベースおよび解析コードの入力データを読み込み、これに従いパラメータの整合性の確認を行い、結果を解析者にメッセージとして表示する汎用プログラム（エンジン）を開発した。このような方法をとることにより、知識化情報が更新された場合には、プログラムを改良するのではなく、単に知識ベース（データ）を作成するだけとなり容易に対応することができる。

この入力データ整合性確認機能は、CAPASA の既存の入力データ作成エディタモジュール上で利用でき、PLAN を実行することなくデータ作成中に適時、利用することが可能である。

(2) 解析結果の妥当性評価支援

解析結果の妥当性評価は、過去の解析結果、または解析解や他の同様な解析コードを用いた解析結果等との比較により行なわれる。

(a) 検証用解析の管理機能

CAPASA 上で実施されたりファレンスケースや検証問題等の解析は、3 階層で構成された分類階層で管理される。そして、結果評価時には、この階層を順次辿ることにより、参考となる解析を検索することができる。

(b) 他解析との比較表示機能

CAPASA 外で行なわれた既存の解析結果または解析解との比較表示機能として、以下の知識化情報のシステム化を実施した。

① MESHNOTE に関する溶解度、分配係数の変化に対する最大放出率への影響

本項目は、RELEASE を用いた解析を元に最大溶出率と溶解度の関係を、分配係数毎に整理した結果および解析解と CAPASA 上で実施された MESHNOTE の解析結果を比較表示する。

② MATRICS に関する簡略化モデルとの比較

本項目は、亀裂性媒体中の核種移行率の傾向を把握するため、解析解と MATRICS の解析結果を比較表示する。

3. 2. 4 まとめ

品質保証要領書および解析コードの運用に関する知識ベースに基づき、品質保証活動の中で反復性や規則性の高い作業において、解析者の負担を減らし、作業の効率化およびヒューマンエラーを防止する品質保証システムを開発した。本システムは、以下の機能を持つ。

(1) 核種移行用データセット管理機能

本機能は、核種移行解析に用いられるパラメータを、品質情報などの補助情報と共にデータベース（プロパティデータベース）を用いて管理する。また、ユーザインタフェースにより、データの編集、登録、検索を効率的に行う。

(2) 共用データ機能

共用データ機能は、プロパティデータベースに格納されたデータを、解析コードの入力データに自動的に転送する。

(3) 入出力データ確認機能

入出力データ確認機能は、解析コードの運用に係わる知識ベースに基づき、入力データの整合性確認、ならびに解析結果の妥当性評価の支援を行う。

これらの機能は、解析管理システム CAPASA と関係付けられており、解析者は、CAPASA から自由に利用することができる。

4. 解析管理システムの機能高度化

これまでの運用より得られた知見および本研究にて開発した品質保証システムを考慮して、解析管理システム CAPASA の機能の高度化を実施した。

4. 1 新規解析コードの導入

生物圏評価モデル「AMBER」を対象として、入出力データやソフトウェア上の特徴の分析を行い、CAPASA に導入した。また、本解析コードと既に CAPASA に導入済みの MESHNOTE および MATRICS とのデータ転送を行うインタフェースプログラムを開発した。

4. 1. 1 解析コードの分析

AMBER は、解析コード自身に、ソルバーに加えて入力データの作成や結果参照用のグラフィカルユーザインタフェースを有する。また、AMBER は、使用許諾ライセンスの関係により特定の計算機上でのみ実行することができる。よって、導入には、入出力データの分析に加えて、CAPASA より AMBER を実行するための制御手法の検討を行った。

(1) 制御手法の検討

AMBER の制御は、図 4.1.1-1 に示すように、AMBER オブジェクトに PLAN の制御が移されると、CAPASA が利用されている計算機（ローカル計算機）から、AMBER が利用可能な計算機（リモート計算機）に AMBER 起動の要求を行う。そして、この要求を受け取ったリモート計算機では、AMBER を起動し、その画面をローカル計算機に表示する。解析者は、AMBER のユーザインタフェース上でデータの作成、解析実行、結果評価の一連の操作を行った後に、結果をファイル出力して、AMBER を終了する。その後、AMBER により作成された入出力ファイルが、ローカル計算機に自動的に転送され、それらが従来の解析コードと同様にして CAPASA のデータベースに格納される。

(2) データ構造の分析

AMBER の入出力データを、データベースを用いて適切に管理、保存するため、入出力データの構成を分析し、データベース設計の基盤となるデータ構造について検討した。検討の結果、入出力データ内に設定されるパラメータの中で、データベースを用いて階層構造化して管理するパラメータは、以下のパラメータとした。

- ◆ 全て Compartment における時系列の核種量データを管理する。
- ◆ 全ての Source における時系列フラックスデータを管理する。
- ◆ 全て Transfer における時系列フラックスデータを管理する。
- ◆ Observer として指定されたパラメータの時系列データを管理する。

なお、入力データが分布データとして与えられている（Probabilistic Case の）場合には、いずれのパラメータも最大値、最小値および平均値を管理する。

また、解析の再現性および操作性の観点から、以下のデータもデータベースを用いて管理する。

- ◆ 解析名称とコメント
- ◆ 入力ファイルとファイル名
- ◆ 解析結果を格納したバイナリファイル

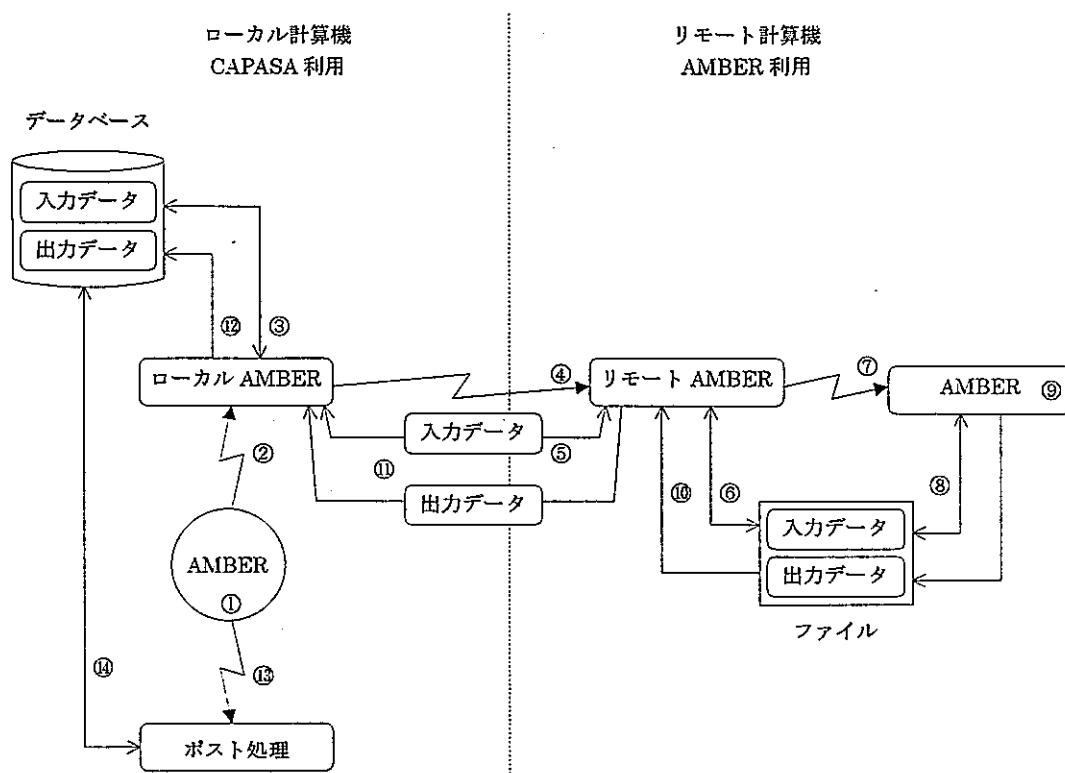


図 4.1.1-1 AMBER の制御フロー

4. 1. 2 解析管理システムへの導入

解析コードのデータ構造の分析に基づき、AMBER の入出力データを適切に格納するクラス構造を設計し、オブジェクト指向データベース管理システム VERSANT に実装した。また、入出力データを、このクラス構造に格納するインタフェースプログラムを開発した。

AMBER の入出力データを格納するクラス構造は、CAPASA に既に導入した解析コード用のクラス構造と整合をとりつつ、且つ既存の汎用クラスを最大限に利用することを考慮して設計された。このクラス構造は、これまでに導入した解析コードと同様に、データ全体を

管理する PrcsData クラスから派生された ArPrcsData クラスを中心に、Compartment、Source、Transfer を格納する ArItem クラスおよび Contaminant を格納する ArElement クラスと ArNuclide クラスおよび Observer を格納する ArObserver クラスなどから構成される。

4. 1. 3 総合的な解析を実現するためのインタフェースプログラムの開発

緩衝材中およびニアフィールド周辺岩盤中の核種移行結果を考慮して、生物圏における被爆量を評価するため、AMBER と既に CAPASA に導入済みの MESHNOTE および MATRICS との接続方法に関して検討を行い、解析コード間のデータ転送を行うインタフェースプログラムを開発した。

AMBER と MESHNOTE または MATRICS との接続は、以下の方法により行う。

- ① AMBER で計算した放射性核種のソースターム 1Bq/y に対する被爆量 (Sv/y) を、MESHNOTE または MATRICS の核種放出率 (Bq/y) に乗ずることにより、被爆量を換算する。
- ② MESHNOTE または MATRICS の解析結果である核種放出率を、AMBER のソースタームに設定し、AMBER 上で被爆量を計算する。

4. 2 機能拡張

本研究では、運用より得られた知見の反映、ならびに性能評価解析の品質向上や効率化および品質保証システムとの連携を目的として、CAPASA の改良を実施した。また、今後の解析コードの新規導入や CAPASA の適用機種拡大に向けての検討を行った。

4. 2. 1 複数計算機への展開

第2次とりまとめに向けての解析業務の増大に対応するため、複数の解析者がサンマイクロシステムズ社製ワークステーションを対象として、異なった計算機上で CAPASA を同時に運用できるように、データベース管理システムのライセンス数の増加とデータベースの分散化を実施した。

これにより、従来はサーバー計算機でのみ CAPASA が利用されていたが、今後は、サーバ機以外でも利用することができ、多数の解析者が、同時に CAPASA を利用する際には、計算機、特に CPU（中央演算装置）の負荷を大幅に軽減することができ、計算速度やデータアクセス速度の向上につながる。

4. 2. 2 インタフェース機能の高度化

(1) グラフ表示用インタフェース機能の拡張

グラフ表示用インタフェース機能の拡張として、各解析コードのグラフ表示モジュールを対象として既存 PLAN の読み込み機能、グラフの比較機能および軸設定の改良を実施した。

(2) ORIGEN2 のデータベース保存項目の拡張

ニアフィールドの放射線場の解析に用いる以下のデータを管理するため、ORIGEN2 に関するデータベースの保存項目の拡張を行った。

- ① (α 、n) 反応による中性子のエネルギースペクトルと発生数
- ② 自発核分裂による中性子発生数
- ③ γ 線のエネルギースペクトルと発生数

(3) ORIGEN2 の補助情報の改良

従来のシステムでは、ORIGEN2 の燃焼や冷却期間等の解析条件は、イベント情報としてデータベース上で管理されてきた。本研究は、このイベント情報の作成方法を改良すると共に、管理項目の見直しを行い、補助情報をデータベースに格納する機能および入力データから補助情報を生成する機能を開発した。

4. 3 他機種・大規模解析コードへの展開

サンマイクロシステムズ社製ワークステーション以外の機種への展開や大規模計算コードの導入向けの CAPASA の拡張性について検討した。

4. 3. 1 他機種への拡張性

CAPASA の他機種への拡張は、その機種が、CAPASA が採用しているオブジェクト指向データベース管理システム VERSANT の対応機種か否か、およびその機種のオペレーティングシステム（ウインドウシステム含む）の種類に依存する。

拡張対象の機種が、VERSANT の対応機種以外の場合には、CAPASA の全てを移植する際には、全ソースコードの 30%位を占めるデータベースアクセス部分の新規開発が必要となる。しかし、PLAN、データベース制御は、VERSANT が動作する計算機で行い、解析コードの実行のみを他機種で行う場合には、オペレーティングシステムに依存するが AMBER の導入方法と同様な方法を用いて拡張することが可能である。オペレーティングシステムに関しては、UNIX 系以外の場合には、全ソースコードの 40%位を占めるグラフィカルユーザインタフェース部分の新規開発が必要となる。表 4.3.1-1 に、これらの検討結果を示す。

4. 3. 2 大規模解析コードの導入

大規模解析コードが、ソルバーのみで構成され、且つ計算機環境が、表 4.3.1-1 で述べたケース 1 に該当する場合は、CAPASA に容易に導入することができる。また、解析コードが、ソルバー以外にグラフィカルユーザインタフェースを持ち、且つ実行計算機が UNIX 系の場合には、AMBER と同様な方法で導入することが可能である。

一方、ケース 4 の場合は、CAPASA が動作しているローカル計算機（ワークステーション）と解析コードが実行しているリモート計算機（パーソナルコンピュータ）との間で入出力データを送受信するプログラムやリモート計算機上のプログラムをローカル計算機側から起動する常駐プログラムを新規に作成する必要がある。なお、解析コードが、ソルバー以外にグラフィカルユーザインタフェース（GUI）を持ったプログラムを持つ場合は、動作環境が Windows ベースのため、AMBER の場合と異なり、解析コードの実行画面をローカル計算機上に表示することができず、解析者は、リモート計算機に対面して GUI を操作する必要がある。

しかし、現実的には、解析者が、ローカル計算機とリモート計算機の両方を交互に対面して使用することは困難と想定されるため、最初にリモート計算機上で、入力データ作成、解析実行等のすべての操作を行い、その後に入出力データを Windows が提供する既存コマンドを用いてローカル計算機に送信し、その後ローカル計算機上でそのデータに対して処理を行うことが運用上妥当である。

表 4.3.1-1 CAPASA の他機種への拡張

ケース	データベース	拡張対象	OS	作業量 GUI 部 数% 新規開発 制御部 10% 改良	備考 対応機種/OS SGI IRIX5.3 HP 9000 HP/UX9.0/10.x IBM RS/6000 AIX4.1 DEC Alpha Digital UNIX V3.2C
1	VERSANT 対応	全体	UNIX 系 (X-Window ベース)		
2	VERSANT 対応	全体	UNIX 系以外 (Windows95/NT)	GUI 部 50% 新規開発 制御部 10% 改良	対応機種/OS PC Windows NT 3.51 PC Windows 95
3	VERSANT 対応/非対応	コード実行	UNIX 系 (X-Window ベース)	新規解析コード導入時に AMBER 導入と同等な作業量	
4	VERSANT 非対応	コード実行	UNIX 系以外 (Windows95/NT)	制御部 10% 新規開発 ただし、運用方法に多くの制 約あり。	4.3.2 節で詳細説明
5	VERSANT 非対応	全体	UNIX 系	DB 部 30% 新規開発	既存 CAPASA との連携 (データ相互 利用等) 不可
6	VERSANT 非対応	全体	UNIX 系以外 (Windows95/NT)	100% 新規開発	

OS オペレーティングシステム
GUI グラフィカルユーザインタフェース

5. あとがき

(1) 品質保証要領書の作成

性能評価・水理・処分技術分野の解析コードを対象として品質保証要領書を作成した。本品質保証要領書は、事業団内部において一部試運用されており、また三菱重工においても、他の委託研究（熱力学データベース）で試験的に運用した。

(2) 品質保証システムの開発

性能評価解析コード（ORIGEN2、PHREEQE60、MESHNOTE、MATRICS）に関する情報を集約し、以下の成果が得られた。

- 知識化項目の摘出
- 品質保証ドキュメントの整備

また、反復性や規則性の高い品質保証活動を対象として、この一部をシステム化することにより、解析者の負担を減らすと共に、品質の向上を目的とした品質管理システムを開発した。本システムは、これまで開発してきた CAPASA を基盤として開発され、核種移行解析に用いるデータセットの管理機能、これらデータセットを解析コードの入力データに転送する機能、ならびに既存解析の管理および解析コードの入力データの整合性や解析結果の評価支援を行う機能を持つ。

(3) 解析管理システムの高度化

CAPASA のこれまでの運用より得られた知見および本研究にて開発した品質保証システムとの連携を考慮して、解析管理システム CAPASA の機能の高度化を実施した。

(a) 新規解析コードの導入

生物圏評価モデル「AMBER」の新規導入、ならびに AMBER と MESHNOTE または MATRICS とのデータ転送を行うインタフェースプログラムの開発を実施した。なお、新規導入に際しては、AMBER が持つソフトウェア面での特徴を考慮して、CAPASA が使用されている計算機以外の計算機上で解析コードを利用することができる制御手法を開発した。

(b) 機能拡張

運用より得られた知見の反映および品質保証システムとの連携を目的として、以下の機能拡張を実施した。

- 解析業務の増大に対応するため、データベースの分散化を行うと共に、複数の解析者が CAPASA を同時に利用できるようにシステムを拡張した。
- グラフ表示用インタフェースを対象として、既存解析との比較表示機能およびグリッド設定機能を開発した。
- ニアフィールドの放射線場の解析に用いるデータを管理するため、ORIGEN2 に関するデータベースの保存項目の拡張を行った。

- ORIGEN2 の解析条件を管理する補助情報をあらたに設定すると共に、この補助情報を入力データからの自動生成する機能を開発した。

(c) 他機種・大規模計算コードへの展開

サンマイクロシステムズ社製ワークステーション以外の機種への展開や大規模計算コードの導入向けの CAPASA の拡張性について検討した。その結果、他機種・大規模計算コードへの展開は、対象となる計算機が、サンマイクロシステムズ社製ワークステーションと同様に UNIX 系のワークステーションであれば、データベース管理システムに依存せずに比較的容易に展開可能なことが整理された。

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 環境技術開発部の諸賢に感謝の意を表わします。

Contents

1. Introduction	1
2. Development of the Quality Assurance Manual	2
2. 1 Study on the Method for Management	
of Data Categorization	2
2. 1. 1 Arrangement of Auxiliary Information	
for Data Registration	2
2. 1. 2 Study on Procedure of Data Processing	
and Management Items	2
2. 1. 3 The Quick Review for the Method	
of Data Registration	2
2. 2 Development of the Validation Method	
for Analysis Code and Data	3
2. 2. 1 Information Collection on YMP and WIPP	3
2. 2. 2 Information Collection on Public Literature	4
2. 2. 3 Development the General Validation Manual	4
2. 2. 4 Development the Validation Manual	
for the PNC Performance Assessment Codes	5
2. 3 The Development of Quality Assurance Manual	5
2. 3. 1 The Study on Static Management	
and Dynamic Management	5
2. 3. 2 Actualization for Dynamic management/control	5
2. 3. 3 The Development of Quality Assurance Manual	5
2. 3. 4 The Quick Review for the Quality Assurance Manual	6
3. Development of Quality Assurance Computer System	6
3. 1 Knowledge Base Associated	
with the Analysis Code Operation	6
3. 1. 1 Collection of the Knowledge Information	6
3. 1. 2 Summarize and Discuss the Knowledge Information	7
3. 2 Creation of Quality Assurance Computer System	11
3. 2. 1 Development of Nuclide Transfer Data set	
Management Function	11
3. 2. 2 Development of Common Data Function	14
3. 2. 3 Development of Input / Output data check function	14
3. 2. 4 Conclusion	15

4. Enhancement of Analysis Management System	17
4. 1 Introduction of an New Analysis Code	17
4. 1. 1 Survey of Analysis Code	17
4. 1. 2 Introduction into Analysis Management System	18
4. 1. 3 Development of Interface Program for Coupling Analysis	19
4. 2 Enhancement of CAPASA	20
4. 2. 1 Expansion to Plural Computers	20
4. 2. 2 Enhancement of Interface Function	20
4. 3 Expansion to the Other Type of Computer and Introduction of Large Size Analysis Codes	21
4. 3. 1 Expansion to the Other Type of Computer	21
4. 3. 2 Introduction of Large Size Analysis codes	21
5. Conclusion	23

List of Figures

Figure 3.1.2-1 Common Concept on Technical Knowledge Information	10
Figure 3.2.1-1 Data Structure of Property Database	13
Figure 4.1.1-1 Control Flow of AMBER	18

List of Tables

Table 2.3.1-1 A Summary of Quality Assurance Program	9
Table 4.3.1-1 Expansion of CAPASA into Other Type of Computer	22

1 . Introduction

The purpose of this study is to develop the integrated quality assurance system for the improvement of reliability of performance assessment (PA). The study is carried out by studying the procedure and method to assure the quality of analysis codes and data used in PA calculations and developing a quality assurance program, which can be reflected in the second progress report, in order to apply the system to the analysis codes and data.

In the last fiscal year, we have developed quality assurance items to be included in PA and the general procedure for such quality assurance items, based upon the framework of PA at Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation (PNC) and the results of quality assurance in and out of the country. Moreover, we have studied the method of the verification of analysis codes and the data classification from the viewpoint of the quality assurance for the results of PA calculations.

In this fiscal year, we have further carried out the following study in order to develop the definite procedure and the method of management and operation for information about quality, based upon the results of the last study.

- (1) We develop the quality assurance manual definitely describing the procedure and method of quality assurance activity for models, data and codes related to PA calculations.
- (2) We develop a computer system to assure the reliability of calculation results by performing the enhancement of integrated approach to analysis codes and data, and by adding information about the quality of data used in PA calculations.

2. Development of the Quality Assurance Manual

In this chapter, firstly we have studied the method for management of data categorization, verification and validation which is considered most important elements for quality assurance of performance assessment. And we have developed quality assurance manual based on these information of results.

2.1 Study on the Method for Management of Data Categorization

In this paragraph, we have studied on the arrangement of auxiliary information for data registration, management items and comprehension of data management items for mass transport model in buffer material and fracture media.

2.1.1 Arrangement of Auxiliary Information for Data Registration

In this study, we have studied auxiliary information of property database with CAPASA which will be attached for data registration. We have summarized MESHNOTE's and MATRICS's auxiliary information which is included radioactive solubility ,distribution coefficient, diffusion coefficient, glass data, geometry information of engineering barrier system, physical data, chemical data hydrology data and groundwater composition. Auxiliary information of these data is categorized follows items;

- a. Name of data
- b. Preparation date
- c. Person
- d. Traceability information
- e. Comments (include technical information)

2.1.2 Study on Procedure of Data Processing and Management Items

In this study, we have analyzed data processing procedure and management items after considering the hierarchy of each model data. As the result, we could categorize on management of new data acquisition, existing data collection and analysis using phenomena model for management items.

2.1.3 The Quick Review for the Method of Data Registration

United States of America has developed technical database system with auxiliary information (reference information base) for Yucca Mountain Project and WIPP Project. Therefore we have requested the quick review in order to confirm the completeness for the method of data registration and auxiliary

information for technical data. As the result, we have confirmed completeness of auxiliary information.

2.2 Development of the Validation Method for Analysis Code and Data

Last year, based on the framework which provide the quality assurance activities corresponding to the life-cycle of software, we developed the general verification manual which make it possible to apply various analysis codes. And also we developed the specific verification manual for PHREEQE, MESHNOTE and MATRICS codes. This year, we have developed the general validation manual for the PNC performance assessment models and the specific validation manual for those three models.

In this study, prior to development of the general validation manual, we have recognized the current state of validation program on YMP and WIPP through the literature investigations. And also, we have investigated the test cases and test procedures used in the international validation projects such as INTRACON and INTRAVAL.

Based on these information we have obtained as the result of literature investigation, we have developed the general validation manual and applied it to PNC performance assessment models such as PHREEQE, MESHNOTE and MATRICS.

2.2.1 Information Collection on YMP and WIPP

We have surveyed the validation examples conducted by YMP and WIPP, prior to the development of the validation manual for the PNC performance assessment models. And we have understood the radionuclide transport code used in YMP and WIPP as follow.

- YMP ; FEHM (Finite Element Heat and Mass transport code)
- WIPP ; NUTS, SECOPT2D

The two radionuclide transport codes used in WIPP become the pair with the BLAGFLO and SECOFL2D code, which is hydraulic analysis code, respectively. And these pair codes are used in proportion to the transport media at WIPP site. In both YMP and WIPP, most performance assessment models have already verified but few are validated. So we have summarized the current state associated with the validation program at YMP and WIPP in this section.

2.2.2 Information Collection on Public Literature

In the similar way used in last year, using the public literature database, we have tried to collect the information associated with the international validation project such as INTRACOIN and INTRAVAL .

As the result, we have recognized that the Level 2 and Level 3 of INTRACOIN and the Phase 2 and Phase 3 of INTRAVAL are available for our purpose. So, we have summarized the test cases used in each project and the validation procedures applied by several participant. And also, we have discussed the applicability that validation test cases to the PNC performance assessment models.

2.2.3 Development the General Validation Manual

Based on the result obtained from literature investigations, we have developed the general validation manual. The general validation manual discussed in this study is almost same as the general verification manual. It is based on the framework for Software Verification & Validation(V&V). The activities which is able to commonly provide as the V&V general procedure have been included in this framework and revised several points. And also, we have discussed the detail procedures for verification and validation individually due to the analysis tasks associated with V&V. In this general validation manual, we have provided that validation procedure as follow,

- ① Model review
- ② Data review
- ③ Selection of the validation test case
- ④ Modeling
- ⑤ Definition the acceptance criteria
- ⑥ Calibration
- ⑦ Prediction analysis
- ⑧ Discrepancy analysis
- ⑨ Comparison alternative models
- ⑩ Proposal on the revised and new experiment

These procedures are not so different with the one proposed by the other organizations. But we have provided that it is necessary to clear explicitly the reason why that model was used against the objective validation test case. Because an acceptance criteria is strongly dependent on the modeling method of the

objective site. And we have provided that these procedure is not absolute and we have to determine the detail validation procedure corresponding to the given site and available data case by case.

2.2.4 Development the Validation Manual for the PNC Performance Assessment Codes.

In the validation test cases obtained from some literature surveys, there are some test case which is able to apply the MESHNOTE and MATRICS. Based on general validation procedure mentioned above, we have developed the validation manual for PNC performance assessment models.

2.3 The Development of Quality Assurance Manual

2.3.1 The Study on Static Management and Dynamic Management

In the FY1996, we have developed the items for quality assurance program and procedure which is included software management, data management and analysis management such as Table.2.3.1-1. In this study we have defined the dynamic control / management for repeating work and systematic work such as analysis, preparation of input data and technical review, the other side, we have defined the static control / management for without repeating and systematic operation such as verification and validation, software selection and software design. Lastly we have categorized static and dynamic management with respect to quality assurance element/sub-elements of Table-1.

2.3.2 Actualization for Dynamic management/control

In this study, we have prepared check sheet and concept of systematic control which is considered phase of creation of input data and complete of analysis by using for performance assessment model (ORIGEN, PHREEQE-60, MESHNOTE, MATRICS). We have also studied dynamic quality for the phase of reference case with respect to the second progress report in PNC.

2.3.3 The Development of Quality Assurance Manual

We have prepared the Quality Assurance Manual and Procedure based on the results of method for management of data categorization, verification and validation, method of static / dynamic management.

2.3.4 The Quick Review for the Quality Assurance Manual

SAIC has reviewed the quality assurance manual which prepared by MHI. As the results, SAIC's comments are as follows;

- a. should be describe PNC's organization.
- b. should be describe configuration management
- c. should be introduce approval system such as sheet.
- d. should be prepare simple documentation
- e. there is no concept of the semi-automatic control

MHI re-prepared the quality assurance manual based on SAIS's comments(a.-d.).

3.1 Knowledge Base Associated with the Analysis Code Operation

3.1.1 Collection of the Knowledge Information

From the existing information source accumulated by PNC such as V&V report, error report on specific code and analysis report, we have surveyed technical information about ORIGEN2, PHREEQE, MESHNOTE and MATRICS in order to present the technical knowledge information to analyst.

As the result, we have picked up the following items which are useful as the technical knowledge information and recognized the current knowledge about each code.

(1) ORIGEN2

- Analysis results associated with the wrong input specified by user
- Influence of the version difference to analysis result.
- Verification study of ORIGEN2

(2) PHREEQE-60

- Limitation for thermodynamic database
- Information of iteration
- Information of modified Davies equation.
- Information for pe changing option
- Verification : manual calculation
- Verification : Benchmark analysis

- Verification : comparison with existing data and calculated results
- Validation : comparison with observed data and calculated results
- Example of illegal input data
- Example of illegal geochemical modeling

(3) MESHNOTE 2

- Influence of the spatial mesh in buffer material on the accuracy of result.
- Influence of the volume of reserver and mixingcell on the analysis result.
- Influence of the variability of the solubility, inventory and distribution coefficient on the maximum discharge rate from outlet of the buffer material.
- Influence of the glass dissolution rate on the accuracy of result.
- Accuracy of the analysis result including the short half life radionuclide.
- Influence of the spatial and temporal variability of the model parameter on the accuracy of the result.
- Occurring the participation front which has no physical meaning.
- Governing relationship between the solubility limited model and primary dissolution reaction model as the inlet boundary condition.

(4) MATRICS

- Influence of the output time which is one of the input item on the analysis result
- Warning message associated with the talbot's algorithm
- Parameter study using simple analytical model

3.1.2 Summarize and Discuss the Knowledge Information

Based on the technical knowledge information for each PNC performance assessment code obtained through the literature survey mentioned above, we have discussed the applicability these information to analysis tasks. In this study, using these technical knowledge information we have considered the common concept which become basic framework. And then we have discussed the applicability such basic framework to the each analysis code. The technical knowledge information we have collected is the one discussed individually and

including quite broad contents. It is actually impossible to make sure the repeatability of the result and recalculate for these all information. And also it is impossible to reflect these all technical knowledge information to the computer system individually because system become more complex and have strong dependency on specific technical knowledge information. So we have considered the common concept such as Fig3.2.1-1 due to obtain the system expandability and commonality. Fig3.2.1-1 shows two categorization on technical knowledge information. One is processed in the system and the another is only read in the system. Due to realize these common concept in the computer system such as CAPASA, it is necessary to have following major functions.

- Function to represent the input/output summary information in order to make sure analysis conditions specified by the user.
- Function to represent the warning message to user.
- Function to compare the difference between the code result and analytical result
- Function to compare the difference between the code result and existing result
- Function to read the existing technical knowledge information on line.

Based on these items, we have categorized technical knowledge information for each code mentioned above

Table 2.3.1-1 A Summary of Quality Assurance Program

Quality Assurance Program Element	Quality Assurance Program Sub-Element		Documents Prepared	Criteria for Review Documents
1.Scenario Management			Review Documents	Suitability of Scenario
2.Software Management	2.1 Software Selection	2.1.1 Software Selection	Software Requirements Specification Sheet	Suitability of Software
		2.1.2 Software Improvement and Development Plan	Planning Documents or Function Specification Documents	Suitability of Improvement/Development Planning Documents, Comprehension of Requirements Specification
	2.2 Software Design and Software Development	2.2.1 Software Design	Software Design Documents	Accuracy of Design Documents, Comprehension of Improvement/Development Plan
		2.2.2 Coding/Installation	Installation Report	Portability, Reproducibility of Software
		2.2.3 Software Documentation	User Manual , Program Manual	Accuracy/ Consistency/ Usability of Manual
	2.3 Software Verification and Validation (Software V&V)	2.3.1 V&V Plan	V&V Test Plans	Completeness, Appropriate Ranges of parameters
		2.3.2 V&V Implementation	Implementation Report	Completeness of Software, Input Data: Accuracy, Comprehension and Reproducibility of Planning Documents
		2.3.3 V&V Report	Quick Report, Technical Information	V&V: Suitability, Credibility, Scientific Defensibility, Consistency
	2.4 Software Configuration Management		Software Documentation Package	Suitability, Completeness and Traceability
3. Data Management	3.1 Management of Data Acquisition Plan		Data Acquisition Planning Documents	Suitability of Access, Comprehension of Access Requirement, Consistency of Procedure, Reproducibility
	3.2 New Data Acquisition	3.2.1 Experiment Implementation/ Data Processing	Experimental Report	Accuracy of Processed Data, Consistency of Processing Method, Traceability
		3.2.2 Data Acquisition Report	Quick Report, Technical Information	Suitability of Experiment, Credibility of Experiment, Scientific Defensibility, Consistency
	3.3 Existing Data Collection		Collection Report	Suitability of Collection, Comprehension of Acquisition Planning Documents/Existing Data
	3.4 Database Management	3.4.1 Data Registration	Registration Report	Completeness of Registration Work, Acquired and Collected Data: Traceability, Supplementary Information: Accuracy
		3.4.2 Data Screening	Quick Report, Technical Information	Completeness of Registration Work, Scientific defensibility of Data Screening ; Consistency of Selection
		3.4.3 Data Base Conversion	Quick Report, Technical Information	Accuracy of Input and Output Data, Supplementary Information: Accuracy, Traceability, Consistency
4. Analysis	4.1 Management of Parameter Set		Completion Report for Parameter Set Registration	Completeness of Registration Work, Traceability of Analysis Data
	4.2 Analysis Plan		Analysis Planning Documents	Suitability of Analysis, Accuracy/Comprehension of Defined Condition
	4.3 Analysis Work		Report of Analysis Implementation	Accuracy of Output Data, Reproducibility of Analysis, Validation of Results
	4.4 Analysis Report		Quick Report, Performance Assessment Report, Examples of Deficiency / Requirement Sheet of Code Improvement	Suitability of Analysis, Credibility of Analysis, Scientific Defensibility, Consistency

Processing in system

Reading in system

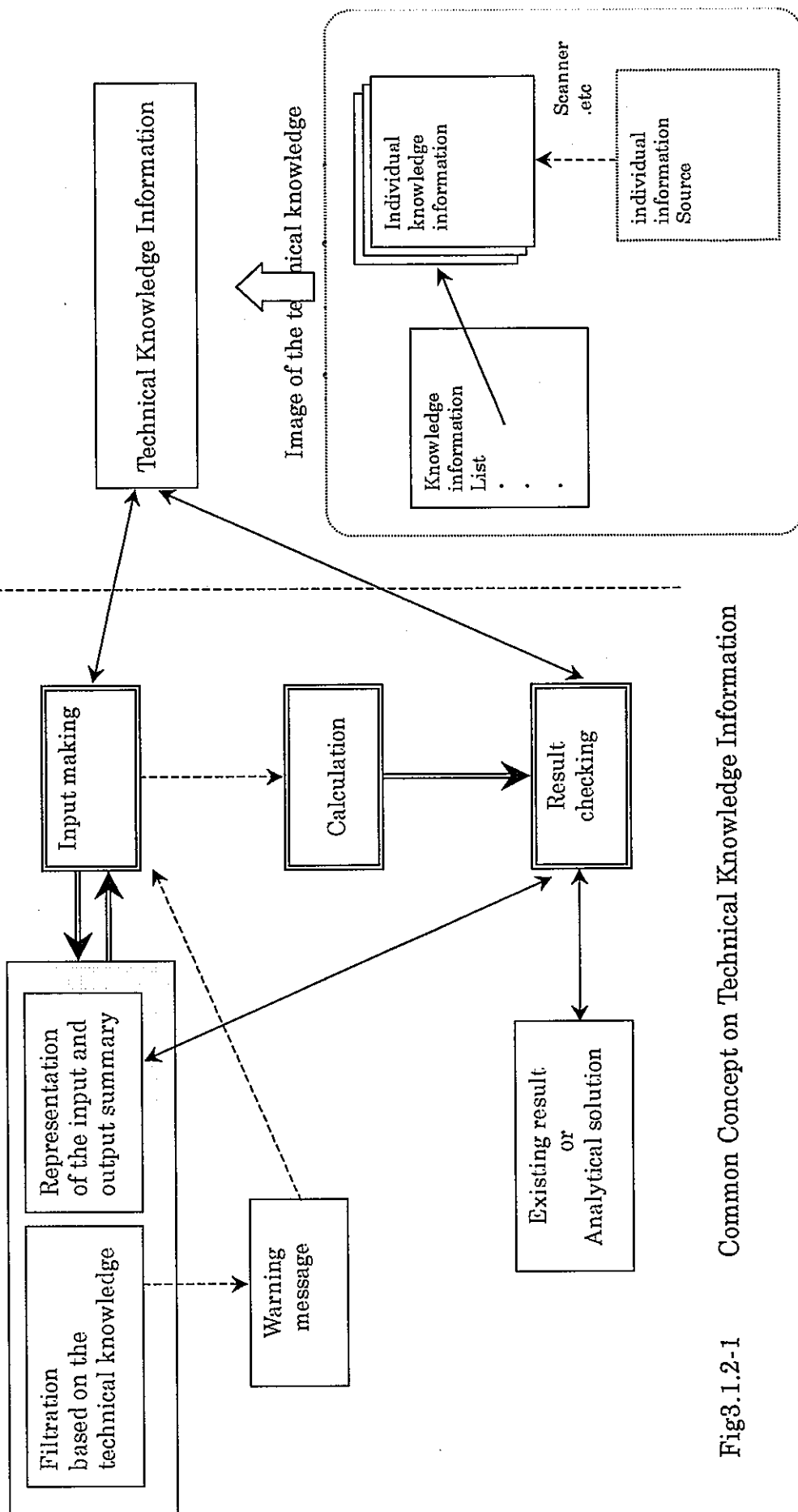


Fig3.1.2-1 Common Concept on Technical Knowledge Information

3. 2 Creation of Quality Assurance Computer System

Most of analysis work is based upon the dynamic quality assurance. It requires much effort and time of analysts and contains work to be included human errors. Therefore, it is important to carry out the quality assurance activity precisely by supporting the analysts by a computer and reducing the load of the analysts. In order to improve the quality of calculations performed on CAPASA, we have developed a quality assurance computer system (QA system), which allows the analysts to check the consistency of input data of analysis codes and supports evaluation of the calculation results.

Based upon the quality assurance manual and the knowledge base, the QA system has developed.

3. 2. 1 Development of Nuclide Transfer Data set Management Function

The purpose of this function is to maintain data (values) of parameters defined in an input of an analysis code and quality information about the data.

(1) Development of database

Based upon the study on the method of data classification, a database, which maintains the following data set, the procedure of data processing and history, has been developed.

(a) Element data set

Element data set maintains half-life of nuclides and concentration limits of ingestion for dose, which are used in PA calculations. The data set is created from a ORIGEN2 library.

(b) Inventory data set

Inventory data set maintains inventory in a vitrified waste. The data set is created from the result of a ORIGEN2 calculation.

(c) Solubility data set

Solubility data set maintains solubility of elements. The data set is generated from a file brought by other department.

(d) Distribution coefficient data set

Distribution coefficient data set maintains Kd of elements. The data set is generated from a file brought by other department.

(e) Diffusion coefficient Data set

Diffusion coefficient data set maintains Dp of elements. The data set is

generated from a file brought by other department.

Figure 3.2.1-1 shows the data structure of the data sets above. Property database has the following restrictions from the viewpoint of the quality control and operation.

- ① Property database principally stores qualified data which quality was assured by the expert review.
- ② The system only permits a system administrator to register new data.
- ③ All analysts can refer to the data sets and utilize them for PA calculation with common data function.
- ④ Data in the database cannot be deleted in order to keep reproducibility.

(2) Development of user interfaces

User interfaces have been developed, which allows analysts to register data sets and refer. The interfaces are provided for each kind of the data set. The procedure of data registration using the interfaces is as follows.

(a) Inventory data set

In prior to data registration, an analyst carried out an ORIGEN2 calculation by CAPASA and evaluated the result of the calculation according to the procedure described in QA manual. After the evaluation, data was moved into a Group database. Then, analyst can register a new data set through selection of the calculation result and creation of auxiliary information.

(b) Element data set

Element data set can be registered through selection of ORIGEN2 Decay library stored in CAPASA database and creation of auxiliary information.

(c) Solubility data set

An analyst reads a file in a floppy disk or an attachment file in a electric mail. which is brought by other department, and confirms the contents of the file with the user interface. After that, the data is stored into Property database.

(d) Distribution coefficient Data set

Distribution coefficient data set can be registered by the same manner as Solubility data set.

(e) Diffusion coefficient data set

Diffusion coefficient data set can be registered by the same manner as Solubility data set.

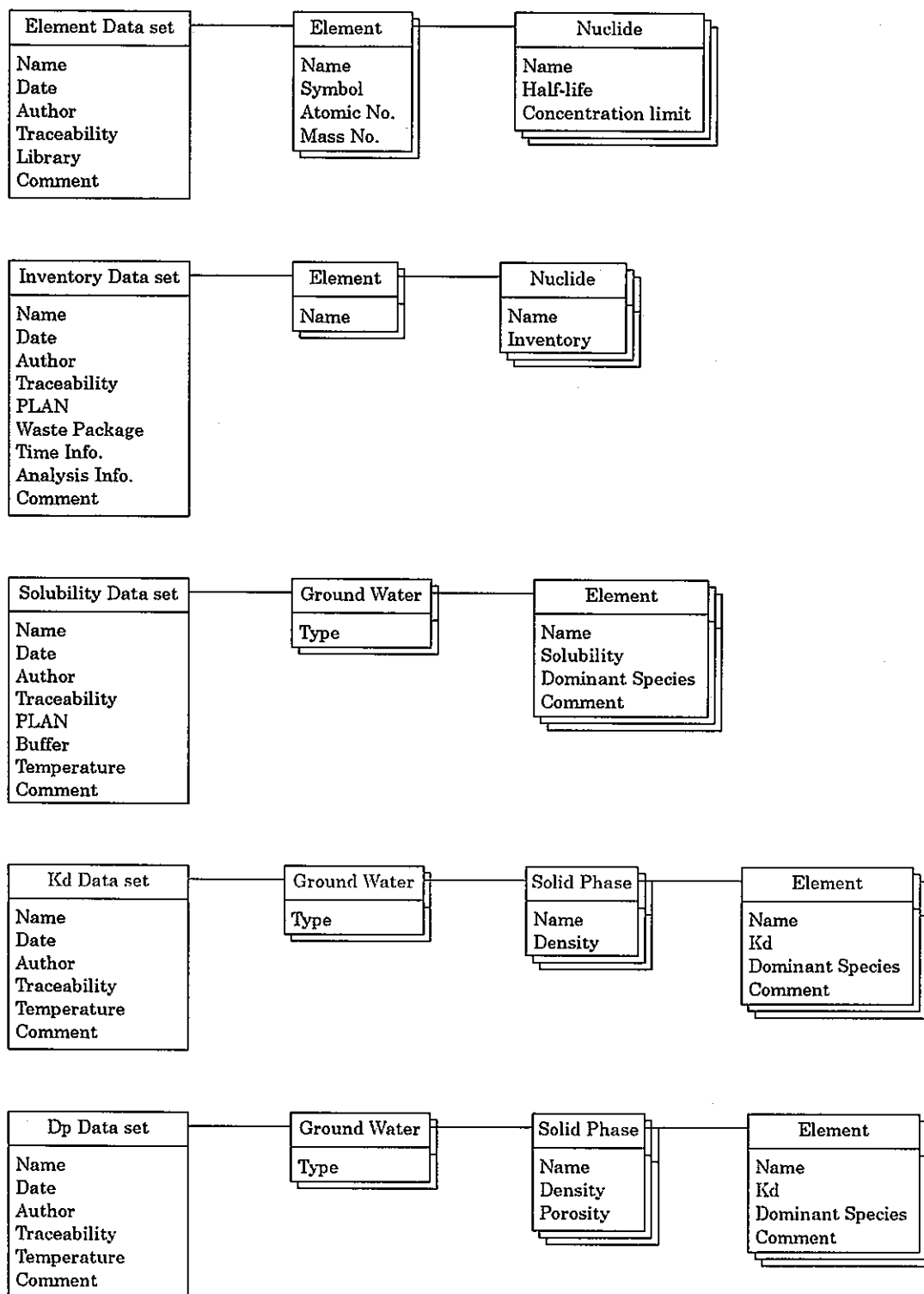


Figure 3.2.1-1 Data Structure of Property Database

3. 2. 2 Development of Common Data Function

It is important to keep the consistency of parameters to be commonly defined in inputs of plural analysis codes. On the other hand, to keep the consistency of parameters, analysts must refer to and check plural inputs simultaneously. Such work may produce human errors and requires much effort of them. As for calculations using singular analysis code, human errors may occur during creation of parameter input.

Common data function aims at the prevention of human errors and keeping the consistency of parameters in inputs. The function automatically sends data stored in Property database into inputs of analysis codes. The function is performed by Data store object defined newly, which makes relation between data in the Property database and analysis codes, and Data flow and Data filter developed in the last fiscal year. The Data store object is connected to a PLAN object expressing a analysis code by Data flow. Data transfer from the Data store object to the PLAN object is performed by an external data connection program related to Data filter in the same manner as Data flow between PLAN objects.

3. 2. 3 Development of Input / Output data check function

Based upon the knowledge base related to the operation of an analysis code and QA manual, the following functions have been developed in order to precisely and efficiently perform a series of works such as the creation of inputs, the execution of analyses and the evaluation of results.

(1) Input consistency check function

Inputs should be created according to the newest knowledge information, since the information is often updated according to the acquisition of new data, development, modification and verification of an analysis code. Therefore, to develop this function, we have created a generic program to check the consistency of data, and then we have registered the knowledge information as the form of data. The program reads an input of an analysis code and the knowledge base described by the specific syntax expressing the knowledge information. The program checks the consistency of parameters by the data to be read and provides the result of checking to analysts as message. According to the method as mentioned above, it is easy to reflect the update of knowledge base without the modification of the program.

Analysts can use this function through Input editor module of CAPASA and check the consistency of input in prior to the execution of PLAN.

(2) Result evaluation function

The evaluation of the result of analyses is carried out by comparison with existing results, analytical solutions, or results calculated by the similar analysis codes as the target analysis code.

(a) Analysis management function

Analyses such as reference cases and verification cases performed by CAPASA are controlled by classification hierarchy that forms into three levels. During the evaluation of results, analysts can retrieve referential results by tracing the classification hierarchy.

(b) Comparison display function

Comparison display function for the following knowledge information has been developed. This function allows analysts to display the result of a target analysis and existing results or analytical solutions performed out of CAPASA.

① Solubility and Kd Influences on maximum release rate about MESHNOTE

The following results are displayed in the same area (window).

- results of MESHNOTE calculated in CAPASA
- analytical solutions
- Existing results describing relation between maximum release rate and solubility

② Comparison between results of MATRICS and simplified model

The results of MATRICS and analytical solutions are displayed in order to understand the trend of nuclide release rate in fissure media.

3. 2. 4 Conclusion

Based upon QA manual and knowledge base about the operation of analysis codes, the quality assurance computer system has been developed, which reduce the load of analysts and human errors from the routine work of quality assurance activity. The system has following functions.

(1) Nuclide transfer data set management function

This function can maintain parameters used in nuclide transfer calculations with auxiliary information such as quality information. Data registration and retrieval are efficiently carried out by graphical user-interfaces.

(2) Common data function

This function can transfer data in Property database to inputs of analysis codes

automatically.

(3) Input / Output data check function

This function can check the consistency of input and help analysts in the evaluation of the result of an analysis.

Analysts can use these functions through CAPASA.

4. Enhancement of Analysis Management System

Analysis management system CAPASA has been improved according to the experience of the operation of CAPASA and the QA system developed in this fiscal year.

4. 1 Introduction of an New Analysis Code

Biosphere model AMBER has been introduced into CAPASA by surveying input / output data and the characteristic of the software. Moreover, an interface program that transfers data of MESHNOTE or MATRICS to an input of AMBER has been developed.

4. 1. 1 Survey of Analysis Code

AMBER has not only a solver, but also a graphical user interface for creating an input and displaying a result. In addition, AMBER can be only used on a computer prescribed by the software license. Consequently, we have analyzed data structure and developed the control method of AMBER.

(1) Development of the control method

The method of the control of AMBER is shown in Figure 4.1.1-1. When AMBER object is activated, a computer where CAPASA is running (local computer) requires a computer (remote computer) in which AMBER can be used to invoke AMBER. When the remote computer receives the requirement, it invokes AMBER and displays an interface of AMBER on the local computer. Through the interface, an analyst puts a result into a file after a series of operation such as the creation of data, execution and the evaluation of results. After that, input / output files created by AMBER are automatically transferred to the local computer and the files are stored in a database in the same manner as the conventional analysis codes like MESHNOTE.

(2) Analysis of data structure

We have studied the data structure of AMBER that becomes the basis of the design of database in order to maintain input / output data of AMBER by a database. The following parameters defined in input / output data are maintained in the form of hierarchy by the database.

- ◆ time series data of nuclide amounts in all Compartments
- ◆ time series flux data in all Sources
- ◆ time series flux data in all Transfers
- ◆ time series data of Parameter defined as Observer

If the input has distribution data (in the case of probabilistic case), maximum,

minimum and mean value of all the parameters described above are maintained.

In addition, the following parameters are also maintained by the database for reproducibility and operation.

- ◆ the name of a analysis and description about the analysis
- ◆ an input file and the name of the file
- ◆ a binary file containing the result of a calculation

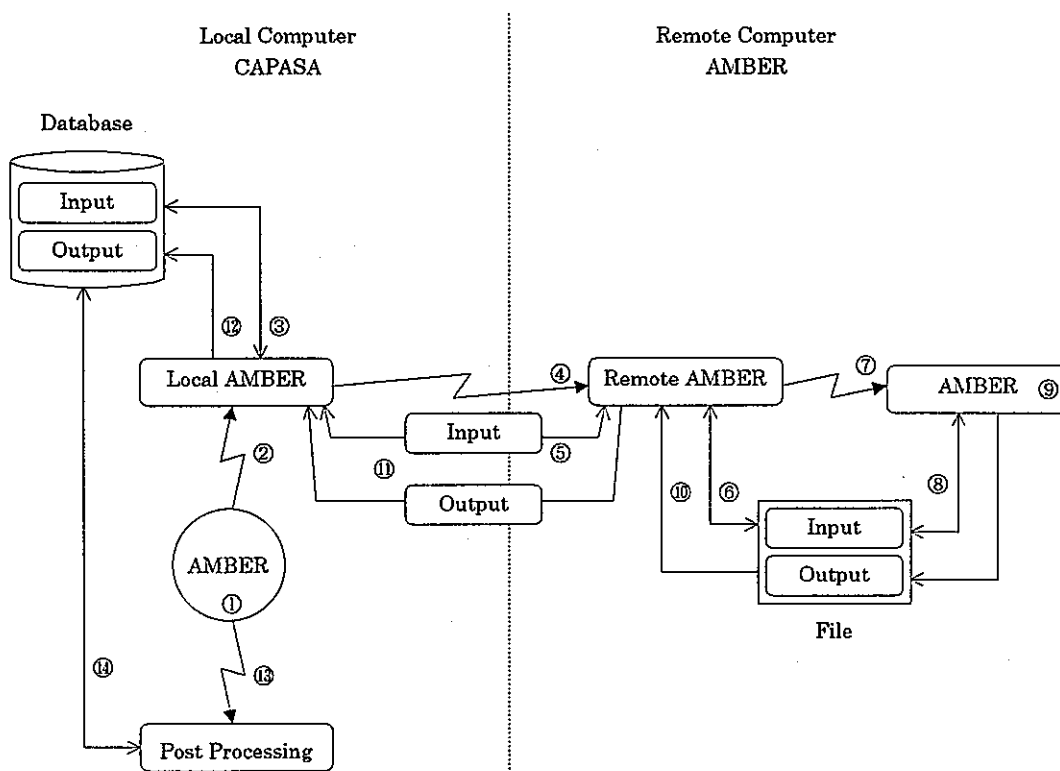


Figure 4.1.1-1 Control Flow of AMBER

4. 1. 2 Introduction into Analysis Management System

Based upon the data structure of AMBER, we have designed class structure and installed it into object-oriented database management system VERSANT. Moreover, we have developed an interface program that stores data of AMBER into the class structure.

The class structure storing input / output of AMBER is designed in consideration of the class structure of analysis codes which has been already introduced into CAPASA and

the utilization of existing generic classes. The class structure consist of ArPrCsData class derived from PrCsData class, ArItem class storing Compartment and so on, ArElement class and ArNuclide class storing Comtamint, and ArObserver class storing Parameter-Observer.

4. 1. 3 Development of Interface Program for Coupling Analysis

In order to evaluate dose to humans in biosphere in consideration of the result of nuclide transfer in buffer and fissured geosphere near near-field, we have studied the method of data connection between AMBER and MESHNOTE / MATRICS. In addition, we have developed an interface program that can transfer data among the analysis codes.

Data connection between AMBER and MESHNOTE / MATRICS are carried out by the following method.

- ① Calculation of dose to humans is performed by multiplying dose rate (Sv/y) of radionuclides against one mol/y source term calculated by AMBER and nuclide transfer rate (Bq/y) calculated by MESHNOTE or MATRICS.
- ② Calculation of dose to humans is performed by asserting nuclide transfer rate calculated by MESHNOTE or MATRICS into source term of AMBER.

4. 2 Enhancement of CAPASA

CAPASA has been improved to reflect the experience of the operation of CAPASA, improve the quality and efficiency of PA calculation, and integrate the QA system and CAPASA. Moreover, the introduction of large size analysis codes and the expansion of CAPASA to other type of computers has been studied.

4. 2. 1 Expansion to Plural Computers

To cope with increase of analyses for the second progress report, addition of the license of the database management system and distribution of databases have been carried out in order that plural analysts can use CAPASA simultaneously on Sun Microsystems workstations. Consequently, analysts can use CAPASA on the different workstation from the server computer. Moreover, in case that many analysts use CAPASA, the load of a computer, especially CPU (central power unit) can be reduced very much and the response of data access and the speed of calculations are much improved.

4. 2. 2 Enhancement of Interface Function

(1) Expansion of graph display interface

Existing PLAN load function, graph comparison function and axis setting function have been developed as the expansion of graph display interface.

(2) Expansion of database item for ORIGEN2

Items of ORIGEN2 to be stored in database have been expanded to maintain the following parameters used in radioactivity analysis in near-field.

- ① energy spectrum and source of neutron by (α , n) reaction
- ② neutron source by spontaneous fission
- ③ energy spectrum and source of γ ray

(3) Improvement of auxiliary information of ORIGEN2

In FY96 CAPASA, burn-up rate, term of cooling and so on were maintained as the event information. In this study, the method of the creation of the event information was improved and the items of the information were improved. Consequently, new auxiliary information has been defined and a function that can generate the information from an input has been developed.

4. 3 Expansion to the Other Type of Computer and Introduction of Large Size Analysis Codes

Expansion of CAPASA to computers except Sun Microsystems workstation and introduction of large size analysis codes have been studied.

4. 3. 1 Expansion to the Other Type of Computer

Expansion to the other type of computer depends on applicability of the object-oriented database management system VERSANT employed by CAPASA and the type of operating system (includes window system) of the computer.

In case that the target computer is not applicable to VERSANT, if all part of CAPASA will be converted, source code describing database access, which occupies 30% of entire source code, should be newly developed. But in case that control of PLAN and databases is performed on the computer where CAPASA can run and the execution of analysis codes is performed on the different computers, the expansion can be carried out in the same manner as the introduction of AMBER. As for operating system, if the operation system of the target computer is not UNIX, source code describing graphical user interfaces, which occupies 40% of entire source code, should be newly developed. Table 4.3.1-1 shows the result of this study.

4. 3. 2 Introduction of Large Size Analysis codes

In case that large size analysis codes has only a solver and the computer environment of the code is correspond to CASE-1 shown in Table 4.3.1-1, the code can be easily introduced into CAPASA. If the code has a graphical user interface except a solver and the operating system of the computer is UNIX, the code can be introduced in the same manner as AMBER.

On the other hand, in the case of CASE-4, programs which performs communication between a local computer where CAPASA is running and a remote computer where a code is running should be developed. If the code has a graphical user interface except a solver, analysts must face the local computer, since a screen of the code cannot be displayed on the local computer, because operating environment of the computer is Windows. However, usually it is difficult for an analyst to face the local computer and the remote computer alternately. Therefore, the analyst creates an input and executes an analysis on the remote computer at first. After that, the analyst performs processing on the local computer after sending input / output by build-in commands provided by Windows.

Table 4.3.1-1 Expansion of CAPASA into Other Type of Computer

Case	Database	Target	OS	Work	Computer/OS	Notes
1	VERSANT	the whole	UNIX (X-Window)	GUI 2-3% new Control 10% modification	SGI HP 9000 IBM RS/6000 DEC Alpha	IRIX5.3 HP/UX9.0/10.x AIX4.1 Digital UNIX V3.2C
2	VERSANT	the whole	none UNIX (Windows95/NT)	GUI 50% new Control 10% modification	PC PC	Windows NT 3.51 Windows 95
3	VERSANT / none VERSANT	code execution	UNIX (X-Window)	the same as AMBER		
4	none VERSANT	code execution	none UNIX (Windows95/NT)	Control 10% new (restriction)		Describes in Section 4.3.
5	none VERSANT	the whole	UNIX	DB 30% new		not integrate the existing CAPASA
6	none VERSANT	the whole	none UNIX (Windows95/NT)	100% new		

OS operating system
GUI graphical user interface

5. Conclusion

(1) Development of the Quality Assurance Manual

A quality assurance manual for performance assessment and hydrology has been created. The quality assurance manual is in the trial use in PNC and it is also applied to other studies in MHI.

(2) Development of Quality Assurance System

Information relating to performance assessment codes such as ORGEN2, PHREEQE60, MESHNOTE and MATRICS has been collected and the following items have been resulted.

- Extraction of knowledge items
- Maintenance of quality assurance documents

Quality assurance computer system has been developed in order to reduce the load of analysts and improve the quality of dynamic quality assurance activity. The system has been incorporated into CAPASA, and has the following functions.

- Data set management function that maintains data used in PA calculations
- Data transfer function that sends the data set into inputs of analysis codes
- I/O Check function that checks the consistency of input and helps analysts in the evaluation of results of calculations.

(3) Enhancement of Analysis Management System

In consideration of the experience of the operation of CAPASA and the integration of the QA system, analysis management system CAPASA has been improved.

(a) Introduction of an analysis code

Biosphere model AMBER has been introduced into CAPASA and a interface program which can transfer data between AMBER and MESHNOTE / MATRICS. Prior to the introduction, the control method, which can invoke an analysis code on a different computer from a computer where CAPASA is running, has been studied, based upon the characteristic of AMBER.

(b) Improvement of Functions

To reflect the experience of the operation and incorporate with QA system, the following improvements have been carried out.

- To cope with increase of analysis works, distributed database system has been developed. Moreover, CAPASA has been improved in order that many analysts can use CAPASA simultaneously.
- Comparison display function and axis setting function for graph display modules have been developed.

- Items of ORIGEN2 stored in a database have been expanded to maintain data used in the analysis of radioactivity in near-field.
 - New auxiliary information of ORIGEN2 is defined and function that can generate the information from an input has been developed.
- (c) Expansion to the other type of computers and introduction of large size analysis codes.

Expandability of CAPASA such as the expansion to the other type of computers except Sun Microsystems workstations and introduction of large size analysis codes has been studied. The conclusion is that the expansion to the computer of which operating system is UNIX is comparatively easy and it does not depend on the database management system.