

ニアフィールド核種移行に関する 概括的感度解析手法の高度化

(動力炉・核燃料開発事業団 委託研究概要)

技術資料		
開示区分	レポート No.	受領日
⌘	J1281 96-005	1996. 12.13.
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		

1996年3月

日揮株式会社

この資料は、動燃事業団の開発事業を進めるため、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、転機、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

目 次

はじめに	1
1. 人工バリア中核種移行挙動	4
2. 広義拡散方程式	5
2.1 人工バリアの構造及び解析対象領域	5
2.2 放射性壊変及び核種移行形態	5
2.3 広義拡散方程式系のテンソル表現	7
2.4 平均移動特性	7
3. 複数崩壊連鎖を取り扱うことが可能な広義拡散方程式のプロトタイププログラムの 開発	9
3.1 概要	9
3.2 .prespf ファイルによるSPADE .spf ファイルの作成	10
3.3 例題演習	11
3.3.1 概要及び.prespfファイル作成のために必要となる情報	11
3.3.2 計算結果	15
3.3.3 単一崩壊系列の場合との比較	15
4. 不確実性解析の必要性、手法及び各手法の問題点と対策についての調査	25
4.1 性能評価に内在する不確実性因子及び不確実性解析の必要性	25
4.2 過去の性能評価研究における不確実性の取り扱い手法及び各手法の問題点	27
4.2.1 保守的評価	27
4.2.2 最良推定	28
4.2.3 感度解析	28
4.2.4 確率論的手法	29
4.3 課題のまとめ	30

4.3.1	「確信の程度 (degree of belief)」の取り扱い	30
4.3.2	パラメータ以外の不確実性の取り扱い	32
4.4	これまでの不確実性解析の問題点に対する代替的手法	33
4.4.1	ファジー理論.....	33
4.4.2	シャドウモデル	40
4.5	今後の研究開発の方向性	42
5.	単一崩壊連鎖を例とした感度解析の実施.....	43
5.1	体系的感度解析の手順	43
5.1.1	感度解析手法.....	43
5.1.2	本解析に用いる感度解析手法の選定.....	45
5.2	一定環境条件下での核種移行プロセスに関する感度解析の実施	46
5.2.1	シャドウモデルの設定.....	46
5.2.2	核種移行解析の結果	47
5.2.3	感度解析.....	48
5.3	沈澱・溶解及び吸着の瞬時平衡を含む一定の核種移行プロセスに対する 環境条件変化の影響の感度解析の実施.....	51
5.3.1	シャドウモデルの設定.....	51
5.3.2	核種移行解析の結果	52
5.3.3	感度解析.....	53
6.	まとめ及び今後の課題.....	70

参考文献

はじめに

高レベル放射性廃棄物地層処分の性能評価には、多様な不確実性が含まれる。この不確実性の種類を性能評価の手順に則して分類すれば以下の様なものを挙げることができる。

- (1) 処分された廃棄物中の放射性物質が人間に影響を及ぼす過程あるいはこの影響程度を規定する環境条件の将来の変遷に関するFEPs(Features, Events and Processes)とこれらの組み合わせの選定についての不確実性 (シナリオ不確実性)
- (2) 選定された個々のFEPs、及びFEPs間の相関についての具体的な現象理解とその数学的な定式化に関する不確実性 (モデル不確実性)
- (3) 定式化された数学モデルを用いて解析を行う際の入力データの選定に関する不確実性 (パラメータ不確実性)

上記のいずれ (FEPs及びこれらの組み合わせの選定、モデルの作成、及び入力データ値の選定) においても、選択の可能性は複数存在しており、しかも評価対象となる時間・空間スケールの大きさに起因する観察結果や経験の不足のために、いずれの選択肢を採用することが適切かを判断する際に主観的な要素の介入を完全に排除することは極めて困難である。このことは、これら複数の選択肢からの選択の問題が一意的には行われ得ないことを意味し、つまり、性能評価の結果に何がしかの不確実性の影響が含まれることは不可避であると考えるなければならない。

このことは、性能評価研究の各段階を通じて極めて重要な意味を持つこととなる。例えば性能評価の実施に先立ち設計、シナリオ解析、モデル開発及びデータ収集を行う準備段階においては、引き続いて行われる性能評価に含まれる不確実性をできるだけ小さくすることが課題であり、このために、それぞれの不確実性を減らすための課題 (設計変更によって該当する不確実性の影響を低減する、保守的なモデルを用いることによって該当する不確実性因子が顕在化することを防ぐ、基礎的な研究を通じて現象理解そのものに内在する本質的な不確実性を低減する、等) の重要度分類を行うことが必要となる。性能評価研究が全体として多くの研究領域にまたがるものであることを考えれば、この点はプロジェクト全体の収束性を保つ上で極めて重要である。

また、実際に評価を行い、地層処分の安全性についてのある (暫定的なものであったとしても) 結論を導く際には、その判断の根拠としての評価結果に含まれる不確実性の種類と大きさを付記することが必須である。これは、統計的な評価手法を用いる場合にはもちろん明示的に為されることとなり、また保守的な決定論的評価においても実際の被ばく線量が算出された決定論的な上限値を上回らないことの確信の程度 (信頼性レベル) を示すことによって為されなくてはならない。

不確実性解析とは、前述した種々の選択肢についてそれぞれの確からしさを表現する「重み付け」 (確率、ファジー理論におけるメンバーシップファンクション、等。4. 参照。) を施すことにより、これら各選択肢のあらゆる組み合わせを包括した集合 (つまり評価結果の分布) の期待値や信頼性上限等の統計的な情報 (あるいは相当する定性的情報) を明らかにする作業である。評価の各段階において必要となる不確実性の取り扱いの

内、これまで最も積極的に研究の対象とされてきたものは(3)のパラメータ不確実性である。これは4.で詳述する様々な手法、例えば通常の性能評価モデルを用い入力データのある統計分布を持つ母集団からサンプリングすることによって行われる統計的な不確実性解析によって定量化することが可能である。より具体的な例としては、例えば人工バリア中の核種挙動についてパラメータの不確実性の影響を低減するための課題として最も重要なものは溶解度を算出するための熱力学データベースの確立であり、インベントリ制限となる少数の核種や娘核種の沈澱成長といった問題を抱えるAmやPuといった例外を除けば分配係数取得の重要性はあまり高くはないといった重要度分類の結果も得られている。しかしながら、この結果はあくまで(1)や(2)の不確実性の存在を無視したものであり、感度解析に用いるモデルやその前提となるシナリオが変われば、当然、変わる可能性がある。実際、最近の研究では、放射性元素の濃度が溶解度に達すると瞬時に沈澱が形成され過飽和状態は決して生じないという従来のいわゆる瞬時平衡溶解度限界モデルに代わり、溶解・沈澱の反応速度を現実的にモデル化した例では、評価結果が溶解度に支配されるのは沈澱反応が数週間のタイムスケールで生じる速い反応の場合に限られ、反応がこれよりも遅い場合には溶解度は人工バリアシステムからの核種放出率を実効的に制限する要因とはなり得ないことが示されている[Takase and Grindrod, 1994]。従って、理想的には、他の二つの不確実性要因についても総合的に考慮することが可能な手法を用いることが望ましい。しかし、現実的にはこれらの不確実性因子に対応する選択肢を上記と同様の統計的な手法において変動させることは即ち解析モデル自体の変更となってしまうために、これまでシナリオ不確実性あるいはモデル不確実性にも併せて適用可能な定量的な解析手法は開発されていない。

本研究は、前出の三種類の不確実性因子(シナリオ、モデル、及びパラメータの複数の選択肢)の全てについて、定量的な感度解析と不確実性解析とを行うことを可能とする手法の開発を目的としたものである。より具体的には、人工バリア内の物質移動が分子拡散によって支配されることのみを前提として、溶存イオン、吸着種、コロイド、あるいは沈澱といった複数の化学形態が相互に相転移しつつ移行する過程を種々の内部あるいは外部事象の影響により空間的にも時間的にも変化する環境条件の下に解析するという一般性の高い問題を、各現象が共通して持っている特性のみを括りだした広義拡散方程式により表現し、さらにこの方程式に含まれる自由度を広義拡散係数と呼ばれる量の代数的な表現として各現象に特有な性質を付加するという方法により取り扱う手法を開発しその適用性を確立することを目標とする。

昨年度の研究においては、単一崩壊系列のみに着目して、ガラス溶解挙動や、コロイド生成・移行、速度論的な溶解・沈澱反応、といった広範な核種移行プロセスを上記手法で表現し、隆起・浸食や酸化性地下水侵入といった事象に起因する環境条件変化の下でのこれらの移行プロセスの振る舞いについての感度解析を実施した。この成果を踏まえ、本年度は来るべき性能評価研究第二次成果とりまとめに向けて、実用性の高いソフトウェアの基盤(プロトタイプコード)を開発し、その適用方法の具体的手順(感度解析の実施手順)を確立するとともに、単なる感度の分析にとどまらず、前出の各選択肢にそれぞれの確からしさについての専門家の主観的な判断に対応した「重みづけ」を施した不確実性解析を行う上での基本的な方向性を明らかにすることを目標とする。具体的には、

- (1) 複数崩壊連鎖を同時に扱うことの可能な広義拡散方程式のプロトタイププログラムの開発

(2) 上記プログラムを用いた感度解析の体系的・効率的な実施手順の検討及び予備的感度解析の実施

(3) 不確実性解析の必要性、手法及び各手法の問題点と対策についての調査・検討並びに今後の研究開発計画の提案

をそれぞれ行うこととする。

1. 人工バリア中核種移行挙動

本節では、2.で行う広義拡散方程式の定式化に先立ち、昨年度報告書（高瀬、中安、1995）に基づき解析対象として考慮すべき人工バリア中核種移行挙動の全体像を整理しておくこととする。なお、詳細については上記報告書を参照されたい。

人工バリア中核種移行挙動の全体像は、核種の移行形態についての選択肢及びこれらの異なる移行形態間で核種の配分に寄与するプロセスについての選択肢を組み合わせることによって理解されるべきである。

この二種類の選択肢を組み合わせた核種移行挙動の全体像を図1-1にまとめる。同図に示した通り、人工バリア中に存在する放射性核種は、複雑に組み合わせられた化学あるいは物理的なプロセスによってそれぞれ移行特性の異なる形態間を転移しつつ分子拡散することとなる。2.以降で具体化する広義拡散方程式は、原則として図1-1に示す全ての移行形態あるいはプロセスに共通のものを括りだし、かつ、残された自由度を用いて個々の現象に特有の性質を広義拡散係数の代数表現として取り扱うことが可能なものであることが求められる。

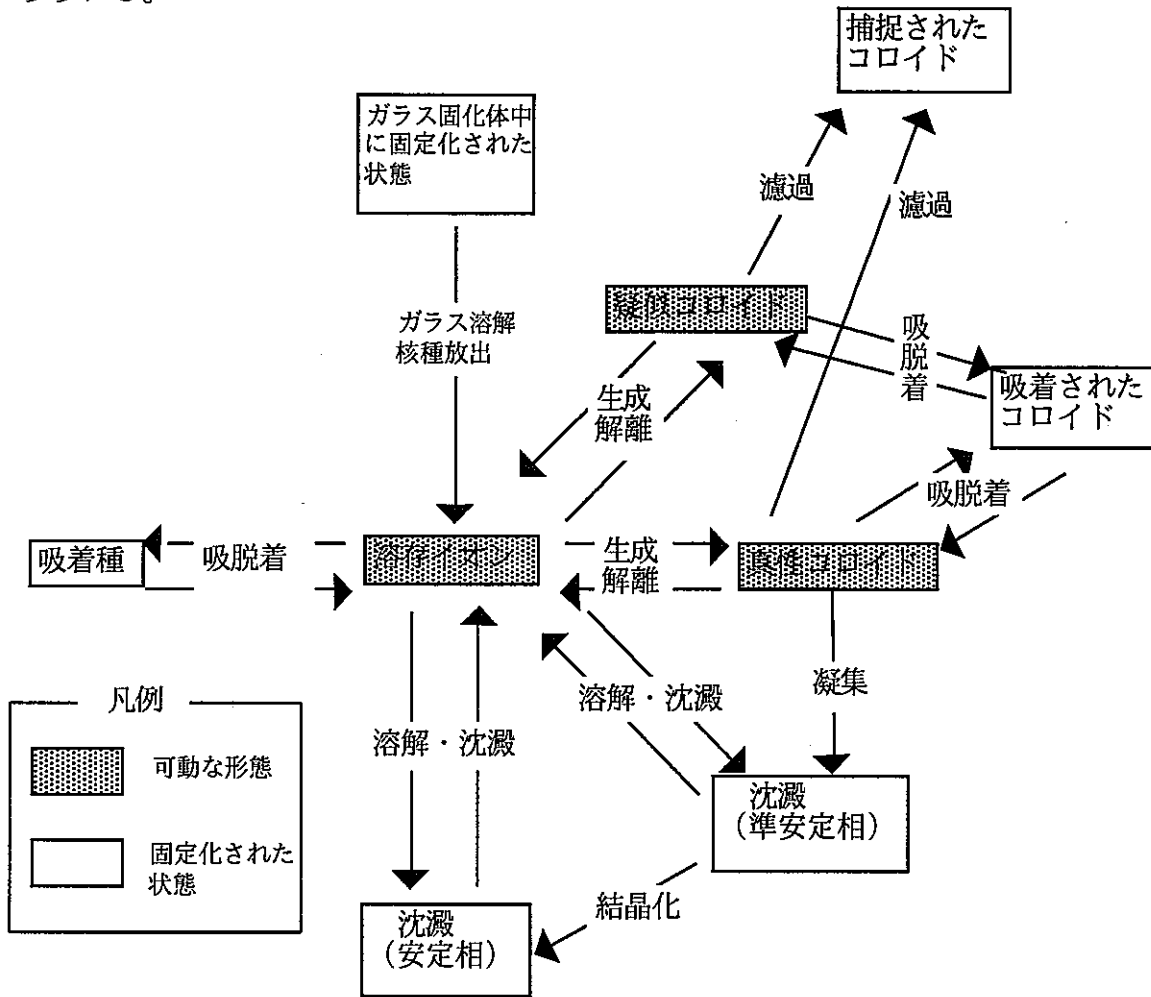


図1-1 人工バリア中核種移行挙動の全体像

2. 広義拡散方程式

ここでは、1. に述べた各現象に共通した部分即ち分子拡散のみを固定し、他の一切の要素を不定とした最も一般的な形式の拡散方程式である広義拡散方程式の導出と定式化を行う。本年度の定式化の眼目とするところは、後述する複数崩壊連鎖への拡張を予め念頭に置いて、最も複雑となるであろう核種の移行形態転移に関する部分をテンソル表現とするという点である。このことにより、3.に述べる様なSPADEの.prespfファイルの構造が極めて見通しの良いものとなる。

2.1 人工バリア構成及び解析対象領域

性能評価研究成果第一次とりまとめ（以下、平成3年度報告書と呼ぶ）あるいは昨年度の本研究と同様人工バリアシステムとして、代表的には、

- ・高レベル放射性廃棄物ガラス固化体
- ・炭素鋼製オーバーパック
- ・高圧縮ベントナイト緩衝材

からなる構成が考えられる。また、人工バリアシステム中の核種移行解析に対して適切な境界条件を与えるために、周囲の母岩特に坑道掘削により形成されると考えられる「ゆるみ域」を含めたニアフィールド領域を想定することができる。

昨年度作成した広義拡散方程式は、上記の人工バリア及びニアフィールド構成に直接対応したものであり、また領域の定義は固定されたものであった。しかしながら、これまでに述べてきた様に本手法が解析上の柔軟性を最大限に確保することを眼目とするものであることを考えれば、まず第一にこの領域設定が解析の目的に応じて自由に設定・変更可能であることが望ましいことは明らかである。そこで、本年度開発する広義拡散方程式では、人工バリアシステムとそれを取りまく周辺母岩が円筒座標系 (x, r, θ) において x, θ についての対称性を有すること、即ち円筒座標系一次元 (r) において近似されることのみを制約条件として、これを任意数 P の小領域（原点を含むものは単位厚さの円盤、これ以外は同じく単位厚さの輪となる）に区分できるものとする。そして、広義拡散方程式の形式（例えばソースの有無）及び後述する広義拡散係数の代数表現（吸着タイプの相異等）はそれぞれ各小領域毎に独立して設定可能なものとする。

2.2 放射性壊変及び核種移行形態

昨年度の報告書（高瀬、中安、1995）で既に述べたように、広義拡散方程式は分子拡散により移動する核種が異なる拡散速さの状態間を転移する過程を広範に表現可能なものであることが必要であり、また、この様な転移の可能性としては広い意味での化学反応による核種移行形態の変化と放射性壊変及びこれらの複合的な効果を考慮する必要がある。これらを取り扱う上では、まず、放射性壊変について各同位体が ${}^{4n} - {}^{4n+3}$ までの4種類の連鎖のうちのどれに属し、その中でどの順位に位置するかを特定することが必要である。つまり、放射性壊変の情報は基本的に同位体に対応して与えられるべきものである。しかしながら、化学反応については事情は異なったものとなる。化学反応はあくまで元素に対応して定義されるべきものであり、各同位体の状態量（例えば濃度）に加えて、

これらを元素毎に括った元素濃度を定義し、これに基づいて化学反応項を立式する必要がある。また、本研究で取り扱う化学反応には、局所瞬時平衡を達成し得る程度に「速い反応」とそれ以外即ち非平衡の可能性を含めて速度論的な取り扱いが必要となる「遅い反応」とが含まれる。また、上記報告書で述べた通り、互いに「速い反応」のみによって対応づけられた移行形態間（例えば瞬時吸着平衡にある溶存イオンと吸着種）には化学的な平衡関係に対応する質量作用式（数学的には、これらは非線形の代数方程式として理解される）が成立する。このため、これらの「速い反応」のみによって対応づけられた移行形態のグループは互いに従属関係にあり、一つの移行形態を代表として採れば他は従属変数として表現可能である。このことは、これらの「速い反応」のみによって対応づけられた移行形態のグループ（以下、簡単のため瞬時平衡グループと呼ぶ）についての総濃度がわかればこのグループに含まれる全ての個々の移行形態の濃度は決定され、従ってこの瞬時平衡グループ全体としての平均拡散係数も決定されることを意味している。つまり、広義拡散方程式に基づく計算の実施という観点のみから言えば、一つの瞬時平衡グループ内の各移行形態濃度を算出する必要はなく、代わりに瞬時平衡グループの総濃度のみを未知数として方程式を立式すれば良いということになる。各移行形態の濃度は、必要に応じて、計算が終了してから瞬時平衡グループの総濃度に基づき算出することができる。以上の状況を図2.1-1に模式的にまとめることとする。

注記：上の議論は、図2.1-1の例で言えば合計13個存在する移行形態のそれぞれを個別に定式化する必要はなく、3種類の瞬時平衡グループについてそれぞれ速度論的反応による相互の物質交換を含んだ広義拡散方程式と広義拡散係数の代数表現とを与えれば良いということの意味している。

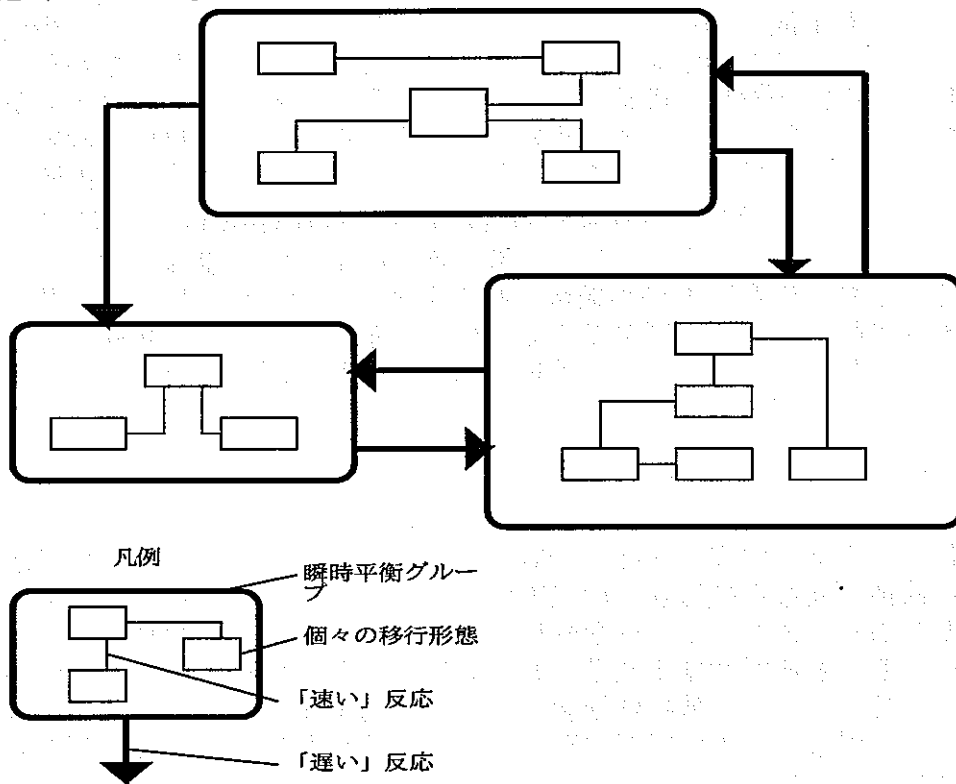


図2.1-1 「速い」反応及び「遅い」反応による核種移行形態間転移の模式図

2.3 広義拡散方程式系のテンソル表現

前節に述べた放射性壊変と化学反応に対応して必要となる核種の区分あるいは括り方を考慮して、以下の一般的な問題を考えることとする。

合計I個の同位体（それぞれの同位体を $i=1,2, \dots, I$ と呼ぶこととする）を有する合計E個の元素（それぞれの元素を $h=1,2, \dots, E$ と呼ぶこととする）が、G個の瞬時平衡グループ（それぞれのグループを $j=1,2, \dots, G$ と呼ぶこととする）の間を速度論的な即ち「遅い」反応に従って転移しつつ分子拡散する状況を想定する。ここで、ニアフィールドを構成するP個の小領域は、さらに通常の円筒座標系における定間隔の空間差分により離散化されるものとし、以下ではこれらのうちの任意の小領域に着目して、Q個の有限差分メッシュに離散化されるこの小領域のメッシュ k についての物質収支式を以下の様に形式的に定式化するものとする。

$$(1) \quad \frac{\partial \mathbf{m}(t)}{\partial t} = \mathbf{T}(m,t) - \Lambda(m,t) + \mathbf{S}(m,t) + \mathbf{R}(m,t)$$

$$m = \theta V C$$

m : 質量
 θ : 空隙率
 V : 体積
 C : 濃度

但し、

質量テンソル $\mathbf{m} = (m_{ijk}(t))$, $m_{ijk}(t)$; メッシュ k （単位体積ではない）における同位体 i のうち瞬時平衡グループ j に属するものの総質量 [mol]

物質移動テンソル $\mathbf{T} = (T_{ijk}(m,t))$, $T_{ijk}(m,t)$; メッシュ k における同位体 i のうち瞬時平衡グループ j に属するものの分子拡散による正味の物質移動フラックス [mol/s]

放射性壊変テンソル $\Lambda = (\Lambda_{ijk}(m,t))$, $\Lambda_{ijk}(m,t)$; メッシュ k における同位体 i のうち瞬時平衡グループ j に属するものの放射性壊変による正味の質量損失 [mol/s]

ソーステンソル $\mathbf{S} = (S_{ijk}(m,t))$, $S_{ijk}(m,t)$; メッシュ k における同位体 i のうち瞬時平衡グループ j に属するもののソースからの供給フラックス [mol/s]

化学反応テンソル $\mathbf{R} = (R_{ijk}(m,t))$, $R_{ijk}(m,t)$; メッシュ k における同位体 i のうち瞬時平衡グループ j に属するものの、他の瞬時平衡グループとの間の速度論的反応に伴う正味の質量増加 [mol/s]

2.4 平均移動特性

上述した広義拡散方程式は、 α_{hjk} 及び γ_{hjk} という瞬時平衡グループ全体について平均化された移動特性（それぞれ分子拡散、及び移流に対応）を含むものである。そして、既に述べた様にこれら二つの平均移動特性の具体形が与えられないために広義拡散方程式は不定となり、逆に、この自由度を利用して様々な移行形態間転移を簡便にモデル化することが可能となる。表2.4-1に、本研究でこれまでに定式化した α 及び γ の代数表現をまとめる。

表2.4-1 α 及び γ の全濃度 C の関数としての代数表現の一覧表 (その1)

	$\alpha(C)$	$\gamma(C)$
線形吸着	$\alpha = \frac{D_{ion}}{R_D}$ <p>D_{ion}; 溶存イオンの拡散係数 R_D; 遅延係数</p>	$\gamma = \frac{q}{R_D}$ <p>q; 移流フラックス</p>
非線形吸着	$\alpha = \frac{D_{ion} \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}{D_{ion} \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}$ <p>a, b; ラングミュア吸着等温線の定数。 $s = \frac{ac}{1+bc}$</p>	$\gamma = \frac{q \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}{q \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}$
溶解度限界及び線形吸着	$\alpha = \begin{cases} \frac{D_{ion}}{R_D}, & \text{for } C < R_D c^* \\ \frac{D_{ion} c^*}{C}, & \text{for } C \geq R_D c^* \end{cases}$ <p>c^*; 溶解度</p>	$\gamma = \begin{cases} \frac{q}{R_D}, & \text{for } C < R_D c^* \\ q \frac{c^*}{C}, & \text{for } C \geq R_D c^* \end{cases}$
溶解度限界及び非線形吸着	$\alpha = \begin{cases} \frac{D_{ion} \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}{D_{ion} \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}, & \text{for } C < c^* + \frac{ac^*}{1+c^*} \\ \frac{D_{ion} c^*}{C}, & \text{for } C \geq c^* + \frac{ac^*}{1+c^*} \end{cases}$	$\gamma = \begin{cases} \frac{q \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}{q \frac{-1-a+bC + \sqrt{(bC-a-1)^2 + 4bC}}{2bC}}, & \text{for } C < c^* + \frac{ac^*}{1+c^*} \\ q \frac{c^*}{C}, & \text{for } C \geq c^* + \frac{ac^*}{1+c^*} \end{cases}$
(線形) 疑似コロイド、溶解度限界及び線形吸着 (*1)	$\alpha = \begin{cases} \frac{D_{ion} + \xi D_{pcol}}{R_D + \xi}, & \text{for } C < (R_D + \xi) c^* \\ \frac{(D_{ion} + \xi D_{pcol}) c^*}{C}, & \text{for } C \geq (R_D + \xi) c^* \end{cases}$ <p>ξ; 疑似コロイド濃度の溶存イオン濃度に対する比例 (平衡) 定数 D_{pcol}; 疑似コロイドの分子拡散係数</p>	$\gamma = \begin{cases} q \frac{1+\xi}{R_D + \xi}, & \text{for } C < (R_D + \xi) c^* \\ q (1+\xi) \frac{c^*}{C}, & \text{for } C \geq (R_D + \xi) c^* \end{cases}$

注記 * 1

核種は疑似コロイドに対しても線形に吸着することが仮定されている。

表2.4-1 α 及び γ の全濃度 C の関数としての代数表現の一覧表 (その2)

	$\alpha(C)$	$\gamma(C)$
真性コロイド、溶解度限界及び線形吸着；真性コロイド濃度が沈澱濃度に比例する場合	$\alpha = \begin{cases} \frac{D_{\text{ion}}}{R_D}, & \text{for } C < R_D c^* \\ \frac{D_{\text{ion}} c^* + D_{\text{col}} \eta (C - R_D c^*)}{C}, & \text{for } C \geq R_D c^* \end{cases}$ <p>D_{col} ; 真性コロイドの拡散係数 η ; 真性コロイド濃度の沈澱濃度に対する比例定数</p>	$\gamma = \begin{cases} \frac{q}{R_D}, & \text{for } C < R_D c^* \\ q \frac{c^* + \eta (C - c^*)}{C}, & \text{for } C \geq R_D c^* \end{cases}$

3. 複数崩壊連鎖を取り扱うことが可能な広義拡散方程式のプロトタイププログラムの開発

3.1 概要

2.に述べた様に、ガラス固化体中に含まれる放射性核種は、人工バリア及びその周囲にあるニアフィールド母岩中において、各時刻及び位置での化学的条件ならびに核種自体の濃度に応じて個々に拡散性の異なる形態間を転移しつつ移動するものである。この様な複数の移行形態間の転移に係る特性は主として化学的なものであり従って元素毎に定義されるべきものである。本章で開発するプロトタイプコードは、この様な問題の枠組みの中において、放射性壊変に伴うある元素の同位体から他の元素の同位体への変化とこれに喚起されて生じる異なる移行形態間の転移さらにはその結果としての移行挙動への影響の解析を正確に行うことがその眼目とするところである。つまり、単一崩壊系列について個別に行う解析では考慮することが不可能な同一元素の複数の同位体間での「反応フラックス」の配分を各時刻、位置における同位体比に対応して正確に行うことを目標とする。

上述した複数同位体の存在に起因する効果のうちこれまでの経験で最も良く知られているのは、恐らく溶解度配分の問題であろう。これは、瞬時平衡溶解度限界モデルにおいて、単一崩壊系列毎に独立して行う計算が全体として見れば溶解度を同位体の個数回重複してカウントしているものであること、従ってある時期存在比が非常に小さくなる同位体については崩壊系列毎の個別計算が無視し得ない程過度に保守的なものとなっている可能性があることを示唆している。この様な崩壊系列毎の個別計算の誤差は、それが安全側のものであること、そして誤差は存在比の小さい同位体のみ顕在化すること、から通常は大きな問題とはならない。しかしながら、存在比の小さい同位体が他の（モル濃度という意味で）支配的な同位体に比して著しく高い毒性を有するものである場合、例えば摂取有害度指数を尺度として見た場合のニアフィールドからの核種放出率を有意に過大評価する可能性がある。以上が複数崩壊連鎖を同時に扱う解析で標的とすべき問題の所在である。

本章では、2.に述べた広義拡散方程式を、任意メンバーの複数崩壊系列、任意数の移行形態グループ及び個々の移行形態について設定し解法することが可能なプロトタイプコードを作成するものとする。より具体的には、解析領域とその離散化、諸物性値、対応する物質移動テンソル、放射性壊変テンソル、ソーステンソル、及び化学反応テンソルと平均移動係数を記述する汎用DAEソーパーSPADEの.spfファイルを体系的かつ効率的に作成するプリプロセッシングユニットを作成する。

3.2 .prespfファイルによるSPADE.spfファイルの作成

2.に述べた広義拡散方程式は、勿論、我々の問題に共通したものであり、従ってこれは同時に作成すべき.spfファイルの共通の構造を与えるものと見ることが出来る。そこで、本研究ではこの広義拡散方程式、特に上記の種々のテンソルを定義するための表記法を作成し、この表記法に基づく入力情報（.prespfファイルと呼ぶ）を解読してこれに基づき対応する.spfファイルを作成するCプログラムを開発した。以下に、.prespfファイルの構造と、ここでの情報に基づきどの様に.spfファイルが作成されるかをまとめる。

.prespfファイルでは、.spfファイル及び他の一般的なC言語でのプログラミングと同様、各行はキーワードで始まりセミコロンで終了する。また、.spfファイルで定義されていた全てのキーワードに加え、.prespfファイルでは2.の広義拡散方程式に対応して以下の新たなキーワード群が使用可能となっている。

DECAY CHAIN
CHEMICAL STATE
COLLECTED STATE
STATE DEPENDENCE
LAYER
POROSITY
VOLUME
AVERAGE MOBILITY
SOURCE
ADVECTIVE MOBILITY
REACTION
SPFWHEIGHT

.prespfファイルのもう一つの特徴は、これらのキーワードに対応するテンソルその他の情報を記述する際に、以下の要領でストリングを作成することである。

” KEY WORD 定義すべき表現の属性1：定義すべき表現の属性2：（必要数継続...）：
関数形、関数に含まれるargumentのリスト”

また、特に頻出する濃度及び質量はそれぞれ[.]及びm[.]によって認識され、括弧内には通常、同位体名称と移行形態あるいは瞬時平衡グループの名称が記入される。従って、例えばU233の溶存イオン濃度をionsで総称される瞬時平衡グループの全濃度で表現する場合、

STATE DEPENDENCE Uranium.233 : dissolved ions : x/RdU, x=[Uranium.233, ions]

というストリングを作成することとなる（但し、RdUは別途定数（CONSTANT）として定義されているものとする）。

3.3 例題演習

3.3.1 概要及び.prespfファイル作成のために必要となる情報

ここでは、前節に述べた.prespfファイルを用いて、各3メンバーを有する4崩壊系列（合計12同位体、5元素）の瞬時線形吸着と速度論的な溶解・沈澱反応を含めた例題について計算を行うこととした。ここでは、まず、前出のキーワードに関連する情報を記載することを通じて例題の条件設定をまとめることとする。

DECAY CHAIN

表 3.3.1-1の各3メンバーを有する4崩壊系列（計12同位体、5元素）を解析対象とする。なお、初期インベントリは表 3.3.1-2の通りである（表中の数字は固化体1体当たりに対応するものであり、円筒座標の軸方向単位長さを対象とする実際の計算では、廃棄体1体当たりの実効高さ1.95メートルで除した数値を用いる）。

CHEMICAL STATE及びCOLLECTED STATE

移行形態及び瞬時平衡グループとしては、それぞれ3種類及び2種類を考えることとし、また、これらの間の対応は表 3.3.1-3に示す通りとする。

表 3.3.1-1 解析対象とする崩壊系列及び同位体

	対応する同位体と崩壊系列
4n	Pu.240 > U.236 > Th.232
4n+1	Am.241 > Np.237 > U.233
4n+2	U.238 > U.234 > Th.230
4n+3	Am.243 > Pu.239 > U.235

表 3.3.1-2 各同位体の初期インベントリ

同位体	初期インベントリ (mols/waste)
Am.243	0.358
Am.241	0.230
Pu.240	0.157
Pu.239	0.223
Np.237	3.527
U.238	8.15
U.236	5.47 e-2
U.235	8.85 e-2
U.234	1.00 e-3
U.233	1.06 e-3
Th.232	5.39 e-6
Th.230	2.37 e-5

表 3.3.1-3 移行形態及び瞬時平衡グループ

移行形態	瞬時平衡グループ
溶存イオン	ions
吸着種	ions
沈澱	precipitates

STATE DEPENDENCE

瞬時平衡グループionsについては、これに含まれる溶存イオンと吸着種の濃度とがそれぞれ以下の関係式によりionsの全濃度により表現されるものとする。

$$[\text{dissolved ion}] = \frac{1}{1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \rho K_D} [\text{ions}],$$

(2)

$$[\text{sorbed ion}] = \frac{\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \rho K_D}{1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \rho K_D} [\text{ions}],$$

但し、 ρ 及び ε はそれぞれ当該領域の密度と空隙率とし、 K_D は表 3.3.1-4で与えられるものとする。

表 3.3.1-4 各元素の分配係数

	K_D (m ³ /kg)
Am	10.0
Pu	10.0
Np	0.1
U	0.1
Th	0.1

LAYER, POROSITY及びVOLUME

解析対象領域としては、ガラス固化体、オーバーパック、緩衝材及びゆるみ域の4つを考慮することとし、それぞれを以下の様に定義する。

表3.3.1-5 各小領域の形状及び特性

	内半径(m)	外半径(m)	容積	密度(kg/m ³)	空隙率
ガラス固化体	0.0	0.2	一定	2.7 e3	0.33
オーバーパック	0.2	0.5	一定	2.7 e3	0.33
緩衝材	0.5	1.5	一定	2.7 e3	0.33
ゆるみ域	1.5	3.0	一定	2.7 e3	0.33

AVERAGE MOBILITY及びADVECTIVE MOBILITY

唯一の可動な形態である溶存イオンを含む瞬時平衡グループionsの平均分子拡散係数及

び平均移流流束は、上述したSTATE DEPENDENCEに基づきそれぞれ以下の様に与えられる。

$$(3) \quad \text{平均拡散係数} = \frac{1}{1 + \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \rho K_D} D,$$

$$(4) \quad \text{平均移流流束} = \frac{1}{1 + \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \rho K_D} Q.$$

但し、溶存イオンの拡散係数 $D=2.84 \times 10^{-2}$ (m²/yr) 及び ゆるみ域内地下水流束 $Q=1$ (m³/yr) とする。

SOURCE

ガラス固化体領域において、以下の一定浸出率のガラス溶解にともなう核種放出が生じるものとする。

$$(5) \quad (\text{ガラスからの核種放出率}) = \kappa e^{-(\kappa+\lambda)t} m_i^0$$

但し、 λ_i 及び m_i^0 はそれぞれ同位体 i の崩壊定数及び初期インベントリとする。また、ガラス浸出率 (fractional rate, 1/yr) は、 1.0×10^{-4} とする。

REACTION

速度論的な反応としては溶解・沈澱反応を考えると、この反応に伴う瞬時平衡グループionsと瞬時平衡グループprecipitatesとの間の核種の交換フラックスを、前者から後者の向きを正として、以下の様に定義する。

$$(6) \quad \begin{aligned} & (\text{溶解・沈澱反応フラックス}) \\ = & -\mu \frac{[\text{isotope, dissolved ion}]}{[\text{element, dissolved ion}]} \left([\text{element, dissolved ion}] - c^* \right) H \left([\text{element, dissolved ion}] - c^* \right) \\ & + \mu \frac{[\text{isotope, precipitates}]}{[\text{element, precipitates}]} \left([\text{element, dissolved ion}] - c^* \right) \\ & \left\{ 1 - H \left([\text{element, dissolved ion}] - c^* \right) \right\} H \left([\text{isotope, precipitates}] \right) \end{aligned}$$

ここで、反応が正方向の場合と逆方向の場合とで使用する同位体比が異なることに留意されたい。これら液相及び固相の同位体比は瞬時平衡の仮定の下では常に等しいが、反応が速度論的である場合には必ずしも等しくはならない。 c^* は溶解度であり、各元素についてそれぞれ表 3.3.1-6に示す数値を用いることとする。また、 μ は反応速度定数であり、

0.1 (1/yr) の場合と10の場合の2ケースを考えるものとする。

表 3.3.1-6 各元素の溶解度

	溶解度(mols/m ³)
Am	6.3 e-5
Pu	2.5 e-8
Np	2.0 e-9
U	3.9 e-7
Th	2.5 e-7

3.3.2 計算結果

前節にまとめた例題についての条件の下で、2ケース（溶解・沈澱反応が速い場合と遅い場合）の計算を実施した。計算結果の例として、Uのニアフィールドからの核種放出率の経時変化を図3.3.2-1及び-2に示す。主としてU.238の寄与により溶解・沈澱反応が遅い（ $\mu=0.1$ ）場合は勿論、速い（ $\mu=10$ ）場合でもゆるみ域内の濃度が溶解度に達すると仮定した場合の放出率を上回る最大放出率が算出されている。また、Uの放出率は、全Uとしての放出率が定常に到達した後も各同位体毎に見れば存在比の変化を反映した非常に複雑な挙動を示している。

図3.3.2-3及び-4は、全Uの人工バリア内溶存イオン濃度分布の時間的な変遷を示す3次元グラフである。放出率のグラフと整合的な挙動を示していることがわかる。また、核種放出率の計算結果からも予想された様に、各同位体の存在比は元素としての定常状態が達成された後も変動をし続け、結果として非常に複雑な溶解度配分の挙動を示している。

全Uについては、いずれのケースでも沈澱フロントがゆるみ域にまで達している。一つの同位体（U.233）に着目して沈澱濃度分布を整理したものが図3.3.2-5及び-6である。このうち特に後者は、全Uとは異なりU.233の沈澱フロントがガラス固化体近傍で留まっていることを示している。この様に沈澱という一種類の形態に限っても位置によって同位体比が異なる理由としては、U.233の沈澱がそれ自体として液相中を移行してきたのではなく既にNp.237として沈澱していたものから放射性壊変によってもたらされたものであると考えられる。これは、フロント位置がNp.237のフロント位置と類似していることとも整合的である。

3.3.3 単一崩壊系列の場合との比較

前節で述べた複数崩壊系列を考慮した計算の結果は、単一の崩壊系列のみを考慮した場合の結果とどの様にあるいはどの程度異なるのであろうか。前節に述べた種々の考察から見て、UのU.238以外の同位体については、複数の同位体間の競合効果により単一崩壊系

列での計算結果とは異なるものであると予想される。この疑問に答えるために、 $4n+1$ 系列のみを考慮して、相当する条件下での核種移行計算を実施した。例として、U-233の溶存イオン及び沈澱のそれぞれについての人工バリア内濃度分布を、複数崩壊系列の場合と単一崩壊系列の場合とで比較した結果が図3.3.3-1及び-2である。複数崩壊系列を考慮した場合に、他の同位体に影響されて溶存イオン及び沈澱濃度ともに時間的な変遷のパターンが大きく異なっていることは明らかである。このことは、複数崩壊系列を同時に計算することの正当性をある程度示しているものと考えられる。しかしながら、最大放出率という性能評価上最も重要性の高い尺度についての差は、評価の用途や安全裕度によって必ずしも有為なものではないと考えられる。また、計算効率の観点から比較すると、単一崩壊系列について1億年の計算をするのに要するCPUタイムはScilicon Graphics社のIRIS機で約15分つまり4系列全体で約1時間であるのに対して、複数崩壊系列の場合にWEIGHTや関数hsmoothを種々に変えて見て得られた最短時間でもその5倍程度を要する。この5倍という差は、現時点では、Uの各同位体の存在比が固相及び液相でめまぐるしく変わり真の意味での定常状態が達成されない複数崩壊系列での問題自体が、数値解法に依らず本質的に有している困難に対応するものと考えられる。より高速の計算機を用いるとしても、いくつかの比較的限られた数のケースについて複数崩壊系列の計算を行うことは必要であるが、膨大な数を処理する必要のある感度解析や不確実性解析を全てこれと同じ設定で実施する必要があるかと言う点については大きな疑問が残ると言えよう。

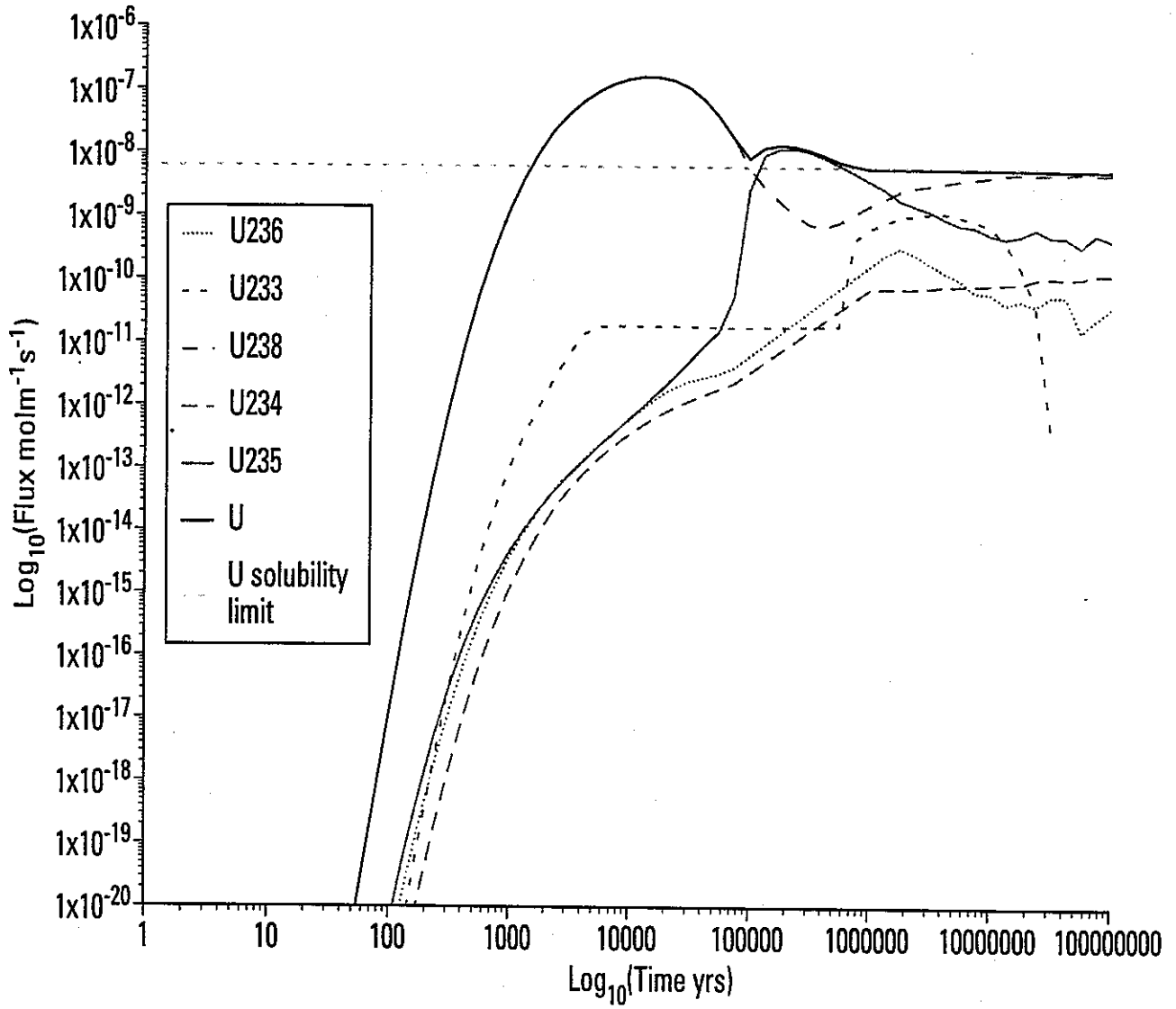


図3.3.2- 1 人工バリアからの核種放出率 (U, $\mu=0.1$)

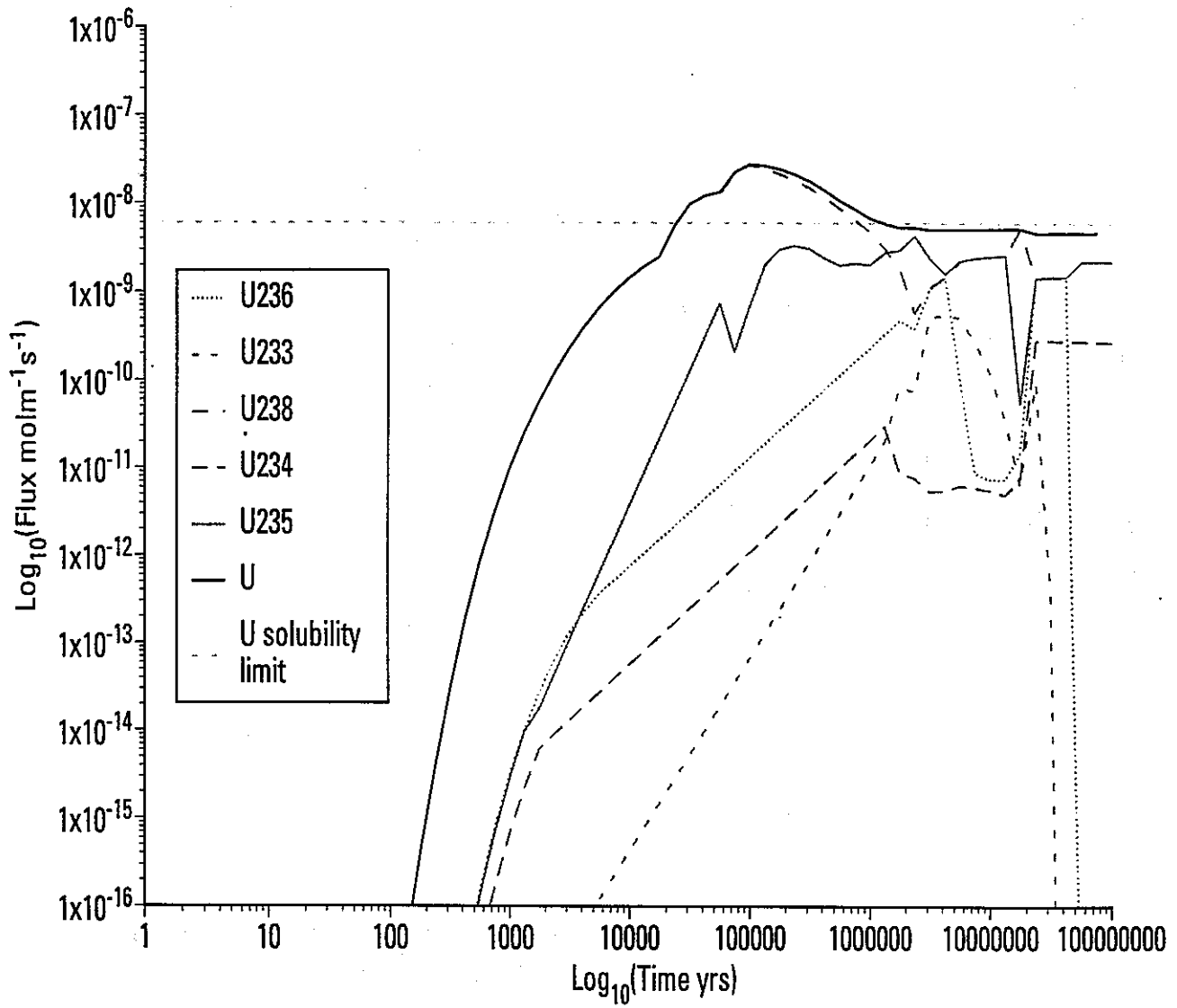


図3.3.2-2 ニアフィールドからの核種放出率 (U, $\mu=10$)

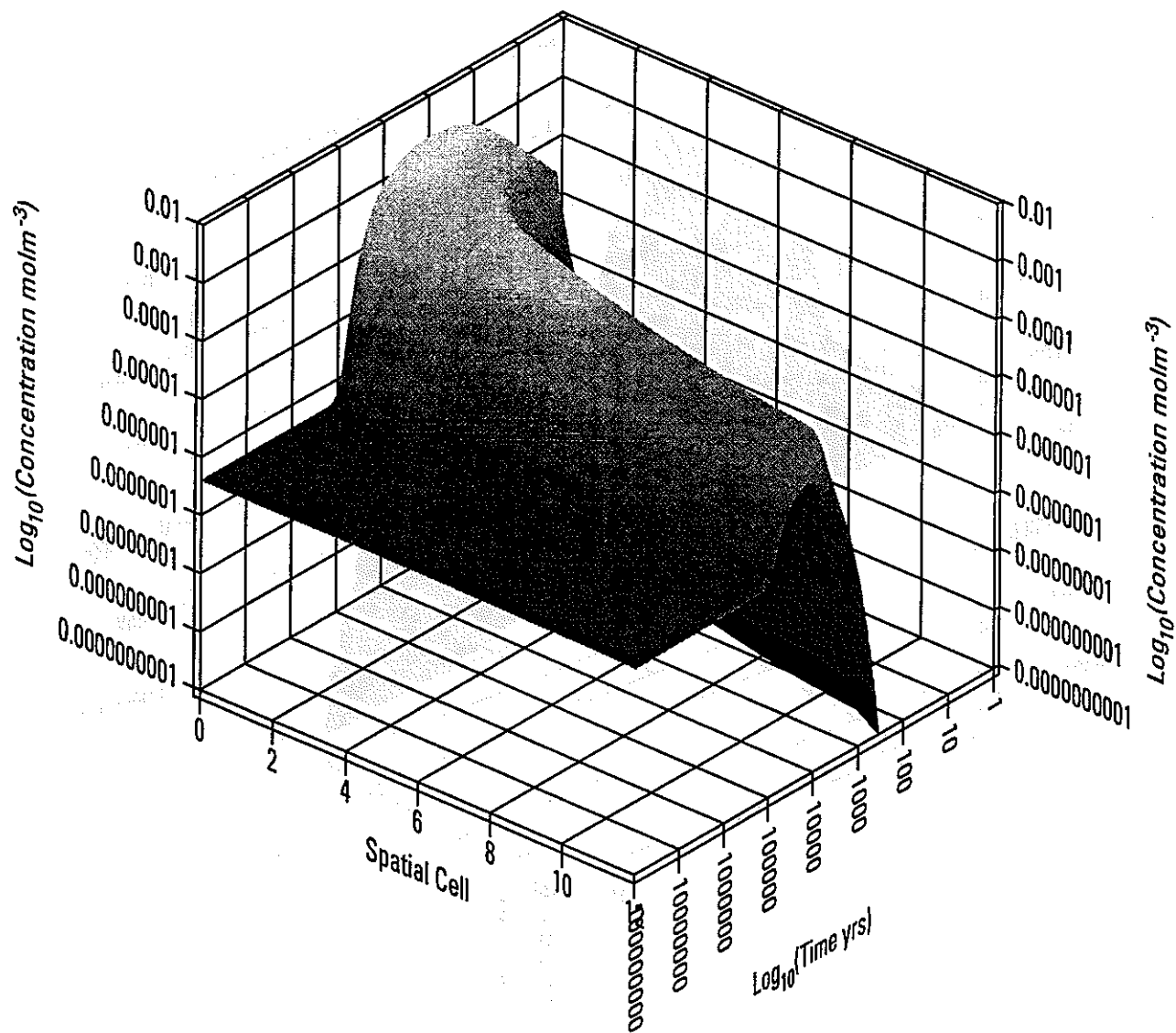


図3.3.2- 3 人工バリア内の溶存イオン濃度分布 (全U, $\mu=0.1$)

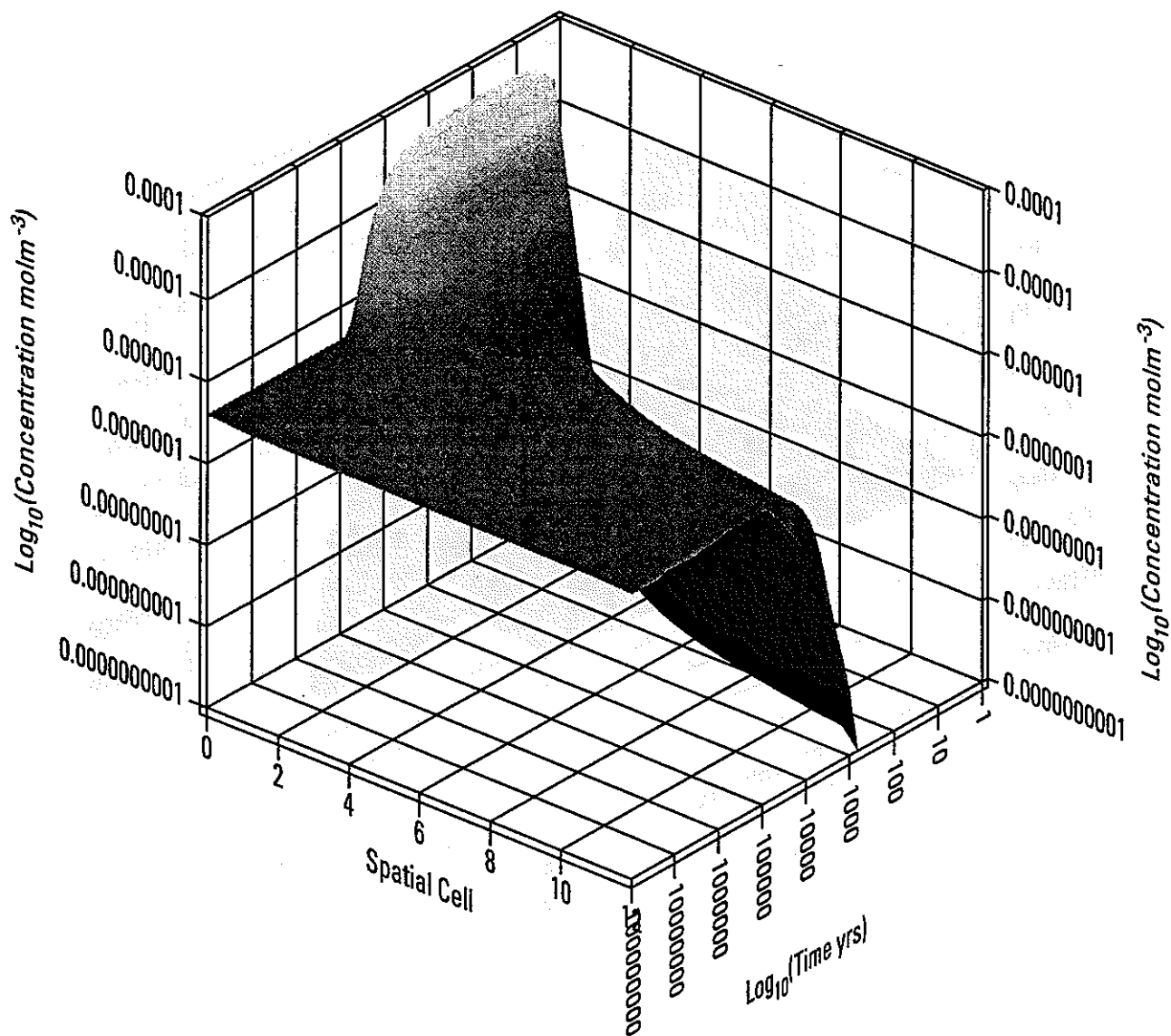


図3.3.2-4 人工バリア内の溶存イオン濃度分布 (全U, $\mu=10$)

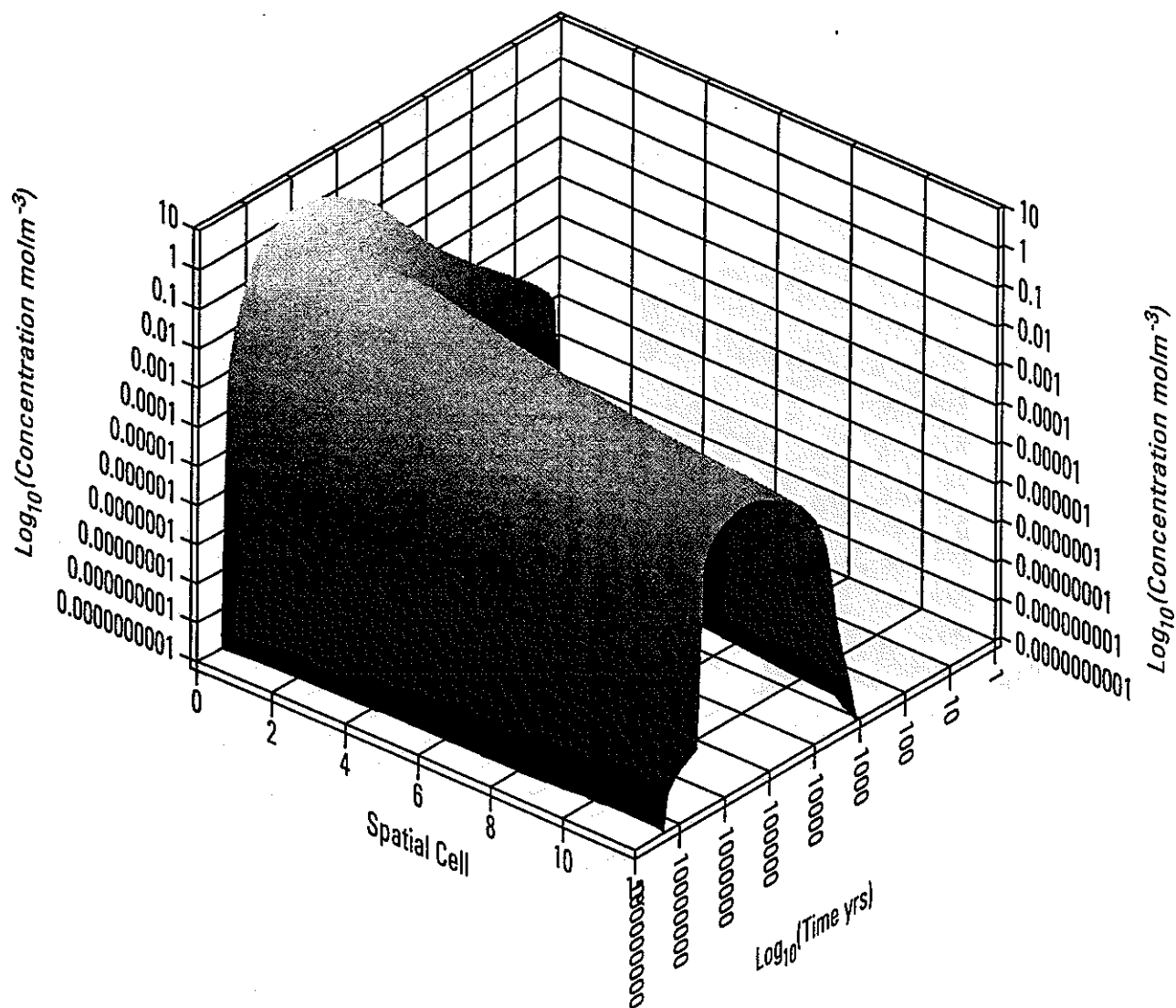


図3.3.2-5 人工バリア内の沈殿濃度分布 (U233 , $\mu=0.1$)

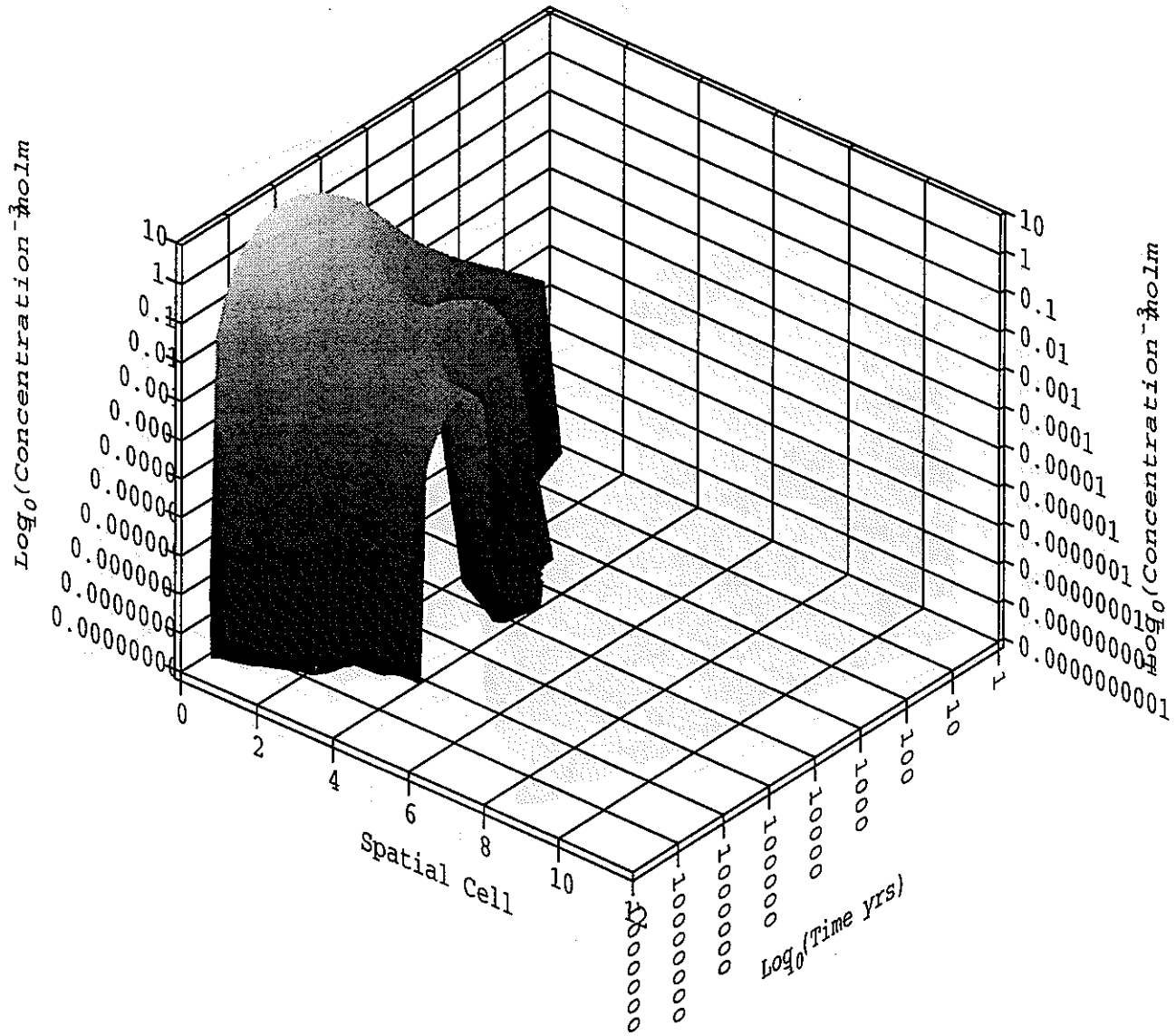


図3.3.2-6 人工バリア内の沈殿濃度分布 (U233, $\mu=10$)

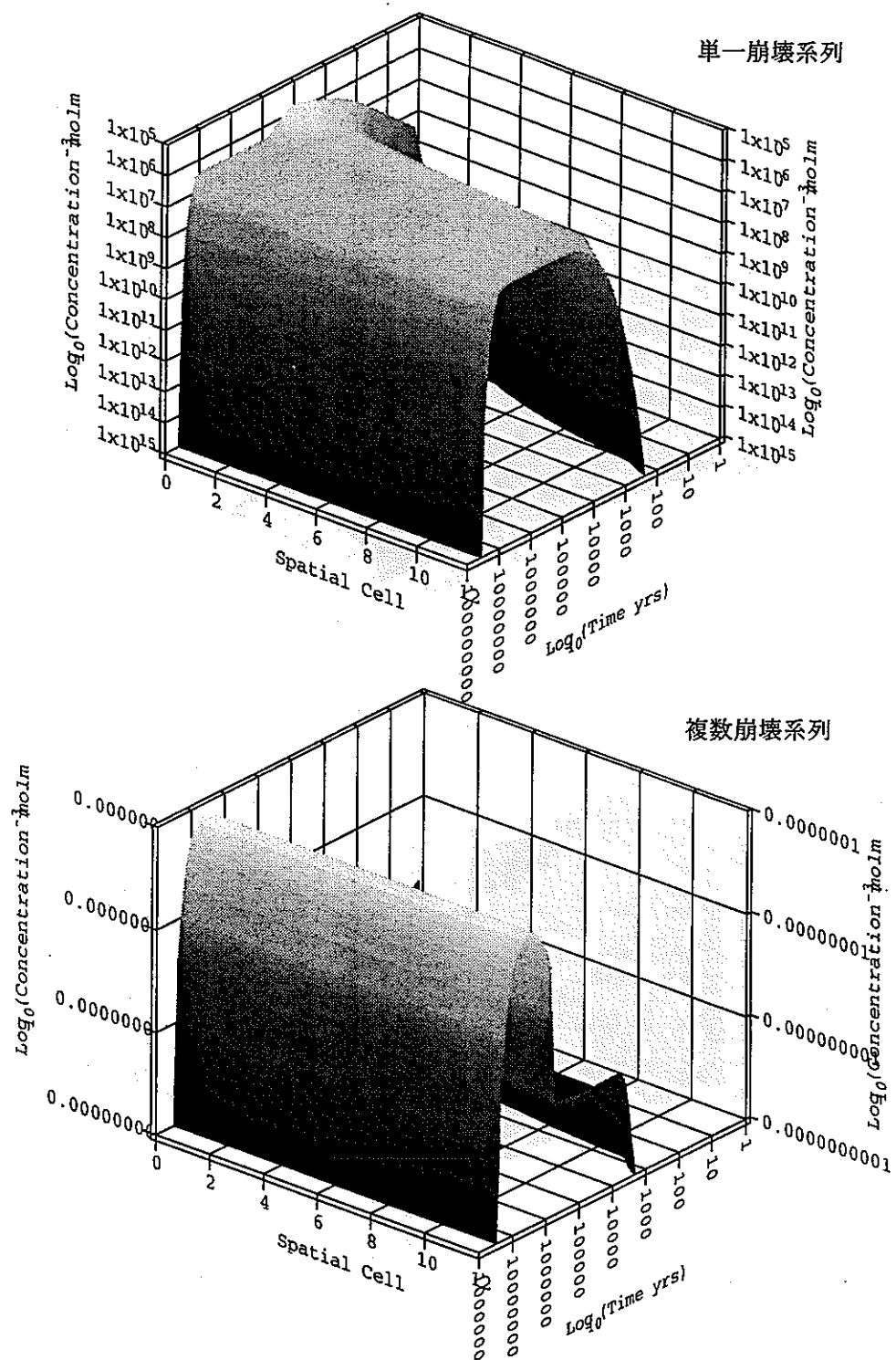


図3.3.3-1 単一崩壊系列と複数崩壊系列での溶存イオン濃度分布の比較 (U233, $\mu=0.1$)

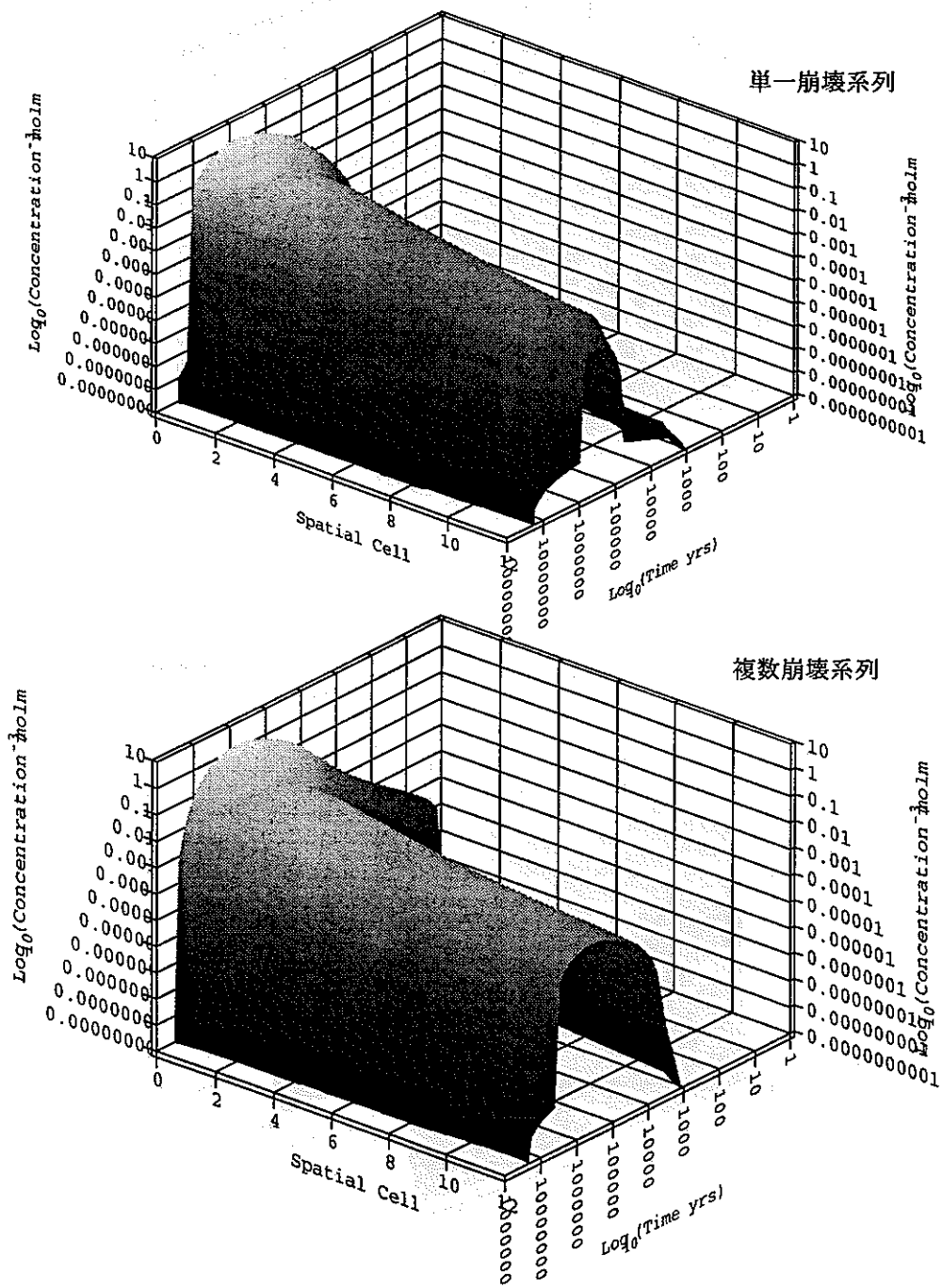


図3.3.3- 2 単一崩壊系列と複数崩壊系列での沈殿濃度分布の比較 (U233, $\mu=0.1$)

4. 不確実性解析の必要性、手法及び各手法の問題点と対策についての調査

4.1 性能評価に内在する不確実性因子及び不確実性解析の必要性

本報告書のはじめに述べた様に、高レベル放射性廃棄物地層処分の性能評価には、評価の各段階で種々の選択（シナリオ、モデル及びデータ等）の可能性が複数存在しており、しかも評価対象となる時間・空間スケールの大きさに起因する観察結果や経験の不足のために、いずれの選択肢を採ることが適切かを判断する際に主観的な要素の介入を完全に排除することは極めて困難である。このことは、これら複数の選択肢からの問題の選択が一意的には行われ得ないことを意味し、つまり、性能評価の結果に何がしかの不確実性の影響が含まれることは不可避であると考えなければならない。

このことは、性能評価研究の各段階を通じて極めて重要な意味を持つこととなる。例えば性能評価の実施に先立ち設計、シナリオ解析、モデル開発及びデータ収集を行う準備段階においては、引き続いて行われる性能評価に含まれる不確実性をできるだけ小さくすることが課題であり、このために、それぞれの不確実性を減らすための課題（設計変更によって該当する不確実性の影響を低減する、保守的なモデルを用いることによって該当する不確実性因子が顕在化することを防ぐ、基礎的な研究を通じて現象理解そのものに内在する本質的な不確実性を低減する、等）の重要度分類を行うことが必要となる。性能評価研究が全体として多くの研究領域にまたがるものであることを考えれば、この点はプロジェクト全体の収束性を保つ上で極めて重要である。

また、実際に評価を行い、地層処分の安全性についてのある（暫定的なものであったとしても）結論を導く際には、その判断の根拠としての評価結果に含まれる不確実性の種類と大きさを付記することが必須である。これは、統計的な評価手法を用いる場合にはもちろん明示的に為されることとなり、また保守的な決定論的評価においても実際の被ばく線量が算出された決定論的な上限値を上回らないことの確信の程度（信頼性レベル）を示すことによって為されなくてはならない。

上記のいずれにおいても、まず第一に重要なことは、ある時点での現象理解やデータに基づき実施される性能評価の結果に含まれる不確実性の大きさを的確に把握するという作業が不可欠だということである。何故ならば、もしも、この様な不確実性の定量化という行為がなにがしかの方法で行われなければ、不確実性を低減する方策を採ることも、あるいは性能評価自体の信頼性を客観的に議論しこれを許認可に反映することも不可能となるからである。不確実性解析とは、前述した種々の選択肢についてそれぞれの確からしさを表現する「重み付け」（主観確率、Fuzzy Membership Function、等。後述。）を施す（最も一般的に考えれば、「保守的」な単一値を選択することもimplicitではあるが、不確実性の見積もりに基づき離散的な「重み付け」を行った結果であると考えられる）ことにより、これら各選択肢のあらゆる組み合わせを包括した集合（つまり評価結果の分布）の期待値や信頼性上限等の統計的な情報（あるいは相当する定性的情報）を明らかにする作業である。

本章の検討は、

1) 以上の主旨に従って、これまでに開発あるいは適用されてきた不確実性解析の諸手法

によって何が可能となり、また、どこに限界があるのかを調査する

- 2) この調査結果を踏まえ、第二次研究成果とりまとめに向けてこれまで本研究で実施してきた広義拡散方程式による手法の活用も含め、何を目標として研究開発を行っていくべきかを提案する

ことを目的としたものである。この様な目的のために、本節ではまず、以下に性能評価に内在する不確実性因子の種類をまとめることとする。

性能評価には、多様な不確実性のソースが含まれ、かつ、これらが非常に複雑な形態で互いに重複したりあるいは相関したりしているために、不確実性因子の分類を客観的かつ一義的に行うことは必ずしも可能ではない。しかし、不確実性への実際の対処という意味ではいくつかの因子が互いに区分され、それぞれ異なる手法で定量化が試みられているという歴史的な経緯があることも事実である。そこで、ここでは、この様な不確実性因子の取り扱い上の分類として[Robinson and Cooper, 1995]により提案されている以下の様な枠組みを考えることとする。

パラメータ不確実性

性能評価モデルに含まれる種々のパラメータは、様々な理由により評価に対する不確実性のソースとなる。この様な理由としては、以下が考えられる。

- ・当該パラメータの測定がこれまでに為されていない。
- ・測定結果が大きなばらつきを有している。
- ・評価に用いられるパラメータ値は、直接的に測定できない量についての推定値であるかあるいは空間的に平均化された数値である。
- ・パラメータ値を変動させる外力（外部事象）の存在や影響の程度が未知である。

統計的なパラメータ

性能評価には、以下の真に統計的なパラメータも含まれるものと考えられる。

- ・将来の気候変動
- ・ある特定の粒子（核種の分子、コロイド、等）がどの亀裂を通過するか

これらの統計的なパラメータの存在も、勿論、評価結果が一意に確定されない状態を作り出すものであり、従って不確実性因子として考慮される必要がある。

シナリオ不確実性

ここではシナリオとは種々のプロセスや事象の組み合わせと時間的な順序づけのことでありと理解した場合、この様なプロセスや事象自体、さらにはその組み合わせと時間的な順序関係としては膨大なケース数が可能である。この様な多数の選択肢の存在は、対応する評価結果もまた多様な代替的可能性を有していることを示している。

概念モデル不確実性

評価対象とすべきシナリオが確定したとしても、これに対するモデル化の方法はやはり一通りには決まらない。モデル化とは、実際の現象が解析可能なものとなるよう、

- ・シナリオに含まれる諸プロセスあるいは事象のうち、処分の長期安全性への関与という意味で主要なもの以外を無視すること（単純化）

・ 主要なプロセスや事象を、ある仮定の下に数学的に表現すること（定式化）を意味している。ここでもやはり、「主要」なプロセスや事象の取捨が一通りではなく、また数学的な表現のために必要となる仮定の置き方も一通りではないことは明らかである。

サイト特性調査に付随する不確実性

これは評価モデル（特に核種移行モデル）への入力情報であるという意味ではパラメータ不確実性の一種と考えることができる。しかしながら、サイト特性は種々の特性値の空間分布即ち位置の関数として表現される必要があり、また、実測データが解析領域全体を稠密に覆うものではあり得ないために、概念モデル不確実性に述べた単純化及び定式化を必要とする。このために、サイト特性調査に付随する不確実性は、通常の意味でのパラメータ不確実性と概念モデル不確実性とを併せ持つという意味から独立した区分として認識されるべきである。

近似誤差

性能評価の予測的な本質から、性能評価モデルはしばしば、元々そのモデルを定式化する際にその根拠となった測定データや観察事実に対応する条件から離れて（内挿あるいは外挿されて）適用されることがある。このような状況では、本来実現象の近似である評価モデルの計算結果に無視し得ない誤差が含まれる可能性がある。また、このような場合以外にも、計算効率を高める等の理由から評価モデル自体の単純化や近似が行われる場合もある。このような場合にも、誤差は先験的には無視し得ず、不確実性因子の一つとして考慮される必要がある。

以上は、性能評価自体が一通りに確定されない理由、つまり評価そのものに含まれる不確実性因子を抽出したものである。しかしながら、同一の評価に対しても、実際には後述する種々の手法で定量化される不確実性の種類や大きさは異なったものとなる。つまり、不確実性解析の手法もまた、見かけの不確実性を左右させる可能性があり、評価の全体的な文脈によっては不確実性要因に含める必要があるかもしれない。

4.2 過去の性能評価研究における不確実性の取り扱い手法及び各手法の問題点

[Savage等、1995]によれば、過去の性能評価研究における不確実性の取り扱い手法は、以下の4種類に大別することが可能である。

- ・ 保守的評価、もしくは"worst case"の採用
- ・ 最良推定、及び"what if"という形式の解析
- ・ 感度解析
- ・ 確率論的手法

ここでは、上記のそれぞれについて概要をまとめるとともに、それぞれの手法の抱える問題点を整理することとする。

4.2.1 保守的評価

保守的な評価は、評価モデルに含まれる各パラメータについて「最も悲観的な」数値を組み合わせることにより、不確実性を含んだ評価結果の上限値を導出しようというものである。この様なアプローチは、シナリオやモデルの選択についても極く自然に延長・適用される（つまり、最も悲観的なシナリオあるいは概念モデルの採用）。

保守的評価の最大の短所は、

- ・通常、パラメータ（あるいはシナリオ、モデル）の変動幅には明確な上限値は存在せず、ある数値（選択肢）を「最も悲観的な」ものとして評価に用いた場合、必ず、「もう少し上はあり得ないのか？」あるいは「もう少し上だとどうなるのか？」という疑問が生じる。そして、これらの疑問を否定することは厳密には不可能である。
- ・複雑な感度を有する評価モデルについては、どのパラメータの組み合わせが真に「悲観的な」つまり"worst case"となるか明らかではない場合が多い。

という点である。また、これに付随するものとして、保守的な評価結果は悲観的な仮定の組み合わせのために現実的にあり得べき地層処分システムの性能を必ずしも代表するものとはならないという傾向も考慮されるべきである。この傾向は、保守的評価を最適化やコスト便益解析に使用することが極めて困難であるということの意味している。

4.2.2 最良推定

最良推定は、パラメータ値の変動範囲の中から最尤のものを選び出し、これを組み合わせることによって不確実性を包含する評価結果の中心値を見だし、更に変動幅を表現するために一部のパラメータについてある極端な（通常は上下限）値を仮定した変動ケースを計算することによって「もしもこの様な極端な状況が生じた場合どうなるか」("what if")を例示するというものである。また、前出の保守的評価と同様、このアプローチはシナリオあるいはモデル不確実性に対しても同様に適用可能なものである。

最良推定の最大の短所は、上記の極端な仮定に従う計算の位置づけが極めて不鮮明であるということである。これは、極端な仮定に従う計算のうちの一つでも許容できないほど大きな影響へとつながった場合に特に重要なものとなる。また、"what if"の仮定は、評価結果を見るものにあたかもこの様な極端な状況が実際に生じ得るかの様な印象を与える可能性もある。

4.2.3 感度解析

ここで言う感度解析とは、

- ・評価結果の、あるパラメータに対する偏導関数を見い出すことを目標とした局所的感度解析
- ・各パラメータの変動幅全域に対して評価結果がどの程度変動し得るかを見いだすことを目標とした大域的感度解析

の両者を指すこととする。これらの共通の目標は、あるパラメータが単位量変動した場合に、対応する評価結果がどの程度変化するか即ち変化の傾き（=感度）を定量化することにある。

感度解析は、それ自体が単独で不確実性を定量化可能なものではないが、手法の正否の鍵となる必要計算ケースがパラメータ数に強く依存する確率論的手法（後述）の場合は勿論、上述した保守的評価及び最良推定においても、感度の大きい即ち重要度の高いパラメータのみを抽出して問題の実効的なサイズを減少させることによって不確実解析実施のための重要な準備段階となる。

現在の感度解析手法の短所は、以下の二つである。

- ・パラメータ間の組み合わせ等を考慮すれば、大域的な感度を見いだすために必要となる計算ケース数が非現実的に大きなものとなる可能性がある
- ・シナリオあるいはモデルに対する感度を定量化する際に、これらの集合での数学的な「距離」の概念が定義されていないために、上述した意味での「単位量の変動」が定義できないために、異なるモデルあるいはシナリオ間の重要性を画一的に比較するための尺度を欠いている。

4.2.4 確率論的手法

確率論的な手法は、評価モデルに含まれる各パラメータ（感度解析によって明らかに無視し得るとされたものは除くとして）に確率分布を与え、この分布から各点での確率密度に従った頻度でパラメータ値のサンプリングを行い、サンプリングされた各パラメータ値の組み合わせに対してそれぞれ評価結果を算出して、最後にこうして得られた多数の評価結果の集合に通常の統計的な規則を適用して期待値や信頼性上限値等を導出するというものである。サンプリングの手法としては、Simple Random Sampling (SRS)、Latin Hypercube Sampling (LHS) あるいはImportance Sampling (IS) 等が開発されている。これらの手法の詳細は勿論個々に異なるが、上記の期待値や信頼性上限値等を導出する手順はほぼ共通である。簡単のために期待値を例としてその導出過程をまとめると次の様になる。

ある評価モデルに含まれるパラメータ全体を一つのベクトルとみなし、これを $p = (p_1, p_2, \dots, p_m)$ とし、パラメータ（ベクトル）値 p に対応する評価結果を $R(p)$ とする。また、 p は確率密度関数 $F(p)$ を有するものとする。この時、上述した種々のサンプリング手法により N 個の p_j を抽出し、各 p_j を入力値として対応する評価結果 $R(p_j)$ を得る。この時、 $R(p_j)$ から全体としての期待値 \hat{R} は次の様に与えられる。

$$(7) \quad \hat{R} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N F(p_j) R(p_j).$$

現在の確率論的な手法の短所あるいは限界は以下の様にまとめることができる。

- ・多くの場合、評価結果の分布は非常に強い非対称性を有するために、上記の手順で推定される統計的な諸量は必ずしもその確率論的な特性を良く代表するものとはならない。例えば上述した期待値の場合、多くの数値がこれよりもはるかに大きくまた同様に多くの数値がこれよりもはるかに小さい。つまり、ここで得られる期待値は、通常の正規分布等におけるその属性とは異なったものである場合が多い。また、サンプル数が少ない場合、この分布の非対称性のために期待値は過小評価される場合の方が多い。そして、期待値あるいは他の統計量推定値が収束するために必要となるサンプル数は極めて大きい。
- ・より基本的な事項としては、性能評価に含まれる不確実性への通常の意味での確率の適用性が否定的であるということがある。つまり、性能評価に含まれる不確実性は、パラメータ値自体が不確実なのではなく、多くの場合はこれらに対する専門家の理解が不確実なのであり、つまり、ここで言う「確からしさ」は厳密な意味での確率ではなくあくまで専門家の信念の強さを示す主観的な重みづけに過ぎない。そして、この様な主観的な重みづけには確率論（記述的確率の理論）は一般には適用できないことが知られている[Robinson and Cooper, 1995]。
- ・感度解析の場合と同じく、シナリオあるいはモデル不確実性の場合には、これらを含む集合に数学的な基本特性（「距離」、「完備性」、等）が欠けている（つまり、パラメータの場合の実数全体の集合 R がそうであった様に、全ての選択肢を包含しかつ各選択肢の位置を同定できるような一つの数学的な空間が定義されていない）ために、現在の手法をそのまま拡張することはできない。より具体的には、確率が定義されるためには、各「選択肢」が一つの空間における「可測集合」となっている必要があるが、これは一般には満たされていない。また、シナリオ及びモデルの網羅性についても既知のもののみで十分であるという保証は得られない。

4.3 課題のまとめ

前節に述べた各手法のうち、保守的な評価及び最良推定という従来の決定論的な評価が今後も行われる必要があることは議論を待たない。しかしながら、これらはいずれも評価に含まれる不確実性の種類や大きさを明確にするものではなく、従って評価結果の信頼性を客観的に示すことができるような代替的手法、より具体的には定量的な不確実性解析の手法開発に努めるべきであることもまた明らかである。本節では、この様な観点から、第二次成果とりまとめに向けて定量的な不確実性解析の手法開発とその適用を進めていくとした場合、どの様な点が重要な課題となるかをまとめることとする。

4.3.1 「確信の程度 (degree of belief)」の取り扱い

前節で既に述べた様に、性能評価に含まれる不確実性への通常の意味での確率の適用性には否定的な意見が多い。性能評価に含まれる不確実性は、パラメータ値自体が不確実なのではなく、多くの場合はこれらに対する専門家の理解が不確実なのであり、つまり、ここで言う「確からしさ」は厳密な意味での確率ではなくあくまで専門家の信念の強さを示す主観的な重みづけに過ぎない。そして、この様な主観的な重みづけに確率論を用いた場合、以下に説明する様なリスク希釈と呼ばれる現象が生じることが知られている

[Robinson and Cooper, 1995].

簡単のため、2回の統計的なサンプリングによりそれぞれ異なる入力データセットが作成され、これらについての解析を実施した結果下図に示す様な被ばく線量の経時変化がそれぞれ算出されたとする。

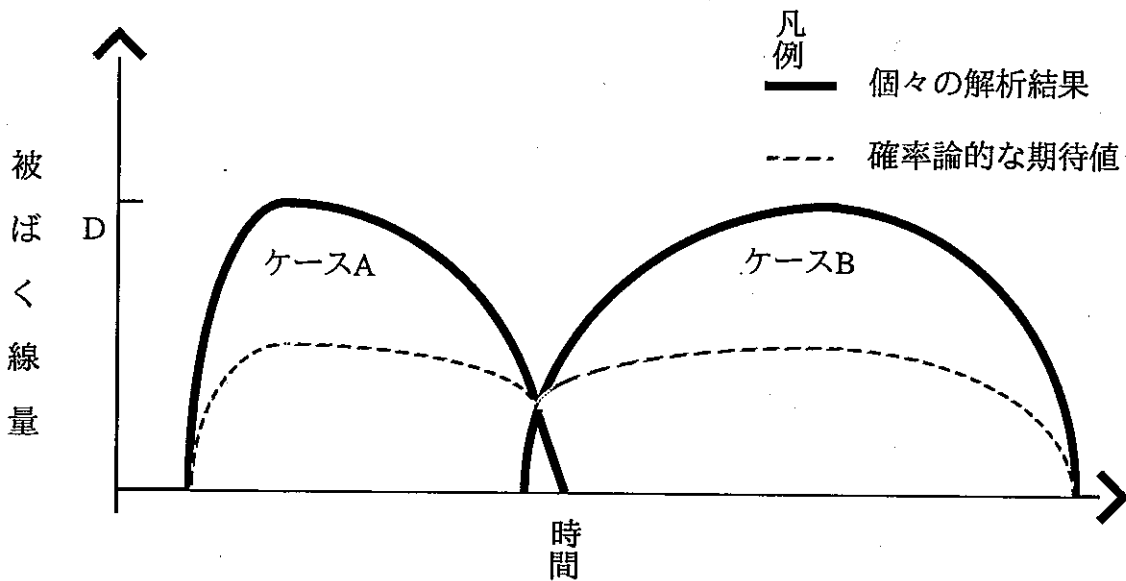


図 4.3.1-1 リスク希釈の例

上図で、各ケースにおいて被ばく線量にピークが現れる時刻はそれぞれ異なるがピーク値そのものは同一であると仮定する。つまり、いずれのケースが実際に生じるにせよ、最大被ばく線量Dが生じるものと考えなくてはならない。これに対して、確率論的な評価の結果として得られる最大被ばく線量の期待値は、同図に点線で示した様に明らかにD/2である。つまり、確率論的な評価では、不確実性のためにかえて評価結果が小さくなるという状況が生じ得る。これがリスク希釈の端的な例である。より一般的には、次の二つの量のうち m が M よりも著しく小さくなる様な場合、確率論的な評価によるリスク希釈が生じたという。

$$(8) \quad m = \max_i \left\{ \int_p D(t; \pi) d\pi \right\}$$

$$M = \int_p \max_i \left\{ D(t; \pi) \right\} d\pi$$

この様なリスク希釈が生じることの背景には、本来、多数回の統計的な試行に対して適用されるべき（記述的な）確率を、事象自体は決定論的につまり一通りに定まるがそれに対する我々の理解が不確実であるために生じる性能評価の不確実性に適用することの矛盾がある。また、リスク希釈と本質的には同じ理由により生じるものとして、確率の分割の問題がある。これは、ある確率 P_r /年以下のシナリオは評価対象から除外するという様な裾切り値が指定されている場合に特に顕著になるものであるが、例えば火成活動による処分場の破壊といったシナリオが確率 $2P_r$ /年と推定されていたとすると、もしこのシナリオ

を該当する火山の位置、種類、事象の起こる時間帯といった指標によって同等に確からしい3つのサブシナリオに分割できたとすると、いずれも生起確率はPr/年を下回り評価から除外できることとなってしまいます。このようなパラドクスは、本来一通りに定まるべき将来に対して我々の無知の故に生じた仮想的な代替案を考える場合に、そもそも通常確率論において行われる様な確率の加減乗除が許されないものであることを示唆している。

以上をまとめると、上述したリスク希釈等の問題を回避することが今後の定量的な不確実性解析の手法開発と適用のための重要な課題として挙げられることになる。そしてこのためには、記述的な確率に代わって、専門家の主観的な「確信の程度」を適切に表現し得る尺度を導入し、また、「各ケースの結果を合計してから個数で割る」という方法に代わって多数の計算結果から本来一通りしかあり得ない将来像を導出することを正当化できる様な新たな算法を考えることが必要となる。

4.3.2 パラメータ以外の不確実性の取り扱い

前節の整理において、これまでに開発あるいは適用されている定量的な不確実性解析手法の問題点として、主観的な「確信の程度」と並んで基本的と考えられるものはパラメータ以外の不確実性の取り扱いである。これを具体的に見るために、ここでは、まずパラメータ不確実性の場合の解析の手順を整理し、これに基づいてパラメータ以外の不確実性の取り扱いではどのような点が問題となるかを見ることとする。

パラメータに関する不確実性解析の手順を以下に示す。

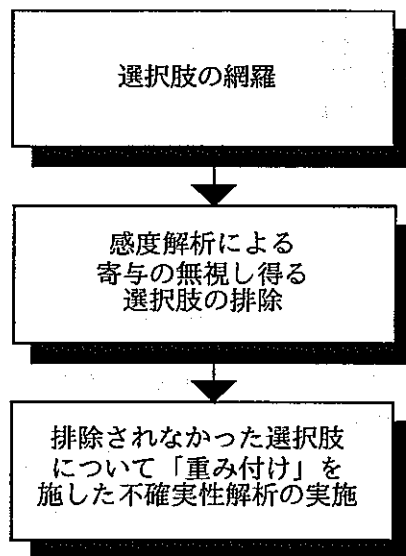


図4.3.2-1 パラメータについての不確実性解析の手順

さて、以下に図4.3.2-1に示した不確実性解析の3つの段階に則して、パラメータ以外の不確実性に対して何が問題となるかを示すこととする。

- (1) 上図で、第一のステップである「選択肢の網羅」は、パラメータ不確実性の場合には通常は意識されない。これは、選択肢つまりこの各パラメータの数値が実数空間 R (多くの場合はその部分空間である正の実数の集合) に包含されており、つまり有限個のパラメータの組み合わせを考える場合には、これらは n 次元ユークリッド空間 R^n に含まれていることが明らかである。しかしながら、シナリオあるいは概念モデルの選択肢を考える場合に、パラメータの場合の実数空間にあたるものが何であるかは直ちに明らかではない。従って、「全て」のシナリオあるいは概念モデルという概念自体も定義されない。このことは、シナリオやモデルのリストを作る際に「他には本当はないのか?」という問いに文字どおり答えることを不可能とする。そこで、通常、このような質問は「他に (これまでに世界中のいかなる機関で研究された例は) 本当はないのか?」という解答ができるものにすり替えられることとなる。しかしながら、この改訂された問いに答えたからと言ってそれが本来の意味での網羅性を意味するものではないことは明らかである。
- (2) パラメータの不確実性の場合、第二の段階である感度解析では、これも通常は選択肢の含まれる実数空間が我々になじみ深く自然なものであるために意識されないが、複数の選択肢の間に何らかの「距離」が定義されている。感度解析が、感度すなわちある属性を変動させた場合の結果の変化の割合であることを考えれば、そもそも変動させる属性について「変動の大きさ」を測ることが必須であることは明らかである。
- (3) モデルやシナリオが適合するか否かもまた本来は決定論的なものであり、これらに重み付けをする場合に従来の確率論を用いることが種々の問題につながることは既に述べた通りである。

以上をまとめると、パラメータ以外の不確実性の取り扱いに関しては、パラメータの場合の R^n に該当する空間を数学的に明確なものとすることが重要な課題であることがわかる。また、上記の(3)の段階を考えれば、この空間に含まれる各要素に専門家が重みを付与できるものであること、特に上述した議論の過程から明らかではあるが、既存のモデルあるいは既知のシナリオ以外についても何らかの形で専門家がそれぞれの確信の程度を評価できるものであることが必要である。

4.4 これまでの不確実性解析の問題点に対する代替的手法

4.2で述べた様に、これまでに開発されたいずれの手法も、全ての種類の不確実性因子に対して正確かつ効率的に不確実性解析を行うという目標を十分に達成し得るものではない。そこで、これらに対する代替的な手法の開発が近年活発に行われている。以下に、それぞれの代替的手法をまとめることにより、前節に述べた各課題に対して、今後の研究開発においてどの様な可能性が期待し得るかを示すこととする。

4.4.1 ファジー理論に基づく解析

CECの実施した性能評価の不確実性解析に関するレビュー (MUNVAR; Modelling with UNcertainty and VARiability プロジェクト) では、確率論に代わるものとしてファジー理論の適用可能性に注目すべきであることが明らかとなった[Robinson and Cooper, 1995]。また、古典的な確率に代わってファジー理論におけるメンバーシップ関数をパラメータ値の確からしさに対応した「重みづけ」に用い、メンバーシップ関数間の演算をファジー算法によって行う解析コードであるQUEST及びMORTALがいずれもCECの委託研究として英国インテラインフォメーションテクノロジーズ社によって開発されている。ここでは、まず基礎となるファジー理論を説明した後に、性能評価への具体的な適用方法としてMUNVARプロジェクトで提案されているアプローチについてまとめる。また、最後にこの様な代替的な手法を用いた場合に確率論的な評価の有する問題点がどの様に解消され得るかについて述べることにする。

(1) ファジー集合及びファジー論理

「1より大きく2より小さい実数全て」や、「ある部屋の内部に居る全ての人々」、といった集合は、要素が全て具体的に列挙されているかあるいは帰属性の定義が明確に為されているクリस्प (crisp) な集合の例である。これに対して、「背の高い人々」といった帰属性の定義は曖昧なものであり、ある人物を指して「この人は「背の高い人々」に含まれるか」という質問を多くの人に尋ねれば、赤ん坊がこれに該当しないことや逆に身長2 mを超えるバスケットボール選手がこれに該当することといった極端な例については全員の合意が得られるだろうが中間的な領域では解答はyesとnoとに分かれるであろう。これは、ファジーな集合の例である。

もう少し丁寧にファジー集合を定義すると次の様になる。まず、各要素の帰属関数 (メンバーシップ関数) を、「 x が、 X という共通の属性によって定義される集合

(簡単のためこの集合自体も X と呼ぶこととする)に帰属することに疑いの余地が無い場合、メンバーシップ関数 $x(X)=1$ とし、反対に帰属しないことに疑いの余地が無い場合、 $x(X)=0$ とする。そして、 $x(X)$ は $(0, 1)$ の任意の値を採ることができる。」により定義するものとする。ここで、實際上メンバーシップ関数を測る方法としては、例えば上述した例の様に多数の人に質問をして「帰属する」と答えた人数の割合を計算することが考えられる(voting modelと呼ばれる)。さて、この様なメンバーシップ関数を用いれば、 X がファジー集合であるとは、 $\{x \mid 0 < X(x) \leq 1\}$ つまり定義 X を満足するという認識の度合いが零ではない様なもの全ての集合のことである。これに対して、 X がクリस्पな集合であるとは、 $\{x \mid X(x)=1\}$ つまり定義 X を満足するという認識の度合いが1であるもの全ての集合のことである。具体的には、「おおよそ1である様な実数全体」という集合について、例えば下図に示すようなメンバーシップ関数によってファジー集合を定義することができる。

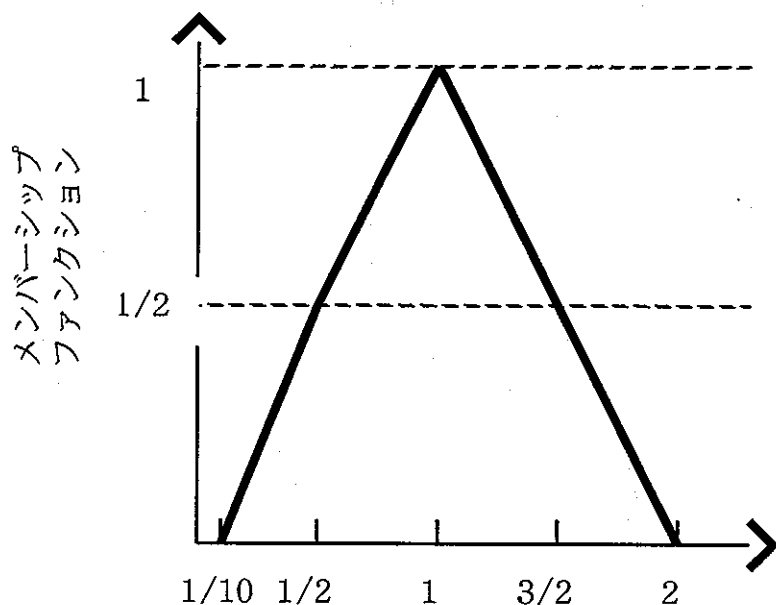


図 4.4.1-1 「おおよそ1の実数」に該当するファジー集合とメンバーシップ関数の例

上図の例では、1のみがメンバーシップファンクション1であるクリスプな意味での帰属性を有している。これに対して、ファジーな観点からは1/10から2までの全ての実数は帰属性が零ではなく従ってファジー集合の要素と考えられる。また、逆に帰属性を指定することも可能である。例えば、上図でメンバーシップファンクションが1/2以上であるものという指定をすることにより、ファジーな部分集合(1/2, 3/2)が定義される。なお、この例と同様にして、「高い透水性を有する母岩」、「緩慢な気候変動」あるいは「通常の圧力範囲でダルシー則の適用可能な媒体」といったファジー集合を定義することが現在でも可能である。

ここで、確率の場合と異なり、全ての要素についてのメンバーシップファンクションを足し合わせても(この例の場合は1/10から2まで積分しても)1になることは保証されていないことに注意を要する。後述する様に、性能評価で対象としているのは一つの処分システムの将来であり、多数の処分システムを作ってその平均をとろうとしている訳ではない。つまり、我々の直面している不確実性はサイコロを振る様な真に統計的な試行によるものではなく、本来一通りに定まるべき将来についての理解が不足していることに起因するものであり、このような場合には全ての選択肢についての「確からしさ」の和が1になる必要はない。

さて、性能評価あるいはもっと具体的にパラメータについての不確実性解析という実際上の作業を例として言えば、上のメンバーシップファンクション及びこれと対応するファジー集合の概念が定義されたことにより、評価モデルに含まれる各パラメータについてメンバーシップファンクションが与えられたファジー集合が定義されたこととなる。次に必要となることは、確率論的な解析の場合と同じように、各パラメータについてある数値をサンプリングして一つの入力データセットを作ることである。ここで問題となるのは、それぞれのパラメータ値がそれぞれの帰属するファジー集合の中であるメンバーシップファンクションを有しているとして、この入力データセットに基づき算出される一つの解析結果は、「解析結果のファジー集合」の中でどの様なメンバーシップファンクションを与えられるべきかということである。この問題に答えるためには、ファジー算法と呼ばれる複数のメンバーシップファンクション間の演算規則を作る必要がある。

ファジー算法の中で最も一般的なものは以下のMin-Maxルールと呼ばれるものである。まず、 n 個のパラメータを有する関数 $f = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ を考え、各パラメータについてメンバーシップファンクション、つまりパラメータ x_i が s_i という数値を採ることの「確信の程度」、が $I_{x_i}(s_i)$ で与えられているものとする。この時、 f が $f(s_1, s_2, \dots, s_n)$ となるためには、全ての i に対して $x_i = s_i$ が成立していなければならない。これらが同時に成立することの「確信の程度」は、 $I_{x_i}(s_i)$ のうち最も小さいものに等しいという仮説がMin-Max原理のMinの部分である。次に、 $If(S)$ つまり関数 f による評価の結果が S という値を採ることのメンバーシップファンクションを考える。一般に、 f の値が S となる様なパラメータ値の組み合わせは複数存在するものと考えられる。つまり、
$$s^{(k)} = (s_1^{(k)}, s_2^{(k)}, \dots, s_n^{(k)})$$
, ($k=1, 2, \dots, m$) がいずれも評価結果 $f = S$ をもたらすものとする。この時、関数 f による評価の結果が S という値を採るためには、上記の $s^{(k)}$ のうちのどれか一つが成立すれば良く、そこで、 $If(S)$ を各 $s^{(k)}$ についてのメンバーシップファンクションのうち最大のものと仮定するというのがMin-Max原理のMaxの部分である。以上を併せる

と、If(S)についてのMin-Max原理に従うファジー算法は、以下の様なものとなる。

$$(9) \quad I_i(S) = \max_{\substack{(s_1^{(k)}, s_2^{(k)}, \dots, s_n^{(k)}) \\ \text{such that } f(s_1^{(k)}, s_2^{(k)}, \dots, s_n^{(k)})=S}} \{ \min \{ I_{x_1}(s_1), I_{x_2}(s_2), \dots, I_{x_n}(s_n) \} \}$$

ここで、ファジー理論に基づく評価では、確率の加減乗除という通常の算法に代わってメンバーシップファンクションへのMin-Max原理の適用という算法が採られるために、前節で述べたリスク希釈の例題で平均をとるという操作によりピーク値が半減する状況は生じないことが保証される（より具体的には、ファジー理論では図4.3.1-1の点線ではなく、ケースAとBの包絡線が評価結果となる）。また、同じくMin-Max原理を適用する限り、一つのシナリオを複数のサブシナリオに分割した場合に少なくとも一つのサブシナリオは元のシナリオと同じメンバーシップファンクションを有していなければ成らない（あるシナリオのメンバーシップファンクション=全てのサブシナリオのメンバーシップファンクションの最大値）こととなり、従って分割によってメンバーシップファンクションが減少しないことも明らかである。

(2)性能評価及び不確実性解析への適用

以下に、MUNVARで提案されているファジー理論の不確実性解析への適用方法をまとめる。まず、ファジー理論の原則を整合的に評価に適用するために、基準自体を次の様に解釈する必要がある。

「地層処分の影響により将来の世代がある線量 χ 以上の被ばくを受けることは決してない
ということ、 ζ 以上の確信を以て言うことができること。」

この文章は、確率論的な観点に対応した「地層処分の影響により将来の世代がある線量 χ 以上の被ばくを受けないという確率が ζ 以上であること。」とは全く異なるものであるということに注意を要する。前者はただ一度の決定論的な事象に対する予測の確信の度合い（degree of belief）を言っているのに対して、後者は地層処分の帰結を統計的な事象と捉え、同様の試行を多数回繰り返した場合に全試行のうち ζ 以上の割合は所定の線量以下となることを言っている。

さて、このような安全基準の解釈に対応して、以下の様な手順（MUNVARで提案されていたものを、性能評価の反復的な実施に関する箇所を省いて簡単化してある）で性能評価を組み立てる。

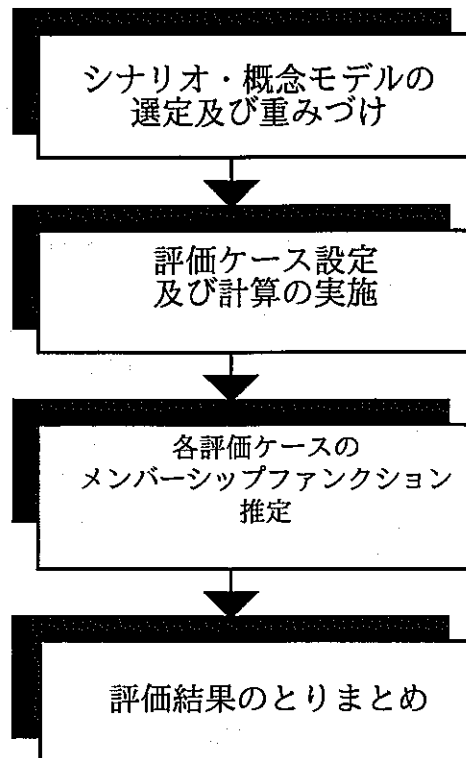


図4.4.1-2 MUNVARプロジェクトで提案されたファジー理論に基づく性能評価及び不確実性解析の手順

各ステップで行う具体的な作業は次の通りである。

① シナリオ・概念モデルの選定及び重みづけ

種々のFEPsの組み合わせとして表現されるシナリオ及びこれに対する概念モデルのオプションのリストを離散的なファジー集合として捉え、それぞれの「確からしさ」についての専門家の意見に基づき各シナリオに対してメンバーシップファンクションを付与する。専門家の意見聴取の方法としては、

- ・多数の専門家に同じ質問を繰り返しyesかnoかの二者択一の返答を要求する。この結果に基づき、voting modelによりメンバーシップファンクションをyesと答えた専門家の割合として定義する方法
- ・単一あるいは少数の専門家から成るグループに質問し、結果を彼らの確信の度合いとして直接(0,1)のメンバーシップファンクションとして返答することを要求する方法

の二つが考えられる。これら二つは、確率論における議論と全く同様に ergodicity が仮定できる場合にのみ一致するものである（エルゴード仮説は常に論争の種ではあるが、ファジー及び確率論に関して共通の問題であるためここでは詳細には触れない）。また、結果として得られたメンバーシップファンクションがより小さいシナリオについては、結果の如何を問わず、このシナリオについての評価結果のために地層処分の安全性が基準に適合しない可能性は無いために無視される。

② 評価ケース設定及び解析の実施

次に、①で排除されなかった各シナリオと概念モデルの組み合わせについて全ての不確実なパラメータにメンバーシップファンクションを①と同様の手法で付与する。そして、確率論的な解析の場合と同様、各パラメータのファジー集合から特定の数値をランダムにサンプリングしてこれを入力データセットとした解析を実施する。そして、算出された結果のメンバーシップファンクションは、サンプリングされた各パラメータ値のメンバーシップファンクションのうち最小のものと等しいとする。なお、①と同様の理由により、各パラメータ値のファジー集合のうちメンバーシップファンクションがとよりも小さいものについては予めサンプリングの対象から除外することが正当化される。

③ 各評価ケースのメンバーシップファンクション推定

②で算出した各線量算出結果のメンバーシップファンクションは、あるシナリオ及び概念モデルが正しいとした場合のいわば条件付きのメンバーシップファンクションであった。従って、複数のシナリオや概念モデルを考慮した評価を実施するためには、以下の方法でこの制約を取り払う必要がある。

$$(10) \quad I(X, S) = \min \{I_{(X)}(S), I(X)\}$$

但し、 $I(X, S)$; シナリオ・概念モデル X が適合し、かつ、線量 S が生じることのメンバーシップファンクション

$I_{(X)}(S)$; シナリオ・概念モデル X が適合するという条件付きでの線量 S が生じることのメンバーシップファンクション

$I(X)$; シナリオ・概念モデル X が適合すること自体のメンバーシップファンクション

④ 評価結果のとりまとめ

②及び③に述べた方法により各シナリオ・概念モデル X によって算出される被ばく線量のファジー集合及び対応するメンバーシップファンクション $I(X, s)$ が得られたとして、次に必要となるのは全ての X についての結果を統合した総合的な線量評価結果についてのメンバーシップファンクション $I(S)$ を算出することである。ここでは、Min-Max原理のうちMaxの部分が適用可能であり、 $I(S)$ は次の様に与えられる。

$$(11) \quad I(S) = \max_x \{I(X, S)\}$$

つまり、各被ばく線量 S について、排除されなかった全てのシナリオ・概念モデル X をスキャンして最大のメンバーシップファンクションにより総合的な結果のメンバーシップファンクションを定義する。この操作により、最終的に図4.4.1-3の様な不確実性の見積もりを含んだ評価結果が得られることとなる。

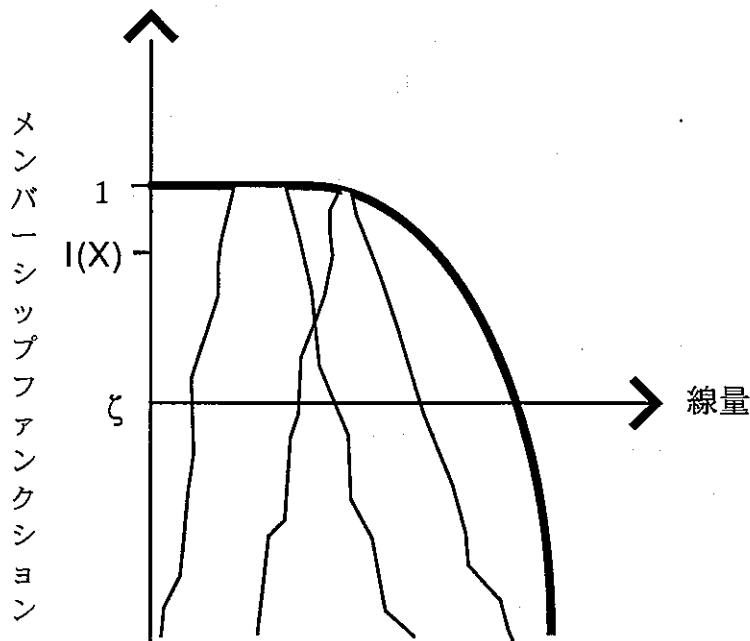


図4.4.1-3 最終的な評価結果のファジー集合及びメンバーシップファンクション* (細線は個別のシナリオ・概念モデルについてのメンバーシップファンクションに対応)

*注：この図では、ある線量を上回ることを確からしさについてのメンバーシップファンクションを例としているため、原則として単調減少である。

4.4.2 シャドウモデル

シャドウモデルは、4.3に述べたパラメータ以外の不確実性を取り扱うために、シナリオあるいはモデルの全ての選択肢を包含した空間を数学的に明確なものとし、空間内の各点（それぞれが一つのシナリオあるいはモデルに対応する）間の距離を定義した上で、この空間の中で物理的に不可能なものを排除することによって性能評価で考慮すべきモデルあるいはシナリオの占める領域を明確にするというものである[Takase, Grindrod and Crompton, 1996]及び[Grindrod and Takase, 1995]。このアプローチは、ある意味では通常モデリングとは正反対のものである。つまり、通常モデリングでは物理的に最尤と考えられるものを数学的に定式化していくのに対して、シャドウモデルではまず全空間を定義し、その中で明らかに不自然なものを切り捨てていって残ったものを全て「否定できない」候補とする。換言すれば、シャドウモデリングにおいては「疑わしいもの」は全て候補の中に残されるが、通常モデリングではこれらは切り捨てられる可能性が強い。従って、網羅性という観点のみで言えば明らかにシャドウモデリングの方が優れていると言える。

シャドウモデリング

通常モデリング

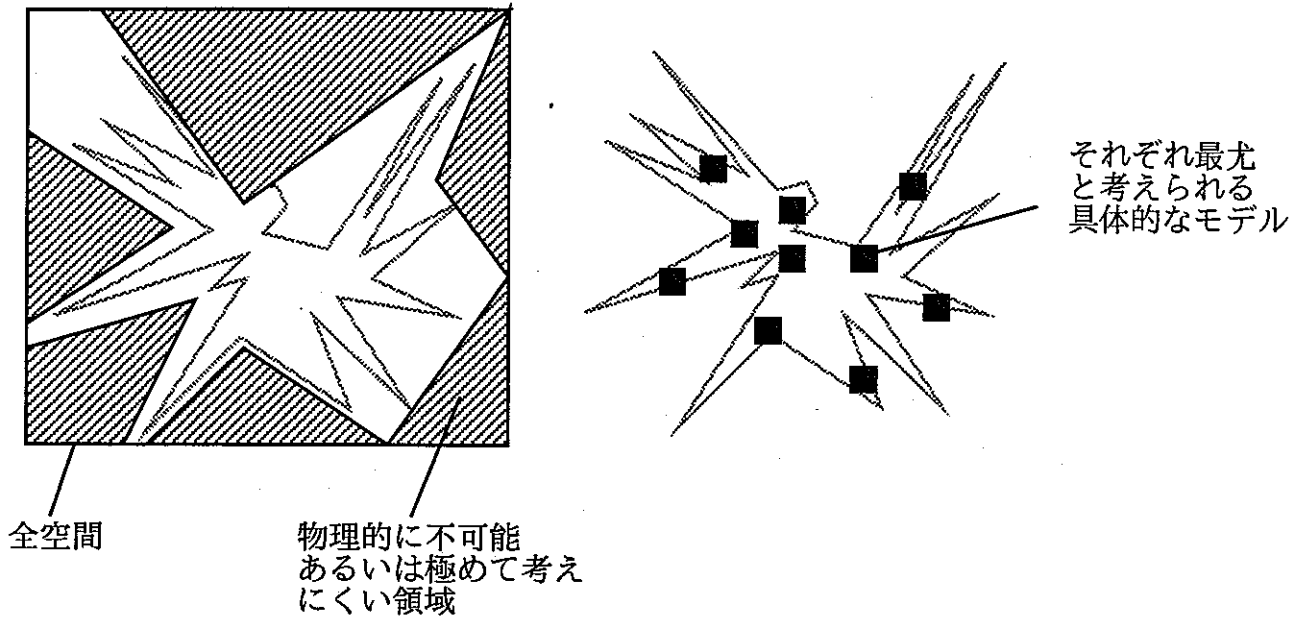


図4.4.2-1 シャドウモデリングと通常モデリングにおける方法論の概念的な比較

シャドウモデルにおける全空間の明確化は、対象とする問題に応じてそれぞれ為されなくてはならない。例えば、ニアフィールドにおける核種の分子拡散による移行を考えた場合、次の様な種々のクラスの問題が考えられる。

1) 全ての化学反応が瞬時平衡にあり、かつ、環境条件が時間・空間的に一定である場合

この場合には対応する広義（平均）拡散係数 α は全濃度 C のみの関数であり、従ってこの問題設定に対応した全てのモデルは α を C のある範囲 $(0, \chi)$ で定義された関数 $\alpha(C)$ の集合の作る空間に含まれることとなる。ここで、数学的にもう少し厳密に言えば、関数 $\alpha(C)$ を連続関数とすれば対応する関数空間はバナッハ空間となり、有限個の不連続点を許容するのであればヒルベルト空間となる。

2) 全ての化学反応が瞬時平衡にあり、かつ、一定の環境条件下での α の C への依存性が既知である場合

この場合には、1) とは逆に環境条件の時間・空間的な変化に対応した広義拡散方程式の見積もりが問題となる。例えば、全濃度 C の関数としての α が、環境条件に依存した n 個のパラメータ $a_i, i=1, 2, \dots, n$ を含めて $\alpha(C, a_i)$ と表現される場合、ベクトル値関数 $a=(a_i)$ が位置と時間の関数 $a=a(x, t)$ として上記の関数空間に含まれる。

3) 全ての化学反応が瞬時平衡にある一般の場合（1）と2）の組み合わせ）

この場合には、 α は $\alpha(C, x, t)$ という全濃度、位置、及び時間の一般の関数として表現した非常に広範な関数空間に含まれるものとなる。

4) 瞬時平衡が成立しない場合

この場合には、 α は (C, x, t) が定まれば一意に定まるという保証はなく、広義拡散係数の観点からは α は統計的な量として捉えられなくてはならない。従って、

$$\alpha = \bar{\alpha}(C, x, t) + \varepsilon$$

という様に、統計的なノイズ ε を含めて表現することが必要となる。そして、対応する関数空間は3)にさらにノイズを含めたものとなる。

シャドウモデルにおいて問題となるのは、該当しない領域の排除が適切に行われない場合、上述した各クラスの関数空間(それぞれ、本来は無次元の空間である)の大きさを反映して取り扱うべきケース数が膨大なものになってしまうという点である。勿論、感度解析によって感度の小さい領域を排除していくという作業は可能である。しかし、感度解析はそれぞれのケースについて一旦は計算を実施し、その結果に基づき取舍を判断するというものであり、対象とすることができるケース数にもおのずと限りがある。従って、シャドウモデルを真に実用的なものとするためには、巨大な関数空間の中から物理的に不可能なものあるいは専門家の知見に照らして不自然なものを体系的かつ効率的に切り捨てていくための具体的な方法論を明確化することが課題である。

4.5 今後の研究開発の方向性

4.4の内容をまとめれば、パラメータ以外の不確実性についてシャドウモデルを用い、網羅された性能評価の選択肢の全てに対して専門家の確信の程度をファジー理論に基づいて付与すれば、理論的には定量的な不確実性解析を満足すべきレベルで、あるいは少なくとも既存の方法論より満足すべきレベルで実施することが可能と考えられる。しかしながら、現実的には、シャドウモデルを含む無次元の関数空間の巨大さと、その中の一点について専門家の意見を聴取してメンバーシップファンクションを付与する労力とを掛け合わせて考えて見れば、全ての選択肢をしらみ潰しに調べて行くことは現実的な時間スケールの中では望むべくもない。このジレンマを打ち破るためには、何かもう一つアイデアが必要である。

一つの考え方は、地質統計的な方法論に着目することである。そもそも地質統計的な手法は、逆問題、つまり広大な地層の中で実測できる点数が限られている現実的な状況の中で、粗(sparse)な実測データセットに基づいて統計的に未測定点での特性値を推定・補間するという目的のために開発され、成功を収めつつあるものである。そして、上に述べた我々の問題も、これと非常に似通っているということができる。つまり、定量的な不確実性解析のために我々が為すべきことは、巨大な関数空間の中の各点に対してメンバーシップファンクションを割り当てるとというのが現在の課題であった。そこで、地質統計的な手法において、地層の代わりに種々のシナリオや概念モデルを包含する関数空間を考え、この中の限られた位置(個々のモデル等に対応する)でメンバーシップファンクションの実測(具体的には専門家の意見聴取)を行う。そして、得られた粗(sparse)な実測データセットに基づいて統計的に未測定点でのメンバーシップファンクションを推定・補間することによって現実的な時間内で巨大な関数空間全域についてのメンバーシップファンクションの付与を行うことが今後の研究開発の一つの方向性として考えられる。

5. 単一崩壊連鎖を例とした感度解析の実施

本章では、単一崩壊系列の3核種 (Am-241, Np-237, 及びU-233) に着目し、種々のプロセスによる核種移行形態間の変化及びニアフィールド内外の事象による環境条件変化の影響について体系的かつ広範な感度解析を行うための手法開発と同手法を用いた予備的な感度解析についてまとめる。

5.1 体系的感度解析の手順

感度解析は、性能評価で必要となる種々の解析の入力情報と出力情報との関係を同定するための手法である。これまでも述べてきた様に、性能評価には必ずしも一意には選定できない選択肢が多く含まれており、多数のケースを設定することが必要である。このような事情を考えれば、感度解析はこれらのケースを統合して性能評価全体としての結論を導出するためには不可欠のものであるということが出来る。本研究で対象とするシャドウモデルを用いた概括的な解析においては、通常の入力データという形式の入力情報に加えて種々の概念モデルやシナリオに対応する仮定が加わるために、体系的な感度解析の重要性はむしろ高まるということが出来る。本節では、まず種々の感度解析手法を概観した後、本研究において使用するべき手法を提案することとする。

5.1.1 感度解析手法

全ての感度解析手法の目的は、所定の数値の範囲内において個々のパラメータあるいは複数のパラメータの組み合わせが結果に及ぼす影響の相対的な重要性を定量的に明らかにすることにある [Doctor, 1989]。つまり、数学的な観点から言えば、感度解析の目指すものは入力パラメータ $X_i, i=1,2,\dots,n$ の関数である結果 $Y=Y[X_i]$ について各パラメータに対応する偏微分係数 $\frac{\partial Y}{\partial X_i}$ を計算することである。しかしながら、原則的には偏微分係数はパラ

メータ空間内の各点毎に異なるものであり、しかも実際上は偏微分係数を算出可能な点数には限りがあることから、各点における偏微分係数によって表現される局所的な感度の情報に基づき解析対象とするパラメータ範囲の全域的な感度を理解するという作業が常に要求されることに注意を要する。

以下に、本研究において使用する可能性がある感度解析手法の概要をそれぞれまとめることとする。

(1) 決定論的手法

決定論的な手法のうち最も古典的なものは、パラメータ空間内のある点 (X_1, X_2, \dots, X_n) における $Y=Y(X_1, X_2, \dots, X_n)$ と一つのパラメータのみ変動させたもう一つの点 $(X_1+\Delta, X_2, \dots, X_n)$ における $Y=Y(X_1+\Delta, X_2, \dots, X_n)$ を計算し、これら二つの計算結果から X_1 についての偏微分係数を以下の様に近似的に求めることである。

$$(1) \quad \frac{\Delta Y}{\Delta X_1} = \frac{Y(X_1 + \Delta, X_2, \dots, X_n) - Y(X_1, X_2, \dots, X_n)}{\Delta}$$

しかしながら、性能評価で用いる解析モデルは多くの場合多数のパラメータを有するものであり、この手法で偏微分係数を算出することは計算時間の観点から現実的ではない。

以上の様な背景において比較的最近開発された手法がAdjoint法である。この方法では、本来の方程式系に代わってその随伴問題を解くことにより、パラメータ空間内の任意の点での偏微分係数を用意に計算することが可能となる。また、この様な随伴問題を解く手順を自動化したソフトウェアとしてGRESSあるいはADGENと呼ばれるものが開発されている[Oblow, 1983 等]。

(2) 統計的手法

統計的な手法は、パラメータ空間から多数の点を統計的にサンプリングし、各点について計算を行った結果に対して多変数の回帰分析を施すというものである。回帰分析の種類は多数存在するが、我々の目的に関して言えば、線形回帰分析とランク回帰分析を代表として考えることができる[Doctor, 1989]。

① 線形回帰分析

多変数の問題 $Y = Y(X_1, X_2, \dots, X_n)$ についての線形回帰分析とは、 Y を X_i の線形和として次式の様に表現し、あるデータセット (Y_k) について誤差 ϵ_k の二乗和を最小化するものである。

$$(2) \quad Y_k = \alpha + \sum_i \beta_i X_{ik} + \epsilon_k$$

誤差 ϵ_k の二乗和を最小化する作業は、(2)式の右辺の線形和と左辺との間の通常の(乗積モーメント)相関係数、

$$(3) \quad r = \frac{\sum_k Y_k \left(\alpha + \sum_i \beta_i X_{ik} \right)}{\sqrt{\text{Var}(Y_k) \text{Var} \left(\alpha + \sum_i \beta_i X_{ik} \right)}}$$

を最大とする様な係数 β_i を見いだすことに他ならない。

ここで、各 X_i についての β_i はそれぞれのパラメータの偏微分係数の全域的な「平均」に対応し、相対的な重要度を示すものとなる(但し、厳密に言えば、各パラメータの変動範囲あるいは標準偏差によって規格化することが必要となる)。

② ランク回帰分析

線形回帰分析は、線形性が強い問題に対しては簡単でありかつ効果的な手法であるが、 Y が X_i に対して非線形な依存性を有する場合には、上述した偏微分係数の全域的な「平均」という概念は意味を為さないばかりか誤った結論に至る可能性もある。この様な非線形性の強い問題についても、 Y の X_i に対する依存性が単調である限りは適用可能な方法がランク回帰分析である。ランク回帰分析は、 Y 及び X_i の数値データの代わりに対応する順位(ランク)に対して線形回帰分析を行うものである。つまり、 Y_k 及び X_{ik} のランクをそれぞれ $R(Y_k)$ 、 $R(X_{ik})$ とすると、 $R(Y_k)$ を $R(X_{ik})$ の線形和として次式の様に表現し、

残差 ε_k^* の二乗和を最小化するものである。

$$(4) \quad R(Y_k) = \alpha^* + \sum_i \beta_i^* R(X_{ik}) + \varepsilon_k^*$$

誤差 ε_k^* の二乗和を最小化する作業は、(4)式の右辺の線形和と左辺との間のランク相関係数（あるいはSpearmanの相関係数とも呼ばれる）、

$$(5) \quad r_s = \frac{\sum_k R(Y_k) \left(\alpha + \sum_i \beta_i^* R(X_{ik}) \right)}{\sqrt{\text{Var}(R(Y_k)) \text{Var} \left(\alpha + \sum_i \beta_i^* R(X_{ik}) \right)}}$$

を最大とする様な係数 β_i^* を見いだすことに他ならない。既に述べた様に、ランク回帰分析の最大の利点は数値データの代わりにランクを用いることにより、Yの X_i に対する依存性が強い非線形を示しても $R(Y)$ 及び $R(X_i)$ はこの特性を保存せず、従って依存性が単調である限りは適用可能であるということである。

(3) Hybrid法

Hybrid法は、決定論的な感度解析と統計的な感度解析を組み合わせることにより、より効率的に感度（偏微分係数）のパラメータ空間内の全域的な分布を調査しようというものである。具体的には、(2)と同様にパラメータ空間内で所定の点数の統計的なサンプリングを実施し、各点について計算を行う。ここで、通常の統計的な手法との最大の相異は、Hybrid法では各点でのYに加えてYの各パラメータに関する偏微分係数も同時に計算するという点である。この方法では、Yに加えてYの各パラメータに関する偏微分係数も同時に再現することが可能な X_i の線形和を見いだすことが必要となる。つまり、

$$(6) \quad \begin{pmatrix} Y_k \\ \left(\frac{\partial Y}{\partial X_1} \right)_k \\ \vdots \\ \left(\frac{\partial Y}{\partial X_n} \right)_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + \sum_i \beta_i X_{ik} \\ \beta_{1k} \\ \vdots \\ \beta_{nk} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_k \\ \tilde{\varepsilon}_{1k} \\ \vdots \\ \tilde{\varepsilon}_{nk} \end{pmatrix}$$

という形の表現で、残差ベクトル ε_k を最小化する様なものを見いだすことが必要となる。ここで、残差ベクトル ε_k の大きさは、通常の二乗和の代わりに重み付けされたソボレフの二乗和

$$(7) \quad \sqrt{\sum_k \varepsilon_k^2 + \sum_k \sum_i w_i \tilde{\varepsilon}_{ik}^2}$$

によって測る必要があることに注意を要する。ここで、Wは重みであり通常は $w_i = X_i$ と設定される。

5.1.2 本解析に用いる感度解析手法の選定

前節に述べた種々の感度解析手法の優劣は普遍的なものではなく、問題毎の特性により異なるものと考えられる。そこで、本解析では現バージョンのSPADEが通常モードでの計

算に加えて各パラメータについての偏微分係数を計算可能であることから、以下の3種類の感度解析手法を比較しつつ利用するものとする。

- 1) 線形回帰分析
- 2) ランク回帰分析
- 3) Hybrid 法

これらの手法を比較する上での尺度は、単位計算時間あたりに得られる感度情報である。例えば、3)のHybrid法は少なくとも理論的には最小の計算ケース数で感度を明らかにすることが可能と考えられるが、同時に、必要とされる計算時間は最も長い。そこで、これら二種類の情報をいずれも考慮して手法の比較を行うこととする。

5.2 一定環境条件下での核種移行プロセスに関する感度解析の実施

本節では、環境条件一定という仮定の下に、種々の核種移行プロセスを包含し得るシャドウモデルを設計しこれを用いて行った感度解析手法の比較及び解析の結果をまとめることとする。

5.2.1 シャドウモデルの設定

環境条件が一定の場合、さらに各移行形態間の転移が全て「速い反応」であるという仮定を置くと、全ての核種移行プロセスは広義拡散係数 α を全核種濃度 C の関数 $\alpha(C)$ として表現することによって包含される。また、 α の代わりに αC を用いることとすると、これが C の関数として単調増加関数でなくてはならないことは全ての移行形態に対応する拡散係数が非負であることから明らかである。そこで、以下の検討では αC についてのシャドウモデルを設定して解析を実施することとする。

シャドウモデルの設定にあたっては、既知の(物理的な意味の明確な)モデルの特徴を整理した上で、これらを全て近似的に表現でき、かつ、既知のモデル以外の可能性をも表現できる様な関数系を選定することが必要である。そこで、まず、図5.2.1-1に示すように、表2.4-1に挙げた全ての既知のモデルに対応する αC を計算し両対数プロットを行った。同図から明らかな様に、各モデルに共通した特徴は、 C の関数としての αC のグラフがたかだか有限個のそれぞれ異なる傾きを持った線分とこれらをつなぐ遷移領域(スイッチ)とから構成されているという点である。そこで、シャドウモデルを次の様に設定する。(数式としては、 $A_i \log C$ という部分が i 番目の線分に当たり、総和の項は基本的には $i-1$ 番目の線分をキャンセルし新たに i 番目の線分を加えるという操作を順次行う構造をとっている。 ξ を含む項は、この $i-1$ 番目のものと i 番目のものの入れ換えを滑らかにを行うためのものである。)

$$\log(\alpha C) = \log f + \{1 - \xi(b_1, \log C - \log c_1)\} a_1 \log C +$$

$$(8) \quad \sum_{i=2}^n \xi(b_{i-1}, \log C - \log c_{i-1}) \{1 - \xi(b_i, \log C - \log c_i)\} \{a_i \log C + (1 - a_i) \log c_{i-1}\}$$

ただし、 $\xi(x, y) = \frac{1 - \tanh(xy)}{2}$ であり、各パラメータの幾何学的な意味は次の通りである。

a_i ; 左から*i*番目の線分の傾き
 b_i ; 左から*i*番目の線分と*i+1*番目の線分との間のスイッチの硬さ
 c_i ; 左から*i*番目の線分と*i+1*番目の線分との間のスイッチの位置
 f ; 縦軸についての切片

物理的な意味としては、スイッチは例えば溶解度や、非線形吸着における飽和吸着量に対応する液相濃度あるいはコロイド生成のしきい濃度等の核種の移行形態間の配分挙動が変化する全濃度に該当するものということができる。また、これと対応して各パラメータの現象論的な意味を次の様にまとめることができる。

a_i ; *i*番目の（全）濃度区間における αC の濃度への依存性（指数）
 b_i ; *i*番目と*i+1*番目の（全）濃度区間の間の遷移領域の大きさ
 c_i ; 移行形態間の配分挙動が変化するしきい（全）濃度
 f ; 微小濃度領域での α

このシャドウモデルは、任意の位置に任意個のスイッチを配置して、それぞれ固有の硬さ（遷移領域の大きさ）で一つの線分からこれと隣接した線分へと切り替えを行うことが可能である。また、単純な「区分的に線形な」曲線（折れ線）と異なり、各点で微分可能なものであることが特徴である。この微分可能性により、スイッチに該当する部分でのSPADEのタイムステップ管理はより容易なものとなる。

(8)式のシャドウモデルを用いて図5.2.1-1の各モデルを近似した結果、このシャドウモデルは既知のモデルを十分な精度で近似することが可能であることがわかった。

5.2.2 核種移行解析の結果

前節に述べた αC についてのシャドウモデルを用いて、核種移行解析を実施した。シャドウモデル中の各パラメータ値の範囲と分布形は表5.2.2-1にまとめる通りである。なお、今回の解析では、この形式のシャドウモデルを用いる初めての機会であるため、感度解析結果の解釈が不必要に複雑になることを避けて、単一のスイッチを持つシャドウモデルに限定することとした。また、ゆるみ域内での移流係数は、簡単のため常に1とした（つまり物理的には全ての核種が移流により移動可能であることを意味する）。以上二つの仮定については他の選択肢も存在していることから、将来の解析に於いてはこれらも種々に変動させることが望ましい。また、表5.2.2-1以外のパラメータ値は、3.に述べた解析と全く同じである。そこで、シャドウモデルに含まれる各パラメータについて下表に示す範囲と分布形とを設定し、これに基づき統計的サンプリングを行い多数のケース設定を行った。

表5.2.2-1 一定環境条件下での種々の核種移行プロセスについての解析条件

パラメータ	範囲	分布形
a1	1	固定
b1	1 - 100	Uniform
c1	10 ⁻¹⁰ - 10	Log Uniform
a2	0 - 1	Uniform
f	2.85 × 10 ⁻⁷ - 2.85 × 10 ⁻²	Log Uniform

なお、ここでの解析対象とする崩壊系列に含まれる3元素について、各パラメータのサンプリングは統計的に独立に実施した。これは、一定環境条件下での核種移行挙動は元素毎に異なる可能性があると考えられるためである。実際の核種移行解析は、上述した統計的なサンプリングによって作成した個々のケース毎に実施した。図5.2.2-1は、前表の条件について実施した解析結果（濃度分布の時間変化）の例である。

5.2.3 感度解析

(1) Hybrid法と統計的手法の比較

既に述べた様に、ここでの感度解析は手法の選定も同時に実施するものである。この観点から、前出の三種類の手法のうち、SPADEの稼動モード自体を変更する必要のあるHybrid法の効率をまず評価することとした。

単一核種(Np-237) のみについて、32ケースの解析条件を統計的にサンプリングし、SPADEを用いて最大核種放出フラックス及びピーク到達時刻での核種放出フラックスの各パラメータに対する偏微分係数を算出した。Hybrid法では(6)及び(7)式により各偏微分係数の数値も考慮した回帰を行っているにも拘わらず、結果は単純な線形回帰と殆ど変わらない。他方、計算効率の点では、通常モードでのSPADEの計算が1ケース1分以内で終了しているのに対して、偏微分係数を同時に算出するモードでは平均10分以上を要している(いずれもScilicon Graphics Indigo 上で)。以上の結果から、我々の解析についてはHybrid法は必ずしも効率の高い感度解析手法ではないといえることができる。しかしながら、この様な傾向は解くべき方程式形や差分条件に依存するものであり、他のケースに関しては手法の優劣は逆転し得るものであることに注意を要する。

(2) 統計的手法による感度解析

次に、Am-241、Np-237、及びU-233の崩壊系列について新たに172ケースの統計的なサンプリングを行いSPADEによる核種移行解析を実施した。以下、これらに対して行った線形回帰分析及びランク回帰分析の結果を整理する。

① 線形回帰分析

ここでは、ステップワイズな線形回帰分析と呼ばれる手法により、パラメータの重要度分類を明らかにしつつ最適な線形回帰モデルを見いだすこととする。ステップワイズな回帰分析は、最も優先順位の高い単一のパラメータによる回帰分析から始めて徐々に優先順位の相対的に低いパラメータを付加しつつ回帰モデルを更新していき、回帰結果に顕著な改善が見られなくなるまでこの手順を反復するというものである。具体的には、 i 回目の回帰ステップにおいて最も残差の少ない i 個のパラメータの組を選定し、 $i+1$ 回目のステップでは前回選んだ i 個のパラメータの組に残されたパラメータのうちで残差を最小化するものを一つだけ付加するという作業を繰り返すものである。今回の例題では、4 回目の回帰後の残差は 3 回目のもとのほぼ同等であり、4 つの主要なパラメータにより線形回帰モデルが十分に表現されることがわかった。図 5.2.3-1 は、同じく Np-237 を例として、線形回帰の改善をスキャッタープロットとしてまとめたものである。徐々に回帰モデルの残差が減少していることはこの図からも明らかであるが、これに加えて、解析結果の非線形性が無視し得ないものであることに起因する線形回帰モデルの限界も顕著である。特に、最大核種放出率が大きい側では、パラメータ値によらず解析結果の放出率は頭うちとなっている。これは、ガラス固化体の溶解時間に対応する放出率の上限に対応するものである。今回の感度解析解析対象とはしなかったがこの領域でのパラメータの組み合わせにおいてはガラス浸出速度が最重要パラメータとなり得ること（つまり、ガラス浸出により供給される以上の核種放出は生じないということ）を示している。表 5.2.3-1 に、最終的に得られた各核種の最大放出率に対するパラメータの重要度をまとめる。

表 5.2.3-1 線形回帰により得られた各核種の最大放出率に対するパラメータの重要度順位

核種	順位 1	順位 2	順位 3	順位 4
Am-241	$f(\text{Am})$	$c_1(\text{Am})$	$a_2(\text{Am})$	$b_1(\text{Am})$
Np-237	$c_1(\text{Np})$	$a_2(\text{Np})$	$f(\text{Np})$	$f(\text{Am})$
U-233	$c_1(\text{U})$	$a_2(\text{U})$	$f(\text{U})$	$c_1(\text{Np})$

Am-241 については、 f つまり微小濃度領域での平均拡散係数が最も重要な感度を有していることがわかる。 f は、通常の線形吸着モデルの場合と同様、機能的には拡散フロントの伝播速度とその遅延を支配するパラメータである。このため、比較的短半減期である Am-241 については、移行が遅延される間の崩壊が最も重要であるという傾向は多様なシャドウモデルを用いた計算結果にも該当するものであることがわかる。また、第二及び第三位にはそれぞれしきい全濃度とそれよりも高い濃度での移行形態間の配分についてのパラメータである c_1 及び a_2 が位置づけられている。

より長半減期である Np-237 については、 c_1 つまりしきい（全）濃度としきい濃度以上の領域での移行形態間の配分を支配する a_2 が最も重要となる。 c_1 の感度は、溶解度の概念を一般化することによって理解することが可能である。つまり、機能的には、前出のガラス浸出率律速のプラトーに至る手前で、沈澱形成あるいはコロイド生成等により C に対する αC の増大を鈍化させる（最も極端には、溶解・沈澱モデルのように完全に増大を停止させる）という役割を有している。また、 a_2 はこの鈍化の程度を規定するものとして重要性を有している。

U-233の感度は、上記二つの核種の感度の中間的な振る舞いを示すものであることがわかる。つまり、最も重要なパラメータは c_1 でありこれはNp-237と同様であるが、その次には移行遅延に関連する f が位置づけられている。この結果は、U-233の半減期を考慮すれば妥当なものと思われる。

第三、及び第四に重要なパラメータについては核種間に相異があり、また、既に述べた様に線形モデルの適合性が必ずしも高いものではないことから、これらについて詳細な傾向を議論することは不相当と思われる。しかしながら、Np-237及びU-233においてそれぞれ親核種のパラメータが重要性を持つことは特筆に値する。これは、平成3年度性能評価研究成果報告書でも触れられているように、親核種の崩壊による娘核種の供給が娘核種の最大放出率に有意に寄与する可能性を示唆しているものと考えられる。また、さらに言えば、Np-237の場合もU-233の場合も娘核種に最も大きな影響を及ぼしているのは親核種自体の移行挙動に対して支配的なパラメータであり、この点も回帰分析結果の整合性を示すものと考えられることができる。

② ランク回帰分析

ランク回帰分析についても、ステップワイズな手順で検討を行った。図5.2.3-2は、Np-237を例として、4ステップ目の線形回帰の結果をスキッタープロットとしてまとめたものである。ここでは、線形回帰モデルの場合と異なり、解析結果の非線形性が無視し得ないものであることに起因する回帰モデルの限界は顕著ではない。表5.2.3-2に、最終的に得られた各核種の最大放出率に対するパラメータの重要度をまとめる。

Np-237とU-233について第1位と第2位とが逆転していることを除けば線形回帰分析の結果と同様の傾向を示している。また、1ステップの回帰終了時のNp-237とU-233の第1位と第2位との残差の相異は微小なものであることから、以上のパラメータの重要度分類はこれら二つの感度解析手法の選択に強く依存するものではなく、ある程度の蓋然性をもつものであること言うことができる。

表5.2.3-2 ランク回帰により得られた各核種の最大放出率に対するパラメータの重要度順位

核種	順位1	順位2	順位3	順位4
Am-241	$f(\text{Am})$	$c_1(\text{Am})$	$a_2(\text{Am})$	$b_1(\text{Am})$
Np-237	$a_2(\text{Np})$	$c_1(\text{Np})$	$f(\text{Np})$	$f(\text{Am})$
U-233	$f(\text{U})$	$c_1(\text{Np})$	$a_2(\text{U})$	$c_1(\text{Np})$

③ まとめ

既に述べた様に、ランク回帰分析に於いては線形回帰分析ほど解析結果の有する非線形性の影響が顕著とはならない。このような回帰モデルの適合性を総合的かつ定量的に調べるためには、以下の様に定義される多重相関係数 R^2 、

$$(9) \quad R^2 = 1 - \frac{\sum_k (Y_k - \hat{Y}_k)^2}{\sum_k (Y_k - \bar{Y}_k)^2}$$

を比較すれば良い。ただし、 \hat{Y}_k , \bar{Y}_k はそれぞれYの回帰モデルによる推定値及び平均をそれぞれ表す。各核種の最大放出率に対する最良の線形回帰モデル、ランク回帰モデル及びこれらの多重相関係数を表5.2.3-3 にまとめる。同表からわかる様に、両者の相関係数の差異は必ずしも顕著なものではないが、ランク回帰モデルにおける多重相関係数の方が線形回帰モデルのそれを常に上回っており、上述した非線形性への適合性を裏付けるものとなっている。また、モデルに含まれる各係数は、ランク回帰分析の場合には自然に規格化されており、対応する各パラメータの感度として直接比較可能であることも利点の一つである。勿論、線形回帰モデルについても規格化を行うことは可能であるが、規格化の方法は必ずしも一義的ではないという問題もある。

表5.2.3-3 各核種の最大放出率に対する最良の線形回帰モデル及びランク回帰モデルの多重相関係数

核種	線形回帰モデル及びそのR ²	ランク回帰モデル及びそのR ²
Am-241	1.84+2.86f(Am)+0.429c ₁ (Am) +2.37a ₂ (Am)+0.00828b ₁ (Am) 0.768	-32.8+0.891f(Am)+0.303c ₁ (Am) +0.146a ₂ (Am)+0.0426b ₁ (Am) 0.889
Np-237	-2.62+0.490c ₁ (Np)+4.88a ₂ (Np) +0.716f(Np)+0.194f(Am) 0.806	-58.5+0.575a ₂ (Np)+0.537c ₁ (Np) +0.486f(Np)+0.0816f(Am) 0.838
U-233	-5.27+0.283c ₁ (U)+0.464f(U) +1.87a ₂ (U)-0.046c ₁ (Np) 0.647	-37.3+0.584f(U)+0.589c ₁ (U) +0.377a ₂ (U)-0.130c ₁ (Np) 0.680

5.3 沈澱・溶解及び吸着の瞬時平衡を含む一定の核種移行プロセスに対する環境条件変化の影響の感度解析の実施

本節では、前節とは逆に核種移行プロセスを最も標準的な線形吸着と溶解度限界を組み合わせたモデルに固定し、代わりに環境条件に強く依存すると考えられる溶解度を時間・空間的に変化させるという問題について統計的な感度解析を実施した結果をまとめる。

5.3.1 シャドウモデルの設定

上記仮定の下に実施する解析において環境条件の変化を記述するためには、溶解度を時間及び空間の関数として与えることができれば十分である。しかしながら、明らかにこの様な関数の全体は無次元の関数空間を為すものであり、何らかの更なる仮定なしには空間全体について包括的な解析を実施することは不可能である。そこで、ここでは、以下の現象論的な仮定を設けることとする。

i) 溶解度の数値としては、3.に述べた還元環境での標準的な値と無限大という二つの離散

的な数値のみを採ることとする。つまり溶解度限界が実効的な放出制限機構となるような通常の地球化学的な条件と、酸化性雰囲気のような溶解度限界が事実上成り立たないような極端な環境条件の二つを考え、これらが時間・空間的に入れ替わるものとする。

ii) i)の条件に対応する様な化学的なフロントは、様々な種類の反応・拡散方程式の解に対応するものであり、これらの解は進行波解という空間的なパターンの伝播という形式で与えられることが知られている[Grindrod, 1990], [Ortoleva, 1994]。そこで、上記の通常の地球化学的な条件が成立している領域と酸化性雰囲気等の極端な条件の領域との間には明瞭な境界が存在し、これが時間的に進退するものと仮定する。

iii) 簡単のため、各核種とも与えられた環境条件の変化に同様に応答するものとする。

以上の仮定の下に、環境条件の種々の変遷を記述するものとして、評価時間と人工バリア厚さによってそれぞれ規格化された時空間平面上に有限個の楕円を統計的に配置するというシャドウモデルが提案されている[Takase and Grindrod, 1996]。そこで、本研究でも、このシャドウモデルを踏襲して解析を行うものとする。また、前節の場合と同じく、今回の解析が予備的なものであることから楕円の個数を2に限定し、これらの楕円はそれぞれ中心の位置座標が人工バリアの内側及び外側境界にそれぞれ位置するものと仮定する（時間座標は任意）。この様な単純化は、環境条件変化の要因として、外部からの異種地下水の進入や放射線分解等の廃棄物と地下水との相互作用に起因するものが多く想定されることから、少なくとも第一回目の解析の前提として適当なものと考えられる。

5.3.2 核種移行解析の結果

前節に述べたシャドウモデルを用いて核種移行解析を実施した。シャドウモデルに含まれる各パラメータについて計算対象とした数値範囲、及び分布形を表5.3.2-1に示す。

表5.3.2-1 一定核種移行プロセスについて種々の環境条件変化を考慮した解析の条件

パラメータ	範囲	分布形
τ_0^1	0 - 1	Uniform
ρ^1	0	固定
θ^1	0 - $\pi/2$	Uniform
a^1	0 - 1	Uniform
b^1	0 - 1	Uniform
τ_0^2	0 - 1	Uniform
ρ^2	1	固定
θ^2	0 - $\pi/2$	Uniform
a^2	0 - 1	Uniform
b^2	0 - 1	Uniform

ただし θ については、 a 及び b の対称性から $0 - \pi/2$ の範囲で全ての可能性を網羅できることに注意を要する。なお、他のパラメータについては、ゆるみ域内地下水流量以外全て3. に述べた解析と同一である。ゆるみ域内地下水流量については、環境変動の影響が顕在化するよう、廃棄体一体当たり $100\text{m}^3/\text{年}$ という上限に近い数値を用いた（ダルシー流速 $1\text{m}/\text{年}$ として、 2km 四方の処分場の総流量を4万本の廃棄体で均等に割り当てた数値）。人工バリア中核種濃度分布の経時変化を Np-237 を例として図5.3.2-1にまとめる。図5.3.2-1の全濃度分布の経時変化は、明らかに沈澱フロントの形成とその伝播を示している。

5.3.3 感度解析

(1) ランク回帰分析

前節までに述べたシャドウモデルは一定環境下で核種移行挙動を種々に変化させた場合のシャドウモデルよりも複雑なものであり、特に、感度解析という観点からは非線形性に加えて各パラメータについての偏微分係数が必ずしも単調なものではないという特徴を有する。このため、前項の解析で適合性の高かったランク回帰分析もこのモデルに対しては有効な感度解析手法とはならないことが予想される。実際、ランク回帰モデルをステップ5まで適用した結果、回帰モデルの適合性は有意なものではなく、多重相関係数も0.22と非常に小さい数値を示している。これらのことから、本モデルについては従来の感度解析とは全く異なるアプローチが必要であることは明らかである。特に、結果1は幅広い入力パラメータ値にわたって一定の最大核種放出率が生じていることを示しており、このような傾向は既存の回帰モデルで取り扱うことが極めて困難なものである。

(2) SVDによるパターン認識

① 基本概念及び手法

従来の感度解析手法に代わり、ここではSVD(Singular Value Decomposition)によるパターン認識の手法を用いることとする。SVDはカオスを含む複雑な時系列データの分析等に近年活発に利用されている数学的な手法であり、その基本的な概念は次の通りである。

定理1

m 個の成分を持つ n 個のデータ $x_i | x_i \in \mathbb{R}^m, i=1, 2, \dots, n$ を列ベクトルとする m 行 n 列の行列を X とする。（但し、平均が0となる様、予め調整されているものとする。勿論、このことによって一般性は失われない。）この時、以下の様な操作が必ず可能である。但し、 (\cdot, \cdot) は内積を表すものとする。

i) \mathbb{R}^m の単位ベクトルの中から、 X の各列ベクトルの該当する単位ベクトル方向の成分

$$(x_{i \cdot n}) \text{の分散 } n^T (X X^T) n = \sum_{i=1}^n (x_{i \cdot n})^2 \text{を最大にするものを選び、} n_1 \text{とする。}$$

ii) 次に、 n_1 と直交する単位ベクトルのうち、上と同じく射影成分の分散を最大にするものを選び、 n_2 とする。そして、 m 個の単位ベクトルが得られるまでこの操作を続ける。

上の定理で得られる m 個の単位ベクトルは、明らかに \mathbb{R}^m における正規直交基底となる。そして更に、次の重要な定理が得られる。

定理2 (Singular Value Decomposition)

定理1の操作で得られる正規直交基底は、行列 X とその転置行列との積 XX^T の m 個の規格化された固有ベクトルと一致する。また、 x_i の各 n_k 方向の成分の二乗和（即ち、 n_k 方向の分散）は XX^T の n_k に対応する正の実固有値 λ_k に等しい。

$$\lambda_k = \sum_{i=1}^n (x_i \cdot n_k)^2$$

以上、証明は例えば[Broomhead and King, 1986]を参照のこと。

概念的に言えば、SVDは、ある多次元のデータ群が与えられた時に、この多次元の空間の中で変動が大きい軸をその大きさの順に抽出することを可能とするものである。この機能の故に、SVDは現在さまざまな分野で利用されている。例えば、時系列データの解析においては、非常に高い次元のデータ空間の中から有意な影響をもっている軸のみ（つまり明らかに0ではない様な XX^T の固有値に対応する固有ベクトルの方向）を抽出して実用上十分な部分空間を定義するという目的に用いられている。

さて、この様なSVDを我々の現在の問題に適用する方策を以下に考えてみる。

まず、スキッタープロットを、最大核種放出率に応じて幾つかの範囲に分割する。こうして得られた各グループ G_j に含まれる n_j 個の計算ケースのシャドウモデルは、前回の帰分析結果からもわかる様に多種多様な特徴を持っているものと考えられる。しかしながら、結果として生じている最大核種放出率はほぼ同様なものであることから、結果について真に敏感な特徴はあまり変化していない筈である。逆に、結果に影響を及ぼさない様な特徴は大幅に変動しているものと考えられる。以下行う解析の主眼は、この「結果に余り影響を与えないシャドウモデルの特徴」をSVDによって見だし、この結果から翻って「結果に大きな影響を及ぼすシャドウモデルの特徴」を明らかにしようというものである。より具体的には、次の手順で解析を行う。

- i) スキッタープロットを、最大核種放出率に基づき N 個のグループ G_j に分割する。
- ii) 各グループ G_j に含まれる n_j 個の計算ケースに対応するシャドウモデルの8個の入力パラメータそれぞれの平均値を成分とするベクトル y_{j0} を作成する。
- iii) 同様にグループ G_j に含まれる n_j 個の計算ケース自体について y_{ji} を作成する。
- iv) 定理1におけるデータベクトル x_{ji} をグループ内での変換 $x_{ji} = y_{ji} - y_{j0}$ によって定義し、SVDによりその主軸に対応する固有ベクトル n_{ji} を見いだす。

ここで、各グループ G_j における固有ベクトル n_{ji} は、「結果に余り影響を与えないシャドウモデルの変換」であり、以下、低感度変換と呼ぶこととする。また、逆に、この低感度変換によって影響を受けない様なシャドウモデルの特徴は、各グループに含まれる多数の計算ケースがそれぞれ同じグループ内の他のケース達と共有しているものであると考えられることから、低感度変換によって保存される様なシャドウモデルの特徴を各グループの代表的特性とする。つまり、SVDにより各グループの代表的な特性のパターンが認識されることとなる。

以上が解析手法の骨子である。以下に、Np-237を例としてこの手法を適用した結果についてまとめる。

② 人工バリア中核種移行問題への適用

図5.3.3-1に、Np-237最大放出率の0.01桁刻みの頻度分布を示す。図から明らかな通り、分布は3カ所の非常に鋭いピークを持った分布を有する。このことは、ある広いクラスのシャドウモデルがこれら二つの最大放出率に収束することを示唆している。従って、これらのピークの部分を無視して一定間隔で区間分割をすることは合理的ではない。そこで、図5.3.3-1の核種放出率の範囲を、「ピーク値をまたがない最大1桁幅の区間」に分割することとし、全計算ケースを以下の7グループに分割するものとする。

	Log (最大放出率) の範囲
グループ1	-2~-3
グループ2	-3~-4.04
グループ3	-4.04~-4.05 (ピーク1)
グループ4	-4.05~-5
グループ5	-6.98~-6.99 (ピーク2)
グループ6	-9~-9.61
グループ7	-9.61~-9.62 (ピーク3)

非零の固有値について明確なしきい値はないが、ここでは、簡単のため3番目までの固有値を選択し、それぞれを第一～第三変換と呼ぶこととする。これは、低感度変換を感度の低い順に並べたものと言うことができる。表5.3.3-1に、例としてグループ1における低感度変換をまとめる。

表5.3.3-1(1) 各グループにおける低感度変換 (グループ1)

	第一変換	第二変換	第三変換
内側楕円の中心時刻 τ_0^1	0.016	-0.073	-0.21
内側楕円の角度 θ^1	-0.15	0.070	0.53
内側楕円の第1軸長さ a^1	0.72	-0.62	0.19
内側楕円の第2軸長さ b^1	0.60	0.75	0.13
外側楕円の中心時刻 τ_0^2	-0.11	-0.022	-0.33
外側楕円の角度 θ^2	0.15	0.20	-0.43
外側楕円の第1軸長さ a^2	0.084	-0.018	0.22
外側楕円の第2軸長さ b^2	-0.24	0.094	0.52

図5.3.3-2から6は、起点となる各グループの平均的シャドウモデルを中心として3つの低感度変換をそれぞれ摂動として与えることにより作成したシャドウモデル群である。より具体的に言えば、平均的シャドウモデルを通過する低感度変換軸に全てのシャドウモデルを射影し、射影された範囲内から各6つのシャドウモデルを代表点としてサンプリングした（下図）。図5.3.3-2から6において明らかなように、各グループに対する低感度変換によって図形的な特徴、従って、これらと対応する現象論的な特徴が保存されていることがわかる。これらの特徴は、各グループの大多数が有している共通のものであり、各グループに固有のものと考えることが出来る。表5.3.3-2に、各グループの特徴をまとめる。

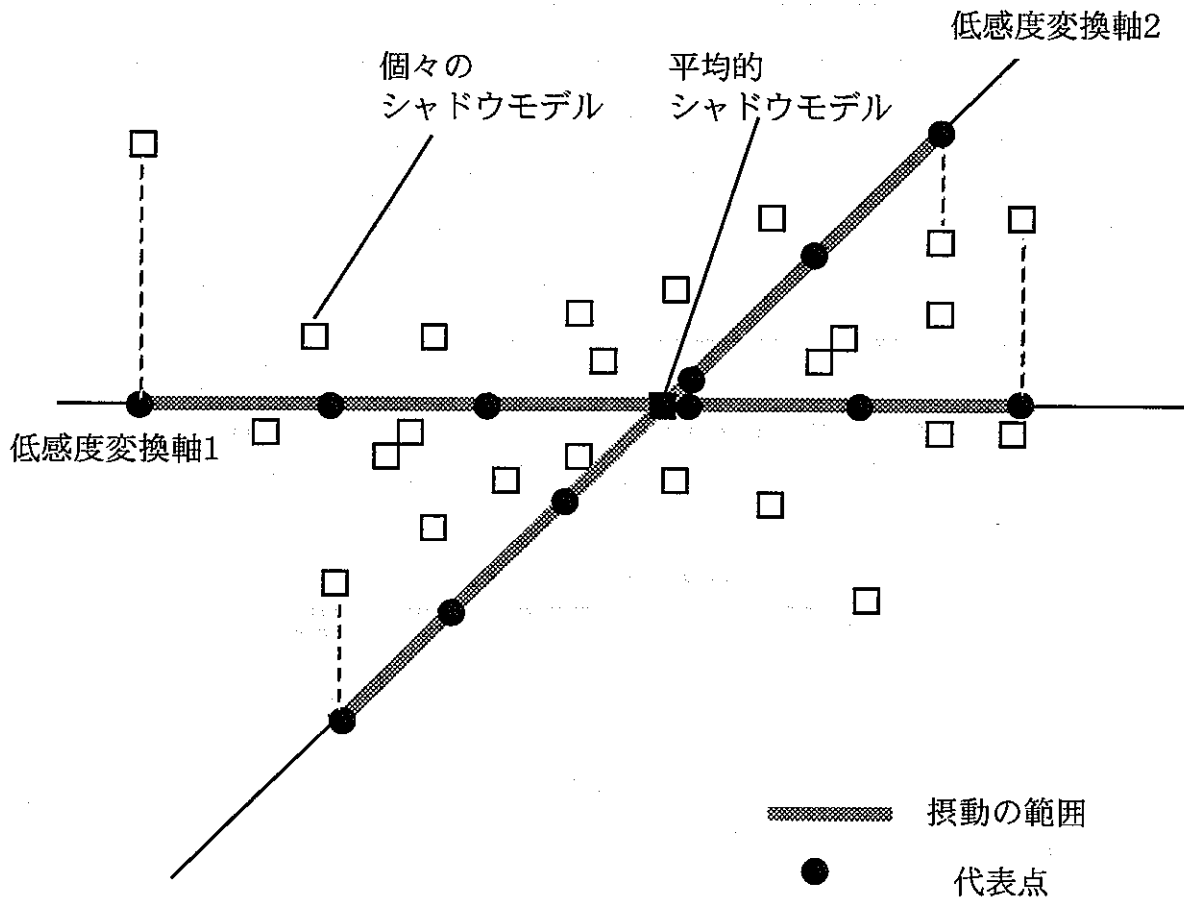


表5.3.3-2 各グループにおけるシャドウモデルで保存されている
図形的及び現象論的特徴

	低感度変換で保存されている図形的な特徴	低感度変換で保存されている現象論的な特徴
グループ1	第一軸の長い内側楕円が、最終グリッドで第二軸の長い外側楕円に交わる。	酸化性雰囲気等の地球化学フロントが内側から広がるにつれて核種の沈殿が外側に移行し、ゆるみ域内で外側からの同様のフロントに出会い溶解、さらに移流により速やかに散逸する。
グループ2	第一軸の長い内側楕円が、最終グリッドよりも手前で第二軸の長い外側楕円に交わる。	酸化性雰囲気等の地球化学フロントが内側から広がるにつれて核種の沈殿が外側に移行し、人工バリア内で外側からの同様のフロントに出会い溶解、拡散により緩やかに散逸する。
グループ3	r軸全体が内側楕円あるいは第二軸によって覆われる。	酸化性雰囲気等の極端な地球化学的条件がガラス浸出期間にニアフィールド全域に及び、このため、溶解度限界は全く作用しない。
グループ4	第一軸の長い内側楕円が、最終グリッドよりも手前で第二軸の長い外側楕円に交わる。	酸化性雰囲気等の地球化学フロントが内側から広がるにつれて核種の沈殿が外側に移行し、人工バリア内で外側からの同様のフロントに出会い溶解、拡散により緩やかに散逸する。
グループ5	第一軸の長い内側楕円が最終グリッド直前までいたるが、その後最終グリッドに外側楕円は存在しない。	核種の沈殿がゆるみ域にまで達するが、その後環境条件が変化しないために、ここで溶解度限界が機能し続ける。
グループ6	内側楕円が最も外側に至る点は外側楕円が最も内側に至る点よりも更に内側にある。	核種の沈殿が人工バリア内部にとどまり、その後環境条件が変化しないために、ここで溶解度限界が機能し続ける。
グループ7	内側楕円が最も外側に至る点は外側楕円が最も内側に至る点よりも更に内側にある。	核種の沈殿が人工バリア内部にとどまり、その後環境条件が変化しないために、ここで溶解度限界が機能し続ける。

グループ2と4、及びグループ6と7との間には質的な差異はなく、最大核種放出率は、沈殿到達位置や再溶解時刻といった定量的な条件に依存して連続的に推移しているものと考えられる。また、グループ5では平均自体が他のシャドウモデルと質的に異なるものとなっており、SVDの効率が最も低い（第一低感度変換に沿った摂動でも明らかに他のグループ（グループ1）の振るまいが生じている）。これは、内側楕円のみが存在しているシャドウモデルで、外側楕円は内側楕円と同時期に存在しているにも係わらずゆるみ域の解析グリッド中央に到達していないためにその存在が無視されていることと関連するものと思われる。

上記の各グループに共通した特徴の分析結果に基づけば、特に、グループ3、グループ5及びグループ7に含まれる頻度分布の3つのピークは、それぞれ溶解度限界が機能せずガラス浸出率律速となっているケース、ゆるみ域において溶解度限界が働いているケース及び溶解度限界が機能しているケースとにそれぞれ対応するものと推定される。そこで、これらの単純なケースを設定して別途計算を実施した。結果として算出されたNp-237最大核種放出率（対数）は、それぞれ、約-4、-7及び-9.6であり各ピークにほぼ正確に該当している。これは、上表の各グループの特徴付けを裏付けるものとなっている。

これまでの殆どの性能評価事例において、環境条件変化については、全域が酸化性である場合と全域が還元性である場合という両極端のみを考えるという設定が採られてきた。しかしながら、この様な手順により真に最大の影響を把握できるのは、モデルの応答が線形で単調な場合のみである。実際、今回の解析結果は、全域が酸化性等の極端な地球化学条件となり溶解度限界が機能しないという場合以上に高い核種放出率をもたらす得るシナリオが想定されることを物語っている。

感度解析手法という観点から言えば、SVDによるパターン認識は専門家の主観的な判断を介することなくグループの分類とその固有の特性を明確化し得るという意味で今後の研究において強力なツールとして活用できるものと考えられる。特に、種々のシャドウモデルを組み合わせるにより専門家が直接解釈することが困難なほど複雑となった入力に対する感度を解明する上では、この手法の重要性がますますものと考えられる。

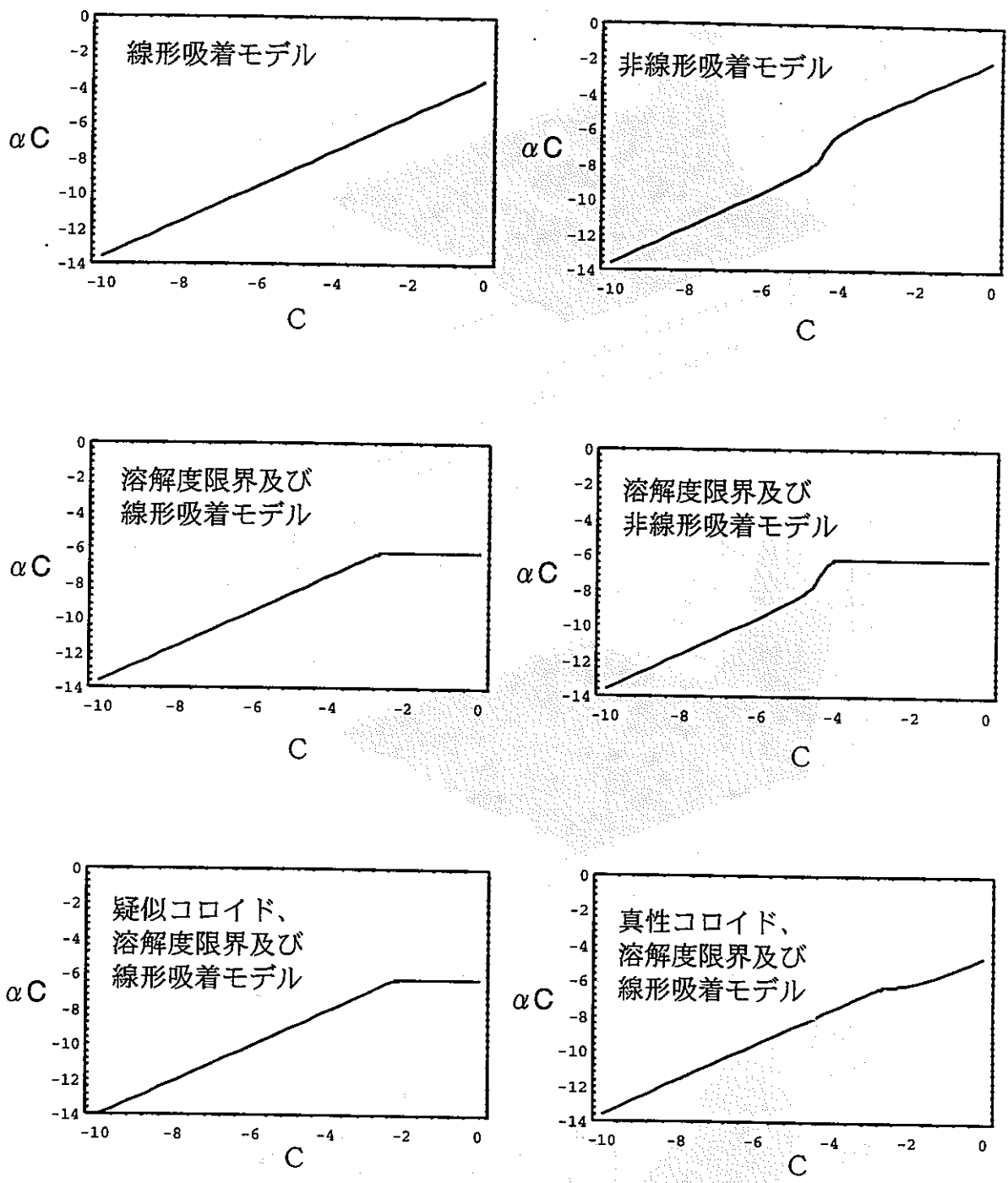
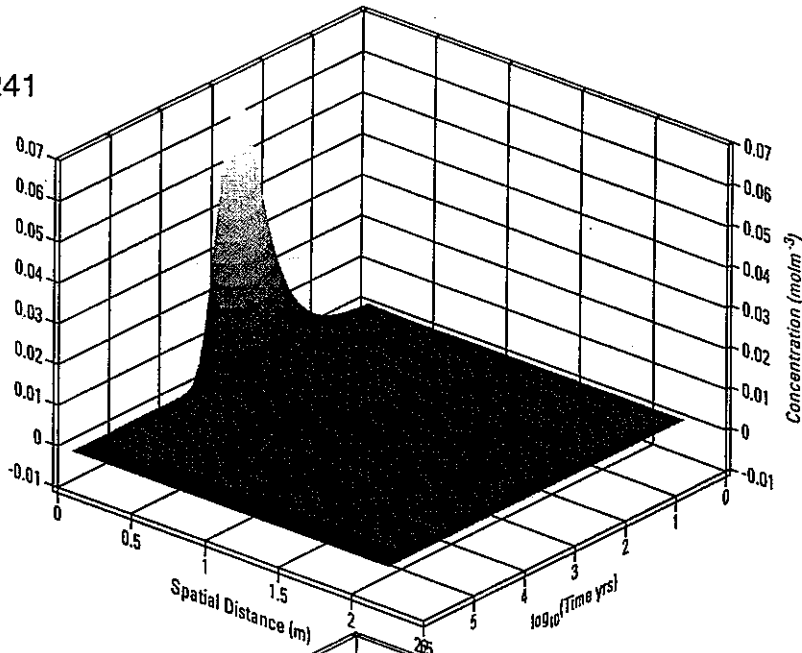
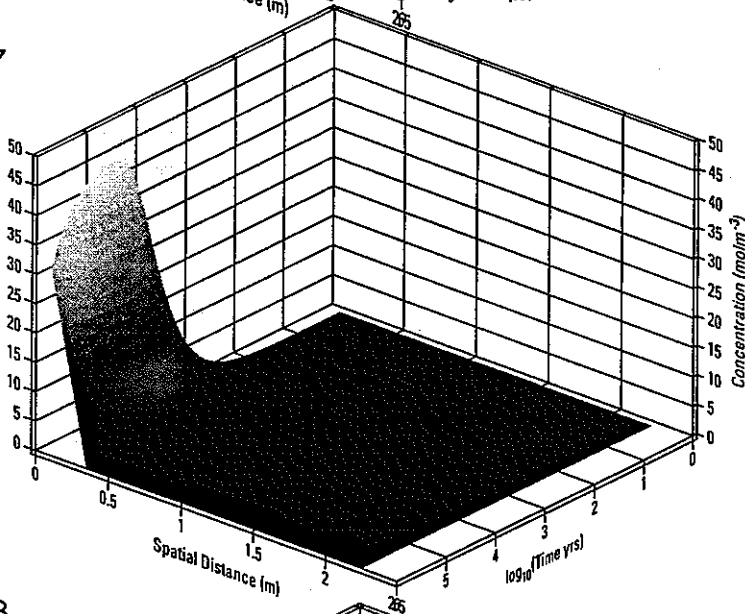


図 5.2.1-1 既知のモデルに対応する αC の例

Am-241



Np-237



U-233

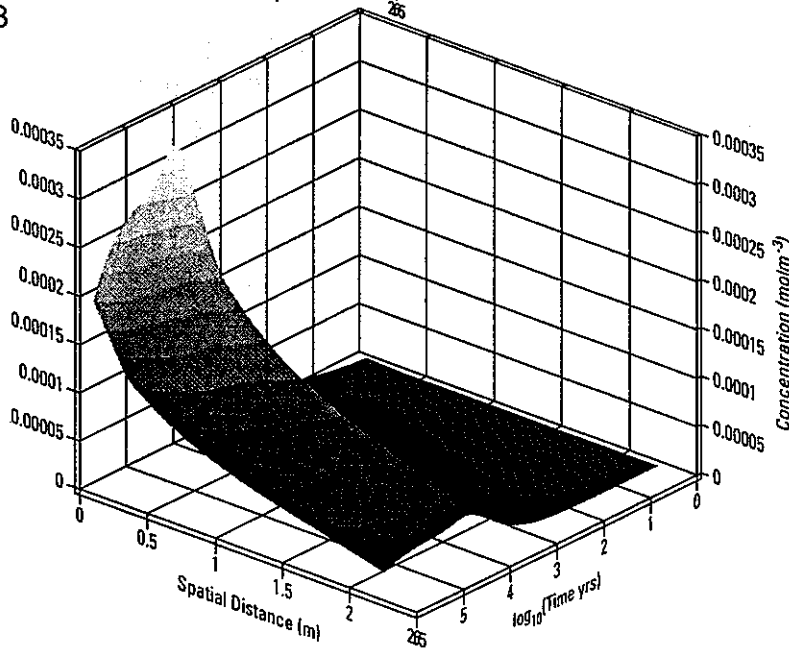


図5.2.2-1 人工バリア内核種濃度分布 (Case No.100)

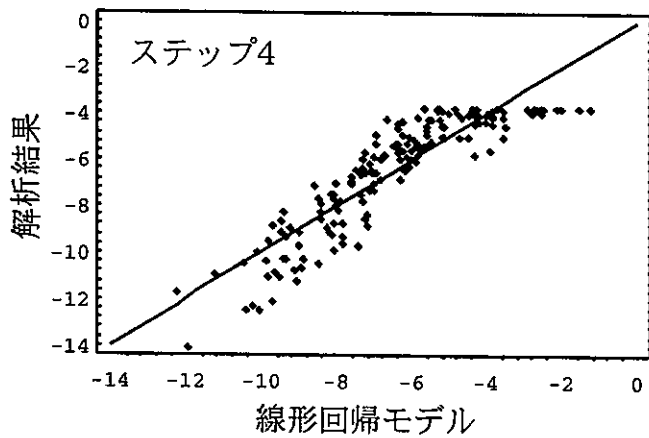
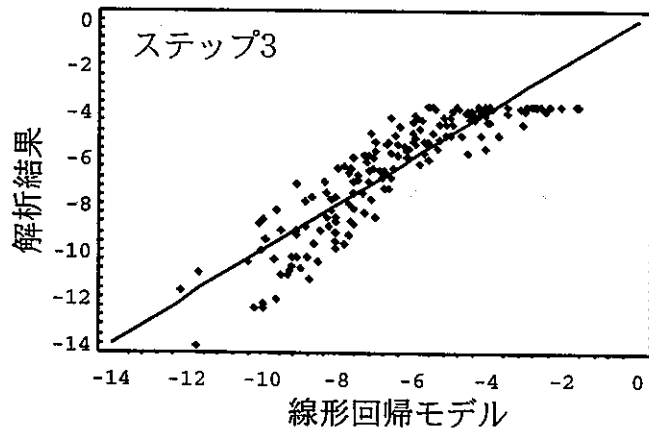
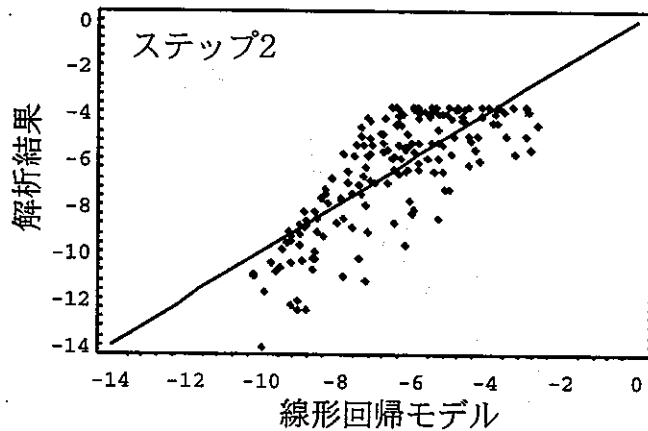
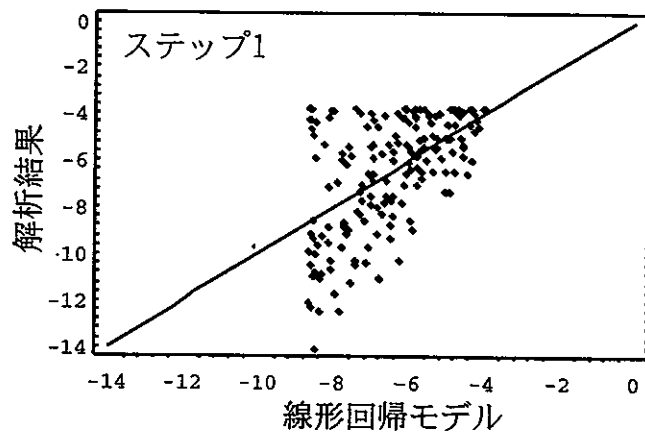


図5.2.3-1 Np-237の最大放出率に対するステップワイスな線形回帰（スキャッタープロット）

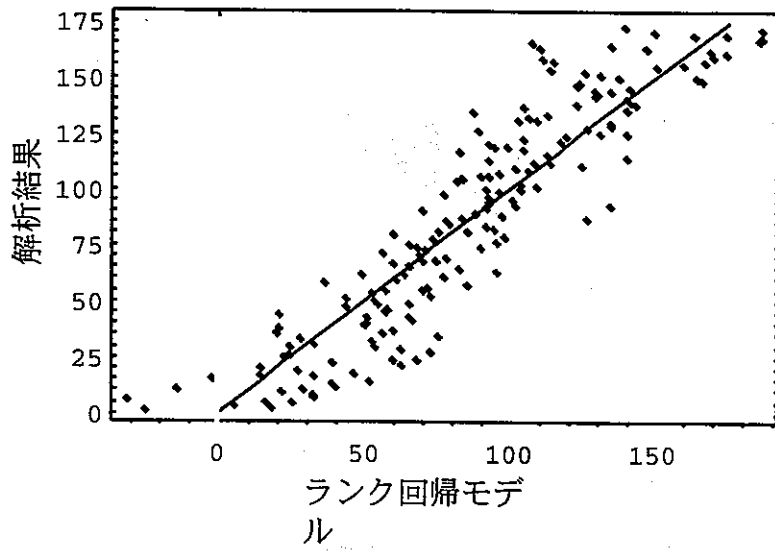
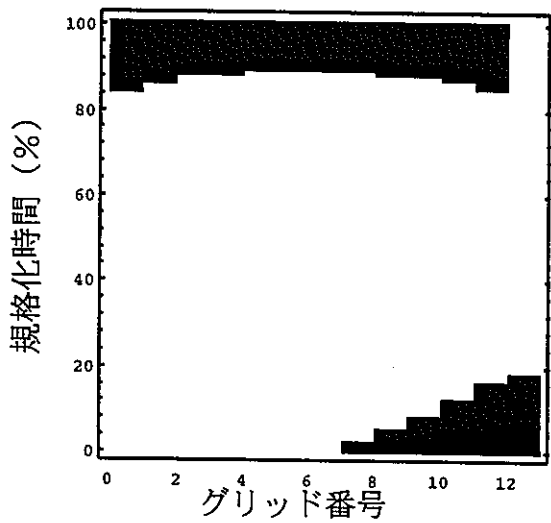
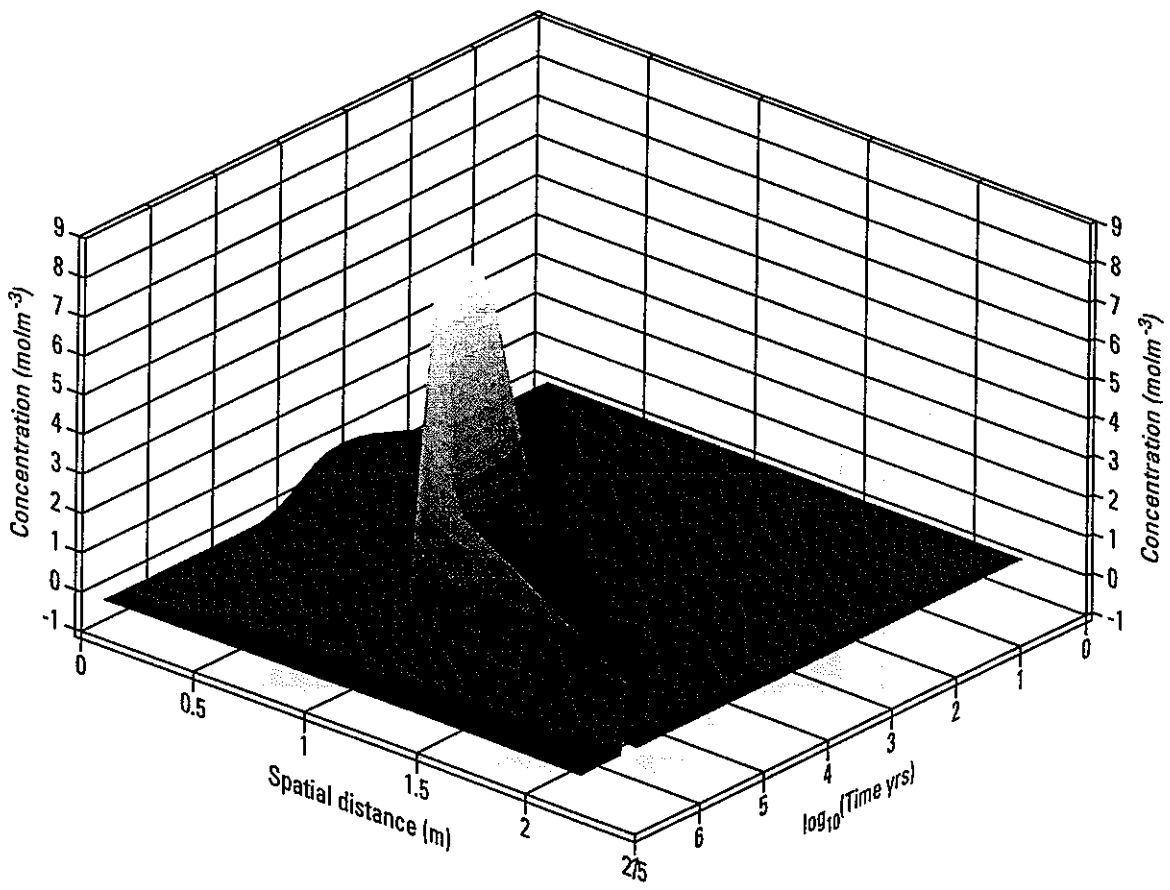


図5.2.3- 2 Np-237最大放出率についてのランク回帰分析の結果
(4ステップ目)



グリッド1; ガラス固化体
 グリッド2; オーバーパック
 グリッド3~12; 緩衝材
 グリッド13; ゆるみ域

図5.3.2- 1 環境条件変化についてのシャドウモデル及び対応する計算結果 (Np-237 全濃度分布の時間変化) の例

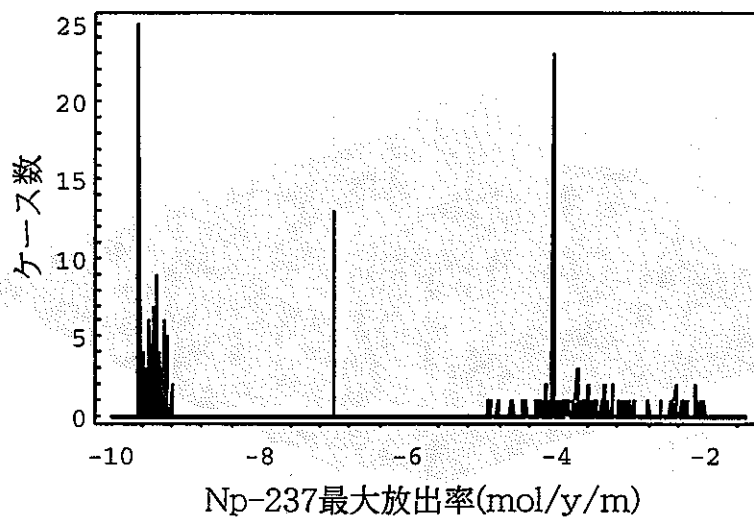
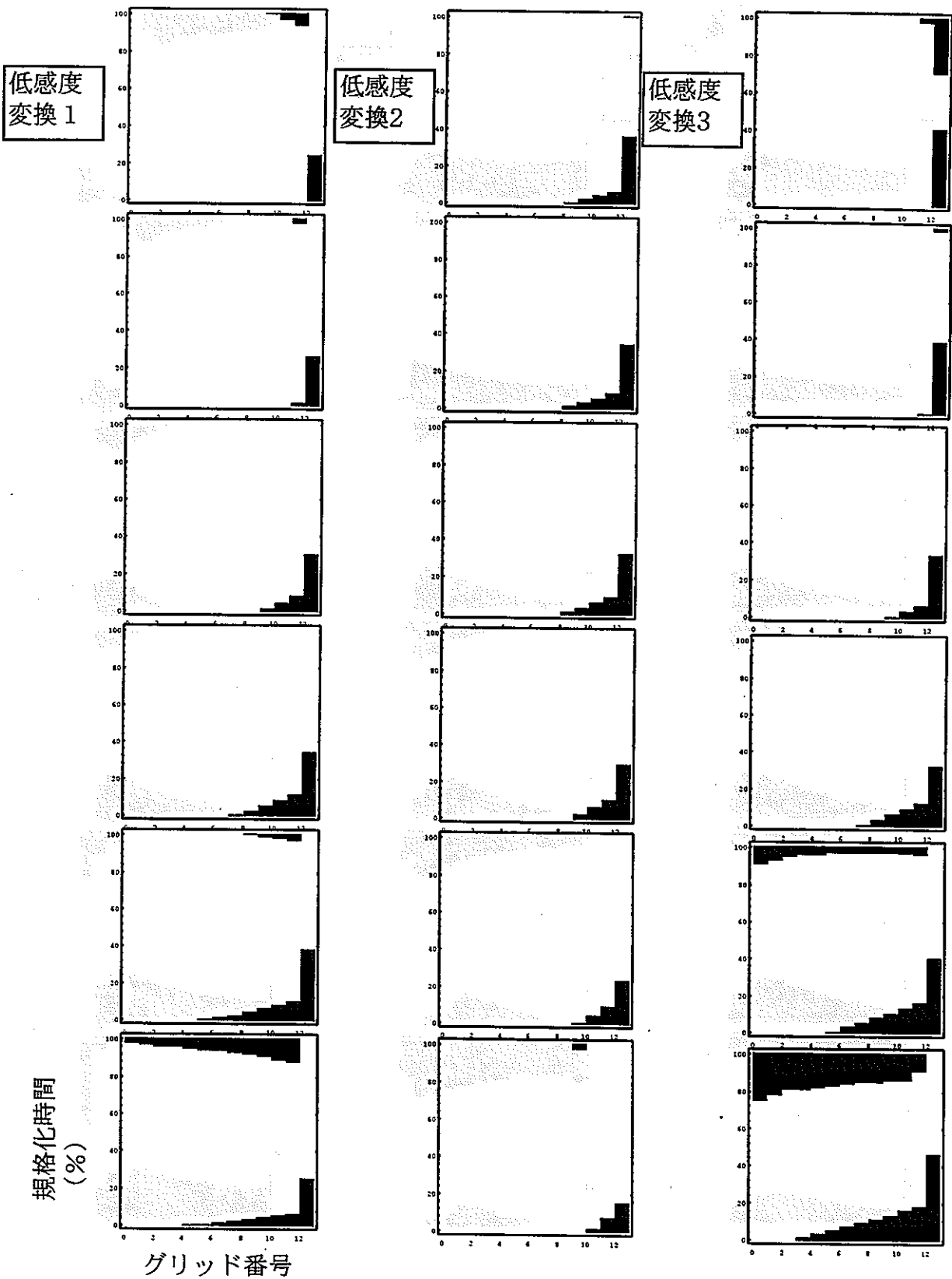
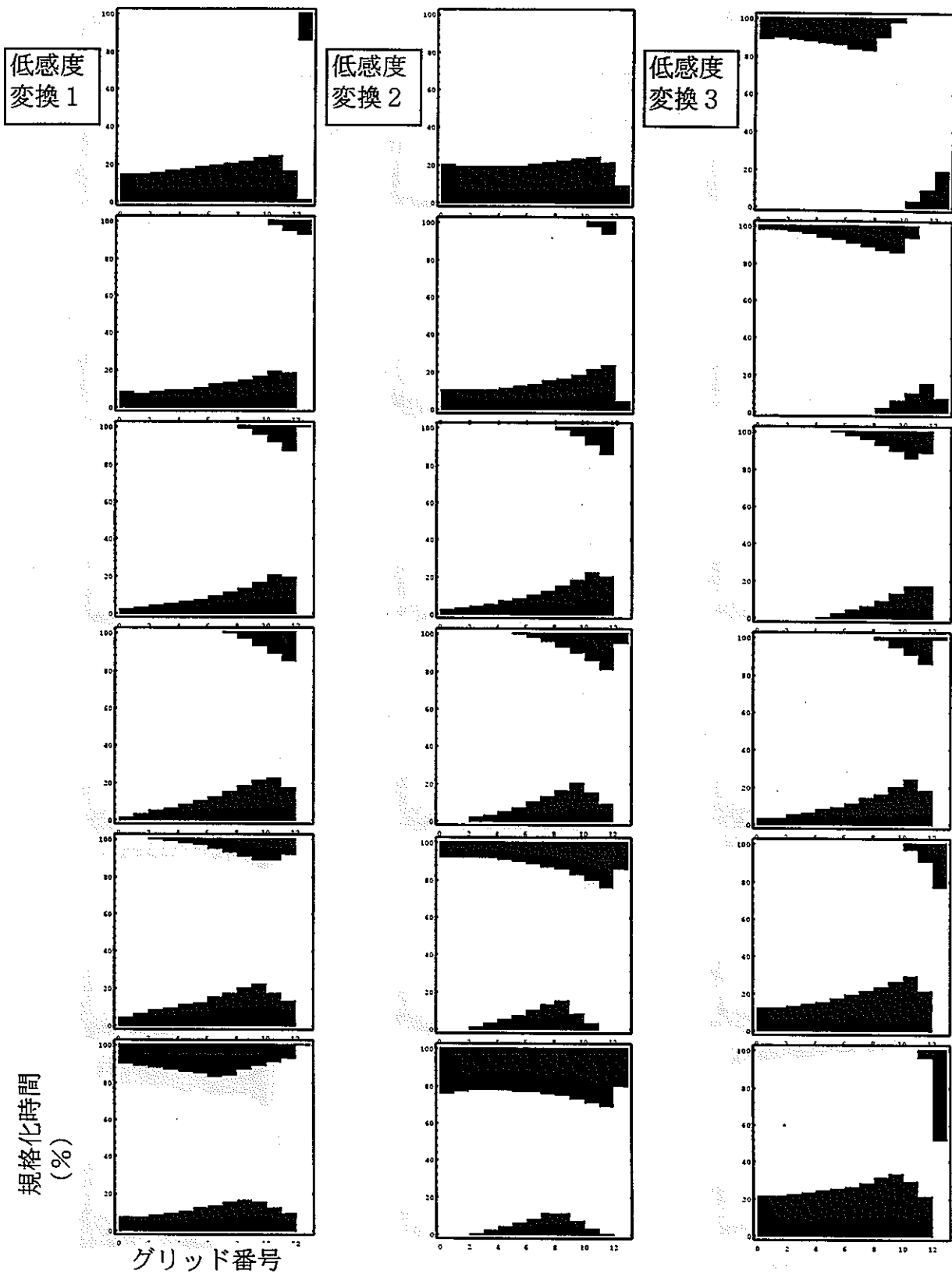


図5.3.3- 1 Np-237 最大放出率の頻度分布



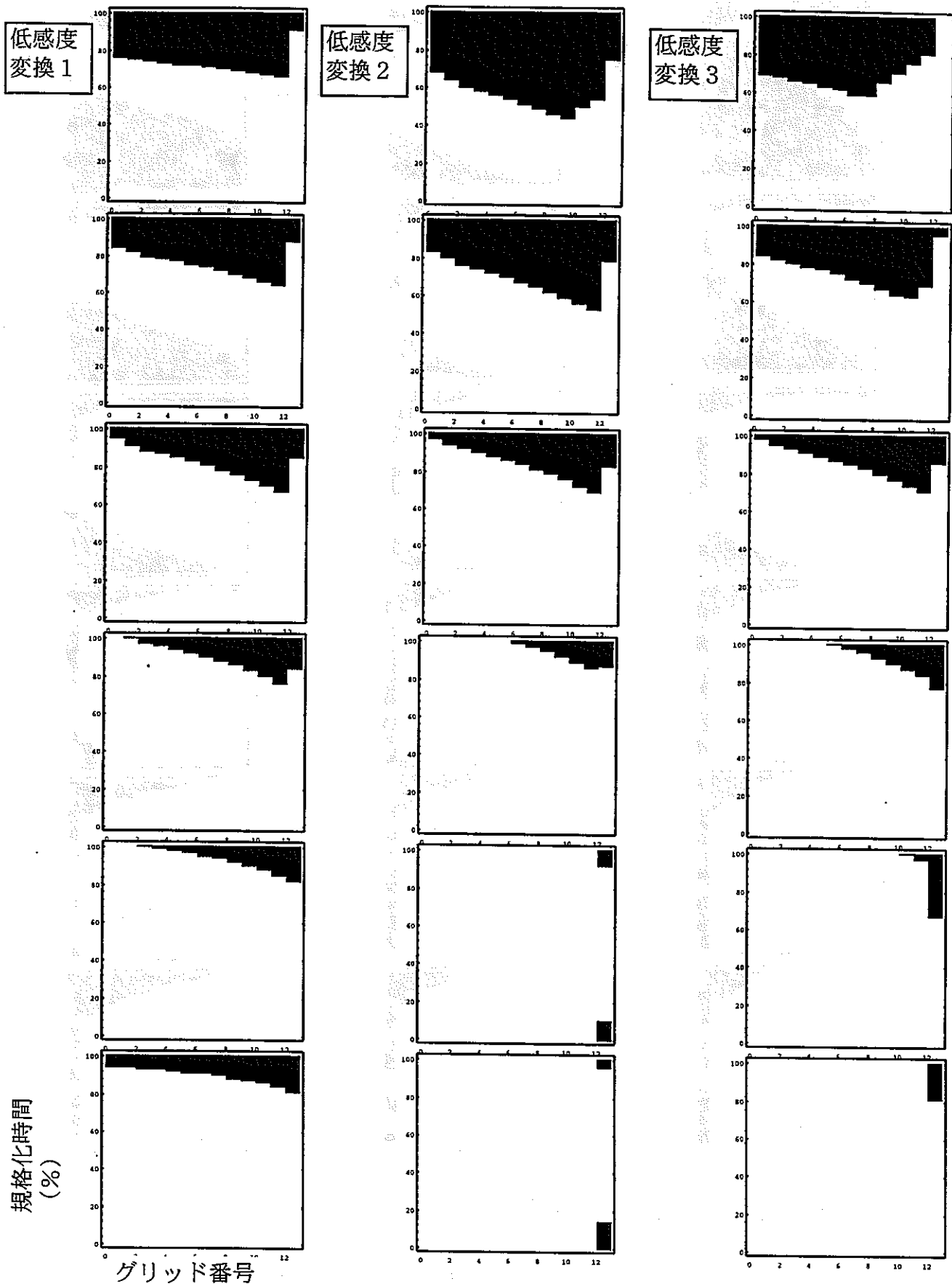
グリッド1 ; ガラス固化体, グリッド2 ; オーバーパック, グリッド3-12 ; 緩衝材, グリッド13 ; ゆるみ域

図5.3.3- 2 グループ1に属するシャドウモデルの共通の特徴



グリッド1 ; ガラス固化体, グリッド2 ; オーバーバック, グリッド3-12 ; 緩衝材, グリッド13 ; ゆるみ域

図5.3.3- 3 グループ2に属するシャドウモデルの共通の特徴



グリッド 1 ; ガラス固化体, グリッド 2 ; オーバーパック, グリッド 3-12 ; 緩衝材, グリッド 13 ; ゆるみ域

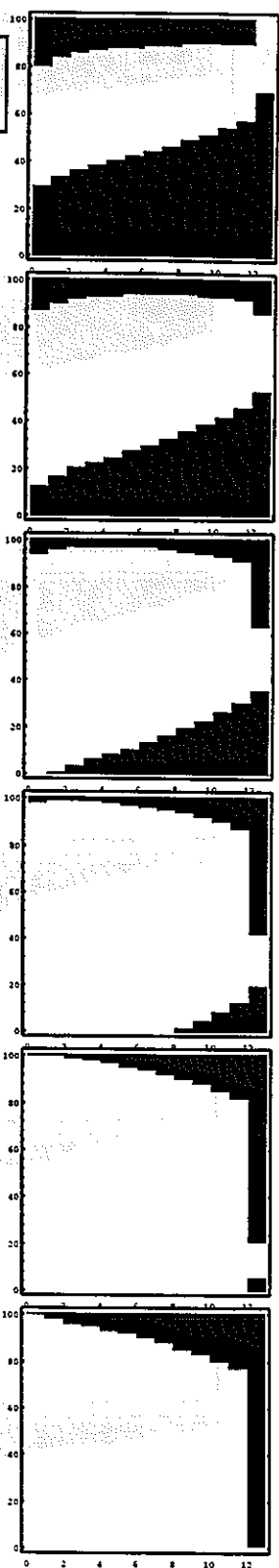
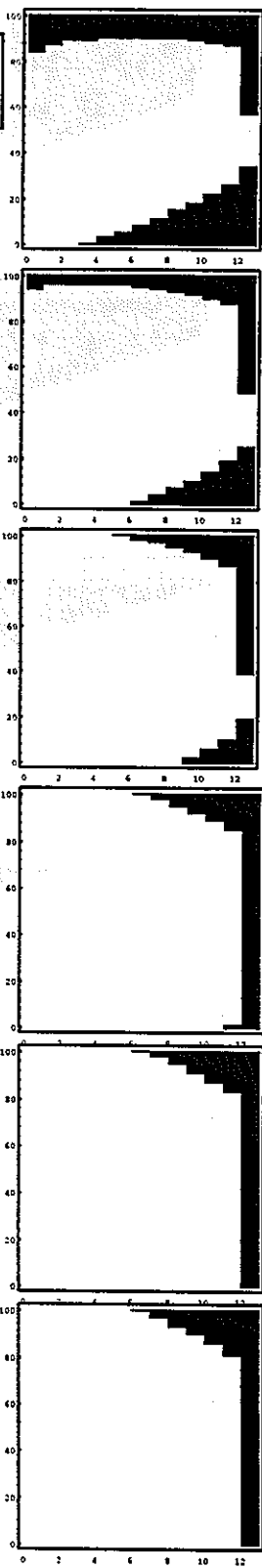
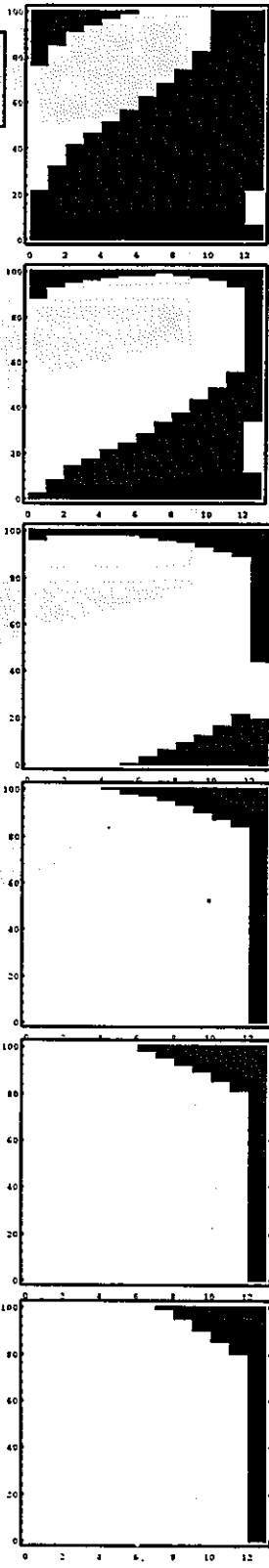
図5.3.3-4 グループ3に属するシャドウモデルの共通の特徴

低感度
変換1

低感度
変換2

低感度
変換3

規格化時間
(%)

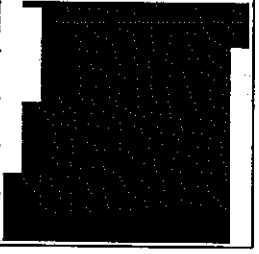
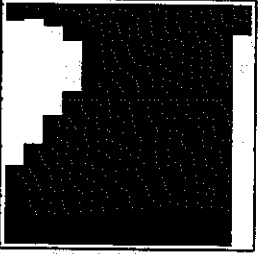
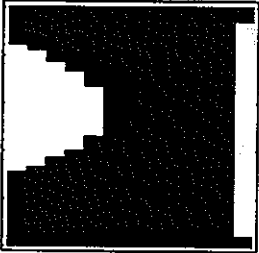
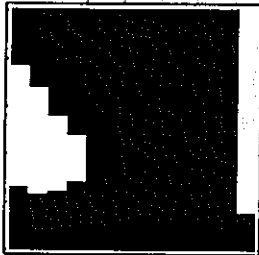
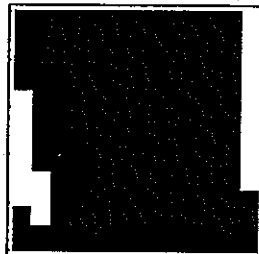
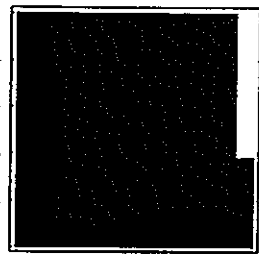


グリッド番号

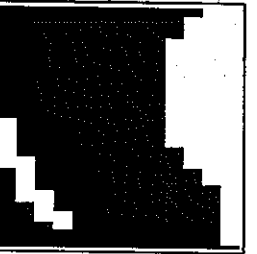
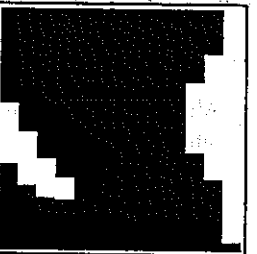
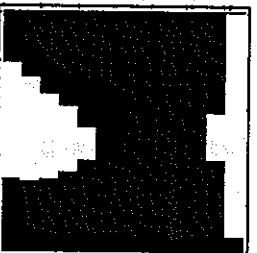
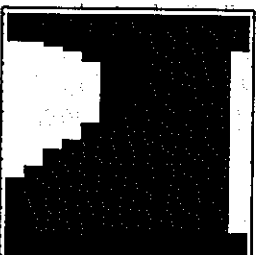
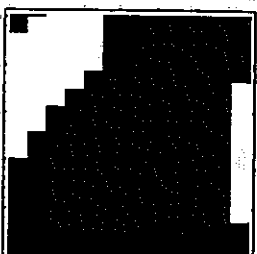
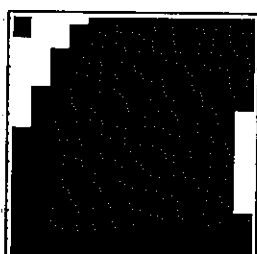
グリッド1 ; ガラス固化体, グリッド2 ; オーバーバック, グリッド3-12 ; 緩衝材, グリッド13 ; ゆるみ域

図5.3.3-5 グループ5に属するシャドウモデルの共通の特徴

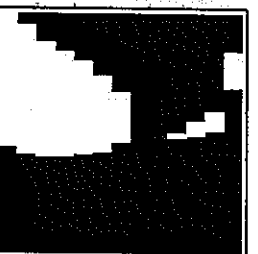
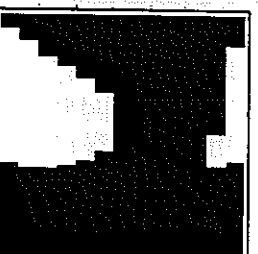
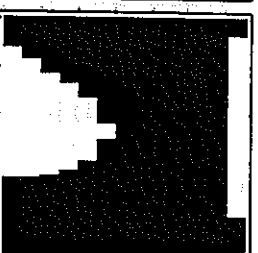
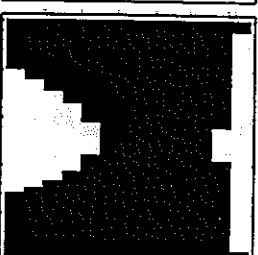
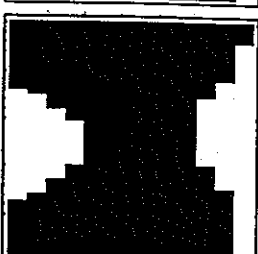
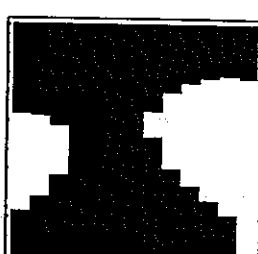
低感度
変換1



低感度
変換2



低感度
変換3



規格化時間
(%)

グリッド番号

グリッド1；ガラス固化体, グリッド2；オーバーハック, グリッド3-12；緩衝材, グリッド13；ゆるみ域

図5.3.3-6 グループ7に属するシャドウモデルの共通の特徴

6. まとめ及び今後の課題

本年度の研究として、次のような項目を実施した。

1. SPADE上の1次元プロトタイプモデルを拡張し、複数崩壊系列の問題を扱えるようにすること
2. 従来の不確実性解析手法に対する文献調査を行い、これらの限界及び代替的な手法を用いた打開策を明らかにすること
3. 動的解析に適した体系的な感度解析の手法を明確化すること

各項目について得られた主要な成果は次の通りである。

1. prespf. file を用いて SPADE の問題を設定するという方法を採用することにより、任意メンバーの複数崩壊系列と複数の移行形態さらにはこれらの間の瞬時平衡あるいは速度論的な遷移を考慮した現象等の複雑な問題を効率的かつ体系的に設定することが可能となった。
2. 従来の不確実性解析手法の主な問題点は、
 - i) 設定されたケースの「尤らしさ」に対する主観的な判断に確率論を適用することの不適切さ（これは「リスク希釈」と呼ばれる効果をもたらす）
 - ii) 異なるシナリオや概念モデルを、数学的な枠組みのないまま離散的な対象として取り扱うことにある。これらに対しては、上記の動的解析の手法を確率論に代わるものとしてファジー理論と組み合わせることによって解決していく見込みがある。
3. 従来の感度解析手法は、動的解析を先導しあるいはまた結果を解釈するという目標を必ずしも常に満足し得るものではない。特に、この問題点はモデルの応答が非線形あるいは非単調である場合に顕著なものとなる。この様な場合には、本研究で新たに開発した SVD (Singular Value Decomposition) によるパターン認識の手法を用いて影響の高いケース群の共通的な特徴を客観的に明らかにしていくことが有効である。

本年度の解析は手法の開発と適用性の確認を目的としたものであり、解析そのものは、個々のモデルの詳しさ及び網羅したシナリオ、モデル及びパラメータの変動可能性の大きさのいずれを見ても予備的な位置づけにあるものと言うことができる。この様な観点からは、今後の研究課題として以下の二つの方向性を追求していくことが重要と考えられる。

- ・ニアフィールド母岩の不均質性と時間的な変遷による影響を採り入れた多次元の核種移行解析手法の開発（詳しい解析）
- ・シナリオ、概念モデル及びパラメータの変動可能性と不確実性とを包含するシャドウモデル空間についての網羅的な不確実性解析の実施（幅広い解析）

一見するとこれら二つの方向性をかけ合わせると、全体として必要となる計算時間は無限に発散するようにも思える。しかしながら、「詳しい解析」の設定は物理的に不合理な条件の組み合わせを顕著なものとするにより unnecessary ケースを減少させ、逆に幅広い

可能性についての解析により結果の幅をおさえるという方向性は極端に詳しい解析を不要とする、という様に相互に補完的な進め方も可能である。今後の研究開発に於いては、この様な「詳しさ」と「幅広さ」の最適な組み合わせを明確にすることが、第二次とりまとめに向けての成否の鍵を握るものと思われる。