

# 地層処分システム性能評価のための 概括的感度解析手法の高度化（Ⅱ）

（動力炉・核燃料開発事業団 研究委託内容報告書）

技術資料		
開示区分	レポート No.	受領日
Z	J1281 98-005	1998.10.6
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		

1998年2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、転記、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。

〒107-0052 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ための概括的感度解析手法の高度化(II)

小山田潔\*, 池田孝夫\*

## 要旨

ニアフィールドは、地層処分システム中で最もコントロールしやすく、従って、最も不確実性の少ない部分であると考えられている。しかしながら、人工バリアシステムからの核種放出率の予測には、人工バリアと母岩との間の力学的、熱的、化学的あるいは水理学的な相互作用によって駆られるニアフィールド環境の長期的変遷のために、未だ無視し得ないレベルの不確実性が含まれているのが現実である。

ニアフィールド条件の物理的あるいは化学的な変遷が核種移行挙動に及ぼし得る影響のうち評価の対象とするものは、屢々、専門家グループにおける議論によって絞り込まれることとなる。また、引き続いて用いられる核種移行解析モデルは、バリア内の状態に関して更なる条件（バリア材の健全性、準定常状態、あるいは条件のステップ状の変化、等）を固定し、対称性、瞬時平衡、線形の質量配分、等の仮定を導入することとなる。この様なアプローチは、将来生ずるであろう諸プロセスについての我々の理解は所詮完全なものではなく、また、計算時間を現実的な範囲に収めるためにもモデルは極力簡単なものでなくては成らないと言う認識に基づくものである。

こうして、上述した種々の簡単化を正当化するために、性能評価に「保守性」という概念が持ち込まれることとなる。しかしながら、種々の事象や過程の時間及び空間依存性や、これらの間の時系列的な組み合わせといった複雑さを考えれば、ある特定の現象を無視することが保守的か否かという点についての専門家の判断の妥当性には疑問が投げかけられることとなる。本研究の主眼とするところは、通常シナリオ作成や解析ケース設定の手順とは全く逆の新たな手法（以下、探索型システム性能評価と呼ぶ）を従来の手法に対して補完的に用いることにより、簡単化された性能評価モデルやこれらに関する解析ケースの設定を正当化することにある。

探索型システム性能評価の雛形となる手法としては、環境シミュレーション法が挙げられる。この手法の重要な特徴の一つは、入力パラメータの値を統計的に変動させることにより、対象とするシステムの将来挙動の「あり得べき」姿を定量的かつ統計的に多数作り出すことが可能であるという点である。しか

し、これまでの環境シミュレーション法では特定の数学モデルが用いられていたために、この方法で網羅できる挙動の範囲には自ずと限界があり、この点が大きな問題点として認識されている。そこで、探索型システム性能評価では、この問題点を克服するために、シャドウモデルという極めて汎用性及び柔軟性に富んだツールを用いることにより未だ専門家によって完全には否定されていない領域を含んだ全てのパラメータ/モデル空間を概括的に調べることにする。

昨 1996 年度には、以上の思想に則り、人工バリア中核種移行シャドウモデルの開発を行った。このモデルの核種移行モデルとしての特徴は、以下の種々の現象や特徴を表現することが可能な柔軟かつ汎用的な定式化にある。

- a) 液相中の分種化、吸着、あるいはコロイド生成の様な速い（従って瞬時平衡の成立する）反応による核種質量配分
- b) 溶解/沈澱、鉱物化、あるいは結晶化の様な遅い（従って速度論的な取り扱いの必要な）反応による核種質量配分
- c) 種々の化学形態毎に異なる拡散係数の影響
- d) 人工バリア内のギャップの生成と閉塞、並びにこのギャップの中での種々の化学形態を採る核種の移行
- e) 人工バリア内外の地下水流れ及びその時間的変化が核種移行に及ぼす影響
- f) 人工バリア内外の地球化学的な変遷（pH, Eh, 温度等の条件の時間的変化）が核種の質量配分に及ぼす影響
- g) 坑道崩落やオーバーパック沈下の様な人工バリアの移動や変形が核種移行に及ぼす影響

人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いて多数の統計的な計算が行われ、この結果として人工バリアシステム中の幅広い核種移行挙動が具現化された。また、これらの結果に対する主成分分析と感度分析は、リファレンスケース近傍での感度構造についての既存の知識をより客観的かつ定量的な方法で再構築することに成功した。さらに、核種放出率の特に高い部分集合についての統計的な分析により、リファレンスケースよりも有意に高い核種放出率に至るよう

なクリティカルな核種挙動の組み合わせを同定することができた。この結果は、今後のシナリオ解析や評価ケースの設定に於いて、これらのクリティカルな核種挙動の組み合わせが具体的にどの様な現象群によって如何にして引き起こされ得るものであり、その生起はどの程度確からしいものであるのかを詳しく調べていくことの重要性を示唆するものである。また、この様な過程を経ることにより、探索型システム性能評価が、将来の地層処分システムの振る舞いに関する各専門家の理解を導きあるいは支援する、という意味に於いて従来の性能評価手法を補完するものとして有効であることが明らかとなった。

以上の成果を踏まえ、本年度の研究では以下の三つの課題に取り組むこととする。

- (1) 人工バリア中核種移行シャドウモデル及びこれを用いた感度解析の効率を改善した上で、より密度の高い統計的解析を行うことにより、昨年度得られた知見を確立すること。これは、最も放出率の高いケース及び動燃事業団殿によって定義されたりファレンスケース周辺の第二次局所サンプリングをも含むものである。
- (2) 動燃事業団殿によって指定されたりファレンスケース周辺の代替的ケース群に対して、人工バリア中核種移行シャドウモデルを決定論的に用いた解析を実施すること。さらに、これらの解析結果と事業団殿既所有のコードによる解析結果との比較を行うこと。
- (3) 探索型システム性能評価の方法論を拡張し、個々のレグが二重空隙媒体である様な時間に依存したチャンネルネットワークモデルとして表現される母岩中での核種移行に関するシャドウモデルを開発すること。

---

本報告書は、日揮株式会社が動力炉・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:090D0269

事業団担当者部課室および担当者:東海事業所 環境技術開発部 処分システム解析室 石黒 勝彦

\*日揮株式会社 第2事業本部 第4プロジェクト事業部 プロジェクトマネジメント部

An Exploratory Approach for Global Sensitivity Analysis on Long-Term  
Performance of the Geological Disposal System (II)

shi Oyamada\*, Takao Ikeda\*

Abstract

The near-field represents the least speculative and best controlled part of the geological disposal system for the high level radioactive waste. However, prediction of the behaviour of radioactive substances migrating from the waste through the EBS is subject to a considerable amount of uncertainty due to the mechanical, thermal, chemical and hydrological perturbations to and from the host rock that drive the near-field to evolve into one of a range of possible futures. Impacts of evolving physical and chemical conditions in the near field on migration of radionuclides are often dealt with by filtered discussions and audits by expert groups. The source term models subsequently employed further fix the conditions within barriers (e.g., the integrity of the barrier materials, quasi-steady-state conditions, or step changes) and incorporate further assumptions (radial symmetry, instantaneous equilibrium, linear partition of nuclide mass, and so forth). This approach is motivated by the recognition that detailed knowledge of the individual processes that will take place in future is generally lacking and that it is necessary to keep the model simple enough to allow computational efficiency. Thus "conservatism" is employed to justify such simplifications. However, the complexity of the problem, i.e., spatio-temporal dependence of events and coupled processes, their timing or sequencing, calls into question the validity of the experts' judgment concerning whether ignoring certain features and/or processes is in fact conservative. In order to underpin and defend the definition of calculation cases and simplified PA models, we discuss a complementary approach which reverses the standard procedure of scenario development and case definition described above.

A methodology which is prototypical to the Scenario Exploration Method is called the Environmental Simulation Method. An important feature of this methodology is in its capability of producing large number of quantitative realizations of the future system behaviour by varying the input parameter values in a stochastic manner. An obvious limitation of the existing Environmental Simulation Method is the constraint in the coverage due to

use of specific mathematical models. To overcome this problem, we design a set of extremely flexible mathematical tools called 'Shadow Models' for the particular purpose of 'scanning' the whole parameter/model space which has not yet been rejected by the experts rather than scrutinizing it.

In the financial year 1996, we developed the Shadow Source Term Model (SSTM) which solves nuclide transport equations within the engineered barrier system (EBS). The key feature of the SSTM as a source term model is in its very generic formulation and flexibility to model wide spectrum of transport behaviours such as

- a) the partitioning of the nuclide mass due to fast (instantaneous) reactions such as aqueous speciation, sorption, and colloid formation;
- b) the partitioning of the nuclide mass due to slow (kinetic) reactions such as dissolution/precipitation, mineralisation, and crystallization;
- c) the variation in values for diffusivity of different chemical forms of the nuclides;
- d) the formation, and sealing, of the possible gaps in the EBS and the advection of nuclides in various chemical forms with possibly different mobilities within the gaps;
- e) the effects of time-dependent flow around and inside the EBS on nuclide migration;
- f) the effects of geochemical evolution (changes in pH, Eh, temperature, etc.) in and around the EBS on chemical partitioning of nuclide mass;
- g) the effects of movement/deformation of the EBS (such as cave-in, canister sinking, etc.) on nuclide migration.

The SSTM was used extensively to generate an ensemble of stochastic realizations of the possible nuclide transport behaviour within the EBS. The principal component analysis on the ensemble and the analysis of the contribution of input parameter variations to the output variations reconstructed the existing knowledge concerning the sensitivity structure for the reference cases in a more formal and quantitative way. In addition, an analysis on the subset of realizations corresponding to high peak release rate revealed a critical combination and sequence of events that could potentially lead to a significantly higher release rate than that of the reference cases. The result suggests the importance of considering what type of actual phenomena can cause this sequence of events and how; whether it is physically possible or not; and how likely they are, in the process of scenario development and safety case definition. This, in turn, encourages the use of

our methodology as a complementary approach to the more standard PA procedure guiding and supporting the experts' understanding of the future system behaviour.

In the current financial year, the objective of the study is three-fold:

- (1) To conduct a more thorough stochastic calculations using SSTM with improved efficiency and to support the results obtained in the last financial year. This includes a set of (repeated) importance sampling around high release cases and the 'reference' case defined by PNC followed by more detailed local sensitivity analysis;
- (2) To use the SSTM in a deterministic mode and produce a set of calculations for a number of perturbations around the 'reference' case provided by PNC;
- (3) To extend the methodology further and develop a shadow model for nuclide transport through near-field host rock which is represented as a time-dependent channel network with dual porosity.

---

**Work performed by JGC Corporation under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation.**  
**PNC Liaison: Isolation System Analysis Section, Waste Technology Development Division, Tokai Works, Katsuhiko ISHIGURO**  
**\*Project Management Department, JGC Corporation**

## 目次

1.	はじめに	1
2.	探索型システム性能評価の方法論	4
2.1	手順	5
2.2	シャドウモデルに関する基本的概念	10
2.2.1	消極的モデリングの考え方	10
2.2.2	シャドウモデルの網羅性	11
3.	統計的解析及び感度解析の効率向上に関する検討	13
3.1	並列コンピュータの利用	13
3.2	全域的サンプリング数の充足性の評価	14
3.3	重要性に応じた局部的サンプリング	17
3.4	パラメータ数の低減	17
3.5	本年度の統計的解析の手順	18
4.	人工バリア中核種移行に関する統計的解析及び感度解析	20
4.1	解析上の前提	20
4.1.1	地層処分システム	20
4.1.2	前提条件	21
4.1.3	流体力学	22
4.1.4	地球化学	25
4.1.5	放射性元素の化学及び移行特性	27
4.2	人工バリア中核種移行シャドウモデルの概要	28
4.2.1	局所座標系を有するボックスモデル	29
4.2.2	一般化された移流－拡散方程式	33
4.2.3	一般化された移流－拡散方程式の離散化とそのテンソル表現	36
4.3	解析条件及びシャドウサブモデルの詳細	45
4.3.1	評価対象核種	45
4.3.2	性能指標	45
4.3.3	計算期間	46
4.3.4	流体力学サブモデル	46
4.3.5	放射性元素の化学及び移行特性シャドウサブモデル	57

4.3.6	地球化学シャドウサブモデル	60
4.3.7	統計的解析のためのシャドウサブモデルとFEP及び 具体的モデル群との対応	65
4.4	全域的サンプリングによる統計的解析の結果	68
4.5	全域的解析結果に対する感度分析	71
4.5.1	クラスター分割	74
4.5.2	Moving Band 法による入力パラメータの重要度分析	76
4.5.3	感度解析	108
4.6	第二次局部サンプリングによる統計的解析	112
4.6.1	局部サンプリングの目的と範囲	112
4.6.2	第二次サンプリングの解析条件	112
4.6.3	最大放出率ケース近傍の第二次（局部）サンプリングの 解析結果	116
4.6.4	リファレンスケース近傍の第二次（局部）サンプリング の解析結果	142
4.7	第三次局部サンプリングによる統計的解析	202
4.7.1	第三次サンプリングの解析条件	202
4.7.2	リファレンスケース近傍の第三次（局部）サンプリング の解析結果	206
4.8	感度解析結果のまとめ及び今後の性能評価研究への成果の反映	231
4.8.1	感度解析結果のまとめ	231
4.8.2	統計的解析及び感度解析結果の性能評価への反映	235
5.	人工バリア中核種移行に関する決定論的解析	246
5.1	人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いた決定論的解析	246
5.1.1	リファレンスケース[1]	246
5.1.1.1	基本的な仮定	246
5.1.1.2	人工バリアシステムの形状	247
5.1.1.3	核種インベントリー及び半減期	248
5.1.1.4	移行パラメーター	249
5.1.2	リファレンスケースに対する摂動	252
5.1.2.1	人工バリアシステム形状の変化	253
5.1.2.2	人工バリアシステム内及び周辺の流れ	253
5.1.2.3	核種移行特性	254
5.1.2.4	地球化学的条件の変遷	255

5.1.3	決定論的解析のためのシャドウモデルの特定	255
5.1.3.1	単一空隙可変形モード	256
5.1.3.2	二重空隙固定形状モード	268
5.1.4	解析結果	271
5.1.4.1	リファレンスケース	271
5.1.4.2	二重空隙固定形状モード	273
5.1.4.3	単一空隙可変形モード	285
5.2	MESHNOTE を用いた決定論的人工バリア中核種移行解析	289
5.2.1	シャドウモデルを用いた解析結果との比較	289
5.2.1.1	リファレンスケース	289
5.2.1.2	酸化剤生成の影響を考慮したケース	289
5.2.1.3	オーバーパックの腐食膨張に伴う影響を考慮したケース	291
5.2.2	リファレンスケース近傍の人工バリア中核種移行解析	296
5.2.2.1	共通解析条件	296
5.2.2.2	各解析ケースの前提条件及びパラメータ設定の考え方	297
5.2.2.3	解析結果	311
5.3	吸着に関する場の不均質性に関する検討	336
5.3.1	不均質多孔質岩体トレーサ試験設備における吸着係数の設定	336
5.3.2	支配方程式	338
5.3.3	評価手法	339
5.3.4	評価ケース	344
5.3.5	評価結果	346
5.3.6	吸着に関する場の不均質性に関するまとめ	350
5.4	まとめ	352
6.	ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルの開発	354
6.1	概念モデル	354
6.1.1	チャンネルネットワーク	354
6.1.2	瞬時平衡あるいは速度論的反応による核種の質量配分	355
6.1.3	時間・空間依存性のニアフィールド環境	355
6.2	数学的定式化	356
6.2.1	チャンネルネットワークの表現	356

6.2.2	単一のレグに対する一般化された移流・分散・マトリクス 拡散方程式	358
6.2.3	シャドウサブモデル	360
6.3	シャドウ関数のための関数形のテンプレート	361
6.3.1	区分的に線形な関数	361
6.3.2	$n+1$ 次元における楕円体	361
6.4	例題についての解析	362
6.4.1	核種移行挙動についてのシャドウサブモデル及び環境 条件の変遷に関するシャドウ関数の分類	362
6.4.2	チャンネルネットワーク及び環境条件の例	367
6.4.3	テストケース	381
6.4.4	まとめ及び課題	388
7.	まとめ	400

## 図リスト

- 図 2.1 探索型システム性能評価に於ける検討の流れ
- 図 3.1 異なるサンプルサイズにおけるNSEのクラスター数依存性の比較  
(1996年度統計的解析結果、対数スケール)
- 図 3.2 異なるサンプルサイズにおけるNSEのクラスター数依存性の比較  
(1996年度統計的解析結果、リニアスケール)
- 図 3.3 本年度行う統計的解析の全体手順
- 図 4.1.1 移行形態及び各形態間の化学反応の区分
- 図 4.2.1 ニアフィールドの形状
- 図 4.2.2 ボックスモデル及び局所座標系によるニアフィールドの表現
- 図 4.2.3 解析領域内での移流による物質移動の概念
- 図 4.3.1 人工バリア中で移流支配となり得る領域
- 図 4.3.2 人工バリア中で移流支配となり得る領域の境界  $R(t)$  の経時変化の  
パターン
- 図 4.3.3 人工バリア中の移流支配となり得る領域のギャップ空隙率と透水  
係数の範囲
- 図 4.3.4 平均拡散係数 ( $\alpha C$ ) 及び平均移流速度 ( $\beta C$ ) に関するシャドウ  
モデルの例
- 図 4.3.5(a) 統計的計算におけるマトリクス中の地球化学条件変化の例
- 図 4.3.5(b) 図 4.3.5(a) に対応するギャップ中の地球化学条件変化の例
- 図 4.3.6 統計的解析に用いるシャドウ (サブ) モデル群及び主要パラメータ  
の全体構成
- 図 4.4.1 全域的サンプリングによる統計的解析結果のスキヤッタープロッ  
ト (常用対数スケール)
- 図 4.4.2 全域的サンプリングによる統計的解析結果のスキヤッタープロッ  
ト (リニアスケール(1))
- 図 4.4.3 全域的サンプリングによる統計的解析結果のスキヤッタープロッ  
ト (リニアスケール(2))
- 図 4.5.1 全域的サンプリングによる統計的解析結果について計算された平  
均二乗残差 (MSE) とクラスター数との関係 (リニアスケール)
- 図 4.5.2 全域的サンプリングによる統計的解析結果について計算された平  
均二乗残差 (MSE) とクラスター数との関係 (リニアスケール、

最大サンプル数のものにより規格化)

- 図 4.5.3 対数スケールにおけるクラスター分析により同定された主要クラスタの分布(1)
- 図 4.5.4 対数スケールにおけるクラスター分析により同定された主要クラスタの分布(2)
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(1))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(2))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(3))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(4))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(5))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(6))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(7))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(8))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(9))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(10))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(11))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(12))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (娘核種(13))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (親核種(1))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果 (親核種(2))

- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(3))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(4))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(5))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(6))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(7))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(8))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(9))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(10))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(11))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(12))
- 図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種(13))
- 図 4.5.6 各クラスターにおける入力パラメータの感度 (第一次サンプリング：主成分 1)
- 図 4.5.6 各クラスターにおける入力パラメータの感度 (第一次サンプリング：主成分 2)
- 図 4.6.1(1) 最大放出率ケースの第 2 次サンプリングによる統計的解析結果  
(3800 ケース)
- 図 4.6.1(2) 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングによる統計的解析結果  
(3800 ケース)
- 図 4.6.2 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについてのクラスター数  
と平均二乗残差の関係
- 図 4.6.3 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについてのクラスター分  
析結果
- 図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band

解析の結果（親核種(1)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(2)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(3)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(4)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(5)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(6)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(7)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(8)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(9)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（親核種(10)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(1)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(2)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(3)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(4)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(5)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(6)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(7)）

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果（娘核種(8)）

- 図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(9))
- 図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(10))
- 図 4.6.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度(最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* : 親核種)
- 図 4.6.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度(最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング\* : 娘核種)
- 図 4.6.6(1) リファレンスケース近傍の第 2 次サンプリング\* による統計的解析結果 (Np237, Th229 : 2200 ケース)
- 図 4.6.6(2) リファレンスケース近傍の第二次サンプリング\* による統計的解析結果 (Np237, Th229 : 2200 ケース)
- 図 4.6.7 リファレンスケース近傍の第二次サンプリング\* についてのクラスター数と平均二乗残差の関係 (Np237, Th229)
- 図 4.6.8 リファレンスケース近傍の第二次サンプリング\* についてのクラスター分析結果(Np237, Th229)
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(1))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(2))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(3))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(4))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(5))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(6))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(7))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(8))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\* に関する Moving Band 解析の結果 (親核種(9))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング\*

- リングに関する Moving Band 解析の結果 (親核種(10))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(1))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(2))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(3))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(4))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(5))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(6))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(7))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(8))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(9))
- 図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(10))
- 図 4.6.10 各クラスターにおける入力パラメータの感度(リファレンスケース近傍の第二次サブリング : Np237)
- 図 4.6.10 各クラスターにおける入力パラメータの感度(リファレンスケース近傍の第二次サブリング : Th229)
- 図 4.6.11(1) リファレンスケース近傍の第 2 次サブリングによる統計的解析結果 (Am243, Pu239 : 2600 ケース)
- 図 4.6.11(2) リファレンスケース近傍の第二次サブリングによる統計的解析結果 (Am243, Pu239 : 2600 ケース)
- 図 4.6.12 リファレンスケース近傍の第二次サブリングについてのクラスター数と平均二乗残差の関係 (Am243, Pu239)
- 図 4.6.13 リファレンスケース近傍の第二次サブリングについてのクラスター分析結果 (Am243, Pu239)
- 図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍第二次サブリングに関する Moving Band 解析の結果 (親核種(1))



- リングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(9))
- 図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプルリングに関する Moving Band 解析の結果 (娘核種(10))
- 図 4.6.15 各クラスターにおける入力パラメータの感度(リファレンスケース近傍の第二次サンプルリング : Am243)
- 図 4.6.15 各クラスターにおける入力パラメータの感度(リファレンスケース近傍の第二次サンプルリング : Pu239)
- 図 4.7.1(1) リファレンスケース近傍の第3次サンプルリングによる統計的解析結果 (Np237, Th229 : 2000)
- 図 4.7.1(2) リファレンスケース近傍の第三次サンプルリングによる統計的解析結果 (Np237, Th229 : 2000)
- 図 4.7.2 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリングについてのクラスター数と平均二乗残差の関係 (Np237, Th229)
- 図 4.7.3 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリングについてのクラスター分析結果 (Np237, Th229)
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(1))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(2))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(3))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(4))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(5))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(6))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(7))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種(8))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(1))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプルリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(2))

- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(3))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(4))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(5))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(6))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(7))
- 図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np237, Th229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種(8))
- 図 4.7.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度(リファレンスケース近傍の第三次サンプリング : Np237)
- 図 4.7.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度(リファレンスケース近傍の第三次サンプリング : Th229)
- 図 4.8.1 ガラス浸出率律速を上回る放出率をもたらす事象の組み合わせ
  
- 図 5.1.1.1 第二次報告書に於ける人工バリアシステム構造の模式
- 図 5.1.3.1 単一空隙可変形モードにおけるニアフィールド形状
- 図 5.1.3.2 炭素鋼体積割合の表現 (模式図)
- 図 5.1.3.3 領域Ⅱにおける腐食生成物の体積割合
- 図 5.1.3.4 領域Ⅱにおけるベントナイト空隙率の変化
- 図 5.1.3.5 領域Ⅱにおけるベントナイト体積割合の変化
- 図 5.1.3.6 領域Ⅲにおけるベントナイト体積割合の変化
- 図 5.1.4.1 人工バリア中核種移行シャドウモデルによるリファレンスケースの解析結果
- 図 5.1.4.2 MESHNOTE 及び人工バリア中核種移行シャドウモデルによるリファレンスケース解析結果の比較
- 図 5.1.4.3 ガス圧による移流の影響についての解析結果 (ケース 1a : 毛管半径 0.1mm)
- 図 5.1.4.3 ガス圧による移流の影響についての解析結果 (ケース 1b : 毛管半径 1.0mm)
- 図 5.1.4.4 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる速度論的溶解・沈殿

(ケース 2a) についての解析結果

- 図 5.1.4.4 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる速度論的溶解・沈殿の影響 (ケース 2b) についての解析結果
- 図 5.1.4.5 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる元素依存の拡散係数の影響 (ケース 3) についての解析結果
- 図 5.1.4.6 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる放射線分解に伴う酸化剤生成の影響 (ケース 4a) についての解析結果
- 図 5.1.4.7 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる放射線分解に伴う酸化剤生成の影響 (ケース 4b) についての解析結果
- 図 5.1.4.8 二重空隙固定形状モードでの解析結果のまとめ
- 図 5.1.4.9 単一空隙可変形モード (ケース II) における緩衝材中空隙率分布の経時変化
- 図 5.1.4.10 単一空隙可変形モデルによる解析結果 (ケース I)
- 図 5.1.4.11 単一空隙可変形モデルによる解析結果 (ケース II)
- 図 5.2.1.1 MESHNOTE によるリファレンスケースの解析結果
- 図 5.2.1.2 酸化フロント進展の核種移行への影響に関する MESHNOTE による解析結果
- 図 5.2.1.3 酸化性領域生成を考慮した場合の最大放出率の比較
- 図 5.2.1.4 腐食によるオーバーパック内拡散係数の低下影響解析結果
- 図 5.2.1.5 オーバーパックの腐食膨張影響を考慮した場合の最大核種放出率の比較
- 図 5.2.2.1 リファレンスケース解析結果
- 図 5.2.2.2 ケース 1.1 解析結果
- 図 5.2.2.3 ケース 1.2 解析結果
- 図 5.2.2.4 ケース 1.3 解析結果
- 図 5.2.2.5 ケース 1.4 解析結果
- 図 5.2.2.6 ケース 1.5 解析結果
- 図 5.2.2.7 ケース 1.6 解析結果
- 図 5.2.2.8 リファレンスケース及びケース 1 の解析結果比較
- 図 5.2.2.9 ケース 2.1 解析結果
- 図 5.2.2.10 ケース 2.2 解析結果
- 図 5.2.2.11 ケース 2.3 解析結果
- 図 5.2.2.12 ケース 2.4 解析結果
- 図 5.2.2.13 ケース 2.5 解析結果
- 図 5.2.2.14 ケース 2.6 解析結果

- 図 5.2.2.15 リファレンスケース及びケース 2 の解析結果比較
- 図 5.2.2.16 ケース 3 解析結果
- 図 5.2.2.17 リファレンスケース及びケース 3 の解析結果比較
- 図 5.2.2.18 ケース 4.1 解析結果
- 図 5.2.2.19 ケース 4.2 解析結果
- 図 5.2.2.20 ケース 4.3 解析結果
- 図 5.2.2.21 ケース 4.4 解析結果
- 図 5.2.2.22 ケース 4.5 解析結果
- 図 5.2.2.23 リファレンスケース及びケース 4 の解析結果比較
- 図 5.3.1.1 吸着性ビーズと非吸着性ビーズとの混合ブロックに関する概念図
- 図 5.3.3.1 混合率 (MR) 0.3 における吸着性のセルを配置した例  
混合度:  $DM=0.2$  (左)、 $DM=0.8$  (右)
- 図 5.3.3.2 混合率 (MR) 0.5 における吸着性のセルを配置した例  
混合度:  $DM=0.2$  (左)、 $DM=0.8$  (右)
- 図 5.3.3.3 混合率 (MR) 0.9 における吸着性のセルを配置した例  
混合度:  $DM=0.2$  (左)、 $DM=0.8$  (右)
- 図 5.3.5.1 「r50m30 ケース」における液相と固相のコンター図
- 図 5.3.5.2 出口境界における液相中トレーサ濃度プロファイル
- 図 5.3.5.3 出口 (右側境界) での液相中トレーサ濃度の時間変化
  
- 図 6.2.1 チャンネルネットワーク及び流れの分布の定義
- 図 6.4.1 テストケースの対象となるチャンネルネットワークの例
- 図 6.4.2 チャンネルに沿った地球化学異常の生成及び消滅の例 (1)
- 図 6.4.2 チャンネルに沿った地球化学異常の生成及び消滅の例 (2)
- 図 6.4.2 チャンネルに沿った地球化学異常の生成及び消滅の例 (3)
- 図 6.4.3 レグ {P4, P5} のマトリクス中の於ける地球化学異常の生成及び消滅の例
- 図 6.4.4 単一レグケースにおけるチャンネル内総濃度分布の時間変化
- 図 6.4.5 単一レグケースにおけるマトリクス内総濃度分布の時間変化  
( $x=40m$ )
- 図 6.4.6 単一レグケースにおけるマトリクス内総濃度分布の時間変化  
( $x=200m$ )
- 図 6.4.7 複数レグケースにおけるチャンネル内総濃度分布の時間変化
- 図 6.4.8 テストケースのために作成されたチャンネルネットワークの例
- 図 6.4.9 レグ 0 のチャンネル内総濃度分布の時間変化

- 図 6.4.10 レグ 2 のチャンネル内総濃度分布の時間変化
- 図 6.4.11 レグ 4 のチャンネル内総濃度分布の時間変化
- 図 6.4.12 レグ 6 のチャンネル内総濃度分布の時間変化
- 図 6.4.13 レグ 8 のチャンネル内総濃度分布の時間変化
- 図 6.4.14 マトリクス内総濃度分布の時間変化
- 図 6.4.15 ソースからの核種流入フラックスとシンクへの流出フラックスとの比較

## 表リスト

- 表 4.2.1 各円筒形部分領域の寸法
- 表 4.3.1 半減期及び初期インベントリの範囲
- 表 4.3.2 パラメータ値の範囲(1)；形状因子
- 表 4.3.3 パラメータ値の範囲(2)；地下水流速場
- 表 4.3.4 パラメータ値の範囲(3)；放射性元素の化学及び移行特性
- 表 4.3.5 パラメータ値の範囲(4)；地球化学
- 表 4.3.6(1) 各シャドウサブモデルと F E P 及び具体的モデル群との対応の例
- 表 4.3.6(2) 各シャドウサブモデルと F E P 及び具体的モデル群との対応の例
- 表 4.3.6(3) 各シャドウサブモデルと F E P 及び具体的モデル群との対応の例
- 表 4.5.1 全域的サンプリングのための統計的入力パラメータ一覧表 (1)
- 表 4.5.1 全域的サンプリングのための統計的入力パラメータ一覧表 (2)
- 表 4.5.2 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ
- 表 4.5.3 各クラスターにおける出力の主変動成分
- 表 4.5.4 各クラスターにおいて支配的な感度を有するパラメータ
- 表 4.6.1 全域的サンプリングにおける最高放出率ケースに対応したパラメータ固定値
- 表 4.6.2 リファレンスケースに対応したパラメータ固定値  
(Np-237→Th-229)
- 表 4.6.3 リファレンスケースに対応したパラメータ固定値  
(Am-243→Pu-239)
- 表 4.6.4 第二次サンプリングのための統計的入力パラメータ一覧表 (1)
- 表 4.6.4 第二次サンプリングのための統計的入力パラメータ一覧表 (2)
- 表 4.6.5 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ  
(最大放出率ケース近傍第二次サンプリング)
- 表 4.6.6 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ  
(Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング)
- 表 4.6.7 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍の第二次サンプリング中クラスター1 において付加的に重要となるパラメータ
- 表 4.6.8 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ  
(Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍第二次サンプリング)

- 表 4.7.1 リファレンスケース近傍での第三次サンプリングのためのパラメータ固定値 (Np-237->Th-229)
- 表 4.7.2 第三次サンプリングのための統計的入力パラメータ一覧表 (1)
- 表 4.7.2 第三次サンプリングのための統計的入力パラメータ一覧表 (2)
- 表 4.7.3 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ (Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍第三次サンプリング)
- 表 4.8.1 リファレンスケースを含む連続的かつ単調な感度構造において重要となる入力パラメータ及び対応する現象群
- 表 4.8.2 リファレンスケースを含む連続的かつ単調な感度構造においては重要とはならない入力パラメータ及び対応する現象群
- 表 4.8.3 核種再濃縮フロントの伝播を伴う代替的な移行機構の生起に係る現象群及び専門家への質問
- 表 5.1.1.1 リファレンスケースに於ける形状及び物理的性質
- 表 5.1.1.2 核種インベントリ及び半減期
- 表 5.1.1.3 ガラス溶解のパラメータ
- 表 5.1.1.4 核種移行パラメータ(1)：核種に依らないパラメータ
- 表 5.1.1.5 核種移行パラメータ(2)：放射性元素溶解度[mol/m<sup>3</sup>]
- 表 5.1.1.6 核種移行パラメータ(3)：(分配係数 m<sup>3</sup>/kg) × (密度 kg/m<sup>3</sup>) [-]
- 表 5.1.3.1 各ボックスに存在し得る媒体の種類
- 表 5.1.4.1 リファレンスケースに於ける最大核種放出率(mol/yr/waste)
- 表 5.1.4.2 ガスによる移流が生じている期間の平均放出率増分(リファレンスケースにおける最大値で規格化)
- 表 5.1.4.3 元素依存の拡散係数値
- 表 5.1.4.4 酸化雰囲気における溶解度
- 表 5.1.4.5 二重空隙固定形状モードでの解析条件のまとめ
- 表 5.1.4.6 単一空隙可変形モードでの解析条件
- 表 5.2.2.1 核種インベントリ
- 表 5.2.2.2 核種分配パラメータ
- 表 5.2.2.3 核種溶解度
- 表 5.2.2.4 ケース (1.2) の解析条件
- 表 5.2.2.5 ケース (1.3) の解析条件
- 表 5.2.2.6 ケース (1.5) の解析条件
- 表 5.2.2.7 ケース (2.1) の解析条件

- 表 5.2.2.8(1) ケース 1 群の解析条件の概要
- 表 5.2.2.8(2) ケース 2 群の解析条件の概要
- 表 5.2.2.9 水の放射線分解による酸化還元フロントの進展
- 表 5.2.2.10 酸化性領域における核種溶解度
- 表 5.3.4.1 ブロック内で均一に混合したと想定した場合の評価ケース
- 表 5.3.4.2 混合率及び混合度を変化させた場合の評価ケース
- 表 5.3.4.3 各パラメータの設定値
- 表 5.3.5.1 混合度を変化させた場合の影響
- 表 5.3.5.2 混合率を変化させた場合の影響
- 
- 表 6.4.1 一般化された移流・分散・マトリクス拡散方程式で使用するパラメータ
- 表 6.4.2 環境条件変化のためのシャドウ関数の分類
- 表 6.4.3 チャンネルネットワークに含まれる点及びこれらのランク
- 表 6.4.4 レグの番号
- 表 6.4.5 各レグの形状
- 表 6.4.6 例 1 に於ける流速分布 ( $\times 1e-6[m^3]$ )
- 表 6.4.7 例 2 に於ける流速分布 ( $\times 1e-6[m^3]$ )
- 表 6.4.8 フロント及びテイルの番号
- 表 6.4.9 ヘッド及びテイルの遅延係数
- 表 6.4.10 単一レグモデルの解析条件
- 表 6.4.11 規格化平均拡散係数及び移流速度のパラメータ値
- 表 6.4.12 チャンネルネットワークに関する解析条件

## 1. はじめに

動力炉・核燃料開発事業団（以下、PNCと略す）は、2,000年までに高レベル放射性廃棄物地層処分についての性能評価研究の成果をとりまとめた第二次報告書を作成・公表することとしている。この第二次報告書における性能評価の主眼とする所の一つは、極めて長期に及ぶ評価期間の中で想定し得る地層処分システムの様々な将来像、ならびにこれら进行评估する側の概念及び手法上の選択肢の多様性を網羅することにより、評価結果に介在する不確実性の全体像と大きさを併せて把握することである。

シャドウモデルの手法を用いた探索型システム性能評価の方法論は、第二次報告書の上記の目標を達成するための有力なアプローチの一つである。広義には、この手法は環境シミュレーションによるシナリオ作成法の一つであるという事が出来る。より古典的な言語ベースのシナリオ作成法と比較した場合、環境シミュレーション法の大きな特徴は、その定量性及び記述の厳密性（言語による概念の記述に比して、数式による記述には曖昧さや内部的な不整合の入り込む余地が極めて小さいと言うこと）にある。そして、探索型システム性能評価では、こうしたシミュレーション法の特徴を最大限に活かすために、シャドウモデルという概念を用いる。シャドウモデルは、通常の物理的なモデルとは異なり、ある現象についての特定の概念化や数式化のための特殊な仮定に対応するものではない。代わりに、シャドウモデルでは、幅広い可能性（数学的により丁寧な言い方をすれば、将来のシステムの状態を記述する関数空間の全体）のうち未だ否定されていない全ての選択肢を網羅することが目標となる。また、シャドウモデルはこの様な幅広い選択肢の集合に基軸（数学的には、関数空間に於ける基底）を導入することにより、莫大な数になりがちな選択肢群を体系的に管理・活用すること（空間に含まれる各関数を各基底に対応するパラメータ値のセットとして表現すること）を可能とする。これらの措置により、性能評価に通常含まれる種々のタイプの不確実性（シナリオ不確実性、概念モデル不確実性、数学モデル不確実性及びパラメータ不確実性）を一つの共通的な不確実性解析及び感度解析のフレームワークのもとで取り扱うことが可能となる。

昨1996年度には、人工バリアシステム内の核種移行問題に関して、以下の種々の核種移行挙動及びニアフィールド環境変化の核種移行への影響機構を表現することが可能な汎用性の高いシャドウ核種移行モデルを開発した。

- a) 液相での分種化、吸着、又はコロイド生成などの速い（瞬時平衡）反応による核種の質量配分
- b) 溶解／沈殿、鉱物化、結晶化などの遅い（速度論的）反応による核種の質量配分
- c) 核種の様々な化学形態での拡散性の違い
- d) 人工バリア内の間隙の形成とその再充填、及び核種の様々な化学形態に対応して異なる流速を持った移流現象
- e) 時間依存の地下水流が及ぼす人工バリア周辺及び内部での核種移行への影響
- f) 人工バリア内外における地球化学的変化（pH、Eh、温度などの変動）がもたらす核種の質量配分への影響
- g) 人工バリア移動・変形（陥没、浸食など）がもたらす核種移行への影響

また、人工バリア内で生ずる可能性のある核種移行の全体像を知るために、人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いた約 1,000 ケースの予備的統計的解析を実施し、この結果について、主成分分析、及び各入力パラメーターの変化によってもたらされる出力の変化の分析を行うことにより、リファレンスケースを中心とした感度構造の理解が定性的にも定量的にも深まった。更に、全ケース中で最大放出率が高いものの部分集合について分析を行ったところ、リファレンスケースより高い放出率を生み出す可能性の有るシステム挙動の組み合わせ及びその順序が推定された。これらの結果は、今後行うシナリオ解析及び性能評価ケースの設定に於いて、どの様な具体的自然現象がクリティカルなシステム挙動をもたらすか、そして、これらの自然現象が物理的に生起可能か否か、更にはどの程度の確からしさを以て生起すると考えられているか、等について詳しく調べることの必要性を示唆するものである。つまり、本アプローチは、将来のシステム挙動についての各専門家の理解を促し、従来の性能評価手法を補完するものとして期待できるということが例証された。

以上の成果を踏まえ、本年度は探索型システム性能評価の手法を更に以下の3つの主要項目について拡張し、適用することとする。

- 1) 人工バリア中核種移行シャドウモデルをより効率的に適用した大規模な統計的解析を実施し、上記の予備的成果をより確かなものとする
- 2) 人工バリア中核種移行シャドウモデルを決定論的に用いてリファレンスケ

ース及びその周囲の変動的ケース群についての解析を行うこと。また、従来の解析コードとの比較を行い、人工バリア中核種移行シャドウモデル自体の検証及びこれらの摂動について近似的な取り扱いを強いられる既存解析コードの妥当性の評価に資すること。

- 3) ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルを開発し、これを用いて例題についての解析を実施すること。

本報告書の構成は以下の通りである。

まず、2.において昨年度の検討の経緯に従った探索型システム性能評価の手順及びシャドウモデルに関する基本的概念をまとめることにより、その方法論の概要を説明する。そして、4.には第一の主要課題である人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いた統計的解析の内容を記述することとし、これに先だつ3.においてこの様な大規模な統計的解析を行う上で必要となる解析効率の向上に関する検討をまとめる。第二の主要課題である人工バリア中核種移行シャドウモデルによる決定論的解析は5.に、そして最後に、ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルの開発を6.に収録した。

## 2. 探索型システム性能評価の方法論

探索型システム性能評価は、この様な従来の言語ベースのシナリオ解析手法の限界に呼応し、これを補足するための有力なアプローチである。この方法論の主眼とするところは、専門家の主観的な判断結果に依拠するのではなく、システム内外で生ずる多様な現象によるシステム性能への影響の可能性を原則として全て取り入れ、対応する多数の計算を実施した上で、その結果に基づきはじめて個々の現象の重要度を考えるという定量的かつ客観的なスクリーニングと類型化を可能とすることにある。この様に、従来のシナリオ解析における先見的なスクリーニングと重要度分類を補足し、また、言語という離散的な表現媒体に代わって連続的な数値を用いることにより、探索型システム性能評価は「広さ」に於いても「きめ細かさ」に於いてもより網羅性の高い結果を得ることが可能となる。

然しながら、上記の「広さ」と「きめ細かさ」とを両立させた場合、全体として解析のために必要となる労力は莫大なものとなることが予想される。この問題点は個々の現象を個別具体的にモデル化する代わりに、各現象が地層処分システム性能（裏がえして言えば、核種移行挙動）に及ぼし得る影響のみを考慮したシャドウモデルを用いることによって克服される。この結果、種々の現象・事象の取り扱いはある種の抽象性を伴うものとなるが、その代わりに、前出の評価シナリオの網羅性に関する質問に対して、次の様に明解に答えることが可能となる。

「個々の現象の発生メカニズムに着目したシナリオと言う観点ではなく、これ等の全体が地層処分システム性能に及ぼし得る影響のタイプ及び程度（システム挙動クラスと呼ぶ）という点に於いて、全ての可能性が評価上考慮されている。」

さらに、重要度の高いシステム挙動クラスを探索する上記の解析の結果として、以下の様な質問に答える事が可能となる。

- ・ どの様な事象/現象の（時間的、空間的な意味も含めた）組み合わせが性能評価の観点からも最も重要な影響を核種移行過程に及ぼすか？

また、この具体的かつ定量的な結果を専門家に呈示し、この様な重要な組み合わせが生じる事確からしさを問うことにより、評価全体の不確実性を考

慮することができる。これは、従来の言語ベースのシナリオ解析に於いて、「何が起こり得るか？」あるいは「高い放出率はどの様にして起こり得るか？」といった漠然とした質問が問われるのとは対象的である。

## 2.1 手順

探索型システム性能評価に於ける検討の流れを図 2. 1 にまとめる。

まず、第一の段階（図中 A）は評価の対象となるシステムを定義することである。ここでは、各構成要素（例、廃棄物、容器、緩衝材、ニアフィールド母岩、等）の仕様・寸法等が定義される。

第二の段階（図中 B）は、以下の様な評価上の前提を定義するものである。

- ・ 考慮すべき核種移行メカニズム
- ・ 性能指標（例、個人に対する年間被ばく線量、集団線量、個人に対する集積線量、及び/あるいは最大核種放出率）
- ・ 評価対象とすべき主要核種
- ・ 評価期間
- ・ バリア状態に関する仮定

第三の段階では、種々の事象及びプロセスがシステム性能（上記で選択される指標に基づく）に及ぼし得る影響についての検討が行われる。各性能指標は、いずれも基本的には放射性核種の移行率に依って規定されるものであるために、ここでの検討の焦点は、核種移行の経路とメカニズムとに置かれる。

将来の長期にわたって、ニアフィールドの内外では多種多様な事象及びプロセスが生ずるものと考えられるが、探索型システム性能評価のスコープはこれらの事象やプロセスの起源あるいは発生メカニズムではなく、これ等がシステムの特徴にどの様な影響を及ぼし得るか、さらに究極的には性能指標の出力をどの様に変動し得るかという事に特定されるべきである。これ等の影響に関する検討は、定性的なものから始まり、やがては定量的なシャドウモデルの定式化に至る（図中 C）。シャドウモデルの定式化は、当該性能指標を決定づけるシステムの特徴を抽出することによって行われる。例えば、最大核種放出率は、液相中の（あるいは他の可動な相での）核種濃度によって規定される。従って、シャドウモデルは、これ等の核種濃度を未知数とした微分方程式及び代数方程式の形式を採る。また、後述するように、シャドウモデルは上位のモデルの入力変数を下位の（より繊細な）モデルにより算出するという階層構造をとるこ

とも可能である。

シャドウモデルの作成にあたりまず行うべき事は、あり得るべきではないタイプ (implausible) の挙動を同定することである。(図中 D. 及び E.)。これは、物理的あるいは化学的な法則 (保存則、等) あるいは専門家の知見\*に基づき行われる。これに引き続いて、残された (即ち implausible ではない) 挙動の全てを記述できる様な一般性の高い数学的定式化を行う。ここで重要な点は、特定の事象やプロセスを具体的にモデル化するのではなく、ある抽象的なレベルでモデルを作成することによりこれらの既知の事象やプロセスは勿論、implausible とは断定できない全ての挙動が少なくとも近似的には表現可能なものとする事である。(詳しくは 3. 参照)。

\*注) 従来のシナリオ解析とは異なり、専門家の知見が得られなくともシャドウモデルによる解析は可能である (ただし、この場合には、検討範囲、従って、専門家の知見は、それが確定したものである場合に限って用いられるべきである)。

シャドウモデルの入力パラメータ空間の時間を媒介変数とした軌道は、前出の用語に対応すれば、事象及びプロセスの時間的系列 (即ち、一つの将来像) となる。従って、次のステップとしては、この空間の中で多数の軌道に対して繰り返し出力値を算出すること (図中 F.) が必要となる。この様な統計的計算により、所定の範囲 (アンサンブル) に含まれる異なる将来像のそれぞれについて、対応するシステムの応答を性能指標を尺度として調査することが可能となる。探索型システム性能評価の際だった特徴の一つは、従来のシナリオ解析の様にシステムの挙動を定性的な検討によって予め絞り込んでしまうのではなく、多数の統計的計算の結果に基づき重要性の高いケース群を自ずと浮き彫りにするという事である。

統計的計算に続くステップでは、特に性能評価上重要な結果 (例えば、高い核放出率) につながる様なクリティカルな将来像に重点を置きつつ、類似した出力をもたらす将来像のグループを同定することにより、多数の計算結果を類別する。この作業は、まず、統計的計算の結果である出力分布に対して、良く知られた統計的な手法であるクラスタ分析を施すことによって行われる (図中 G.)。ここで留意すべき点は、クラスタリングの結果が一義的に定まらないということである。そこで、このステップではクラスタ分析を反復的に行いながら、各クラスタについてある目的関数が最適値を採る様なクラスタ分割を見出すという手法を用いることとする。昨年度の解析においては、この目的関

数として各クラスにおける（対数スケールでの）線形回帰残差を選択し、合理的なクラス数で最小の残差が得られる様な分割と、これに対応した区分的に線形な回帰分析結果とが得られた。他の目的関数としては、リニアスケールでの線形回帰残差や、当該入力パラメータの帰属性等が考えられる（これらの選択肢の詳細については、4.5を参照のこと）。

次に、各クラスターに対して主成分分析（Principle Component Analysis; PCA）を行うことにより、各クラスターに属する計算ケース群の入力パラメーターセットのうち特に重要性の高いものを明らかにする（図中 H.）。これら二つ（G.及び H.）の作業により、システム挙動のクラス、即ち「同様の出力をもたらす」という意味で互いに類似した将来像のグループ、が得られるとともに、個々のクラスの特徴が定量的に明確化されることとなる。

探索型システム性能評価の最後のステップは、システム挙動クラス類別化の結果と、各システム挙動クラスの特徴及び対応する出力を専門家グループに報告し、各クラスの確からしさ（Plausibility）を評価する段階である（図中 1.）。この作業では、特に重要性の高い入力パラメータ（及びその組み合わせ）についてより詳しい検討を行う。この様に定量的な重要度を反映して、詳細な検討を特定のパラメータに限定できることは、この方法論の大きな特徴の一つである。勿論、各パラメーター値に対する専門家の判断は plausible と implausible という二つにはっきりと分けられるとは限らない。恐らく、より現実的には、いくつかのパラメータ範囲の生起の確からしさは中間的なものとなることが予想される。このような場合には、専門家の判断結果をファジー理論に於けるメンバーシップ関数あるいは主観確率として表現し、各計算ケースの出力をこれらによって重み付けした上で積算することにより、最終的な評価結果の統合と不確実性の見積もりがなされる。

以上の方法論を全体として見れば、性能評価の水理モデリングにしばしば用いられる地質統計的な手法との類似性があることがわかる。未知の特性値（例えば透水係数）の地質統計的なシュミレーションでは、不均質な空間分布をパターンを統計的に多数作成し、個々のパターン（リアライゼーションと呼ばれる）全体をアンサンブルとして解析を行う。この際、各リアライゼーションはそれぞれ特定の知見に基づき具体的に作られるのではなく、むしろ制約条件のみを明らかにしておいて、この条件を満足するような広範なパターンを統計的に幅広くカバーするという方針がとられる。そして、個々のリアライゼーションの詳細は初期には問題とされず、一連の解析を全て行って重要度分類が明らかとなった後に、はじめて、重要と考えられる少数のリアライゼーションのみ

について個別、具体的な検討が加えられる。ある意味では、探索型システム性能評価の方法論は、この様な地質統計学に見られるアプローチを積極的に取り入れ、地質特性以外の系の「特徴 (feature)」全般に適用するものということができる。換言すれば、地下にあるために「見る」ことができない地質特性を対象として考案されたアプローチを、長期性のために「見る」ことができないニアフィールドの特徴全般に拡張するというのがその中核的なアイデアである。そして、多岐にわたるニアフィールドの将来像のうち、真に重要な少数のもののみが、より具体的かつ詳細な研究の対象となる。

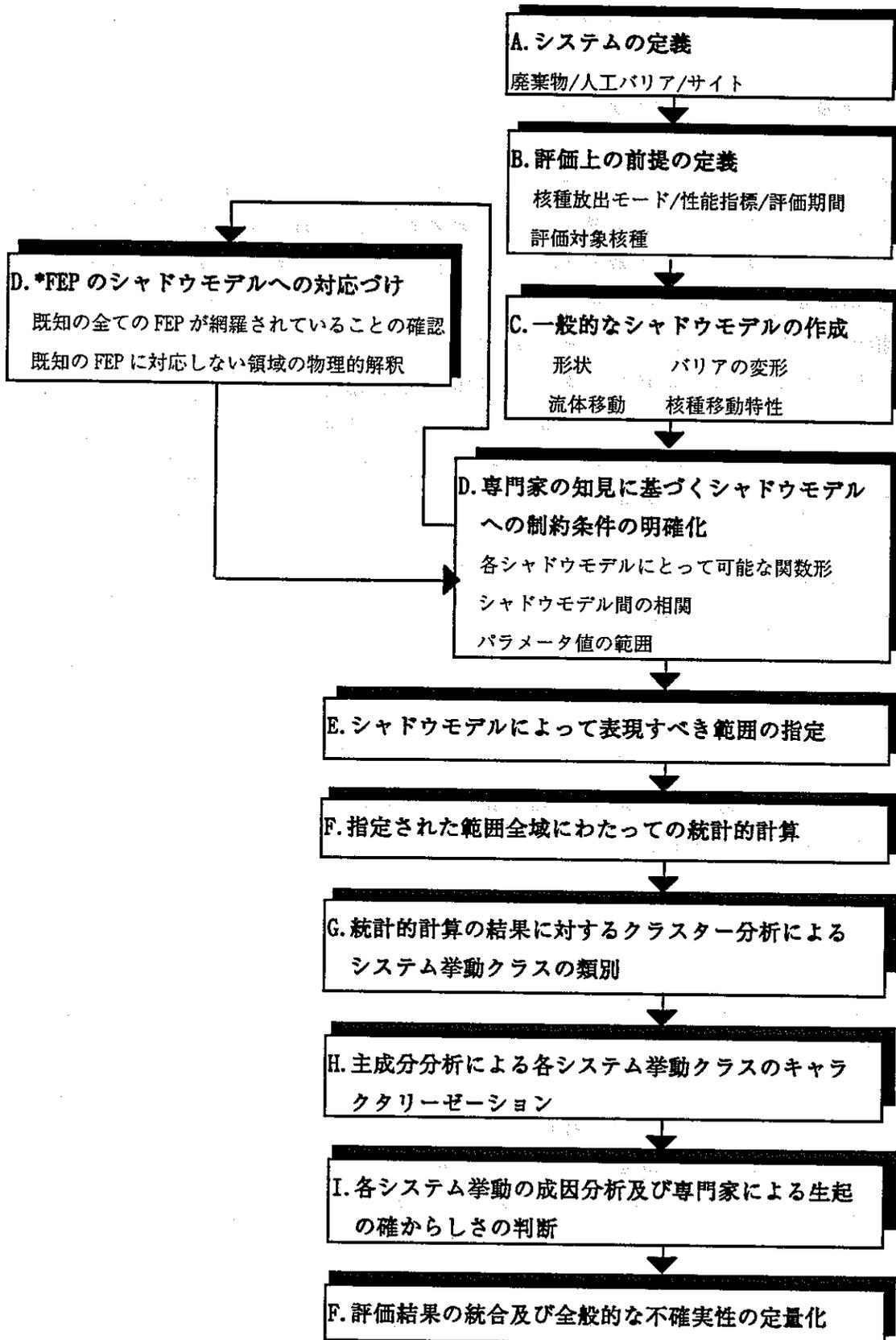


図 2. 1 探索型システム性能評価に於ける検討の流れ

## 2.2 シャドウモデルに関する基本的概念

### 2.2.1 消極的モデリングの考え方

通常の物理的なモデルは、対象とする現象の挙動あるいは種々の条件への依存性を、対応する知見や観察事実と極力整合的となる様に特定的かつ具体的に記述するものである。このようなモデリングは、モデルを用いた解析と観察あるいは実験結果とを比較・照合することを繰り返すことによりモデル自体の精度と信頼性とを向上していくことが可能である。（あるいはこれが可能であるという立場を採ることが実験的な科学の基本的な立場である。）しかしながら、地層処分、特にニアフィールド性能評価の様に、予測的な性格を有するモデリングにおいては、解析結果に対して比較すべき実験的事実が不足するためにこのような方向性をそのまま踏襲することは困難である。そこでほとんどの場合、モデルが必ずしも十全ではないという前提の下に、取りあえずの解答を用意するという立場が採られることとなる。この時、モデルを特定する筈の情報（観察事実）の不足は、予測結果が一義的に定まらずある程度の幅を持たざる得ないという状態を必然的にもたらすこととなる。このような状況下で可能な最良の解析は、可能な予測結果を全て網羅することによって意思決定の支援を行うことである。

それでは、このような「可能な予測結果全ての網羅」は、どの様にして行うことができるだろうか？明らかに、以下の二つのアプローチを想定することができる。

- a. 類似した現象あるいは当該現象のうちの一部についての観察結果をうまく説明できるようなモデル（群）をリストアップし、それぞれのパラメータを広範に変動させる。
- b. モデルを、与条件（システム構成、形状、特性、物理・化学的条件、等）と出力との間の写像という抽象的なレベルで捉え、この写像の全体集合の中からあり得ないものを削除した残りの部分集合を一種類の汎用的なモデルで覆う。

ここでは、便宜的に前者を積極的モデリング、後者を消極的モデリングと呼ぶこととする。勿論、実験的な科学に於いては積極的なモデリングが必要であり、逆にここでは消極的なモデリングは何ら新たな情報価値を作り出さない。しかし、予測的な科学においては、積極的なモデリングは常に「それ以外のモ

「モデルはないのか？」という解答不可能な問いに晒される事となるのに対して、消極的なモデリングではまず「可能性の全体」が定義されるために、定量的かつ客観的に網羅性（後節において詳述）を捉えることが可能となる。さらに、積極的なモデルが複数存在し得るのに対して、消極的なモデルは単一の対象に対しては唯一であるという点も特筆すべきである。この特徴のために、消極的なモデリングにおいては、異なる概念や前提（パラダイム）の下に構築された複数のモデル間の包含あるいは排他関係を規定するという集合論的なパラドクスを回避することが可能である。本研究で行うシャドウモデリングは、地層処分システムの挙動、より具体的には核種移行挙動について消極的なモデリングを行うことを目指すものである。

### 2.2.2 シャドウモデルの網羅性

前節で述べた様に、シャドウモデルを用いることの大きな利点の一つは、写像としてのモデルの全ての可能性を網羅し得るということである。ここでは、この「網羅性」についてもう少し詳しく述べることにする。

モデルの網羅性を議論する上での格好の例は、フーリエ級数の様な近似関数列である。良く知られている様に、全ての連続関数\*はフーリエ級数により任意の精度で近似することが可能である。このことは、最も自然な意味で「網羅性」に相当するものと考えられる。つまり、上の記述は次の様に言い換えても差し支えない。

「フーリエ級数で表現できる関数の範囲は、連続関数全体の集合において網羅的である。」

そこで、この例を踏襲して、本研究におけるシャドウモデルの網羅性を以下の様に定義することとする。

「ある現象に対して否定されていない全ての物理的なモデルがシャドウモデルにより任意の精度で近似可能である場合、このシャドウモデルは網羅的である。」

ここで、明らかに、「全ての」という条件はシャドウモデル（あるいはフーリエ級数）の値域が否定されていない関数の全体にまたがるものであることを意味しており、「任意精度での近似」はどの関数のどれほど近くにもシャドウモデル（あるいはフーリエ級数）が存在していること即ち稠密性を意味してい

る。つまり、換言すれば、上の定義は「網羅性」を「全域的」に「稠密」であることとみなすものであるとすることが出来る。

上記の定義は、数学的にもある程度の厳密性を持つという意味では好ましいものであるが、必ずしも実践的であるとは言えない。再びフーリエ級数の例に戻れば、確かにフーリエ級数は上の意味に於いて網羅的であるが、連続関数の全体を任意の精度で近似するためには、実に無限個の項を必要とするのである。明らかに、このような無限級数はシャドウモデルの候補として現実的ではない。そこで、ここでは、上の網羅性の定義を少し弱めて、以下の様に言い換えることとする。

「 $n$  個のパラメータを持つシャドウモデルが、 $n$  を無限に増やして行くことにより前出の意味での「網羅性」を達成することが出来る場合、このシャドウモデルは前網羅的である。」

実際、フーリエ級数による近似を行う場合にも、最初の有限項を採ることが普通であり、この意味から上の「前網羅性」の定義は妥当性を持つものと考えられる。また、明らかに、有限差分や有限要素法における近似は、メッシュ数を無限に増やすことにより網羅的となり得るために、上の意味に於いて前網羅的であると言って良い。

パラメータ数を増減可能なあるシャドウモデルの列が前網羅的である場合、少なくとも理論的には（つまりパラメータ数をどんどん増やして行けば）どのような物理的モデルも任意の精度で近似可能である。つまり、この場合、「網羅性」の程度は計算効率とのトレードオフを介して管理可能であるということになる。

\* 厳密には、より一般的な二乗可積分な関数全体に適用可能であるが、ここでは簡単のため連続関数に限定して議論を進めた。

### 3. 統計的解析及び感度解析の効率向上に関する検討

昨年度実施した統計的解析の個々のケースは、60個の入力パラメータ空間に対応している。この60次元という膨大な空間の中においては、1,000ケースというサンプルの存在は極めて粗なものであると言わざるを得ない。勿論、60個の入力パラメータの中には自ずから感度の大小があり、従って、この写像の次元は実効的には60よりも遥かに小さいものであると考えられるが、それでも尚、サンプルが空間の主要な特性を十分代表可能なものであることを示すことは、解析結果の蓋然性を明確にする上で極めて大きな重要性を有する。

この問題への対策としては、以下の二つの項目の双方が必要である。

- 1) 上記の空間に対する統計的解析及び感度解析の効率を向上すること
- 2) サンプル数が十分なものであるか否かを判断する基準を明確にすること

また、1)のより具体的な方策としては、

- ・ 計算自体の効率向上
- ・ 全体空間のうち何らかの理由で重要性の高い部分領域に集中したサンプリング効率の向上
- ・ 入出力パラメータ数の低減による空間自体の縮小

が考えられる。

以上を踏まえ、サンプル数の充足性の評価を含めて、効率向上のための上記のそれぞれの方策について以下に検討を加えるとともに、今年度の統計的解析の手順を具体化するものとする。

#### 3.1 並列コンピュータの利用

昨年度実施した人工バリア中核種移行シャドウモデルの個々の計算は、平均して約2時間（Silicon Graphics社の平均的ワークステーション上で）程度であり、単一の計算規模が大きいという訳ではない。そこで、この解析自体をベクトル化するよりは、多数のCPUを有するマシンを用いて、複数系列の計算を

同時進行で進めることが簡単かつ適切である。

以上を踏まえ、統計的サンプリング機能を含めた SCENARIO SPADE に必要な改良を施し、PNC 所有の CRAY 上にコンパイル可能なものを作成した。しかしながら、現在の人工バリア中核種移行シャドウモデルの単一ケースの計算に求められるメモリーが現在の CRAY 運用上の個々の CPU に割り当てられたメモリー制限を上回るため、PNC の現在の CRAY 稼動規則を変更しない限りは上記の様な並列計算は不可能であることが判明した。

そこで、代替案として、本年度の統計的解析においては 5 機の SG 社製ワークステーションを並列して処理にあたることとした。但し、多数の CPU を有するマシン上で人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いた解析を行うための、SCENARIO SPADE 側の問題は、上記の改良に伴い既に解消されているため、将来的には、個々の CPU へのメモリー配分が十分なマルチ CPU 機（例えば、カタロニア大学の Power Challenge は 64 個の CPU を搭載しており、メモリーの問題もない。また、時間単位の料金を支払うことにより、遠隔的に利用することが可能である。）の利用を図るべきであると考えられる。

### 3.2 全域的サンプリング数の充足性の評価

昨年度の統計的解析においては、60 個の入力パラメータについて統計的なサンプリングが行われた。つまり、この例における入力空間は 60 次元という大きなものであり、各パラメータ値について大小二種類の値を選んだとしても全体としてのサンプル数は  $2^{60}$  つまりおよそ  $10^{18}$  に達することとなる。この問題はあらゆる統計的な解析にとっての重要な課題であり、統計的解析結果が信頼すべきものであることを示すためには、空間の大きさを考慮に入れた上で、サンプル数が、当該解析の目的を達成する上で十分なものであることを確かめる必要がある。また、この様な充足性の評価を行う方法は、個々の解析の目的に応じて種々に異なる。

既に述べた通り、重要性の高い部分領域を重点的にサンプリングすることによるサンプリング効率の向上は、サンプルの分布にバイアスを持ち込むことになるため、感度解析の一部として実施するクラスタ分析の結果に人為的な影響を及ぼすことになる。このため、クラスタ分析のためには、いずれにせよまず全域的かつ均一なサンプリングを行う必要があり、第二次の重点的なサンプリ

ングに先だつて、この全域的かつ均一なサンプリングのサンプル数が少なくともクラスタ分割を指定するという目的のためには十分なものであることを調べることが必要となる。つまり、ここでの充足性の評価は、クラスタ分割という目的に照らして行われるべきものである。

2. において述べた通り、クラスタ分割は一意的に定義できるものではなく、何らかの目的関数を選んでこれを最適化する様な分割を選定するという手順が必要となる。つまり、この観点から言えば、ある規模のサンプルについてのクラスタ分析の内容は、クラスタ数を種々に変化させた場合の目的関数の変化を示すグラフとして要約されることとなる。例えば、昨年度の統計的解析については、目的関数として規模 (= サンプル数)  $N$  のサンプルにおけるクラスタ数  $P$  の分割を行った場合の平均回帰残差 (総残差を  $N$  で除したもの)、 $MSE(P, N)$  を採ることとが適切であり、この場合、クラスタ分割の収束性の基準は、次の様に定式化することが可能である。

$$(3.1) \quad \max_{1 \leq P \leq P_{best} + 1} |MSE(P, N) - MSE(P, N + M)| < \epsilon MSE(P, N)$$

上式において、 $M$  は  $N$  に比して小さな数であり、 $P_{best}$  は最適クラスタ数、 $\epsilon$  は相対誤差の許容上限である。つまり、この基準は、ある規模 ( $N$ ) の統計的解析結果について、所定数 ( $M$ ) のケースの追加を行っても、関連する範囲 ( $1$  から  $P_{best} + 1$ ) の  $P$  全てについて平均回帰残差の相対的な変動がある許容範囲以内である場合に、クラスタ分割が当該サンプル数において収束したと見なすことを意味している。

図 3.1 は、昨年度行った対数スケールの核種放出率に対するクラスタ分析結果における  $MSE$  の挙動を、 $N=980$  及び  $880$  の場合についてプロットしたものである。この例では、(3.1) の意味でのクラスタ分割の収束は認められない。他方、図 3.2 は、リニアスケールの核種放出率に対するクラスタ分析を新たに実施し、その結果に対して同様に  $MSE$  の挙動をプロットしたものである。ここでは、 $N=980$  及び  $880$  に対する  $MSE$  の振る舞いは全ての  $P$  について同様であり、上記の意味での収束が見られる。図 3.1 と図 3.2 との間の明瞭な相異は、対数スケールにおいては回帰残差に対する極低放出率側のケースの寄与が顕著となるのに対して、リニアスケールにおいては高放出率側のみが支配的な寄与を有することに起因するものと考えられる。つまり、昨年度の統計的解析におけるサンプル数は、高放出率側のケース群をクラスタとして同定するには十分であるが、

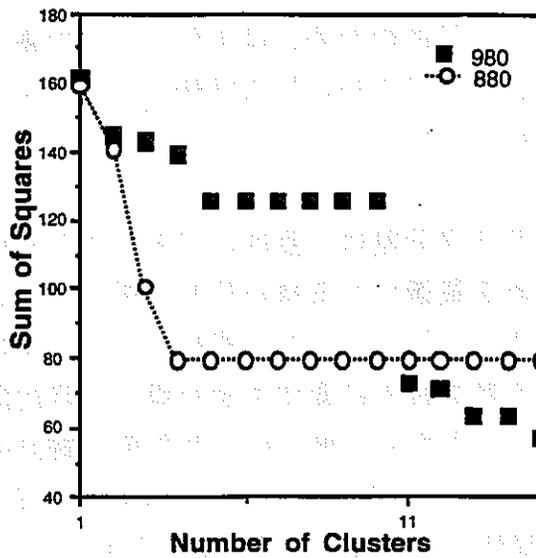


図 3.1 異なるサンプルサイズにおけるNSEのクラスタ数依存性の比較  
(1996年度統計的解析結果、対数スケール)

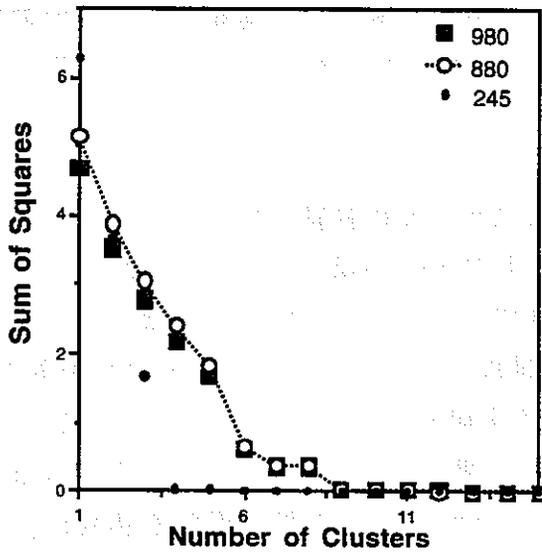


図 3.2 異なるサンプルサイズにおけるNSEのクラスタ数依存性の比較  
(1996年度統計的解析結果、リニアスケール)

極低放出率側のものについては必ずしも十分ではないということがわかる。

以上を踏まえ、本年度の解析においては、後述するクラスタ分析手法のそれぞれについて (3.1) に示す基準により (例えば  $M=N/10$ 、 $\epsilon=0.05$  として) サンプル数の充足性の評価を行うこととする。

### 3.3 重要性に応じた局部的サンプリング

昨年度の研究結果にも見られる通り、種々の感度解析の手法は明らかな感度から順番に抽出していくという傾向がある。つまり、一回の全域的なサンプリングの結果からはまずほとんど自明と行って良いような感度の組み合わせが抽出され、他のより微妙なそして多くの場合はより興味深いパラメータの感度の組み合わせは、これらの強い傾向の背後に隠れてしまうことが屢々生ずる。特に、後述するように、本年度の全域的な解析ではインベントリと半減期とを統計的にサンプリングするため、これら二つのパラメータの組み合わせについての明らかな感度 (高放出率となるためには、それ自体かあるいは親核種の半減期及び初期インベントリが十分大きいことが必要であること) がまず強調され、溶解度やコロイド移行等に対応するパラメータの感度はその陰に隠れてしまうことが予想される。この様な状況では、より高い次元の知見を得るために、第二次のサンプリングにおいて、既に感度の明確化されている入力パラメータを「ある代表点」の値で固定し、未だ感度構造が明らかとなっていない他の入力パラメータのみについて統計的なサンプリングを行うという、局部的なサンプリングを行うことが有効と考えられる。また、「ある代表点」は、何らかの意味で評価上の重要性の高い点を探るべきであると考えられる。より具体的には、「影響」が大きいという観点から全域的なサンプリングにおける最大核種放出率に対応するケース、及び「確からしさ」が高いという観点から別途設定されるリファレンスケースの二つを「代表点」として選ぶことが妥当と考えられる。

### 3.4 パラメータ数の低減

統計的解析及び感度解析の効率向上のための最後の方策は、パラメータ数を低減することにより入出力パラメータ空間を小さくするとともに、個々のケースの計算時間を低減することである。より具体的には、本年度の解析に於いては解析対象核種数を 2 個に減らし、その代わりにこれらの半減期を統計的にサンプリングすることとする (詳細は 4. 参照)。入力パラメータ数の半分以上は

各核種毎に指定されるものであるため、この措置により全パラメータ数は大きく減少することが期待される。

但し、この措置に関連して留意すべきことは、解析対象核種が（連続的に）変化するために、前節で述べたリファレンスケースとして複数のものが対応することになるという点である。そこで、この点をむしろ活用して、実在の親核種と娘核種の半減期の組み合わせとしてそれぞれ異なるものを複数選定し、それぞれに対応したリファレンスケースについて上記の局部的サンプリングを行うこととする。この場合、追加的にサンプリングされるケースの核種半減期は当該実在核種の値に固定することが必要である。

### 3.5 本年度の統計的解析の手順

以上の検討成果をまとめ、本年度の統計的解析の手順を図 3.3 に示す。なお、クラスタ分析と組み合わせて行う線形回帰分析については、前出の対数スケールとリニアスケールの両者を行うこととし、また、これと併せて入力パラメータ値の帰属性分析を行うこととする。これらの手法の詳細については、4. を参照されたい。

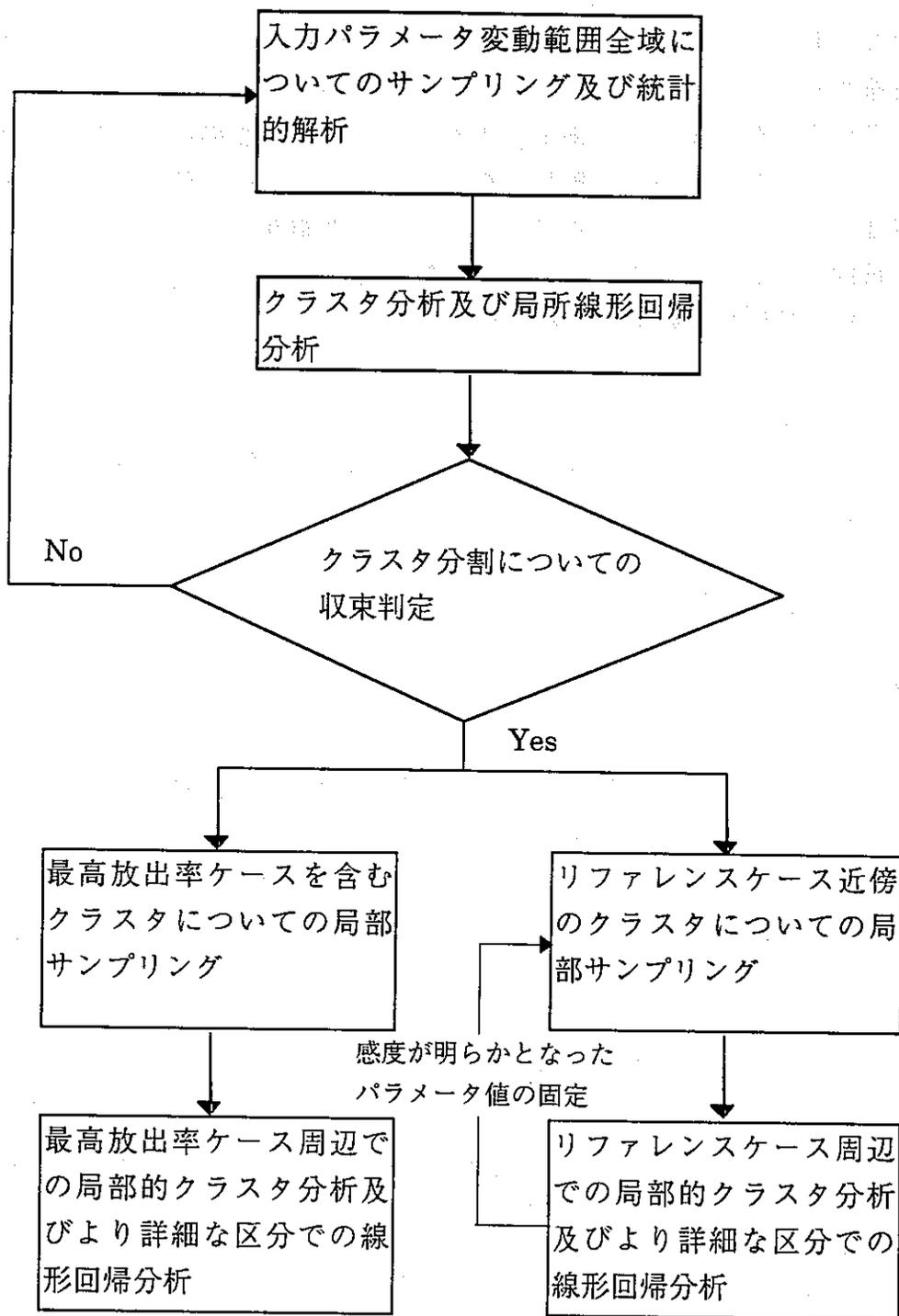


図 3.3 本年度行う統計的解析の全体手順

## 4. 人工バリア中核種移行に関する統計的解析及び感度解析

核種移行シャドウモデルを用いた統計的計算の目的は、専門家によって否定されていない範囲で各パラメータの入力値を統計的にサンプリングして多数の解析を実施することにより、ニアフィールド内の多様な核種移行挙動を網羅し、またそれぞれを比較することにある。本章では、この様な網羅的な解析の内容を明確にするために、以下に、解析の前提、人工バリア中核種移行シャドウモデルの概要、及びシャドウサブモデルとパラメータ範囲をまとめた上で、引き続き、全域的なサンプリングによる統計的解析及び局部的（第二次）サンプリングによる統計的解析の結果をそれぞれ述べることとする。

### 4.1 解析上の前提

以下に、昨年度のワークショップに於いて確認された解析上の前提をまとめる。

#### 4.1.1 地層処分システム

##### 1) 廃棄物

軽水炉の再処理により生ずる高レベル放射性廃液のガラス固化体。他の代替的な廃棄物（例えば、使用済燃料あるいはTRU廃棄物）は考慮しない。

##### 2) 人工バリアシステム

以下の要素から構成されるバリアシステムを想定する。

- ・ ステンレスキャニスタ
- ・ 炭素鋼オーバーパック
- ・ 高圧縮ベントナイト緩衝材（クニゲルV1）

なお、代替的なバリア材料としては、以下のものが想定されている。

- ・ コンクリート支保、プラグ及びグラウト
- ・ 銅あるいはチタン性オーバーパック
- ・ 砂／ベントナイト混合物を用いた緩衝材
- ・ 鉄製支保
- ・ ベントナイトを用いたグラウト

人工バリアの処分場内定置方式としては、処分坑道横置きを主として考える

事とする。

### 3) 母岩

母岩としては花崗岩系のものを想定し、亀裂状媒体であることを仮定する。水理地質の観点からは、地下水の支配的流路は母岩の中に種々のスケールに於いて存在する不連続面に在るものとする。不連続面としては、具体的には以下の2つを考える。

- ・ 処分坑道を横切る亀裂群
- ・ 処分坑道（従って人工バリアシステム）とは直接連絡していない断層あるいは破碎帯との距離は少なくとも数十メートル以上と仮定する。

### 4) 地下水

処分場周辺を流下する地下水は、天水起源あるいは海水起源もしくはこれらの混合を仮定する。更に、処分サイトの位置（後述）ならびに想定される将来の地質学的諸プロセスを考えれば、地下水のタイプは天水起源と海水起源との間で時間的に変動する可能性が高い。また、以上に加えて、恐らくは岩石との化学反応により強く支配されているであろう岩体マトリクス中の空隙水の組成は、循環地下水と有意に異なるものとなる可能性もある。

### 5) サイト

サイトの地質学的あるいは水理地質学的な環境としては、沿岸地域の堆積層の下部に位置する基盤岩を他に優先して考えることとする。但し、その他の可能性が排除された訳ではない。また、この様なサイトもしくはその近傍で現在生じている、あるいは将来生ずる可能性のある地質、気象学的事象として以下を想定する。

- ・ 隆起・浸食及び沈降・堆積
- ・ 断層活動及び地震
- ・ 火山活動
- ・ 海水準変動

#### 4.1.2 前提条件

##### 1) 核種移行メカニズム

核種移行媒体としては地下水のみを考え、従ってガス等の他の流体による移行メカニズムは考慮しないものとする。但し、この事はニアフィールドに於けるガスの存在と、それに起因する各バリア性能への影響までも排除するものではないことに留意されたい。

## 2) 評価期間

本解析に於いては、「種々の環境条件変化のタイムスケールと比較して、もはや先行する期間に於ける最大放出率を上回るピークが生ずる可能性が無視し得る様になる迄」計算を継続することを原則とする。

## 3) 評価対象核種

第一次とりまとめに於ける対象核種[1]にいくつかの長寿命のアクチニド元素同位体(\*)を加えた以下の合計 21 核種を想定する。

Cm-247\*→Am-243→Pu-239→U-235→Pa-231\*

Am-241→Np-237→U-233

Pu-240→U-236→Th-232

U-238→U-234→Th-230→Ra-226\*

Cs-135, Sn-126, Pd-107, Tc-99, Zr-93, Se-79

### 4.1.3 流体力学

#### 水理学的構成単位

解析対象領域として、廃棄物、人工バリアシステム及びその周囲にあるニアフィールド母岩を想定するものとする。また、母岩の外側境界はトンネルを横切る亀裂群がより大規模な水理学的不連続面である断層あるいは破碎帯と出会う地点に設定する。

解析対象領域は、水理学的特性から更に以下の 8 種類のユニットに分割される。

- ・ ガラスマトリクス：未反応のガラス及び表面変質層
- ・ ガラス中のギャップ：固化体中のひび割れ及びボイド
- ・ オーバーパックマトリクス：未反応のオーバーパック及び腐食生成物層
- ・ オーバーパック中のギャップ：オーバーパック及び腐食生成物中に存在するひび割れ及びすき間

- ・ 緩衝材マトリクス：健全な緩衝材マトリクス及び連続体である変質領域
- ・ 緩衝材中のギャップ：緩衝材中のひび割れ、すき間、あるいは（ガス移行等で生成する）キャピラリー
- ・ 母岩マトリクス：健全部あるいは変化した領域（EDZ等）に於ける岩体マトリクス
- ・ 亀裂

上記の区分に於いて、マトリクスとは「動水勾配が水理学的に不可能では無い範囲内にある限り物質移行が常に拡散により支配されている領域」を指すものとする。

母岩以外の各領域にあるマトリクスの形態及び容積はそれぞれ時間の経過と共に変化し得る。また、その変化のパターンとして以下のものは起こり得ないと考えられた。

- ・ 不連続な変化
- ・ 滑らかではない変化
- ・ 周期的に繰り返す変化

この根拠としては、人工バリアマトリクスの変化が（ギャップ部とは異なり）主として、不可逆な化学反応と物質移動の組み合わせとして生ずるものであり従って急激な変化や繰り返しは極めて考えにくい事が挙げられる。

更に、特にガラスマトリクスについては、その体積変化は単調でなくてはならないと考えられた。これは、ガラスの反応によって生ずる変質層が常に体積の減少を伴うためである（これはオーバーパック腐食や緩衝材変質の生成物には必ずしも当てはまらない）。また、これらの変化に対応した時間スケールは、ナチュラルアナログ等に於ける小さい反応速度から見積もって 100 万年以下と考えられ、また、ガラスについては加速試験に相当するソックスレー浸出試験結果から 1 年以上とすることができる。

各水理学的単位の中には、流体として水とガスの両者が存在する可能性を考えることとする。

#### 1) ギャップ中の透水量係数分布

(1)に従えば、移流による物質移動は各バリアのギャップ部に於いてのみ生ずることとなる。ガラス、オーバーパック及び緩衝材中のギャップについては、

対応する透水量係数が不均質なものである可能性は否定できないが、現在の現象理解の程度から考えてこれを定量的な解析に取り込むことの優先順位は必ずしも高くないと判断された。換言すれば、現時点では、これ等の人工バリア中に生ずるかもしれないギャップ内の透水量係数分布の詳細よりも、まず、ギャップが存在する場合と存在しない場合での地下水流速場の差異とその核種移行への影響を定量化することの重要性の方が高いと考えられた。従って、以下に於いては、母岩の亀裂中に於ける透水係数場の不均質性のみを対象とする。

亀裂中の透水量係数場は、現位置での亀裂表面の観察結果に基づき、滑らかなものではないと考えられた。そして、その不均質性の程度は大小様々であり、異方的である可能性も等方的である可能性もある。また、空間的トレンドとしては、それが存在しない場合と単純な線形のものが存在する場合との比較が、他のより複雑なものを考えるよりも至急性が高いと判断された。

加えて、亀裂中の透水量係数場が空間的不均質性のパターンとして有する諸特性（滑らかさ、強度（標準偏差）、異方性、及びトレンド）は時間の関数として変化し得る。然しながら、この様な変化についての現在の知見は限られており、連続か不連続か、単調か、不単調か、滑らかか、滑らかでないか、また、周期的であるか否かを特定することは困難である。時間スケールについても現状での特定は難しい。

## 2) 圧力境界条件

ニアフィールド母岩の外側境界及び内側での境界（存在する場合）に於ける圧力条件は、不均質性を呈するが、過去の原位置での測定結果から、その空間的パターンは滑らかに変化しまた不均質性の程度も小さいものであると考えられた。この仮定は、地下水流動の数学的定式化（即ち一階の微分演算子を含むこと）と整合的である。然しながら、その時間的変動についての知識は限られており、連続性、単調性、滑らかさ、周期性、及び時間スケールを特性することは困難である。

## 3) ソース／シンク

地下水流動モデルに於けるソース／シンクは、本質的に3次元である体系を2次元の平面上に射影することによって無視される流れの成分を取り組むためのものである。特に、亀裂に関して言えば、ソース／シンクとして取り扱うべき亀裂面に直交する成分の流れは、他の亀裂との交差線及び処分坑道に沿って生ずるゆるみ域以外には考えにくいとされた。また、ゆるみ域のサイズ（幅）

としては、原位置での観察結果に基づき、坑道半径と同等の数メートル規模のものが参考値として示された。

#### 4) マトリクスの形状因子

形状因子（空隙率、屈曲率、等の空隙構造の幾何的特性）は、区分的に線形なパターンのもものが、他のより複雑なものよりも高い優先順位にあると考えられた。また、異なる形状因子を有する部分領域間の境界の移動は、以下に該当しないと考えられた。

- ・ 不連続
- ・ 非単調
- ・ 周期的

この判断は、形状因子の変化が、人為的に地下深部に持ち込まれたバリア材が周囲の環境と新たな平衡を達成する連続的な変化過程で生ずる原則的に不可逆の反応—移動プロセスの帰結であるという現象理解に依拠するものである。

上記の変化に対応する時間スケールは、前出のものと同じ理由によりいずれのバリア材についても百万年以上ではなく、また、ガラスについては1年以下ではないと考えられた。

#### 4.1.4 地球化学

##### 1) 鉱物の地球化学的特性

母岩の鉱物学的特性の空間分布（化学的緩衝性の分布）は、流動する地下水との相互作用という観点からとらえられるべきものであるため、それ単独ではなく、背後にある不均質な透水係数場との関連において（つまり統計的な相関として）議論されるべきである。

鉱物学的特性の空間分布と透水係数場との統計的相関のタイプとしては、後述する具体的な例を考慮して、以下の3種類の全てを考えることとした。

- ・ 正の相関
- ・ 負の相関
- ・ 相関なし（統計的に独立）

\* 注

正の相関の例

亀裂表面がある特定の組成を持つ地下水との反応により変質し、かつ、その結果生ずる二次鉱物（例えば、セメントに起因する高アルカリ地下水と母岩との反応により生ずるゼオライト等）が想定する反応（例えば吸着）に対して以前の鉱物よりも化学的に活性である場合、母岩の化学的反応性は地下水の支配的流路に沿って選択的に増大する、つまり正の相関が生ずることとなる。

負の相関の例

透水係数及び化学的緩衝性がいずれも亀裂内充填鉱物によって支配されており、かつ充填鉱物がより活性である場合、亀裂内が密に充填されている部位ほど化学的に活性な状態、つまり負の相関が生ずることとなる。

1) ニアフィールドに流入する地下水の化学特性

ニアフィールドに流入する地下水化学特性の時間的变化については、以下の状況は生じにくいと判断された。

- ・ 不連続あるいは滑らかでない変化
- ・ 一つの化学特性から他の特性へ推移するのに 100 万年以上の時間的スケールを要する様な非定常状態

変化のタイプとしては単調なもの、及び単調ではないもののいずれも可能であると考えられる。

\* 注1

地震時の seismic pumping の様に事象自体は不連続なものを考えても、母岩の化学的緩衝性により地下水特性の変化はより滑らかなものになると想定される。

\* 注2

隆起・浸食の様に地球化学的条件の変換をもたらす様な地質学的プロセス自体は数百万年のオーダーを上回る時間スケールにあると想定されるが、その結果として生ずるニアフィールドの変化、つまり化学的フロントが数 10 m を横切

るための時間は相対的に短いと考えられる。

#### 4.1.5 放射性元素の化学及び移行特性

##### 1) 移行形態及び反応

各元素の移行形態として、これまでの室内実験及び原位置での天然同位体等の観察結果を踏まえ、以下の6種類を考えることとする。

- ・ 溶質
- ・ 吸着種及び共沈
- ・ 疑似コロイド
- ・ 真性コロイド
- ・ 沈殿 (安定相)
- ・ 沈殿 (準安定相)

更に、緩衝材マトリクス中に於いてはコロイドの形態 (真性ないしは疑似コロイド) にある核種が移行することはないという仮定を置く。また、各形態間の反応が速く、瞬時平衡を達成し得るものであるか、あるいは速度論的に扱うべきものであるかについて区分を行った。結果を図 4.1.1 に示す。

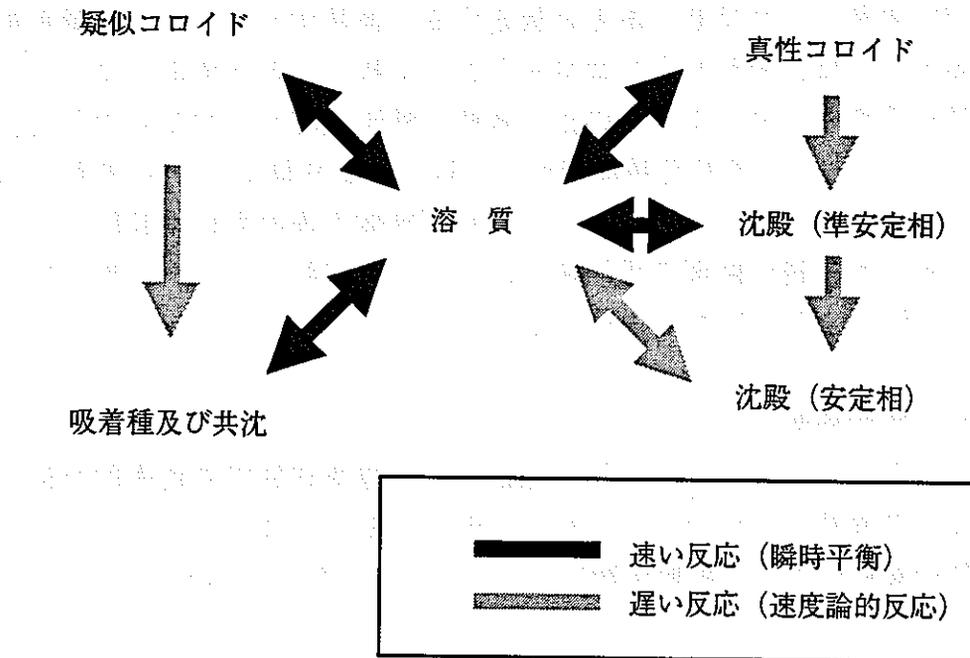


図 4.1.1 移行形態及び各形態間の化学反応の区分

## 2) 各移行形態の濃度及びその総濃度の化学条件への依存性

互いに瞬時平衡の関係にある各移行形態の濃度とそれらの総濃度の関係としては、吸着種、共沈、及び真性/疑似コロイド濃度は、特に高い総濃度の領域に於いて線形ではないと考えられる。

各移行形態の濃度は液相及び固相の地球化学的条件にも依存するものであると考えられる。この依存性タイプとして、以下は排除すべきと判断された。

- ・ 不連続あるいは滑らかではないもの

このことは、通常の質量作用式で表現される関係と整合的なものである。但し、この様な依存性は単調ではない可能性も指摘された。

検出下限に対応する  $10^{-12}$  mol/l 以下の濃度については評価上の重要性は低いと判断された。また、廃棄物のインベントリーから考えて、1 mol/l 以上の溶質濃度は現実的ではない。

## 3) 各移行形態の移行特性

### 規格化された移流速度

地下水流速によって規格化された移流速度としては、沈澱（安定相、及び準安定相）及び吸着種のそれは0であると仮定する。換言すれば、もし移動可能な沈澱があるとすれば、それを全てコロイドとして扱うこととする。コロイドを除く他の移行形態は、全て1以下の正の規格化移流速度を有するものと考えられる。また、コロイドの規格化移流速度は1以上になり得るが、10を超えることはない。これは、コロイドが、コロイド及び媒体の表面電荷に起因する斥力のために、地下水流速が断面の平均値よりも大きく空隙（あるいは亀裂）中央部を選択的に流下する可能性があるためである。

### 規格化された拡散係数

移流速度と同じく、沈澱及び吸着種の拡散係数（標準状態での代表的な溶質の拡散係数により規格化されたもの）も0と仮定する。コロイドを含む他の全ての移行形態の規格化された拡散係数は、1以下の正の値を採るものとする。

## 4.2 人工バリア中核種移行シャドウモデルの概要

人工バリア中核種移行シャドウモデルの目的は、地下水を介した溶質移動と

しての核種の人工バリアからの放出フラックスを定量化することにある。この目的を、極力幅広いプロセスを対象に含めつつ達成するためには、

1) 地下水自体の動き

2) 地下水中の放射性核種の動きやすさ

の二つをできるだけ一般的、かつ柔軟性のある方法で定式化することが必要である。(1)は、基本的には、三次元性を含めた様々な幾何的特徴を失うことなく、ニアフィールド自体の構成と形状とを極力簡潔に表現することが課題であり、この点については、ニアフィールドの全体を種々の局所座標系を有するボックスモデルとして表現する手法を開発した。また、(2)については、各核種の採り得る化学形態を一つずつ特定することなく、全体としての「動きやすさ」を適切に表すことが課題であり、これについてはやはり昨年度、瞬時平衡グループという概念に基づき一般化された移流-拡散方程式が作成されている。

人工バリア中核種移行シャドウモデルとは、局所座標系を有するボックスモデル上の一般化された移流-拡散方程式に他ならず、数値解法の目的には、各ボックス内での空間的離散化を行ったものをテンソルとして表現している。

本節では、以上の点を中心として、同シャドウモデルの概要をまとめることとする。

#### 4.2.1 局所座標系を有するボックスモデル

既存のほとんど全ての核種移行モデルは1次元あるいは2次元であるが、実際の核種移行現象は、もちろん、現実には3次元のものであり、1次元あるいは2次元のモデルの選択は、多かれ少なかれ、現在の計算機の性能上の限界に対応するものである。探索型システム性能評価の場合、時間的に変化する不均質なシステムの中で核種移行問題について統計的なアンサンブルを対象とした多数の計算を行うことが求められるため、この様な計算上の制約はより大きな意味を持つこととなる。

上述した種々の要求と制約条件とを満たす様なニアフィールドの構造及び幾何的な表現の方法は以下の様なものである。

a. ニアフィールドを、それ本来の形状から連続的に従って、トポロジー的な全

ての性質を保持したまま、互いに連結したボックス群へと変形する。

- b. 各ボックスについて、それぞれ対応する核種移行プロセスを表現する上で最も適した局所座標系が定義される。各ボックスの局所座標は必ずしも全て同じである必要はない。

a. の目的は本来の形状との間に最小限の（つまり、トポロジー的な）整合性を保ちつつ単純化を行うことであり、b. の目的は解析の用途と個々の移行現象の特徴とを考慮しつつ、適切な（局所的）詳細さと精度とを約束することにある。

より具体的には、ニアフィールドが、

- ・ ガラス固化体
- ・ オーバーパック
- ・ 緩衝材
- ・ 母岩ゆるみ域

という4つの要素から成るものとし、また、各人工バリア材について、物質移動が拡散によって支配される様な多孔質の「マトリクス」部と、移流が生じ得る様な相互に連結した亀裂から成る「ギャップ」とを考えると。統計的計算で想定するニアフィールドの形状を図4.2.1に示す。

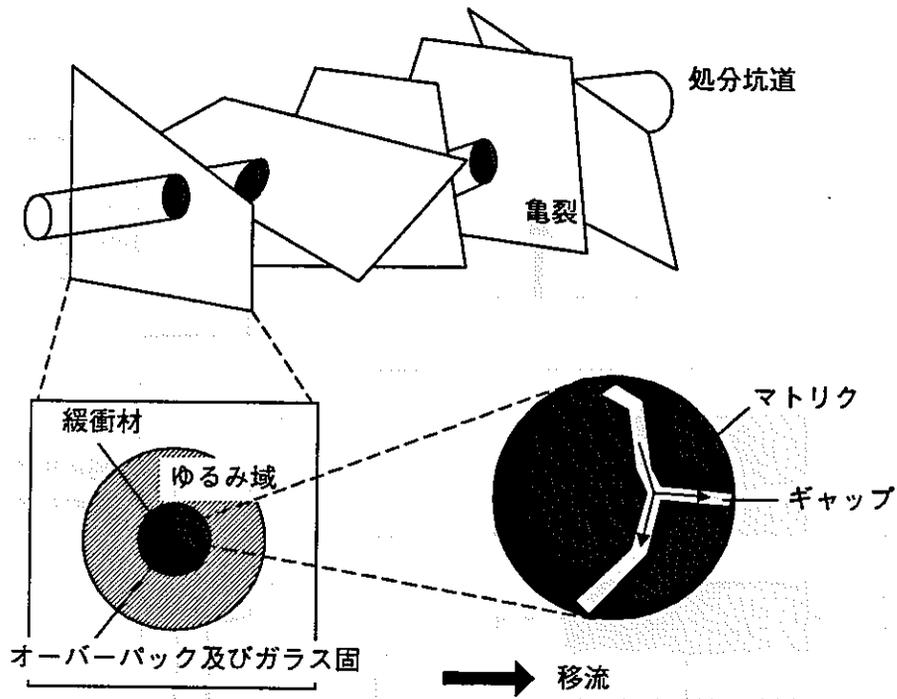


図 4.2.1 ニアフィールドの形状

表 4.2.1 各円筒形部分領域の寸法

名 称	外側半径(m)
ガラス固化体	0. 2
炭素鋼製オーバーパック	0. 4 3
ベントナイト緩衝材	1. 1
ゆるみ域	1. 6

ニアフィールド内の核種移行問題を数学的に定式化するために、図 4.2.1 のニアフィールド形状を図 4.2.2 に示す用に複数のボックスにより表現する。更に、緩衝材マトリクス及びギャップについては一次元の円筒座標を導入することにより、対応する空間離散化を行う。

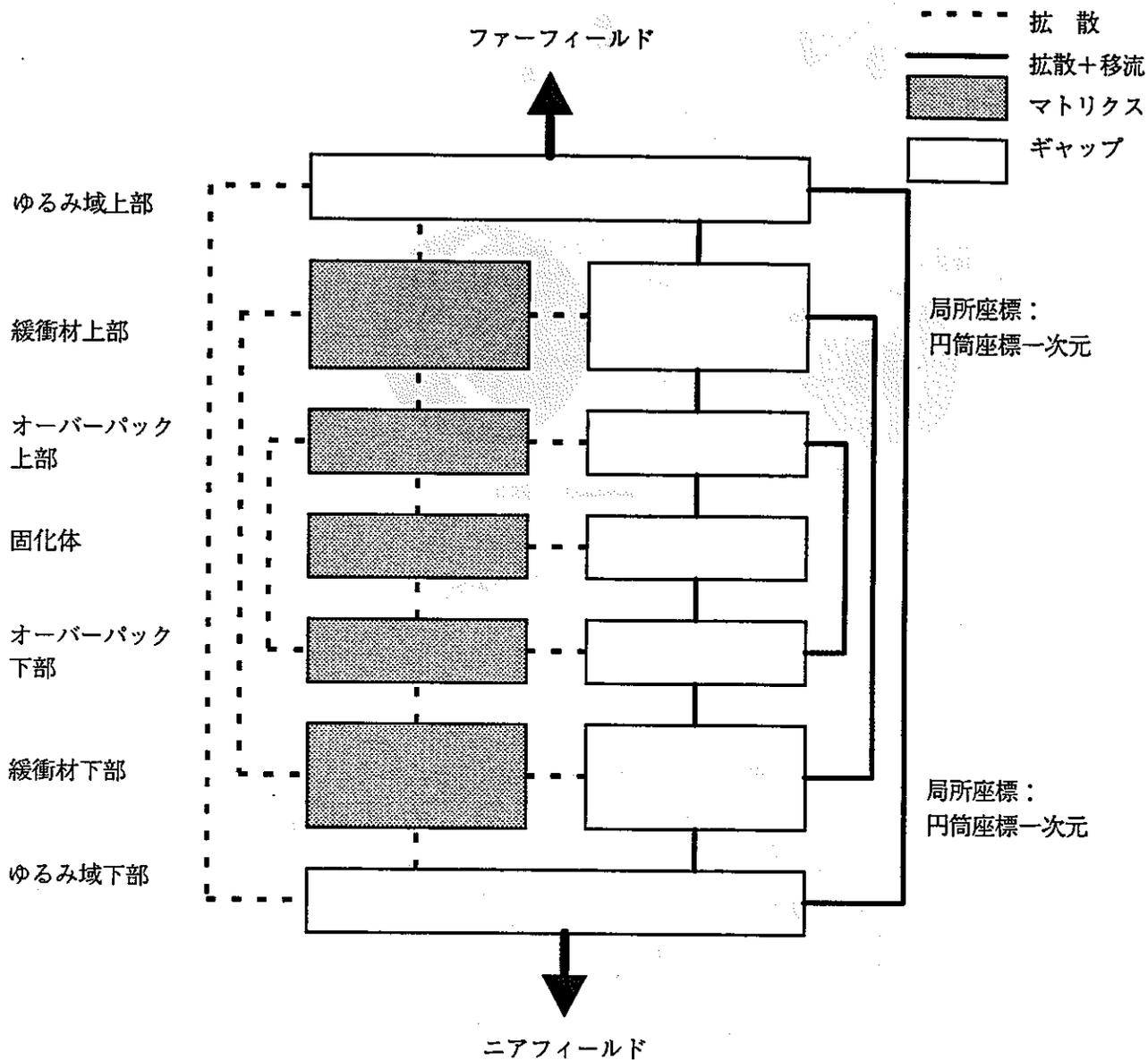


図 4.2.2 ボックスモデル及び局所座標系によるニアフィールドの表現

#### 4.2.2 一般化された移流－拡散方程式

シャドウモデルを用いた解析に於いては、多様な核種移行プロセス及び広範な環境変化の影響を考慮することが必要である。しかしながら、シャドウモデルが汎用のものとなるためには、個々の化学形態やこれ等の反応を具体的に特定することなく、これ等の全体をある抽象的な枠組みで取り扱うべきである。一般化された移流－拡散方程式は、この様な要請の下に開発されたものである。

まず、核種  $i$  の単一の化学形態  $k$  (その具体形は問わない) としての濃度を  $u_i^k$  とし、これについての移流－拡散方程式を考える。

(4.1)

$$\frac{\partial u_i^k}{\partial t} = \nabla \cdot (D_i^k \nabla u_i^k) - \nabla \cdot (v_i^k u_i^k) + R_i^k + \lambda_{i-i} u_{i-i}^k - \lambda_i u_i^k + S_i$$

但し、

$D_i^k$  : 化学形態  $k$  の拡散係数 ( $\geq 0$ )

$v_i^k$  : 化学形態  $k$  の移流速度 ( $\geq 0$ )

$R_i^k$  : 化学形態  $k$  の反応項

$\lambda_i, \lambda_{i-i}$  : 核種  $i$  及びその親核種の崩壊定数

$S_i$  : 化学形態  $k$  の他のボックスとの間の物質移動フラックス

次に、 $k$  と瞬時平衡の関係にある全ての化学形態のグループ (瞬時平衡グループ) を考え、対応する移流－拡散方程式の全てを足し合わせる。この時、グループ内での反応項は全て相殺されるため、この瞬時平衡グループ全体の濃度を  $\tilde{u}_i$  とし、次式が得られる。

(4.2)

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} = \nabla \cdot \nabla (\tilde{D}_i \tilde{u}_i) - \nabla \cdot (\tilde{v}_i \tilde{u}_i) + \tilde{R}_i + \lambda_{i-i} \tilde{u}_{i-i} - \lambda_i \tilde{u}_i + S_i$$

但し、

$$\tilde{D}_i : \text{瞬時平衡グループの平均拡散係数} \quad \left( \tilde{D}_i = \frac{\sum_k D_i^k u_i^k}{\tilde{u}_i} \right)$$

$$\tilde{v}_i : \text{瞬時平衡グループの平均移流速度} \quad \left( \tilde{v}_i = \frac{\sum_k v_i^k u_i^k}{\tilde{u}_i} \right)$$

$\bar{R}_i$  : 他の瞬時平衡グループとの間の速度論的反応項

(4.2)式は、一般化された移流-拡散方程式と呼ばれ、 $D_i$ 、 $v_i$ 、及び $R_i$ を $u_i$ の関数として指定することにより、この瞬時平衡グループのメンバーや、これ等の間の反応を個別具体的に考える必要がなくなる点が、その最大の特長である。

$\bar{D}_i$  : 核種  $i$  の平均拡散係数

$\bar{v}_i$  : 核種  $i$  の平均移流速度

$\bar{R}_i$  : 核種  $i$  の速度論的反応

$\bar{S}_i$  : 核種  $i$  のボックス間での物質移動に対応するソースシンクターム

これ等のパラメータは、一般に総濃度 $\bar{u}_i$ 及び位置と時刻の関数であり、各パラメータに対応した関数空間の全体を有限項のフーリエ級数の様な標準的な基底を用いて表現し、調査することは原理的に可能ではあるが必ずしも現実的ではない。各関数空間の中で物理的にあり得ないあるいは非常に考えにくい部分を「切り落とし」て、解析を合理的な作業量にするためには、各パラメータに関連した分野の専門家からの情報提供が必要となる。また、上記の4つのパラメータを更に細分化することにより、既存の研究分野との対応が容易なより詳細な下位のモデルにより核種移行モデルをサポートすることが有効である。この様な観点からは最初の2つのパラメータについては、後述する様により具体的な下位のモデル(シャドウサブモデル)を用いることが適切である。これに対し、 $\bar{R}_i$ と $\bar{S}_i$ についてはこれらを更に細分化することにより研究分野との対応が改善される見通しは直ちに明らかではない。特に $\bar{S}_i$ については、むしろその形式ができるだけ簡単なものとなる様にボックス分割を設定することが望ましい。

#### 放射性元素の化学及び地球化学環境シャドウサブモデル

このサブモデルは、速い化学反応により瞬時平衡の状態にある各化学形態間の質量配分を記述するものである。

$$(4.3) \quad \bar{u}_i(\xi) \equiv \theta(\xi, \bar{u}_i, \Psi)$$

但し、

- $\xi$ : 移行特性の異なる化学形態を識別するためのインデックス  
 $\theta$ : 個々の化学形態に対応した全濃度の配分 (核種移行形態モデル)  
 $\Psi$ : 核種の移行形態に影響を及ぼす pH、Eh、温度等の化学条件  
 (地球化学環境モデル)

### 移行特性シャドウサブモデル

一つの化学形態グループ全体についての平均移動特性を定量化するためには、以下の2つの移行特性をインデックス $\xi$ に対応して定義する必要がある。

- $\alpha_i^*(\xi, \Psi)$ : 化学条件 $\Psi$ におけるインデックス $\xi$ の化学形態の拡散係数を標準状態でのそれにより規格化したもの。(拡散係数モデル)  
 $\beta_i^*(\xi, \Psi)$ : 化学条件 $\Psi$ におけるインデックス $\xi$ の化学形態の移流速度を地下水自体の流速により規格化したもの。(移流速度モデル)

### 流体力学シャドウサブモデル

(4.2)式の平均移行特性 $\bar{D}_i$ 及び $\bar{v}_i$ を定量化するためには、上記に加えて、以下のモデルが必要となる。

- $\tau_{(x,t)}$ : あるボックス中の媒体の空隙構造に対応した形状因子の分布と時間変化 (形状因子モデル)  
 $v_{(x,t)}$ : あるボックス中の流体の移流(動)速度分布と時間変化 (流速場モデル)

以上の様なパラメータの更なる細分化の結果、(4.1)式中の平均移行特性はそれぞれ次の様に定式化される。

(4.4)

$$\bar{D}_i = \frac{\tau(x,t)D\alpha_i}{\bar{u}_i}$$

$$\bar{v}_i = \frac{v(x,t)\beta_i}{\bar{u}_i}$$

但し、

$$\alpha_i(\bar{u}_i, \Psi) = \int \alpha_i^*(\xi, \Psi)\theta_i(\xi, \bar{u}_i, \Psi)d\xi$$

$$\beta_i(\bar{u}_i, \Psi) = \int \beta_i^*(\xi, \Psi)\theta_i(\xi, \bar{u}_i, \Psi)d\xi$$

なお、統計的解析で用いる各シャドウサブモデルの詳細については、4.3を参照のこと。

#### 4.2.3 一般化された移流-拡散方程式の離散化とそのテンソル表現

前項で定式化した一般化された移流-拡散方程式は、各放射性核種のそれぞれの瞬時平衡グループについて適用され、対応する計算が実施されるが、計算に当たっては式(4.2)を空間的に離散化することが必要となる。このため、注目する質量は、

$i$  : 放射性核種、 $i \in [1, \text{同位体数}]$

$j$  : 瞬時平衡グループ、 $j \in [1, \text{瞬時平衡グループ数}]$

$k$  : 空間メッシュ、 $k \in [0, Q-1]$ 、 $Q$  : メッシュ数

という三種類の添字によって $m_{ijk}$ と表現されることとなる。そこで、以下ではこれらの添字を合理的に表現するために、テンソルを用いることとする。即ち、一般化された移流-拡散方程式は、まず空間的に離散化され、更に、これは物質移動テンソル、物質交換テンソル（異なる瞬時平衡グループ間、及びギャップマトリクス間での質量のやりとりに対応）、ソース/シンクテンソル（ガラス固化体からの核種の供給、及びニアフィールドへの流出）及び放射性壊変テンソルとして分割される。

セル $k$ のギャップ部分に存在する同位体 $i$ の $j$ 番目の瞬時平衡グループ総質量を $m_{ijk}^G$ とすると、ギャップ内での濃度は次式で与えられている。

$$(4.5) \quad C_{ijk}^G = \frac{m_{ijk}^G}{\phi_k(t)v_k(t)}$$

但し、 $\phi_k(t)$ 及び $v_k(t)$ は、それぞれセル $k$ においてギャップが占める体積割合と、セルの体積とを示す。

また、同様に、マトリクスについては次式が成立する。

(4.6)  $C_{ijk}^M = \frac{m_{ijk}^M}{(I - \phi_k(t))\theta_k(t)v_k(t)}$

$$C_{ijk}^M = \frac{m_{ijk}^M}{(I - \phi_k(t))\theta_k(t)v_k(t)}$$

ここで、 $\theta_k(t)$ は、セルkに於けるマトリクス有空隙率である。  
更に、ゆるみ域内では、次式が得られる。

(4.7)

$$C_{ijk}^{DZ} = \frac{m_{ijk}^{DZ}}{(\theta_k^{DZ}(t)v_k(t))}$$

但し、 $\theta_k^{DZ}(t)$ ゆるみ域内の全空隙率。

また、元素*l*に対応した質量テンソル  $M_{ijk}$  も、同位体の質量テンソルに基づき以下の様に定義することが可能である。

(4.8)

$$M_{ijk} = \sum_i E_{ij} m_{ijk},$$

(4.9)

$$E_{ij} = \begin{cases} 1(i) \\ 0(ii) \end{cases}$$

但し、(i) *i*が*l*の同位体である場合、(ii)それ以外の場合。

勿論、元素濃度もまた、(4.5)~(4.7)と同様に定義することができる。

さて、以上に基づきギャップあるいはマトリクスそれぞれの質量テンソル  $m_{ijk}$  の変化に対して、以下の支配方程式が得られる。

$$(4.10) \quad \frac{\partial m_{ijk}(t)}{\partial t} = T_{ijk}(t) + \sum_n \lambda_{in} m_{nj k}(t) + J_{ijk}(t) + R_{ijk}(t)$$

(4.10)が目的とする支配方程式であり、右辺の各項目は、それぞれ以下のものである。

- 物質移動テンソル  $T_{ijk}(t)$  : セルkの境界を横切る物質移動による  $m_{ijk}$  の変化率

- ・ 放射性壊変テンソル  $\lambda_{in}$  :  $\lambda_{in}$  は、同位体  $n$  の崩壊による同位体  $i$  の生成率 (非負) を示す。特に、 $n = i$  の場合、 $\lambda_{in}$  は 0 となる (同位体  $i$  の崩壊により、 $i$  自身は、生成されないため)。
- ・ ソース/シンクテンソル  $J_{ijk}(t)$  : 外部からの核種の供給あるいは逆に流出による  $m_{ijk}$  の変化率
- ・ 物質交換テンソル  $R_{ijk}$  : 異なる瞬時平衡グループ間、及びギャップマトリクス間での質量のやりとり

以下、それぞれのテンソルについて詳述することとする。

### 1) 物質移動テンソル

ここでは、二重空隙モデルに於けるギャップ及びマトリクスのそれぞれについて、移流あるいは/及び拡散による物質移動項を定式化する。これは、円筒座標系での差分セルに於いて空間平均をとることにより、次の物質収支式で定義される。

$$(4.11) \quad T_{ijk}(t) = -\int S_k F_{ij} \cdot n ds$$

但し、 $S_k$  ; セル  $k$  の表面積、

$F_{ij}$  ; 瞬時平衡グループ  $j$  に属する  $i$  番目の同位体のフラックス

$n$  ; セル  $k$  における外向き単位法線ベクトル

(4.11) 式は、半径方向及び周方向の 2 つの成分を有している。また、図 4.2.2 に示したボックスモデルの定義では、物質移動が左右対称であることが前提となっている。このため、物質移動テンソルは次の様に書き下すことができる。

(4.12)

$$T_{ijk}(t) = A_k^- F_{ijk}^- - A_k^+ F_{ijk}^+ + 2A_k^0 F_{ijk}^0,$$

但し、 $A_k^-$  及び  $F_{ijk}^-$  はそれぞれセル  $k-1$  と  $k$  との間の境界の面積及び対応する半径方向の物質移動フラックスを、また  $A_k^+$  及び  $F_{ijk}^+$  はセル  $k$  と  $k+1$  との間の同様の量を表す。また、 $2A_k^0$  は  $k$  番目の位置にあるセルと、これと上・下対称の位置にあるセルとの間の境界の面積を示し、 $F_{ijk}^0$  は、これら二つのセルの間の、つまり周方向の物質移動フラックスを示す。

周方向、及び半径方向の物質移動フラックスを具体的に記述するためには、更に、ギャップとマトリクスとの間の区分を行う必要がある。これは、マトリクスでは拡散のみが生ずるのに対して、ギャップは移流と拡散の両者の寄与を考慮する必要があるためである。

さて、まず(4.12)式のセル境界に対応した各方向の(単位面積当たりの)拡散による物質移動フラックスは、それぞれ以下で与えられる。

$$(4.13) \quad \begin{aligned} F_{ijk}^- &= \frac{D\partial(\alpha_{ij}((C_{ij}(r))C_{ij}(r)))}{\partial r} \Big|_{r=r_k^-}, \\ F_{ijk}^+ &= \frac{D\partial(\alpha_{ij}((C_{ij}(r))C_{ij}(r)))}{\partial r} \Big|_{r=r_k^+}, \\ F_{ijk}^\theta &= \frac{1}{r_k^{mid}} \frac{D\partial(\alpha_{ij}((C_{ij}(\Theta))C_{ij}(\Theta)))}{\partial \Theta} \Big|_{\theta=\theta_k^{opp}}. \end{aligned}$$

但し、 $\alpha_{ij}$  ; 瞬時平衡グループ  $j$  に属する同位体  $i$  の規格化平均拡散係数  
 $r_{k-1}^- r_k^+$  ; それぞれセル  $k-1$  と  $k$ 、及びセル  $k$  と  $k+1$  の境界の位置  
 $\theta_k^{opp}$  ; セル  $k$  と、それと上下対称の位置にあるセルとの境界  
 $r_k^{mid}$  ; セル  $k$  の中心位置

(4.13)式は、次の様に差分化される。

$$(4.14) \quad \begin{aligned} F_{ijk}^- &= \frac{D\alpha_{ijk}(C_{ijk}^{mid}) - D\alpha_{ij(k-1)}(C_{ij(k-1)}^{mid})C_{ij(k-1)}^{mid}}{d_{k-1,k}}, \\ F_{ijk}^+ &= \frac{D\alpha_{ij(k+1)}(C_{ij(k+1)}^{mid})C_{ij(k+1)}^{mid} - D\alpha_{ijk}(C_{ijk}^{mid})C_{ijk}^{mid}}{d_{k-1,k}}, \\ F_{ijk}^\theta &= \frac{D\alpha_{ijk}(C_{ijk}^{mid})C_{ijk}^{mid} - D\alpha_{ij(opp)}(C_{ij(opp)}^{mid})C_{ij(opp)}^{mid}}{d_{opp,k}}, \end{aligned}$$

但し、 $C_{ijk}^{mid}$  ; セル  $k$  の中心での濃度

$d_{k-1,k}, d_{k,k+1}$  ; それぞれセル中心点間の距離

opp ; 上下対称の位置にあるセルを示す添字

$$d_{opp,k} = r_k^{mid} d\Theta = \pi r_k^{mid}$$

また、既に述べた様に、(4.14)中の各濃度と質量との間には、次の関係が成

立する。

$$(4.15) \quad C_{ijk}^M = \frac{m_{ijk}^M}{(I - \phi_k(t)\theta_k(t)v_k(t)}$$

$$(4.16) \quad C_{ijk}^G = \frac{m_{ijk}^G}{\phi_k(t)v_k(t)}$$

$$(4.17) \quad C_{ijk}^{DZ} = \frac{m_{ijk}^{DZ}}{\phi_k^{DZ}(t)v_k(t)}$$

次に、ギャップ部、及びゆるみ域に於ける移流による単位面積当たりの物質移動フラックスは、上流差分の結果として次の様に与えられる (図 4.2.3 参照)。

(4.18)

$$F_{ijk}^- = \begin{cases} \beta_{ij(k-1)}(C_{ij(k-1)})v_k^- C_{ij(k-1)}, v_k^- \geq 0 \\ \beta_{ijk}(C_{ijk})v_k^- C_{ijk}, v_k^- < 0 \end{cases}$$

$$F_{ijk}^+ = \begin{cases} \beta_{ijk}(C_{ijk})v_k^+ C_{ijk}, v_k^+ \geq 0 \\ \beta_{ij(k+1)}(C_{ij(k+1)})v_k^+ C_{ij(k+1)}, v_k^+ < 0 \end{cases}$$

$$F_{ijk}^0 = \begin{cases} \beta_{ij(opp)}(C_{ij(opp)})v_k^- C_{ij(opp)}, v_k^0 \geq 0 \\ \beta_{ijk}(C_{ijk})v_k^0 C_{ijk}, v_k^0 < 0 \end{cases}$$

但し、

$\beta_{ijk}(C_{ijk})$  ; セル  $k$  に於いて瞬時平衡グループ  $j$  に属する同位体  $i$  の規格化平均移流速度

$v_k^-, v_k^+, v_k^0$  ; それぞれ、地下水流速の半径方向成分 (上流側、下流側) 及び周方向成分 (下部から上部の向きを正とする)。なお、各濃度は、(4.15)~(4.17)と同様の形式で与えられる。

## 2) ソース/シンクテンソル

ソース/シンクテンソルは、系外からの核種の供給及び流出を表現するものであり、形式的に以下のソース項 (上添字+) 及びシンク項 (上添字-) に二分される。

$$(4.19) \quad J_{ijk} = J_{ijk}^+ - J_{ijk}^-$$

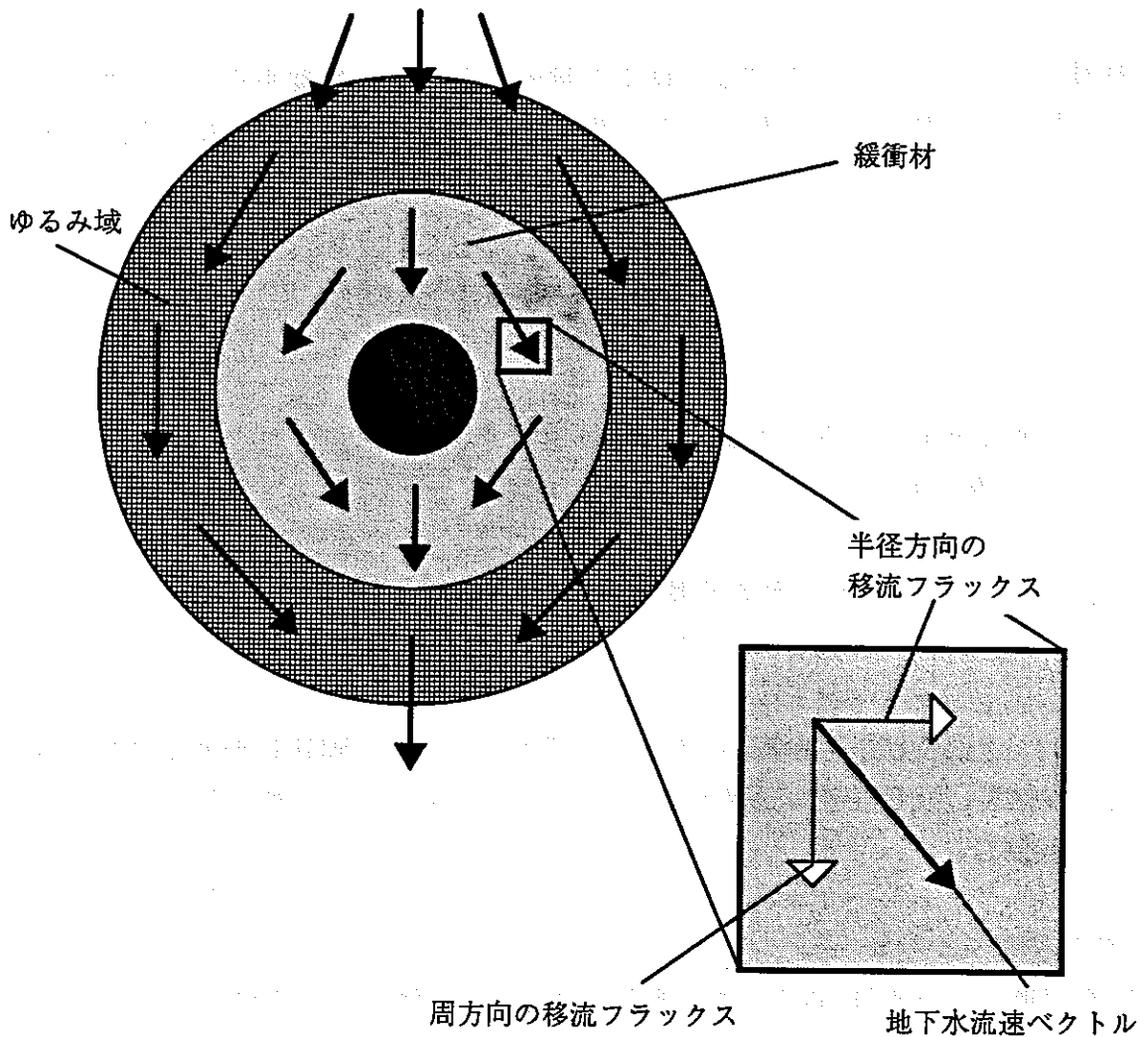


図 4.2.3 解析領域内での移流による物質移動の概念

核種供給のソースは、ガラス固化体の溶解に伴う溶出のみと考える。この場合は下の様に表現される。

$$(4.20) \quad J_{ijk}^+ = \begin{cases} \eta_j \omega_i(t) k(t), & (i) \\ 0, & (ii) \end{cases}$$

(i) セル  $k$  がガラス固化体に対応する場合

(ii) その他の場合

但し、固化体中の  $j$  番目の瞬時平衡グループが溶質を含む場合  $\eta_j = 1$  とする。

ここで  $\omega_i(t)$  は時刻  $t$  における核種  $i$  がガラス固化体中に占めるモル濃度を、また、 $k(t)$  はガラス固化体の溶解速度 ( $\text{m}^3/\text{yr}$ ) を示す。

核種のシンクタームとしては、ゆるみ域から主として亀裂を介したニアフィールド外部への移流による放出のみと考える。このシンクタームは、以下の様に表現される。

$$(4.21) \quad J_{ijk} = \begin{cases} \beta_{ijk}(C_{ijk})m_{ijk}q_k^f(t), & (i) \\ 0, & (ii) \end{cases}$$

- (i) セル  $k$  がゆるみ域に対応する場合
- (ii) その他の場合

但し、 $\beta_{ijk}(C_{ijk})$ ；規格化された平均移流速度（後述）  
 $q_k^f(t)$ ；ゆるみ域から流出する地下水流量

$q_k^f(t)$  は、上部及び下部ゆるみ域のそれぞれについて、別途行われる 2 次元流動解析の結果、及び後述する流体力学シャドウサブモデルと整合的に設定される（4.3 参照）。

### 3) 物質交換テンソル

物質交換テンソルは、以下の様に瞬時平衡グループ間の速度論的反応  $R_{ijk}^{kin}$  と、マトリクス及びギャップ間の物質移動  $R_{ijk}^{tran}$  とに二分される。

$$(4.22) \quad R_{ijk} = R_{ijk}^{kin} + R_{ijk}^{tran}$$

上記のうち速度論的反応項は、該当する瞬時平衡グループの組全てについて総和をとることにより次の様に表現される。

$$(4.23) \quad R_{ijk}^{kin} = \sum R_{jn}^{kin}(t)$$

ここで、 $R_{jn}$  は、瞬時平衡グループ  $n$  の反応によって生ずる瞬時平衡グループ  $j$  の割合を表す。より具体的な反応として、準安定相の沈澱から沈澱への変化（例、結晶化） $R_{jn}^{crystallisation}$ 、及び安定相の溶解  $R_{jn}^{dissolution}$  が考えられ、これらはそれぞれ次の様に定式化される。

$$R_{jn}^{crystallisation} = \mu_{jn}^{crystallisation} \gamma_{ink}(m_{ink})m_{ink},$$

$$R_{jn}^{dissolution} = \mu_{jn}^{dissolution} H(m_{ink}),$$

但し、上の定式化では一次反応速度式を仮定し、 $\gamma_{ink}$  は瞬時平衡グループ  $n$  のうち反応に寄与する質量の割合を、また、 $\mu_{jn}^{crystallisation}$  及び  $\mu_{jn}^{dissolution}$  はそれぞれ対応する反応の反応速度定数である。

次に、 $R_{ijk}^{tran}$  としては、以下の様に拡散と移流のいずれにも当てはまる一般的な線形、可逆の移動過程を考える。

$$(4.24) \quad R_{ijk}^{tran} = \chi^G(\alpha_{ijk}^G, \beta_{ijk}^G, t)m_{ijk}^G - \chi^M(\alpha_{ijk}^M, \beta_{ijk}^M, t)m_{ijk}^M$$

ここで、フラックスの方向は、ギャップからマトリクスを正としている。また、 $\chi$  は広義の物質移動係数であり、通常はマトリクス拡散の寄与が支配的であるため規格化平均拡散係数  $\alpha_{ijk}$  に形状効果を加えることで与えられる。上記のより一般的な表現は、しかしながら、例えばマトリクスの圧縮とそれに伴う空隙水の亀裂への流出による移流等をも考慮することが可能である。

#### 4) 平均拡散係数及び平均移流速度

瞬時平衡が成立している様な異なる化学形態を一括して取り扱うためには、既にのべた様にグループ全体としての規格化平均拡散係数  $\alpha_{ijk}$  及び規格化平均移流速度  $\beta_{ijk}$  を定義することが必要となる。ここで、瞬時平衡のために、各化学形態の濃度は（単一の化学条件下では）全濃度によって一意に定まる。従って、 $\alpha$  及び  $\beta$  もまた化学条件が指定されれば、全濃度の関数として以下の様に一義的に定まることとなる。

$$(4.25) \quad \alpha_{ijk} = \alpha_{ijk}(C_{ijk})$$

$$(4.26) \quad \beta_{ijk} = \beta_{ijk}(C_{ijk})$$

但し、これらの具体的な関数形を設定する上では、規格化平均拡散係数  $\alpha_{ijk}$  及び規格化平均移流速度  $\beta_{ijk}$  の代りに全濃度の関数として単調増加であることが明らかなる  $\alpha_{ijk} C_{ijk}, \beta_{ijk} C_{ijk}$  を対象とする。

#### 5) 環境変化の表現

以上の内容は、ニアフィールドの環境条件が与えられた場合に、これに対応して核種移行がどの様に生ずるかを規定するものであった。実際の解析を可能

とするためには、これらに加えて、環境条件自体の変遷を表現するシャドウサブモデルの作成及びその影響を核種移行の当該パラメータと連動させることが必要となる。

環境条件の変化によって影響を被る主要な（つまり変動幅が大きい）核種移行パラメータとしては、

- ・ 人工バリア及びゆるみ域中地下水流速
- ・ 各瞬時平衡グループの規格化平均拡散係数及び規格化平均移流速度

が挙げられる。このうちニアフィールド内の地下水流速は、ニアフィールドを横切る動水勾配 $\nabla P$ 、及び人工バリアとゆるみ域内の透水係数 $k_{EBS}$ 、 $k_{EDZ}$ により規定されることとなり、 $\nabla P, k_{EDZ}$ については（ゆるみ域を単一のセルとして表現する場合）任意の時間の関数が、 $k_{EBS}$ については位置と時刻の任意の関数がシャドウサブモデルの候補となる。つまり、

$$(4.27) \quad v(x,t) = v(\nabla P(t), k_{EBS}(x,t), k_{EDZ}(t))$$

となる。また、 $k_{EBS}$ については、前出の二重空隙の存在を考えれば、その主要な変遷は人工バリア材中（特に緩衝材中）のギャップの生成及び消滅によるものと考えられる。そこで、 $k_{EBS}$ の定義にあたってはゆるみ域と連結した（従って人工バリア内外側に位置する）ギャップが各時刻にどの程度内側にまで進入するかを表現することが肝要となる。なお、以上の基本的な考え方に基づく具体的なシャドウサブモデルの設定については、4.3を参照のこと。

次に、平均拡散係数及び平均移流速度は酸化還元状態やpH等のニアフィールド内各位置での化学条件にも依存するものである。また多くの場合、このような化学条件の変化は、2つの異なる平衡状態とその間のフロント（相対的に小さい還移領域）、並びにそのフロントの伝播という形態をとる。そこで、このような化学条件の変化を記述するために、抽象的な意味での化学インデックス $\Psi \in [0,1]$ を考えることとする。化学インデックスは、深部地下の環境として期待される還元性、弱アルカリ性等の条件を0とし、ある種の異常（anomaly）である酸化性あるいは酸性の条件を1としてその間を連続的に内挿するものである。そして、(4.25)及び(4.26)に含まれる諸パラメータは、化学インデックスと連動して変化するものとして次の様に定義することとする。

$$(4.28) \alpha_{ijk} = \alpha_{ijk}(\Psi, C_{ijk})$$

$$(4.29) \beta_{ijk} = \beta_{ijk}(\Psi, C_{ijk})$$

化学インデックス自体の変化を記述する関数形としては、一般的には位置  $x$  と時刻  $t$  の任意の関数とその候補となる。

$$(4.30) \quad \Psi = \Psi(x, t)$$

化学条件の変化が2つの異なる平衡状態とその間のフロント（相対的に小さい遷移領域）、並びにそのフロントの伝播という形態をとることから、化学インデックスの変遷を表現するシャドウサブモデルとしては、通常の深部地下の化学条件（インデックス0）を保つ領域と何らかの異常（インデックス1）の生じている領域との間の領域分割を各時刻において指定するものであることが必要である。なお、化学インデックスの具体形の指定については、4.3を参照されたい。

### 4.3 解析条件及びシャドウサブモデルの詳細

#### 4.3.1 評価対象核種

3.に述べた様に、本年度の全域的な統計的解析の対象としては、抽象的な崩壊ペアを考えることにより入力パラメータ数を低減するものとする。また、この崩壊ペアを特長づけるそれぞれの半減期と初期インベントリは以下の範囲からランダムにサンプリングする。

表 4.3.1 半減期及び初期インベントリの範囲

	半減期 (年)	初期インベントリ (mol)
親核種	$10^3 \sim 10^7$ (Log Uniform)	$10^{-2} \sim 10^1$ (Log Uniform)
娘核種	$1 \sim 10^7$ (Log Uniform)	$10^{-2} \sim 10^1$ (Log Uniform)

#### 4.3.2 性能指標

クラスターの同定という統計的計算の目的のためには、重み付けされた核種

フラックスの和である総ハザードインデックスの様な指標よりも、各核種のニアフィールドからの最大放出率（放射エネルギーとして）のほうがより多くの情報を含んでおり、従って適切と考えられる。また、前節に述べた様に、統計的計算の対象となる「代表的」核種は、あくまでクラスターの識別のための代表であり、これらに基づいて総ハザードインデックスの大小を論ずることは不適當でもある。

#### 4.3.3 計算期間

ニアフィールドに於ける主要条件の変化（人工バリア材の劣化、岩体及び地下水の地球化学的特性の変遷）は長くとも  $10^6$  年のオーダーで生ずるという見解が専門家グループによって示されていることから、ニアフィールドからの核種放出率のピークをとらえるために  $10^7$  年を計算の対象期間とする。

#### 4.3.4 流体力学サブモデル

以下、放射性核種移行シャドウモデルに含まれる全てのパラメータに対して、統計的計算の対象とする数値の範囲を定義することとする。ここで特定されたパラメータ値の範囲から一様に統計的なサンプリングを行うことにより、統計的計算を実施する。

##### 1) 形状因子シャドウサブモデル

統計的計算においては、ガラス固化体及びオーバーパック中のマトリクス空隙率の経時変化を考慮することとする。また、緩衝材及びゆるみ域については、相対的に変化が小さい（特に初期値が非零である）ことから、一定値とする。まず、ガラス固化体及びオーバーパックの体積変化を、以下のべき乗則のモデルを用いて表現する。

$$(4.31) \quad V(t) = H(t-t_0) \left( \frac{T-t}{T} \right)^n$$

但し  $V(t)$  ; 未反応の物質の体積割合  
 $H(.)$  ; ヘビサイドステップ関数  
 $T$  ; 反応（腐食、浸出）期間  
 $t$  ; 反応開始以降の時間

なお、 $t=T$  における微分可能性を確保するために、実際の計算は、次式において  $d > n$  として(4.31)式を近似することにより行うものとする。

$$(4.31') \quad V(t) = \left\{ 1 - \left( \frac{t}{T} \right)^n \left( 1 + \left( \frac{t}{T} \right) \right)^d \right\}^{\frac{n}{d}}$$

次に、(4.31) 及び(4.31')に基づき、マトリクス部の空隙率の変化を以下の様に表現する。

$$(4.32) \quad \theta(t) = \theta_0(t) + \theta_1(1 - v(t))$$

但し、 $\theta(t)$  ; マトリクスの平均空隙率

$\theta_0$  ; 未反応のマトリクスの空隙率

$\theta_1$  ; 反応後のマトリクスの空隙率

更に、(4.31) 及び(4.31')式と整合的と成るように、ガラス固化体からの核種放出率を以下の様に表現する。

$$(4.33) \quad J_i(t) = -\frac{dV}{dt} \eta_i(t)$$

但し、 $J_i(t)$  ; ガラス固化体からの核種  $i$  の放出率

$\eta_i$  ; 核種  $i$  のインベントリ

また、人工バリア中の透水係数分布については、既に述べた様にゆるみ域に連結しており、従って移流支配となる可能性のあるギャップに着目することが重要であると考えられ、このようなギャップの存在する領域の時間的変化を図4.3.1に概念的に示す様に、幅が時間的に可変のリングによって表現することとする。

ギャップ空隙率の分布とその経時変化  $\phi(r, t)$  は、以下に従うものとする。

$$(4.34) \quad \phi(r, t) = \begin{cases} \phi_0, & R(t) \leq r \leq r_B \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases}$$

但し  $\phi_0$  は定数。なお、図 4.3.1 中の  $R(t)$  の具体的な関数形としては、以下を想定する。

$$(4.35) \quad R(t) = 4 \frac{R_{\min}}{T_{ad}^2} (t - t_c - \frac{T_{ad}}{2})(t - t_c + \frac{T_{ad}}{2})$$

なお、(4.35) は、図 4.3.2 に示す放物線に対応するものである。

他方、 $\frac{T_{ad}}{2} > t_c$  という可能性も考慮に含めることとする。このようなケースは、例えば製作あるいは施工時の何らかのエラーにより緩衝材中に予めギャップが存在している様な場合に対応している。

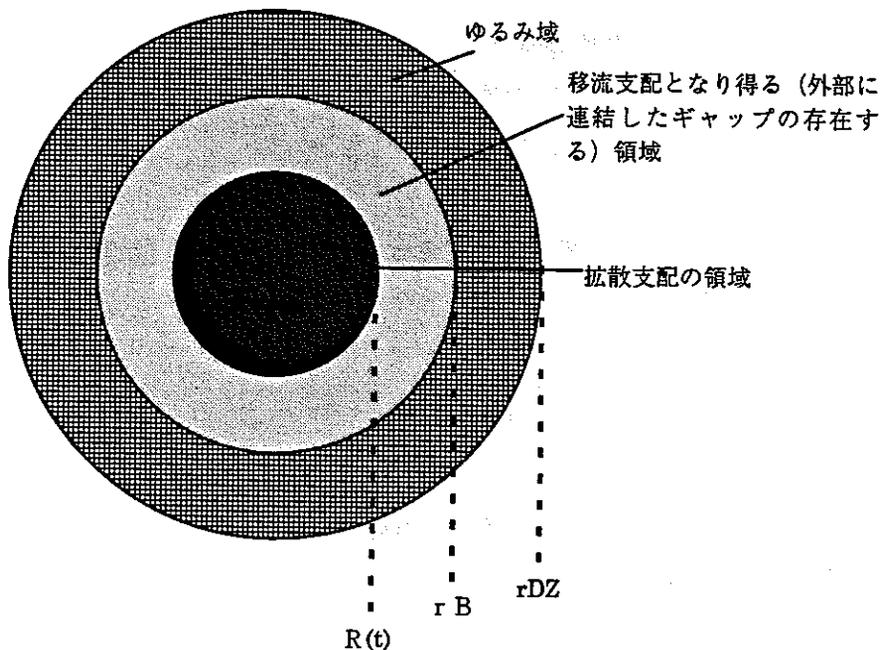


図 4.3.1 人工バリア中で移流支配となり得る領域

移流支配となり得る領域では、ギャップとマトリクスとの間の核種移行を考える必要がある。このために、マトリクスの変形はたとえそれが生じたとしてもマトリクス空隙水の絞り出しが核種のマトリクスからのギャップへの移流による移動を生じる程急激なものではないと仮定することにより、5. に述べたより一般的な表現において移行が拡散支配であることを仮定した以下の式を用いることとする。

但し、
$$J_{ex} = \varepsilon D (\alpha_i^G C_i^G - \alpha_i^M C_i^M)$$

$J_{ex}$  ; 核種移行 (交換) 率

$\epsilon$  ; 物質移動定数

$G, M$  ; ギャップ及びマトリクスにそれぞれ対応する添字

また、物質移動定数  $\epsilon$  は  $\epsilon = \frac{A\theta}{l}$  として表されるものとする ( $A$  ; 単位体積のマトリクスのギャップにさらされた面の面積、 $l$  ; マトリクスブロックの中心とギャップとの距離)。

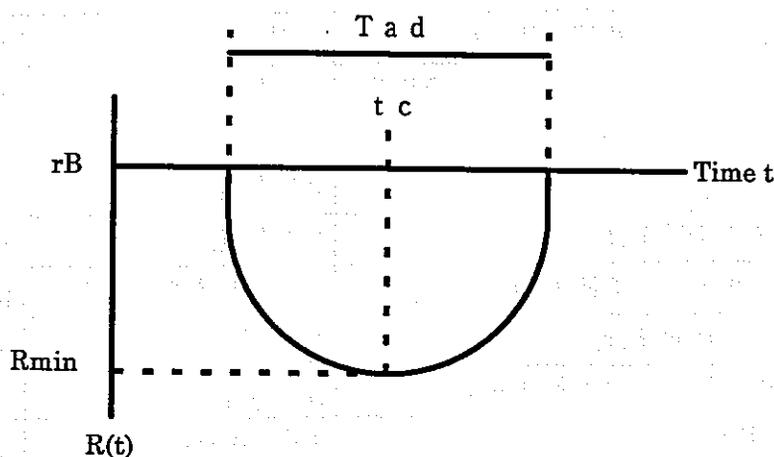


図 4.3.2 人工バリア中で移流支配となり得る領域の境界  $R(t)$  の経時変化のパターン

表 4.3.2 に、各パラメータの統計的サンプリングを行う数値の範囲をまとめる。ここで、以下のパラメータについては、他のパラメータに比して相対的に変動幅が小さいことから、一定値を用いることとした。

- ・ 未反応及び反応後のマトリクス空隙率
- ・ ゆるみ域中のギャップ空隙率
- ・ マトリクスの比表面積
- ・ マトリクスブロックの中心からギャップまでの距離
- ・ (4.31)式中のべき  $n$

しかしながら、これはクラスタ分析の対象となるパラメータ数が大きくなり過ぎることを避けるためのものであり、上記の各パラメータ値に不確実性が含まれることを否定するものではない。

表 4.3.2 パラメータ値の範囲 (1); 形状因子

名称	範囲	スケール
オーバーパック腐食の開始時刻; $t_{ov}$	$10^0 - 10^3$ yrs (注 1)	log
ガラス浸出の開始時刻; $t_G$	$10^0 - 10^6$ yrs (注 2)	log
オーバーパック腐食の継続期間; $T_{ov}$	$10^0 - 10^6$ yrs (注 2)	log
ガラス浸出の継続期間; $T_G$	$10^0 - 10^6$ yrs (注 2)	log
べき; $n$	1 (固定)	N/A
未反応のオーバーパックマトリクスの空隙率; $\theta_0^{ov}$	0 (固定)	N/A
未反応のガラスマトリクスの空隙率; $\theta_0^G$	0 (固定)	N/A
反応後のオーバーパックマトリクスの空隙率; $\theta_1^{ov}$	0.3 (固定)	N/A
反応後のガラスマトリクスの空隙率; $\theta_0^G$	0.3 (固定)	N/A
緩衝材マトリクスの空隙率; $\theta^B$	0.3 (固定)	N/A
人工バリア外側のギャップ空隙率; $\phi_0^{EBS}$	表 6.4.5 参照(注 3)	log
ゆるみ域のギャップ空隙率; $\phi_0^{DZ}$	0.01 (固定)	N/A
移流支配となり得る領域の最大幅; $R_{max}$	0 - 1.5 m	linear
$R_{max}$ に対応する時刻; $t_c$	$10^0 - 10^6$ yrs (注 2)	log
ギャップの継続期間; $T_{ad}$	$10^0 - 10^7$ yrs (注 4)	log
マトリクスの比表面積; $A$	$0.6 \text{ m}^{-1}$ (固定) (注 5)	N/A
マトリクスブロック中心とギャップとの距離; $l$	0.1 m (固定) (注 5)	N/A

注

1;  $t_{ov}$  は、地下水が人工バリアを飽和するのに要する時間に対応する。通常、人工バリアの冠水時間は短いと考えられるが、ガラス固化体からの熱により形成される温度勾配のために冠水過程が遅延されるという予測[3]もあり、いわゆる thermal period の上限の見積もりとして  $10^3$  年までを計算範囲に含める。

2; これらのパラメータ値の範囲は、ワークショップにおける専門家グループの見解に依拠するものである。他のパラメータについては、それぞれ以下を参照のこと。

3; これらはギャップ部の透水性と併せて設定される必要がある (後節参照)。

4; ギャップが再び消滅する可能性 (Self-sealing あるいは自己シール) についても大きな不確実性が存在するため、計算期間全体をカバーする様な設定を行った。

5; 統計的計算全体をハンドリング可能なサイズにとどめるために、10cm 間隔で半径 1mm 程度のチューブ状のギャップが存在している状況に対応した一定値が仮定されている。しかしながら、この事は、これ等のパラメータの変動が有為なものとなる可能性を否定する訳ではなく、これらのパラメータの感度について、将来、検討を加える必要がある。

## 2) 地下水流速場シャドウサブモデル

定義より、ゆるみ域及び人工バリア中のギャップ内の地下水流のみを考えれば良い。この目的のために、図 4.3.1 中の移流支配となり得る領域における地下水流動に対して、区分的に均質な多重円筒形モデルを適用する。また、簡単のため、内側に位置する拡散支配の領域は完全に不透水性であると仮定する。以上に基づき、次の流れの支配方程式を  $P \rightarrow -\gamma \cos\theta (r \rightarrow \infty)$  という条件とともに解くこととする。

(4.36)

$$\begin{aligned} v &= -k\nabla P, \\ \nabla P &= 0, \end{aligned}$$

上記の部分的に均質な多重の円筒を仮定することにより、 $n$  番目の領域の水頭  $P$  について以下の解を得る。

(4.37)

$$P = -\left(A_n \gamma + \frac{B_n}{\gamma}\right) \cos\theta.$$

但し、 $A_n$  及び  $B_n$  はそれぞれ定数であり、以下に述べるように各円筒領域の境界上で水頭をマッチさせることにより決定される必要がある。

特に、図 4.3.1 に示されている形状に対応して上記の定数を決定するためには、十分に大きい  $\gamma_m$  に対して以下の式を解く必要がある。

(4.38)

$$\begin{aligned} A_{EBS} + \frac{B_{EBS}}{r_B^2} &= A_{DZ} + \frac{B_{DZ}}{r_B}, \\ k_{EBS} \left( A_{EBS} - \frac{B_{EBS}}{r_B^2} \right) &= k_{DZ} \left( A_{DZ} + \frac{B_{DZ}}{r_B} \right), \\ A_{EBS} - \frac{B_{EBS}}{R^2(t)} &= 0, \\ A_{DZ} + \frac{B_{DZ}}{r_\infty^2} &= r_\infty. \end{aligned}$$

ここで、別途実施する 2 次元流動解析（次節参照）と整合的となるよう、 $r_m = r_{DZ}$  とし、また、 $r_m$  は解析結果におけるゆるみ域上部と下部の水頭差から算

出される平均勾配と同等となるように設定される。

以上の結果として、各層（円筒）内の平均地下水流速は、次式で与えられることとなる。

(4.39)

$$\begin{aligned}
 v_r^{TopEBS} = -v_r^{BottomEBS} &= \frac{1}{\phi_{EBS} \pi r_B} \int_{-\frac{x}{2}}^{\frac{x}{2}} k_{EBS} \left( A_{EBS} - \frac{B_{EBS}}{r_B^2} \right) r_B \cos \theta d\theta \\
 &= \frac{2}{\pi \phi_{EBS}} k_{EBS} \left( A_{EBS} - \frac{B_{EBS}}{r_B^2} \right), \\
 v_r^{TopDZ} = -v_r^{BottomDZ} &= \frac{2}{\pi \phi_{EBS}} k_{DZ} \left( A_{DZ} - \frac{B_{DZ}}{r_{DZ}^2} \right), \\
 v_\theta^{TopEBS} &= -\frac{\pi r_B}{2(r_B - R(t))} v_r^{TopEBS}, \\
 v_\theta^{BottomEBS} &= -\frac{\pi r_B}{2(r_B - R(t))} v_r^{BottomEBS}, \\
 v_\theta^{TopDZ} &= -\frac{\pi r_B \phi_{EBS}}{2(r_{DZ} - r_B) \phi_{DZ}} v_r^{TopEBS} - \frac{\pi r_{DZ}}{2(r_{DZ} - r_B)} v_r^{TopDZ}, \\
 v_\theta^{BottomDZ} &= -\frac{\pi r_B \phi_{EBS}}{2(r_{DZ} - r_B) \phi_{DZ}} v_r^{BottomEBS} - \frac{\pi r_{DZ}}{2(r_{DZ} - r_B)} v_r^{BottomDZ},
 \end{aligned}$$

但し、

- $v_r^{TopEBS}(t)$  ; 上部人工バリア内ギャップ中の半径方向平均流速
- $v_r^{BottomEBS}(t)$  ; 下部人工バリア内ギャップ中の半径方向平均流速
- $v_\theta^{TopEBS}(t)$  ; 上部人工バリア内ギャップ中の周方向平均流速
- $v_\theta^{BottomEBS}(t)$  ; 下部人工バリア内ギャップ中の周方向平均流速
- $k_{EBS}$  ; 移流支配となり得る人工バリア部分領域の平均透水係数
- $k_{DZ}$  ; ゆるみ域の平均透水係数

また、各領域においては、流入側を正とし、(4.39)中の周方向平均流速は当該領域の内側及び外側境界を横切る地下水フラックスの収支から計算される。

(4.39)式は、ニアフィールド内の透水係数分布が部分的に均質でありかつ対称でもあるという仮定に基づくものである。この簡単化のために、まず流れは常に半径方向から上部ゆるみ域及び人工バリア領域に進入し、ここから周方向

に下部の領域に流入する。しかしながら、実際には、常にこの様な流れのパターンが成立するとは限らない。例えば、母岩中の透水係数分布の不均質性やチャンネルの存在のために、上部ゆるみ域と人工バリア領域に流入した地下水は、それぞれ対応する下部領域ではなく、これらをバイパスして流れ去る可能性がある。この様な状況は、速いチャンネルが上部ゆるみ域に到ることによってショートカットが生ずる様な場合には必然的に現れることとなる。この様な流れが核種移行に及ぼす影響を表現するために、流れのうちバイパスが生ずる割合に相当するパラメータ  $y(t)$  を導入する。このパラメータを用いて、ゆるみ域及び人工バリア内の地下水流れの分布を次の様に表現することができる。

(4.40)

$$\begin{aligned}
 \tilde{v}_r^{TopEBS} &= (1 - y(t))v_r^{TopEBS}, \\
 \tilde{v}_r^{TopDZ} &= v_r^{TopDZ}, \\
 \tilde{v}_\theta^{TopEBS} &= (1 - y(t))v_\theta^{TopEBS}, \\
 \tilde{v}_\theta^{TopDZ} &= (1 - y(t))v_\theta^{TopDZ}, \\
 \tilde{v}_{bypass}^{TopDZ} &= -y(t)v_r^{TopDZ}, \\
 \tilde{v}_r^{BottomEBS} &= (1 - y(t))v_r^{BottomEBS}, \\
 \tilde{v}_r^{BottomDZ} &= (1 - y(t))v_r^{BottomDZ}, \\
 \tilde{v}_\theta^{BottomEBS} &= (1 - y(t))v_\theta^{BottomEBS}, \\
 \tilde{v}_\theta^{BottomDZ} &= (1 - y(t))v_\theta^{BottomDZ},
 \end{aligned}$$

ここで、 $\sim$ を付した変数はそれぞれ、バイパス流れを考慮した地下水フラックスの再配分後の流速に対応する。

(4.40) 式は、ゆるみ域に流入する総フラックスのうち  $y(t)$  を(4.39) 式中の各フラックスからそれぞれの流れ成分のバランスを保ちつつ取り去るという操作を表すものである。簡単に確かめられるように、この操作によってニアフィールド全体の水収支が崩されることはない。

一般に、 $y$  は時間の関数である。しかしながら、今回の統計的計算においては、簡単のため時間的に一定と仮定し、その数値は後述する範囲から統計的にサンプリングすることとする。

更に、式(4.36)に含まれる平均動水勾配については、以下の様な定式化を行うものとする。

(4.41)

$$\nabla P(t) = \begin{cases} \nabla P_{\max}, & t_p \leq t \leq t_p + T_p, \\ \nabla P_{\min}, & \text{otherwise,} \end{cases}$$

但し

$\nabla P_{\max}$  ; 動水勾配の最大値

$\nabla P_{\min}$  ; 動水勾配の最小値

$t_p$  ; 強い流れの開始時期

$T_p$  ; 強い流れの継続期間

次に、人工バリア内ギャップ透水係数及び空隙率のパラメータ値の範囲を設定するのに先だって、まず、人工バリア中に生ずる可能性のあるギャップの透水係数と空隙率とを、次式の様に多数のスリットとチューブの組み合わせにより表現する。

(4.42)

$$k_{EBS} = \left\{ \frac{n_1 b^3}{12} + \frac{n_2 \pi d^4}{8} \right\} \frac{\rho g}{\mu}$$
$$\phi_0^{EBS} = (n_1 b + n_2 \pi d^2) \tau$$

但し、

$n_1, n_2$  ; それぞれ単位立方体中のスリット及びチューブ数

$b, d$  ; スリットの平均幅及びチューブの平均半径

$\tau$  ; 平均屈曲率

$\rho$  ; 水の比重

$g$  ; 重力加速度

$\mu$  ; 水の動粘性係数

図 4.3.3 は、(4.42) 式を用いて以下の範囲から統計的なサンプリングを行った結果 (1000 点) をまとめたものである。

$$n_1, n_2: 0 - 10^7$$

$$b, d: 10^{-6} - 10^{-4} [m] (\log \text{ scale}),$$

$$t: 1 - 10.$$

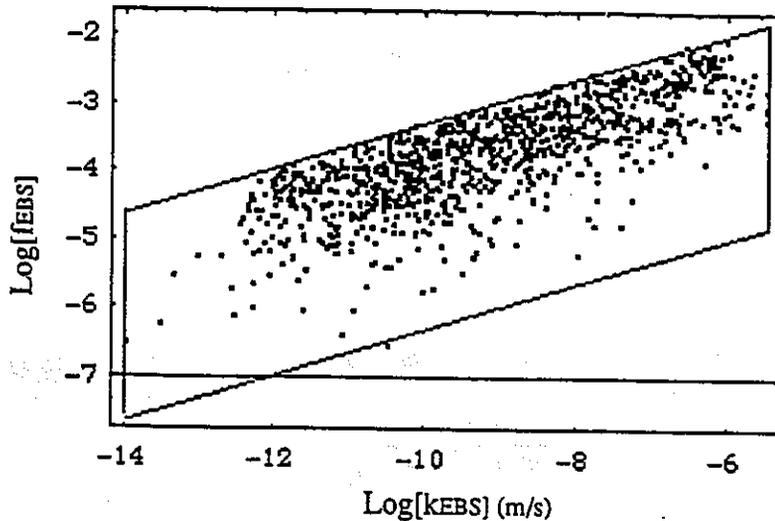


図 4.3.3 人工バリア中の移流支配となり得る領域のギャップ空隙率と透水係数の範囲

(4.42) 式によって推定される各ケースを包括するために、統計的計算では図 4.3.3 中の平行四辺形の範囲内からギャップ空隙率と透水係数の組み合わせを統計的にサンプリングすることとする。ここで、(4.42) 式自体の恣意性を考慮して、図 4.3.3 中の平行四辺形は(4.42) 式を用いた推定値のスキッタープロットよりも特に下部、即ちギャップ内の流速が大きくなる部分で広いものとなっていることに留意されたい。

また、ニアフィールド全体としての地下水流動場を見れば、ゆるみ域及び人工バリアシステム全体の透水性とこれらを横切る動水勾配との間には相関がある可能性が高い。つまり、周囲の健全な母岩領域の透水性によってニアフィールドを横切る地下水の総フラックスには制約があるため、ゆるみ域及び人工バリアシステムの透水性がある程度以上になれば、対応する動水勾配は減少する筈である。この傾向は、不均質場に於ける 2 次元の詳細な水理解析によっても確認されており、以下の簡単な近似式で上記の相関を表現することが可能である。

$$\nabla P_{DZ} = \begin{cases} \nabla P(t), k_{DZ} \leq k_{HR} \\ \nabla P(t) \frac{k_{HR}}{k_{DZ}}, k_{HR} < k_{DZ} \end{cases}$$

上式中に現れる周辺母岩の透水係数  $k_{HR}$  については、母岩が亀裂状媒体であることを仮定し亀裂内の平均開口幅  $b$  と亀裂の頻度  $n$  とを

$$b = 10^{-6} - 10^{-3} [m],$$

$$n = 0.1 - 1 [m^{-3}]$$

という範囲内で変動させることにより得られる

$$k_{HR} = 10^{-13} - 10^{-6} [ms^{-1}]$$

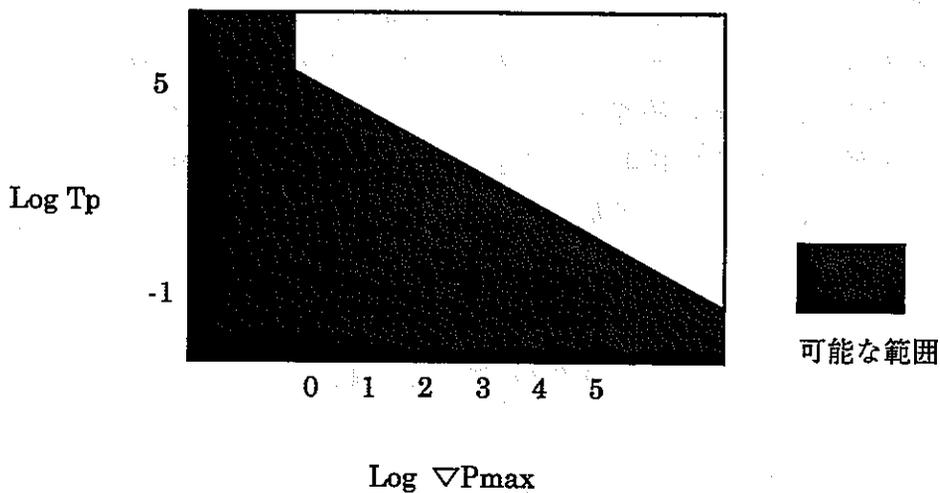
という範囲を設定することとする。

表 4.3.3 パラメータ値の範囲 (2); 地下水流速場

名称	範囲	スケール
移流支配となり得る人工バリア領域の透水係数; $kEBS$	$10^{-14} - 10^{-4} \text{ m/s}$	log
ゆるみ域の透水係数; $kDZ$	$10^{-14} - 10^{-3} \text{ m/s}$	log
母岩健全部の透水係数; $kHR$	$10^{-13} - 10^{-6} \text{ m/s}$	log
移流支配となり得る人工バリア領域のギャップ空隙率; $\phi EBS$	$0.33 kEBS - (-3 + 0.33 kEBS)$	log
平均動水勾配の最大値; $\nabla P_{max}$	$\nabla P_{min} \sim 10^4 / k_{DZ}$	log
平均動水勾配の最小値; $\nabla P_{min}$	$10^4 \sim 1$	log
強い流れの開始時期; $t_p$	$10^0 - 10^7 \text{ yrs}$	log
強い流れの継続期間; $T_p$	$10^2 \sim H[\log \nabla P_{max}] 10^{8-3 \nabla P_{max}} + (1 - H[\log \nabla P_{max}]) 10^7$	log
バイパス流の割合; $y$	$10^{-5} - 10^0$	log

注

強い流れの継続期間  $T_p$  と平均動水勾配の最大値  $\nabla P_{max}$  との関係は、Seismic Pumping 等の事象を反映した専門家の知見に基づき設定されたものであり、具体的には、下図に対応している。



#### 4.3.5 放射性元素の化学及び移行特性シャドウサブモデル

それぞれ  $VC = v \beta C$  及び  $DC = D_0 \alpha C$  で表される平均移流速度及び平均拡散係数を昨年の解析で用いたものと同様の区分的に線形なシャドウサブモデルによって定義する。

本年度の定式化の主な特徴は：

- ・ コロイドのような可動な固体は、ギャップでしか存在できない。
- ・ 最初の勾配は化学形態のみに依存し、物質移動のメカニズムには関係ないため、これらの値は平均移流速度及び平均拡散係数に共通である。
- ・ 全てのマスが最も移行性の高い化学状態（マトリクス内の溶解イオン及び隙間内のコロイド）にある時の値を平均の移行性は超えることができない。
- ・ 地球化学的異常内における平均移行特性は、通常の化学条件での平均移行特性を全体的にシフトしたものとして表される。

(4.43)

$$\alpha C = \min \left[ C, \frac{C^{a0}}{R_a} \left\{ 1 + \left( \frac{C}{C_{a1}^*} \right)^{d1} \right\}^{\frac{a1-a0}{d1}} \left\{ 1 + \left( \frac{C}{C_{a2}^*} \right)^{d2} \right\}^{\frac{-a1}{d2}} \right]$$

$$\beta C = \min \left[ mC, \left\{ 1 - \text{Heaviside}[C - C_{\beta3}^*] \right\} \frac{C^{b0}}{R_\beta} \left\{ 1 + \left( \frac{C}{C_{\beta1}^*} \right)^{d1} \right\}^{\frac{-b0}{d1}} \left\{ 1 + \left( \frac{C}{C_{\beta2}^*} \right)^{d2} \right\}^{\frac{b2}{d2}} \right]$$

$$+ \text{Heaviside}[C - C_{\beta3}^*] \frac{C_{\beta3}^{*b0}}{R_\beta} \left\{ 1 + \left( \frac{C_{\beta3}^*}{C_{\beta1}^*} \right)^{d1} \right\}^{\frac{-b0}{d1}} \left\{ 1 + \left( \frac{C_{\beta3}^*}{C_{\beta2}^*} \right)^{d2} \right\}^{\frac{b2}{d2}}$$

但し、 $C_{\alpha}^*$  及び  $C_{\beta}^*$  は節点の位置 ( $C_i^* \leq C_{i+1}^*$ )、 $a$ 、 $b$  は勾配、 $d$  は節点の堅さ、 $R$  は「遅延係数」、 $m$  はコロイドの可動性（移流）の係数である。

地球化学的異常におけるスイッチは以下のように表される。

$$\begin{aligned} \text{Log} C_{\alpha}^*(\text{anomaly}) &= \text{Log} C_{\alpha}^*(\text{normal}) + K, \\ \text{Log} C_{\beta}^*(\text{anomaly}) &= \text{Log} C_{\beta}^*(\text{normal}) + K, \\ K &\geq 0. \end{aligned}$$

(4.44)

(4.43)及び(4.44)に含まれる各パラメータのサンプリングの範囲を表 4.3.4 にまとめる。なお、作成された $\alpha C$ 及び $\beta C$ の例を図 4.3.4 に示す。

他方、準安定相、吸着種及びコロイドといった比較的動きにくい移行状態から安定相の沈澱への速度論的反応 $R_i^1$ 及び安定相から溶質への速度論的反応 $R_i^2$ をそれぞれ以下のシャドウサブモデルで表現する。

$$R_i^1 = -\mu_1(C_i - \alpha_i C_i) \\ R_i^2 = \mu_2 S_i$$

但し、 $\mu_1, \mu_2$  ; 反応速度定数

$S_i$  ; 安定相としての沈澱濃度

第一の式は、 $C_i - \alpha_i C_i$ で表わされる、全濃度のうち比較的動きにくい移行形態に相当した濃度が一定の割合 $\mu_1$ でより安定な形に不動態化されるプロセスに対応しており、結晶化や不可逆吸着を一般化したものと言うことができる。

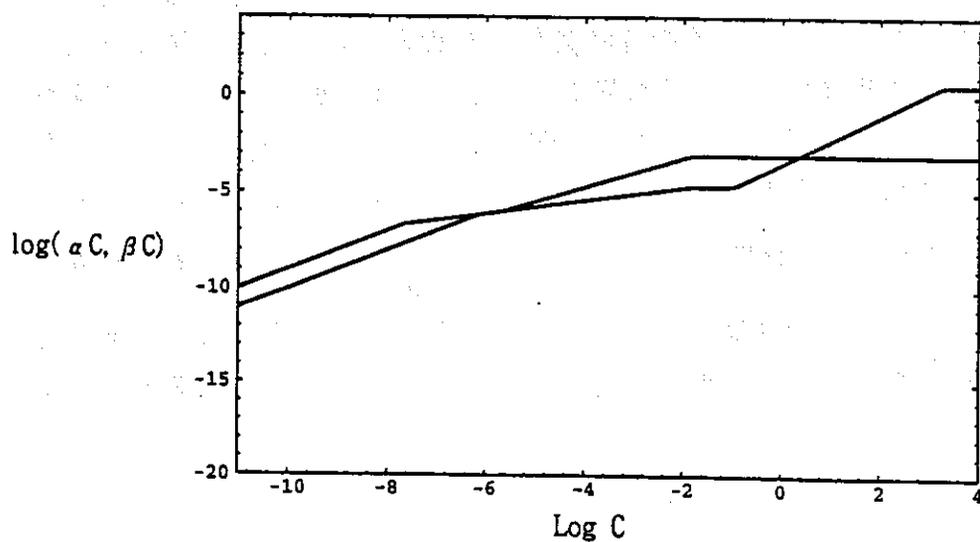
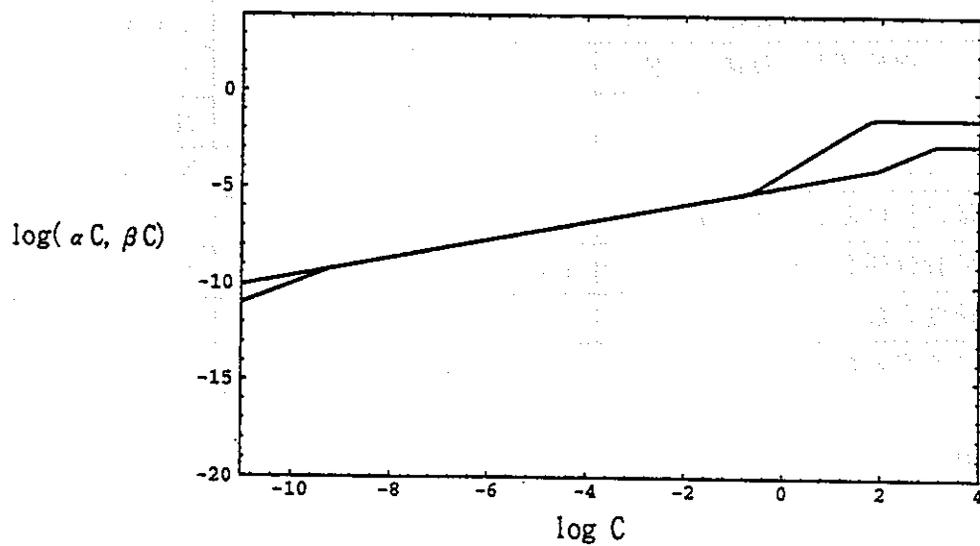
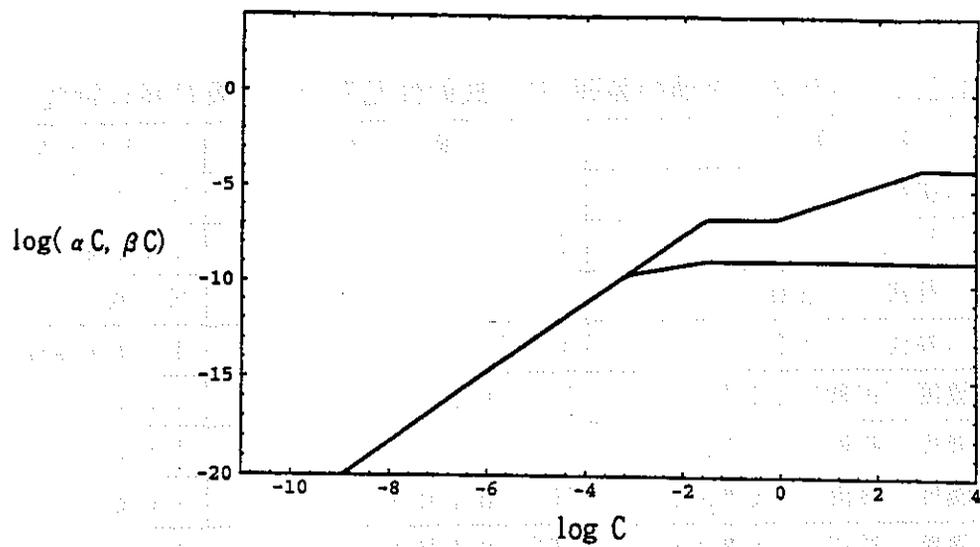


図 4.3.4 平均拡散係数( $\alpha C$ )及び平均移流速度( $\beta C$ )に関するシャドウモデルの例

表 4.3.4 パラメータ値の範囲(3)：放射性元素の化学及び移行特性

名 称	範 囲	スケール
第一の勾配 (拡散) : $a_0$	1	N/A
第二の勾配 (拡散) : $a_1$	0~2	linear
第一の勾配 (移流) : $b_0$	1	N/A
第三の勾配 (移流) : $b_2$	0~2	linear
第一の節点濃度 (拡散) : $C^*_{\alpha 1}$	$10^{-11} \sim 0.1 R_{\alpha}$	log
第二の節点濃度 (拡散) : $C^*_{\alpha 2}$	$10^{-11} \sim 0.1 R_{\alpha}$	log
第一の節点濃度 (移流) : $C^*_{\beta 1}$	$10^{-11} \sim 0.1 R_{\beta}$	log
第二の節点濃度 (移流) : $C^*_{\beta 1}$	$10^{-11} \sim 0.1 R_{\beta}$	log
第三の節点濃度 (移流) : $C^*_{\beta 3}$	$10^{-11} \sim 0.1 R_{\beta}$	log
低濃度領域での遅延係数 (拡散) : $R_{\alpha}$	$1 \sim 10^5$	log
低濃度領域での遅延係数 (移流) : $R_{\beta}$	$1 \sim 10^5$	log
節点の堅さ : $d_1$	10	N/A
節点の堅さ : $d_2$	10	N/A
地球化学異常に於けるシフト : $k$	0~10	linear
コロイドの可動性係数 : $m$	10	N/A
不動態化の速度定数 : $\mu_1$	$10^{-6} \sim 10^0 \text{ y r s}^{-1}$	log
安定相溶解の速度定数 : $\mu_2$	$10^{-6} \sim 10^0 \text{ y r s}^{-1}$	log

#### 4.3.6 地球化学シャドウサブモデル

核種の平均移行特性 (拡散係数及び移流速度) は、ニアフィールド内の地球化学的条件にも依存している。このため、統計的計算のために、地球化学的条件の空間的なプロファイルとその経時変化とを設定することが必要である。より具体的には、解析領域をそれぞれ異なる化学的平衡状態にある 2 つの領域に分割し、これら二つの領域の間の境界が時間の経過と共に移動することを仮定した「一般化された」地球化学フロントの概念を用いる。更に、この様なフロントは、多くの反応-拡散問題に於いて見られる  $\frac{r}{\sqrt{t}}$  のスケールに従い伝播することを仮定する。以上の前提の下に、 $(r, t)$  平面上の楕円群により、地表水の侵入や放射線分解に起因する酸化性プルーム、セメント反応による高アルカリプルーム、あるいは熱水の存在といった、各マトリクス中の種々の地球化学的な特異領域として表現することが可能となる。

昨年度実施した二次元解析の結果も参考として、今回の統計的計算に用いるシャドウサブモデルにおいては、以下の仮定を設けることとする。

A1 ; 固化体中心、上部及び下部ゆるみ域の外側境界にそれぞれ中心を持つ3つの楕円のみを考える。

A2 ; 各楕円の長軸及び短軸は、r 軸あるいは t 軸に平行であるとする。

A3 ; 内側の楕円は、左右対称であるとする。

A4 ; 外側の楕円の中心は、対称の位置にあるものとし、また、下部の楕円の大きさ（つまり継続期間と侵入深さ）は上部のそれに対して、バイパス部の割合に応じてスケールされる（注1）。

A5 ; ギャップ中の化学条件は、外側の楕円が存在している場合にはゆるみ域の条件と等しく、それ以外の場合は隣接したマトリクス条件と等しいとする。

#### 注

1 ; この事は、バイパス流がなく、上部のゆるみ域に進入した地下水が全て下部ゆるみ域と下部人工バリアとに到る場合には、外側の2つの楕円の大きさは全く同じとなることを意味している。逆に、バイパス流が存在する場合には、下部の化学的特異領域は、侵入深さが小さくなると共に、その継続期間もまた短縮されることとなる。極端な例として、全ての地下水が下部ゆるみ域をバイパスする場合には、下部外側の楕円（特異領域）は存在しないこととなる。

仮定 A1~A5 の帰結として、図 4.3.5 に例示する様なニアフィールドの地球化学的変遷が得られることとなる。

なお、前節に述べた平均移動特性との対応としては、各化学インデックスと対応して(4.43)式を設定する必要がある。しかしながら、この場合、仮にインデックス0と1の両端について(4.43)の各パラメータを統計的にサンプリングした場合でもパラメータ数はかなり増大する一方、これら二つの条件に対応する平均移動特性がそれぞれ有意に異なるという保証はない。そこで、再び計算負荷を現実的なものに保つという要請から、楕円の外部に該当する基本的化学条件（インデックス0）においては統計的にサンプリングされたパラメータ値を(4.43)式に適用して得られる移動特性を用い、楕円の内部、つまり地球化学的な特異領域（インデックス1）においては、(4.44)式に示したように通常の地球化学条件での平均移行特性を（形状を保ったまま）右にシフトすることにより、核種がより移動しやすくなることを表現するものとする。

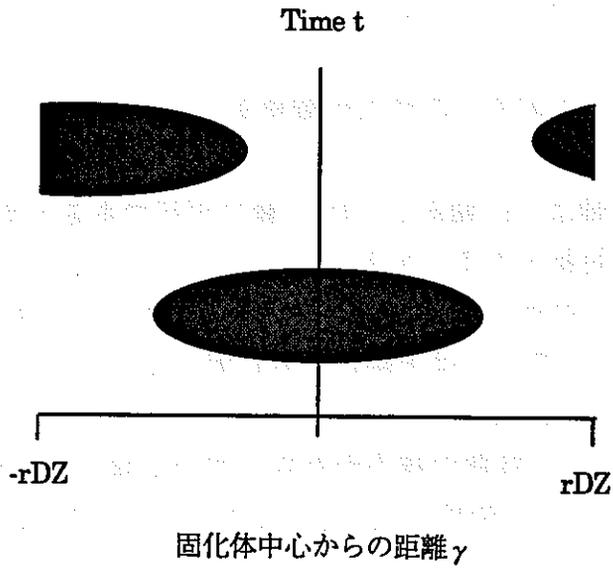


図 4.3.5(a) 統計的計算におけるマトリクス中の地球化学条件変化の例

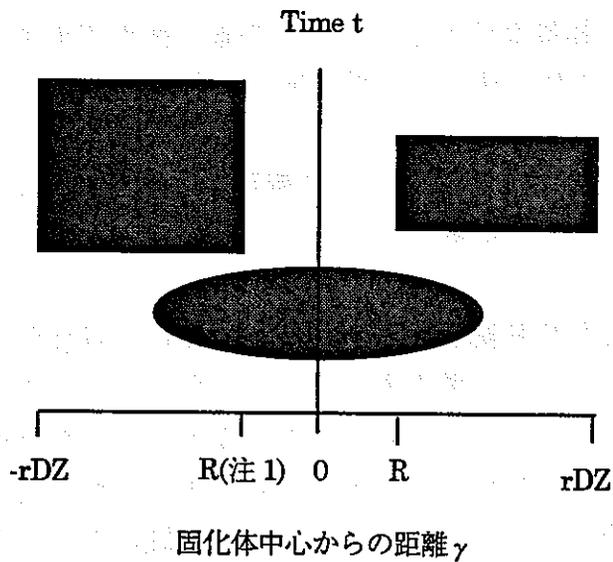


図 4.3.5(b) 図 4.3.5(a)に対応するギャップ中の地球化学条件変化の例

1; 変数の定義については図 3.1 を参照のこと。簡単のため、上図では  $R$  が時間的に一定であるとしているが、計算上はこの仮定は必要ない。

図 4.3.5 から明らかな様に、上記の方法でニアフィールド内の地球化学的変遷を表現するためには、表 4.3.5 に示す 6 種類のパラメータが必要となる。

表 4.3.5 パラメータ値の範囲 (4); 地球化学

名 称	範 囲	スケール
外部の化学平衡が変化し始める時刻; $t_{ex}$	$10^0 - 10^7$ yrs	log
内部の化学平衡が変化し始める時刻; $t_{in}$	$10^0 - 10^6$ yrs	log
外部の化学的特異条件の継続期間; $T_{ex}$	$10^0 - 10^7$ yrs	log
内部の化学的特異条件の継続期間 ; $T_{in}$	$10^0 - 10^6$ yrs	log
外部の化学的特異性の侵入深さ; $R_{ex}$	$0 - r_{DZ}$	linear
内部の化学的特異性の侵入深さ; $R_{in}$	$0 - r_{DZ}$	linear

以上の各シャドウサブモデル及びそれぞれに対応する主要パラメータの全体構成を図 4.3.6 にまとめる。また、それぞれのサポート解析の結果をシャドウサブモデルの概念あるいはパラメータ値の範囲もしくは相関関係の設定に用いた部分を同図に併せて示す。

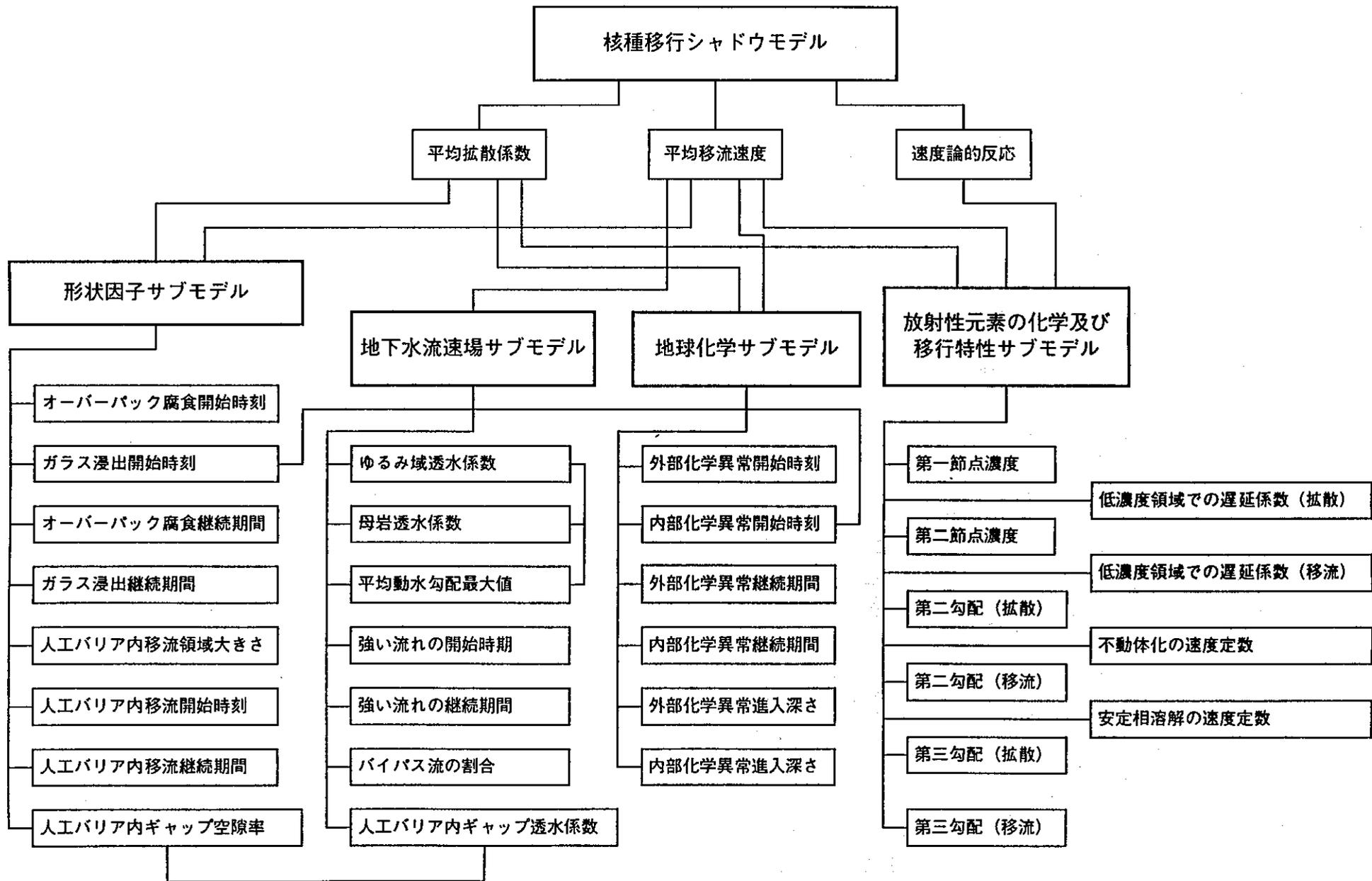


図4.3.6 統計的解析に用いるシャドウ (サブ) モデル群及び主要パラメータの全体構成

#### 4.3.7 統計的解析のためのシャドウサブモデルと FEP 及び具体的モデル群との対応

前節までに作成したシャドウサブモデルは、シャドウモデルの基本方針の一つである「消極的モデリング」(2.参照)の考え方に則ったものであり、従って、既知の具体的な現象及びこれらに対する特定のモデル化オプションと関係づけることは敢えて避けてきた。しかしながら、その結果得られたシャドウサブモデル群はある意味で抽象的なものであり、このため、翻ってその含意するものを理解し、また、対象とする範囲がどの程度広いものであるかを確認するためには、例示的に既知の FEP 及び具体的なモデル群との対応を整理しておくことが望ましいと考えられる。

このような意味から整理を行った結果を、表 4.3.6 にまとめる。

表 4.3.6 (1) 各シャドウサブモデルと FEP 及び具体的モデル群との対応の例

シャドウサブモデル	対応する FEP の例	具体的モデルの例	備考
形状因子変化シャドウサブモデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ ガラス溶解[12]</li> <li>・ オーバーパック腐食[12]</li> <li>・ ガラスひび割れ [13]</li> <li>・ ガラス内初期ポイド[13]</li> <li>・ オーバーパック早期破損 [14]</li> <li>・ 均一腐食[14]</li> <li>・ 不均一腐食 [14][13]</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 一定浸出率モデル</li> <li>・ 外表面積の変化に伴う時間依存浸出率モデル[3]</li> <li>・ 一次反応速度及び残存浸出率モデル[1]</li> <li>・ 定腐食速度モデル [1]</li> <li>・ 時間依存腐食速度モデル</li> </ul>	<p>緩衝材についても同様の対応付けが可能。</p> <p>反応及び腐食速度に関する各モデルとの対応付けは、結果としての未反応体積の時間変化の近似による。</p> <p>腐食の進展と独立にガラス浸出に関し時刻が指定可能であるため、少量の腐食で容器が破過する場合(不均一腐食モデル)を取り扱うことが可能</p>
核種溶出モデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ ガラスからの核種溶解[13]</li> <li>・ ひび割れによる表面積増大[13]</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ コングルエント放出モデル[1]</li> </ul>	<p>溶出後の核種挙動(再沈澱、吸着等)については後述。参照</p>

表 4.3.6 (2) 各シャドウサブモデルと FEP 及び具体的モデル群との対応の例

シャドウサブモデル	対応する FEP の例	具体的モデルの例	備考
人工バリア中ギャップサブモデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>・緩衝材施工不良（初期ギャップの存在）[14]</li> <li>・緩衝材熱変質[10]あるいは化学的変質[10]、セメンテーション[13]による自己シール性喪失</li> <li>・ガス透過による毛管形成</li> <li>・外部事象（トンネル崩落[11]、母岩クリープ[10]、断層活動、等）による緩衝材のせん断あるいはひび割れ形成</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・キャピラリーバンドルモデル[7]</li> </ul>	<p>ギャップ中の地下水流については後述</p>
地下水流速場シャドウサブモデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ゆるみ域中地下水流れ[10]</li> <li>・人工バリアギャップ中地下水流れ</li> <li>・周辺母岩中流れのチャネルリング（バイパス流れ）[10]</li> <li>・二次鉱物沈澱による閉塞、あるいは母岩風化、溶解、並びに応力条件の変化等による母岩中亀裂の透水性変化[10][14]</li> <li>・二次鉱物沈澱/ベントナイトスウェリングによる閉塞[13]、あるいは母岩風化、溶解、並びに応力条件の変化等によるゆるみ域の透水性変化[10][14]</li> <li>・ガス蓄積による動水勾配変化 [10]</li> <li>・熱対流による動水勾配変化[10][14]</li> <li>・塩水楔による動水勾配変化[10][14]</li> <li>・seismic pumping による動水勾配変化[15]</li> <li>・海水準変動による塩淡境界の変化に伴う動水勾配変化[10][14]</li> <li>・隆起/浸食による動水勾配変化[12]</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・定常ダルシー流モデル[5]</li> <li>・非定常モデル [5]</li> <li>・熱-地下水流連成モデル[5]</li> <li>・密度流モデル [5], [8]</li> </ul>	<p>非定常流れ、熱対流の効果、及び密度流の効果については動水勾配の時間的変化としてその影響を考慮</p>

表 4.3.6(3) 各シャドウサブモデルと FEP 及び具体的モデル群との対応の例

シャドウサブモデル	対応する FEP の例	具体的モデルの例	備考
瞬時平衡 グループ 平均拡散 係数及び 移流速度 シャドウ サブモデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 溶質の分種化[11][13]</li> <li>・ 溶解/沈澱[10]</li> <li>・ 準安定相形成[10]</li> <li>・ 真性コロイド生成/解離[10]</li> <li>・ 疑似コロイド生成/解離[10][11]</li> <li>・ 線形吸着[10][14]</li> <li>・ 非線形吸着[10][11]</li> <li>・ 溶質拡散、移流、マトリクス拡散[10]</li> <li>・ コロイド拡散、移流、マトリクス拡散[10]</li> <li>・ 表面拡散[10][14]</li> <li>・ 陰イオン[10]、コロイド及び媒体表面との電氣的相互作用（排斥）[10]</li> <li>・ コロイド濾過[10]</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 瞬時平衡モデル[9]</li> <li>・ 線形吸着モデル[9]</li> <li>・ ラングミュア吸着モデル[9]</li> <li>・ フロイドリッヒ吸着モデル[9]</li> <li>・ 拡散、移流モデル[1]</li> <li>・ 二重空隙（マトリクス拡散）モデル[3]</li> <li>・ コロイド移動モデル[16]</li> </ul>	
速度論的 反応シャ ドウサブ モデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 安定相としての沈澱及び溶解[10][13]</li> <li>・ 結晶化[10][14]</li> <li>・ 鉱物化[10][14]</li> <li>・ 不可逆吸着[14]</li> <li>・ コロイド凝集[10][13]</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 一次反応速度モデル</li> <li>・ より高次の反応速度モデル</li> <li>・ コロイド濾過モデル[16]</li> </ul>	
地球化学 フロント 伝播シャ ドウサブ モデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 地下水放射線分解による酸化還元フロント[10][11]</li> <li>・ 残存空気及びその反応</li> <li>・ ガラスからのアルカリ金属の浸出[14]</li> <li>・ 腐食及び腐食生成物の影響[13][14]</li> <li>・ ベントナイト-地下水反応[10][14]</li> <li>・ コンクリート浸出水の進入[10][14]</li> <li>・ 塩淡境界移動による塩水の進入[10][14]</li> <li>・ 火山活動、地熱の影響等による温度上昇[12]</li> <li>・ seismic pumping による地表水あるいは超深部地下水の進入[14][15]</li> <li>・ 隆起/浸食による地表水の進入[12]</li> <li>・ 立孔に沿った地表水の進入[11]</li> <li>・ 火山活動による酸性地下水の進入[12]</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 水交換+瞬時平衡化学反応モデル[1]</li> <li>・ リアクションパスモデル</li> <li>・ 速度論的反應-移動モデル[10]</li> <li>・ 密度流モデル[8]</li> <li>・ 熱解析モデル</li> </ul>	

#### 4.4 全域的サンプリングによる統計的解析の結果

4.1～4.3の問題設定に対応して全域的なサンプリングを行い、5機のワークステーションを並行して約6,000ケースの統計的解析を実施した。3.におけるSCENARIO SPADEの改良において、コンパイル方法の最適化を行ったこともあり、本年度の解析に要した時間は1ケース当たり30分弱（昨年度は1ケース当たり約2時間）と大幅に短縮された。

図4.4.1は、上記6,000ケースのそれぞれに於ける親及び娘核種放出率を、対数スケール上でスカッタープロットしたものである。6,000ケース全体としては、核種放出率は約100桁に及ぶばらつきを示しているが、その大部分は、図中右上の-25から0の範囲に密集していることがわかる。また、核種放出率の著しく低い領域では、二つのテイルが存在していることが明瞭である。このテイルのうちの一つは、上述した密集領域の延長線上にあり、これらは全体として二つの核種の放出率が同様のオーダーにある一つのトレンドを形成している。もう一つのトレンドは、密集領域から直下に分岐するテイルである。これらのテイルは著しく放出率の低い領域に対応しており、4.3に述べた各パラメータのサンプル範囲から見て、この領域では感度がそれぞれの核種の半減期によって規定されていることは明瞭である。

第二のテイルでは、娘核種の放出率は大きく変動しないまま、親核種の放出率が50桁以上変動するという「異方的」な傾向を示しており、これは、親核種の半減期のみが著しく小さいケースに対応しているものと考えられる。また、これと対称の関係にあるテイル、つまり密集領域から左水平に変動していくテイルが存在しないことも興味のある点である。これは、娘核種の半減期のみが著しく小さい場合には、放射平衡が成立することにより、娘核種の放出率が必ずしも低下しないことに対応しており、結果的にこれらのケースは第一のテイルに吸収されているものと推定される。

次節で述べる対数スケールでのクラスタ分析は、いわば図4.4.1の分布から統計的かつ客観的な方法により、ある「構造」を探り出していく作業であるといえることができる。

図4.4.2及び4.4.3は、それぞれ異なる大きさのリニアスケール上で図4.4.1を描いたものである。これらのスカッタープロットの特徴は、大部分のケー

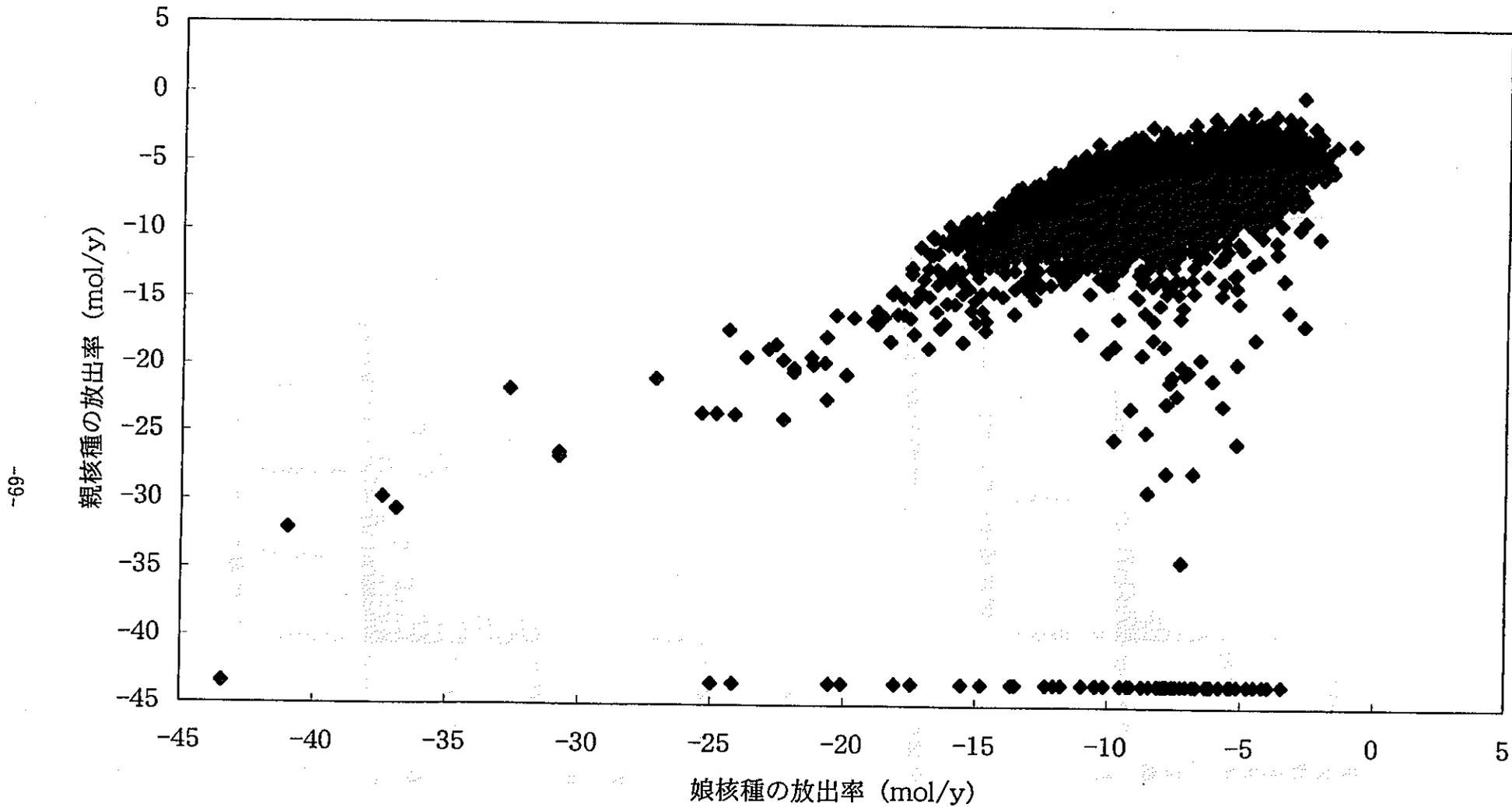


図 4.4.1 全域的サンプリングによる統計的解析結果のスカッタープロット  
(常用対数スケール)

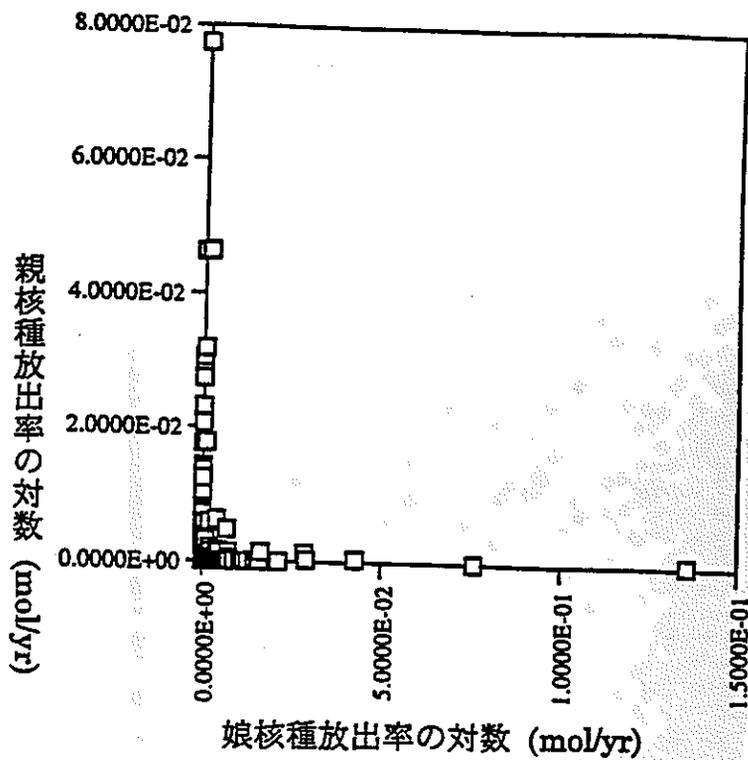


図 4.4.2 全域的サンプリングによる統計的解析結果のスクエアープロット (リニアスケール (1))

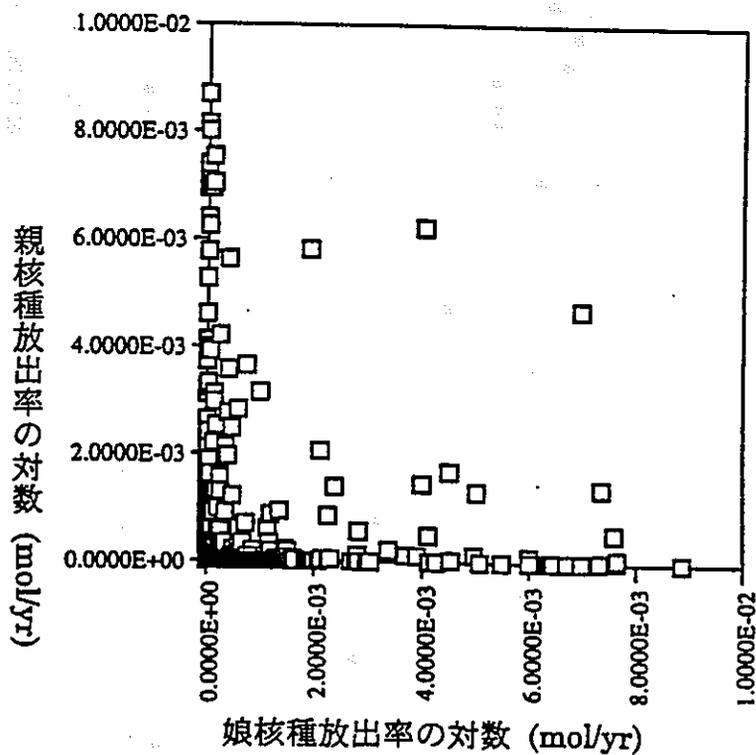


図 4.4.3 全域的サンプリングによる統計的解析結果のスクエアープロット (リニアスケール (2))

スが原点近傍に密集し、対数スケールの場合とは逆に、放出率の高い方向にテイルが伸びているという点である。また、これら二つのテイルは二つの核種それぞれに対応した軸に沿ったものとなっている。上と同様、次節で述べるリニアスケールでのクラスタ分析は、いわば図 4.4.2 あるいは 4.4.3 の分布から統計的かつ客観的な方法により、ある「構造」を探り出していく作業であるといえることができる。

#### 4.5 全域的解析結果に対する感度分析

シャドウモデルを用いた統計的解析は、合計 49 個の入力パラメータ群における統計的サンプルを、2 個の出力（親及び娘核種の最大放出率）へ対応づけるものであり、数学的には 49 次元の空間から 2 次元の空間への写像と見なすことができる。写像としての統計的解析の最大の特徴は、以下の二点にある。

- (1) 入出力間の相関の非線形性
- (2) 複数の感度構造の重なり合い

(1) は、解析に用いたシャドウモデル自体の特徴に起因するものであり、この特徴は通常の核種移行解析モデルに於いても、程度の差こそあれ、見られるものである。他方、(2) は、入力空間と出力空間の次元（すなわち 49 と 2）の間に大きな差が存在することに起因して、複数のパラメータあるいはパラメータ群の感度構造がたかだか二次元の出力平面に織り込まれてしまっていることに対応している。

後に述べる様に、複数の感度構造が出力平面に塗り重ねられている状況では、各感度解析手法はいずれも統計的に顕著な感度のみを抽出することとなる。より具体的に言えば、例えばある単一のパラメータが他のパラメータ値にはあまり依存せずに出力を大きく変動させるというある意味で簡単明瞭な感度構造を有するものとする。この例では、当該パラメータと出力との間には明確なトレンドとその周囲に小さな摂動とが生じ、従っていずれの感度分析手法によっても、統計的に有意な感度が同定されることとなる。他方、関連する複数のパラメータ値がある組み合わせになった場合に限って感度を有する様なパラメータの場合には、これらの関連するパラメータ群についての統計的なサンプリングに起因する摂動の方が優り、ノイズの中にトレンドが埋没してしまうこととな

る。このことは、全域的なサンプリング結果のみから、複雑な感度構造までを一括して抽出することが極めて困難であることを意味しており、この問題への対策として、後述する様に、全域的サンプリングによって同定された感度に対応するパラメータ値をある代表点（最高放出率ケース、リファレンスケース等）において固定し、他のパラメータを統計的に変動させる局所サンプリングを逐次行っていくことによって、上記の出力平面に織り込まれた感度構造を解きほぐしていくことが必要となる。

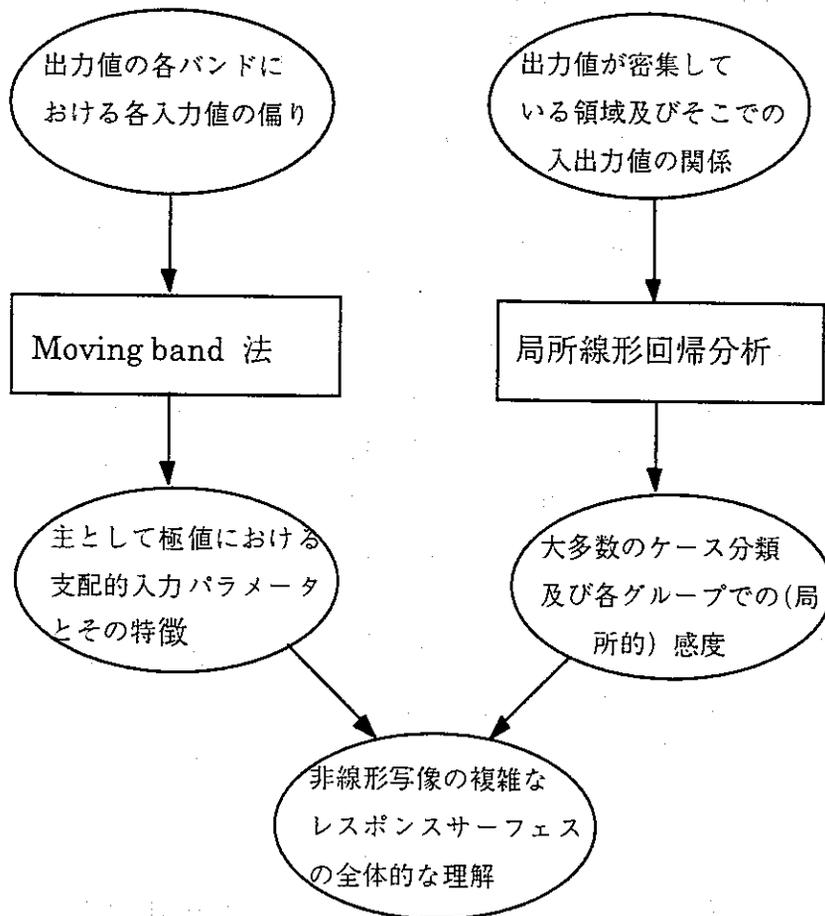
(1) の写像の非線形性は、レスポンスサーフェスが複雑な形状をとるために、通常の全域的な線形回帰モデルが適合しないという問題を生ずる。そこで、この非線形な写像に対応して複雑な形状を持つレスポンスサーフェスをどの様に調べていくかが、感度解析手法としての最大の課題となる。

上記の課題に対して、本研究において開発・使用する感度解析手法は以下の二つである。

- (1) クラスタ分析と組み合わせた局所線形回帰分析による感度解析
- (2) Moving band 法による入力パラメータの重要度分析

これらいずれの手法も、目的とするところは、非線形な写像に特徴的な感度（つまり微係数）の位置依存性を考慮して、局所的な感度を調べることにある。(1) の手法は、クラスタ分析によって出力空間中の分布から全ケースをグループ分けし、それぞれのグループについて線形回帰分析を行うものであり、各グループにおける各入力パラメータの感度が回帰係数（Jacobian 行列）として定量的かつ直接的に算出できることが利点である。この手法は、出力空間において密に計算結果が分布している領域では極めて有効であるが、高放出率側及び低放出率側といった極値ではケース数が少ないために回帰分析を実施可能なサイズのクラスタが同定されず、しばしば適用困難となる。他方、(2) では、感度を直接的に計算する代わりに、各入力パラメータについて、出力値のバンド毎に、そこに属する全サンプルの平均値が全域的な平均値からどれほど離れているかを計算することにより、出力値がどの領域でどの入力パラメータによって支配されているかを示すものである。こうして計算される感度は間接的かつ半定量的なものであるが、この手法は、高放出率側及び低放出率側といった極値においても適用可能である。

以上から、本研究の感度解析においては、主として極値に対して Moving band 法による入力パラメータの重要度分析を、また、大多数のケースについてクラスター分析と組み合わせた局所線形回帰分析による感度解析を、それぞれ相互に補完的に用いることによって非線形写像の感度の全貌を調べることにする。なお、それぞれの手法の詳細については以下の各節を参照されたい。



各感度解析手法の相互補完的な適用

#### 4.5.1 クラスタ分割

4.4 に述べた約 6,000 ケースの解析結果について、リニアスケールでのクラスタ分析と局所線形回帰分析により得られた平均二乗残差(MSE)とクラスタ数の関係を図 4.5.1 に示す。ここで、MSE は二つの核種についての残差二乗和として定義されており、勿論、二つの核種それぞれについて別々にクラスタ分析した場合とは一般に異なったものとなる。どちらか一方の核種についての残差が大きい場合には二乗和も必ず大きくなることから、残差二乗和に基づくクラスタ分割は、個別の核種毎のクラスタ分割を重ね合わせたもの（より厳密には集合論的な直積）と概ね等しいものとなる。MSE はクラスタ数の増加に伴って急速に減少し、クラスタ数が 6 以上になるとほとんど 0 となる。また、同図には、サンプル数を種々に変動した場合の挙動を併せて示すが、これらの間の差異は小さい。図 4.5.2 は、最大サンプルサイズの場合の MSE によって他の MSE を規格化し、その結果を対数プロットしたものである。図 4.5.1 では差の比較が困難なクラスタ数の大きい領域に於いても、1,000 以上のサンプル数の MSE は 1 の近傍に分布していることがわかる。なお、各クラスタ毎に見た場合、異なるサンプル数での規格化 MSE の差異は更に小さいものとなる。

リニアスケールの解析によって同定されたクラスタは、いずれも核種放出率が大きい範囲に対応しており、かつ、各クラスタの大きさはそれぞれ数ケース程度に過ぎない。つまり、この解析は、図 4.4.2 及び 4.4.3 のスキッタープロットにおいて、放出率の高いグループを順番に抜き取っているものであることがわかる。また、本年度の研究では、図 4.5.1 及び 4.5.2 に示したクラスタ数の範囲（20 以下）を超えて、クラスタ数 100 まで解析を行った。しかしながら、結果として得られたクラスタ分割は、5,000 以上のサンプル数を有する一つの大きなクラスタと 99 個の微小なクラスタ群とを示しており、上記の傾向（放出率の高いグループを順番に抜き取っているものであること）はここでも変わらない。

以上に基づき、リニアスケールでの解析結果は高放出率側の感度構造の同定に用いて行くべきであり、また、この目的のためには、全域的なサンプリングの大きさが 1,000 ケース以上であれば、比較的クラスタ数の少ない範囲での収束性から見て、十分なものであると考えられる。なお、親及び娘核種の最大放出率に対応したケースはいずれも微小なクラスタに属するものであり、現段階では線形回帰分析の対象とはできない。この点については、後節で述べる

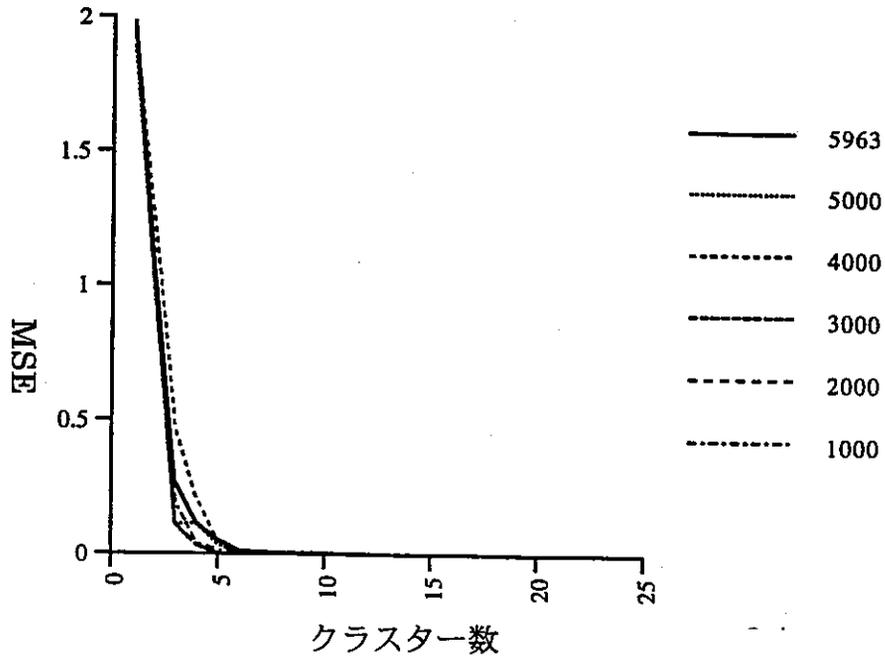


図 4.5.1 全域的サンプリングによる統計的解析結果について計算された平均二乗残差(MSE)とクラスター数との関係 (リニアスケール)

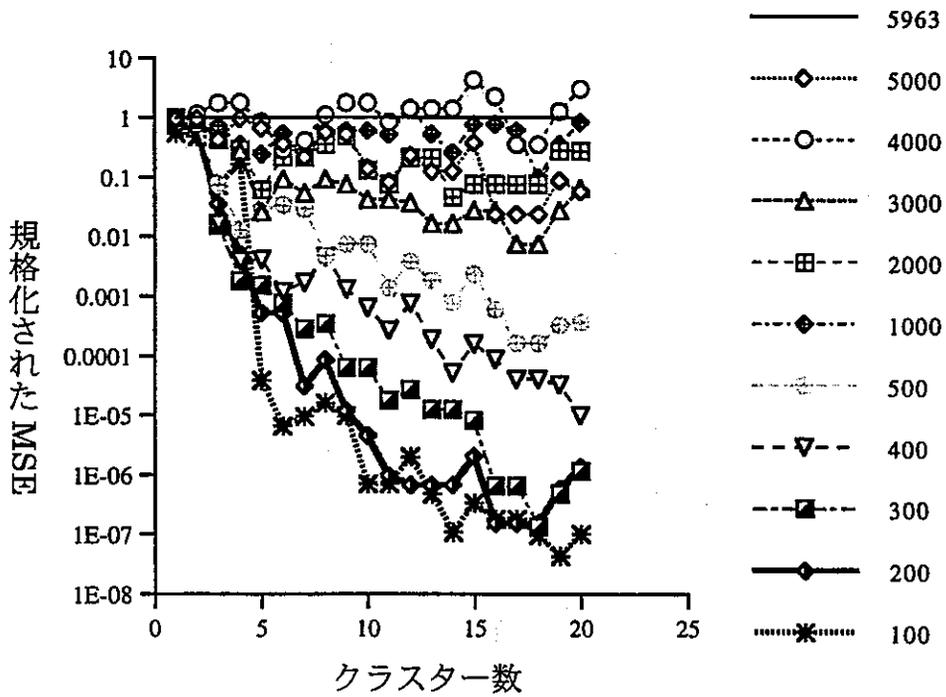


図 4.5.2 全域的サンプリングによる統計的解析結果について計算された平均二乗残差(MSE)とクラスター数との関係 (リニアスケール、最大サンプル数のものにより規格化)

第二次の局部的サンプリングに対応した統計的解析結果を用いて詳細な感度分析を行うものとする。

同様に、対数スケールにおいても、クラスター分析及び局所線形回帰分析をクラスター数 100 まで行った。この結果、図 4.4.1 に見られた二つのテイルが微小なクラスターとして徐々に抜き取られていく一方、結果的に 7 個のサンプル数 50 以上のクラスターが残った。これらを図 4.5.3 に示す。また、これらのクラスターの内の一つは親及び娘核種の放出率がいずれも  $10^{-100}$  以下のものであり重要性は極めて小さい。これを除いた 6 個のクラスターの分割を示したものが図 4.5.4 である。

#### 4.5.2 Moving Band 法による入力パラメータの重要度分析

親あるいは娘核種の放出率の大きい順番に全てのサンプル (N=5963 個) を並べ直し、互いに隣接した  $m$  個の部分集合 (バンドと呼ぶ) を抜き出すとする。そして、それぞれの入力パラメータ毎に、この  $m$  ケースにおける平均を計算し、これを  $\mu_m$  とする。また、N 個全体での平均を  $\mu_N$  とし (規格化されているため、 $\mu_N$  はほぼ 0.5 となる)、 $C_N$  個存在し得る全てのサイズ  $m$  の部分集合を考えこれらそれぞれにおける入力パラメータの平均値の標準偏差を  $\sigma_m$  とする。この時、次式によって定義される量  $S_m$  は、当該バンドにおける入力パラメータのサンプル値が全体の平均から離れた位置で偏ってサンプリングされている程大きな値を示すこととなる。

$$(4.44) \quad S_m = \frac{\mu_m - \mu_N}{\sigma_m}$$

但し、N 個のサンプル全体における標準偏差を  $\sigma$  とすると、上式中の  $\sigma_m$  は、次式に従うことが知られている。

$$(4.45) \quad \sigma_m = \sqrt{\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{N}\right)}\sigma$$

$S_m$  のある信頼性限界値、例えば 99 パーセンタイル=2.574、は既知であり、これを用いてあるバンドにおいてある入力パラメータ値が特殊な値をとっているか否か、つまり、核種放出率がこのバンドに対応する値を採るために、この入力パラメータが特定の値の範囲にあることが必要か否かを統計的に検定するこ

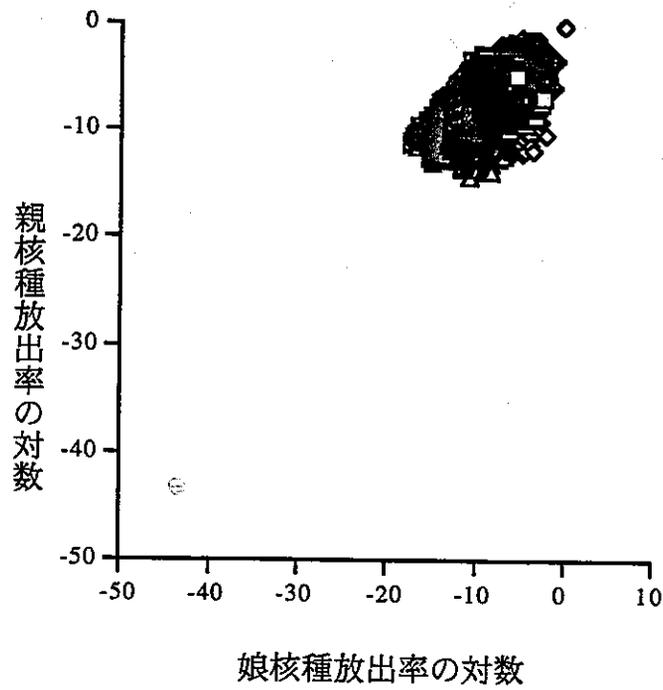


図 4.5.3 対数スケールにおけるクラスター分析により同定された主要クラスタ  
ーの分析 (1)

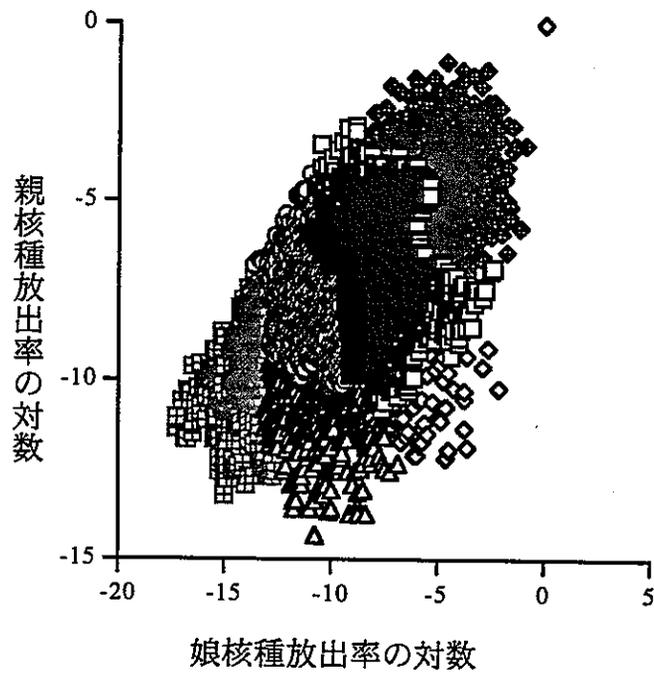


図 4.5.4 対数スケールにおけるクラスター分析により同定された主要クラスタ  
ーの分布 (2)

とが可能である。さらに、この様なバンドを、核種放出率の高い側から低い側へと順次移動させながら  $S_m$  を計算していくことにより、任意のバンド位置に於いてそのバンドを特徴づける入力パラメータを連続的に同定していくことが可能となる。図 4.5.5 は、親及び娘核種についてそれぞれバンドサイズ=50 ケースの Moving Band 解析を行った結果をまとめたものである。ここで、式(4.45)に従えば、 $\sigma_m = 0.024$  となる。

なお、統計的にサンプルされた各入力パラメータの内容は表 4.5.1 に示す通りである。

表 4.5.1 全域的サンプリングのための統計的入力パラメーター一覧表 (1)

入力パラメータ番号	内容
1	親核種半減期
2	娘核種半減期
3	親核種初期インベントリ
4	娘核種初期インベントリ
5	親核種第二区間勾配 (拡散)
6	親核種第二区間勾配 (移流)
7	親核種の低濃度領域での遅延係数 (拡散)
8	親核種の低濃度領域での遅延係数 (移流)
9	親核種の第一節点濃度 (拡散)
10	親核種の第二節点濃度 (拡散)
11	親核種の第一節点濃度 (移流)
12	親核種の第二節点濃度 (移流)
13	親核種の第三節点濃度 (移流)
14	地球化学異常での節点のシフト (親核種)
15	親核種の不動態化反応速度
16	親核種の安定相溶解速度
17	娘核種第二区間勾配 (拡散)
18	娘核種第二区間勾配 (移流)
19	娘核種の低濃度領域での遅延係数 (拡散)
20	娘核種の低濃度領域での遅延係数 (移流)
21	娘核種の第一節点濃度 (拡散)
22	娘核種の第二節点濃度 (拡散)
23	娘核種の第一節点濃度 (移流)
24	娘核種の第二節点濃度 (移流)
25	娘核種の第三節点濃度 (移流)
26	地球化学異常での節点のシフト (娘核種)
27	娘核種の不動態化反応速度
28	娘核種の安定相溶解速度

表 4.5.1 全域的サンプリングのための統計的入力パラメーター一覧表 (2)

入力パラメータ番号	内容
29	オーバーパック腐食継続期間
30	オーバーパック腐食開始時期
31	ガラス浸出期間
32	動水勾配最小値
33	人工バリア内ギャップ透水係数
34	ゆるみ域透水係数
35	母岩透水係数
36	人工バリア内空隙率
37	移流領域の人工バリア内進入距離
38	最大進入時期
39	ギャップ存在期間
40	動水勾配最大値
41	強い流れの開始時期
42	強い流れの継続期間
43	バイパス流の割合
44	外側地球化学異常開始時期
45	外側地球化学異常継続期間
46	外側地球化学異常進入距離
47	内側地球化学異常開始時期
48	内側地球化学異常継続期間
49	内側地球化学異常進入距離

図 4.5.5 においてほとんど全てのパラメータの  $S_m$  は 0 をはさんで正負にランダムに振動している。このことは、同程度の放出率を示す隣接した二つのバンドにおいて当該入力パラメータ値が全く異なる傾向を示していることを表しており、つまり少なくともこれら二つのバンドにまたがるスケールでの放出率は他のパラメータによって支配されていることを示している。しかしながら、この様なノイズとは異なり、多数のバンドにわたって安定した傾向を示すパラメータがいくつか存在している。これらのパラメータにおいてもノイズは存在しているが、重要な点は、明瞭な非零のトレンドが存在しているということである。このことは、放出率が当該バンドの位置にあるためには、このパラメータがトレンドの示す数値を中心としたある範囲内にあることが必要であるという予想を統計的に支持するものである。

有意な放出率領域（例えば  $10^{-20} \text{ mol/yr}$  以上）においてこの様な非零のトレンドを有するパラメータを表 4.5.2 にまとめる。なお、同表中の傾向が「正」のものは放出率が高い領域で高い入力値を採ることを示し、「逆」は放出率が低い領域で高い入力値を採ることを示す。

表 4.5.2 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ

	パラメータ	傾向
1	親核種半減期	正（親及び娘核種放出率について）
2	娘核種半減期	正（娘核種放出率について）
3	親核種初期インベントリ	正（親及び娘核種放出率について）
4	娘核種初期インベントリ	正（娘核種放出率について）
7	親核種遅延係数	逆（親核種放出率について）
19	娘核種遅延係数	逆（娘核種放出率について）
31	ガラス浸出期間	逆（親及び娘核種放出率について）
34	ゆるみ域透水係数	正（親及び娘核種放出率について）
35	母岩透水係数	正（親及び娘核種放出率について）

また、オーバーパック腐食開始時期及び動水勾配最小値は、放出率が  $10^{-20} \text{ mol/yr}$  以下の領域において明瞭なトレンドを有しているが、より大きな放出率領域でのトレンドの存在は必ずしも明確とは言えない。

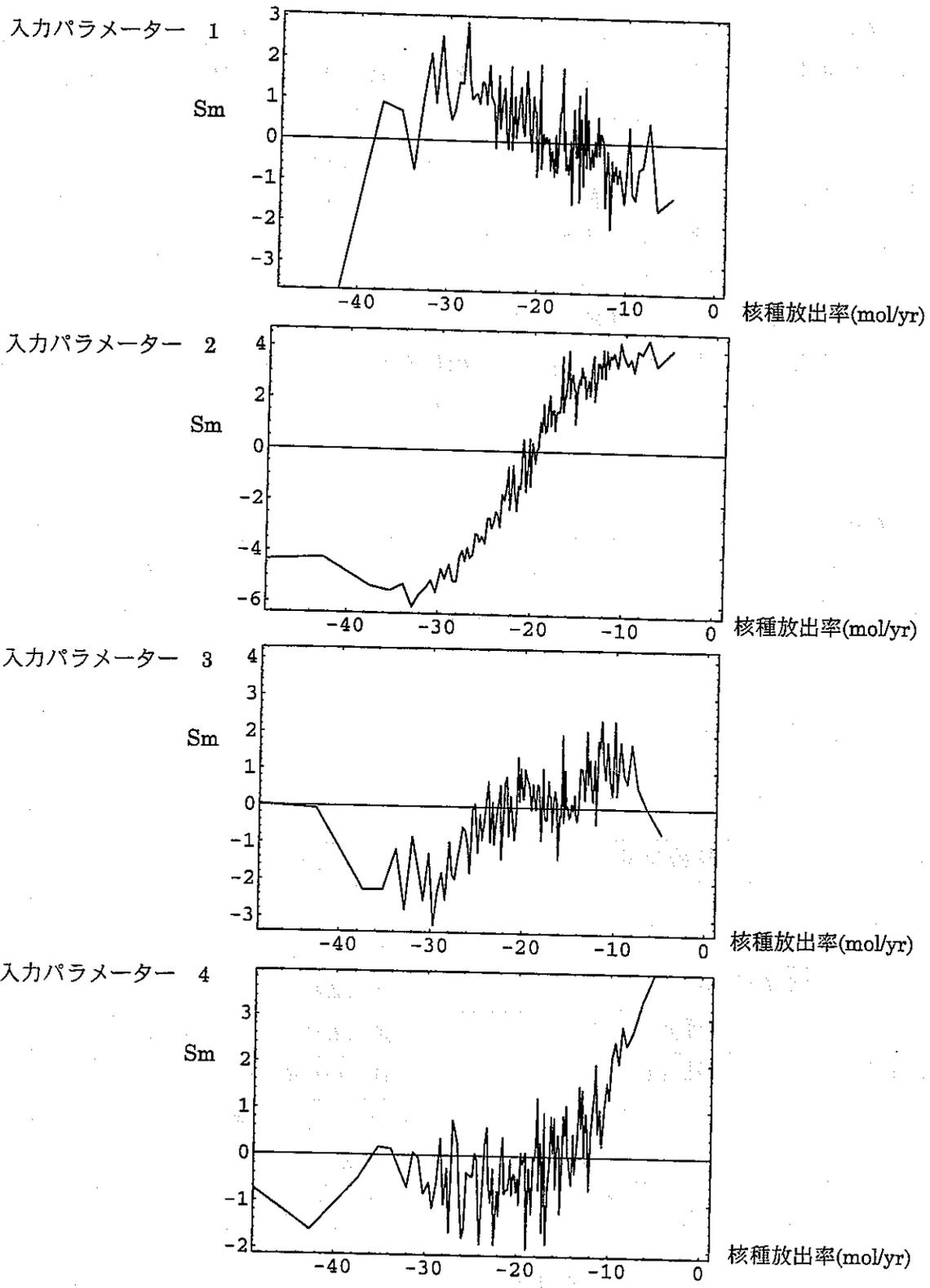


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (1))

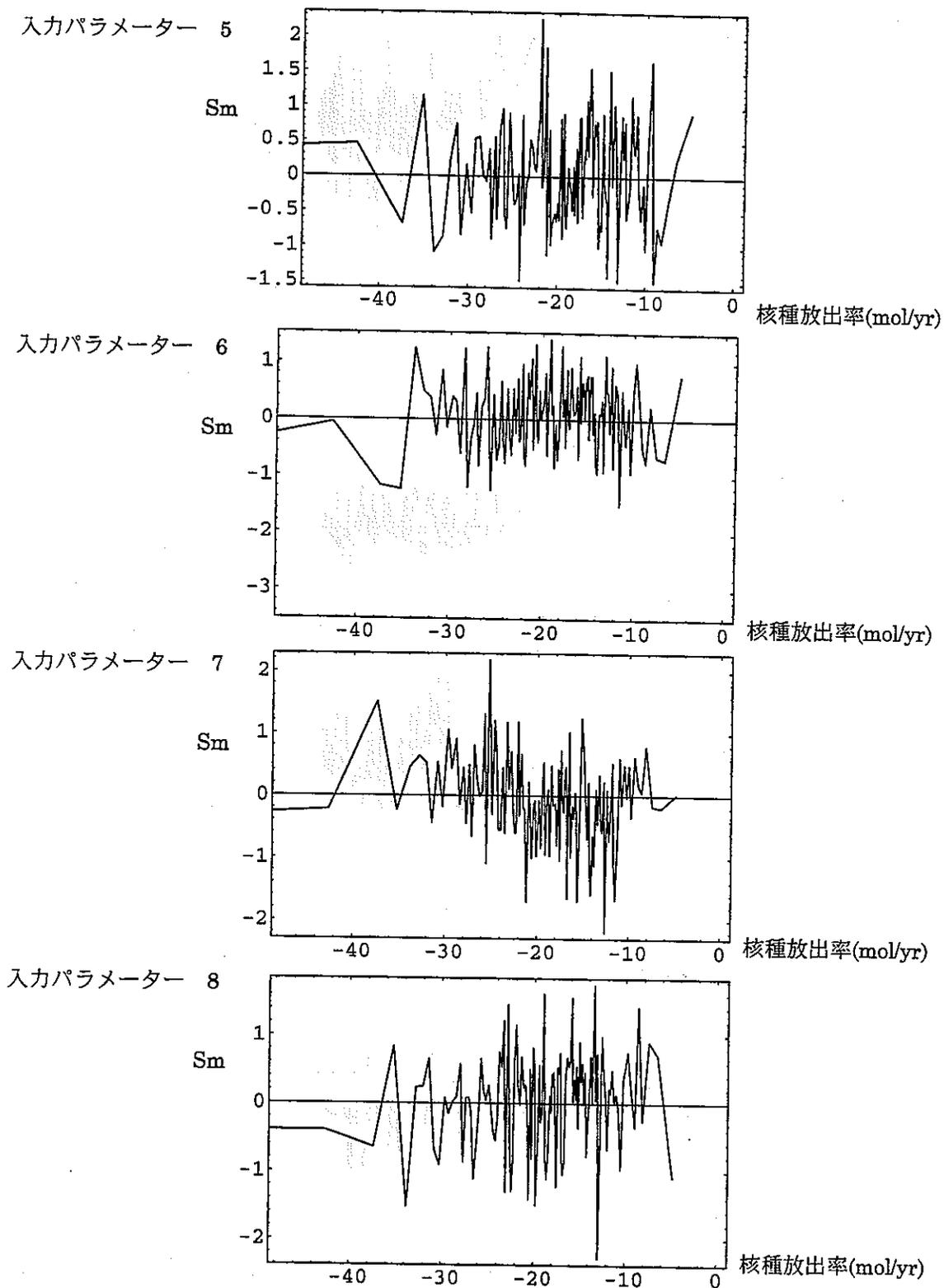


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (2) )

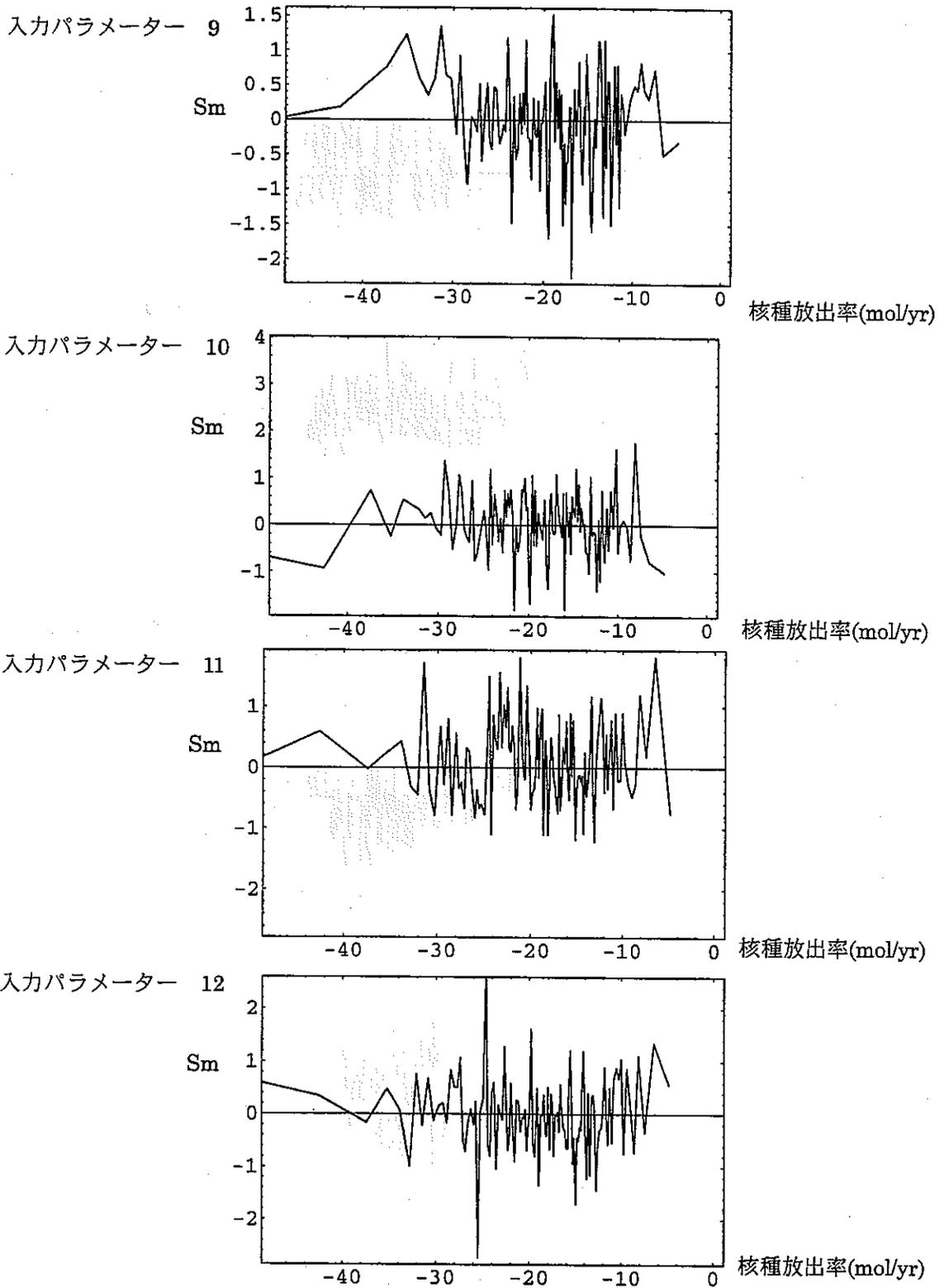


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (3) )

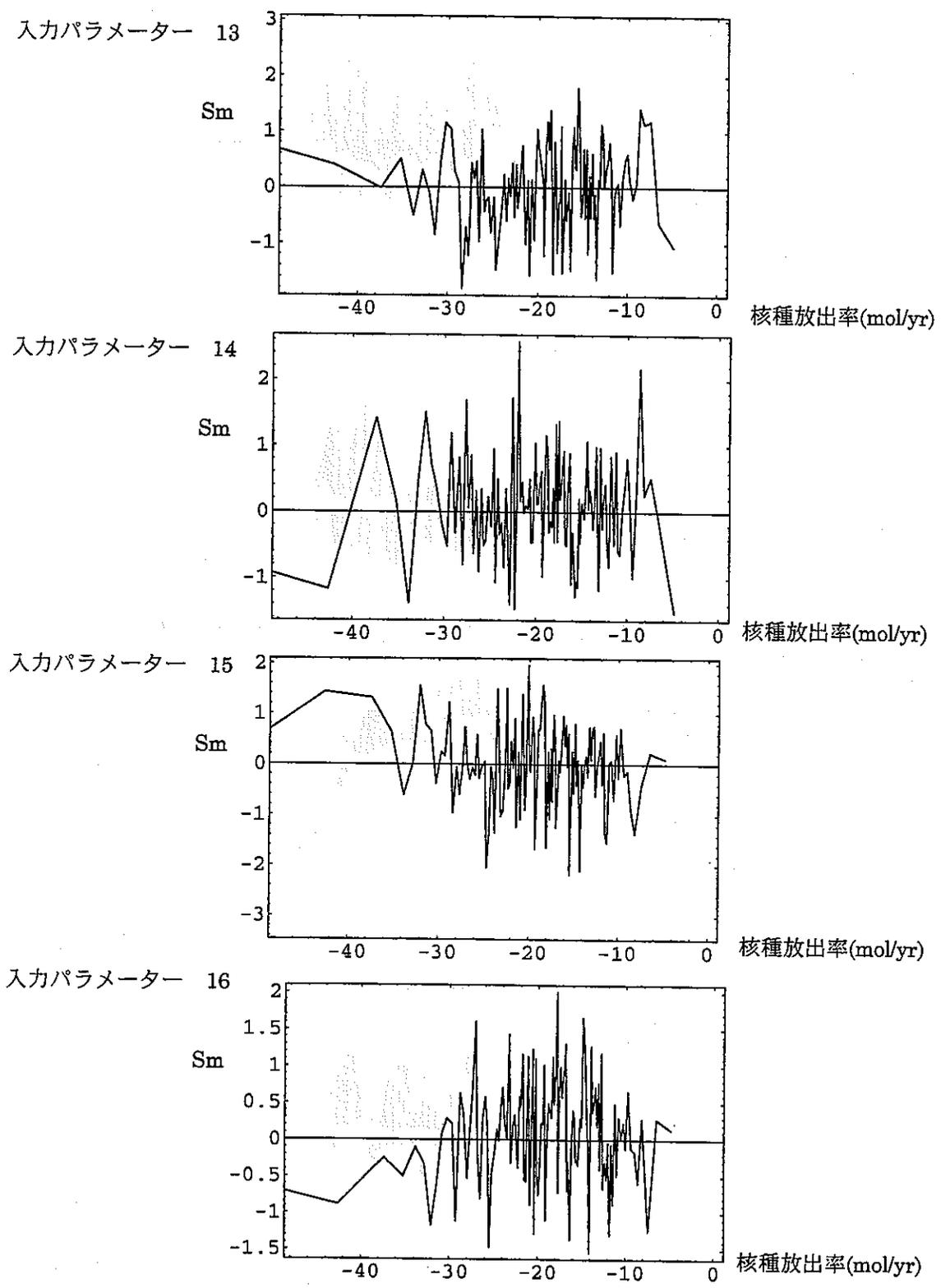
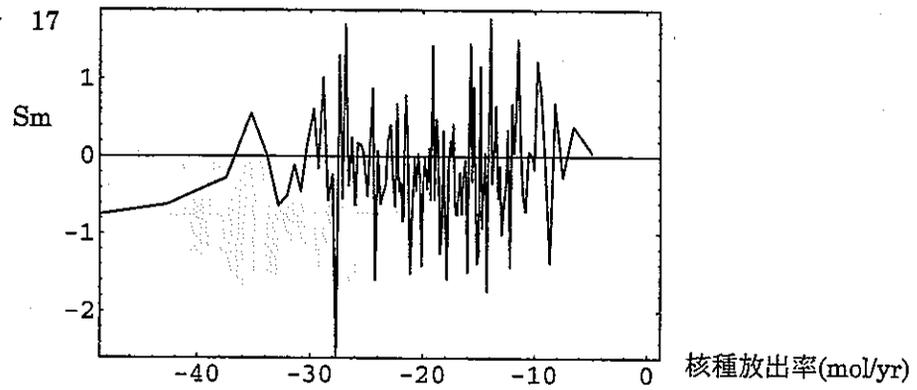
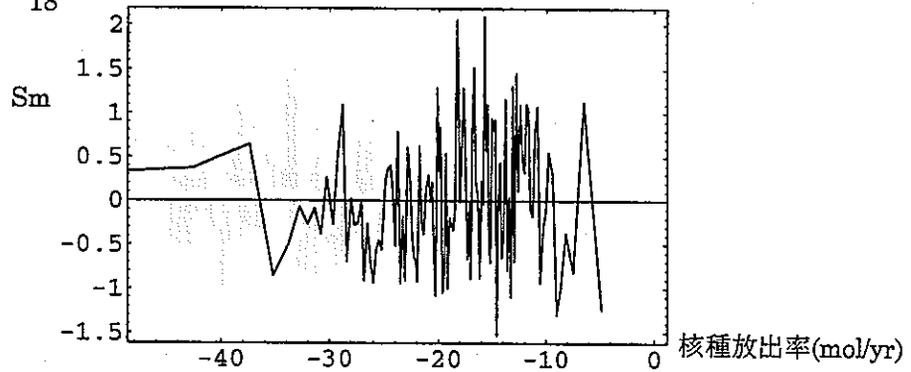


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (4) )

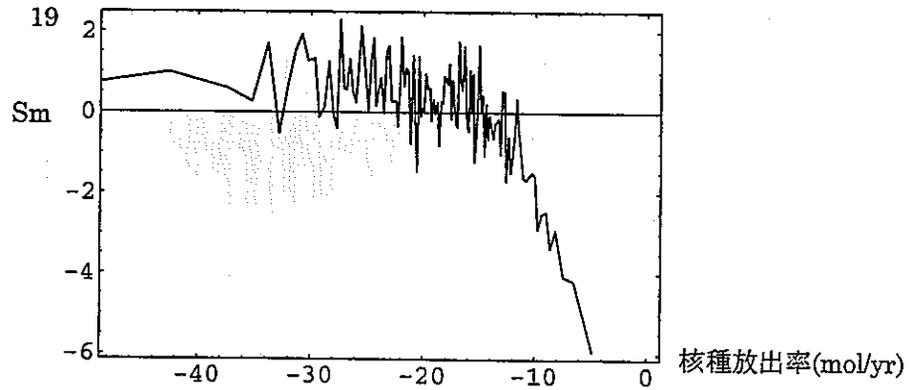
入力パラメーター 17



入力パラメーター 18



入力パラメーター 19



入力パラメーター 20

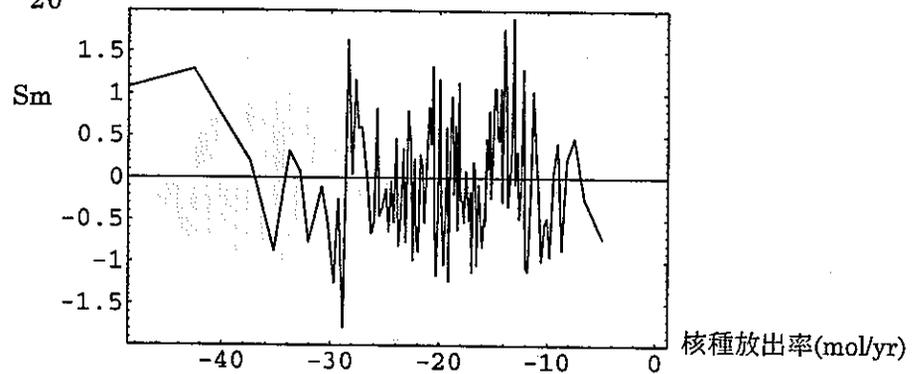


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (5) )

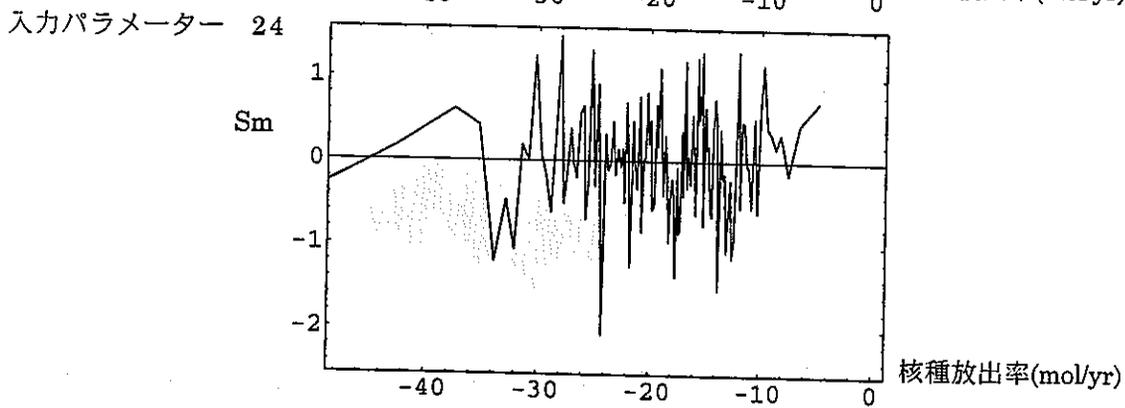
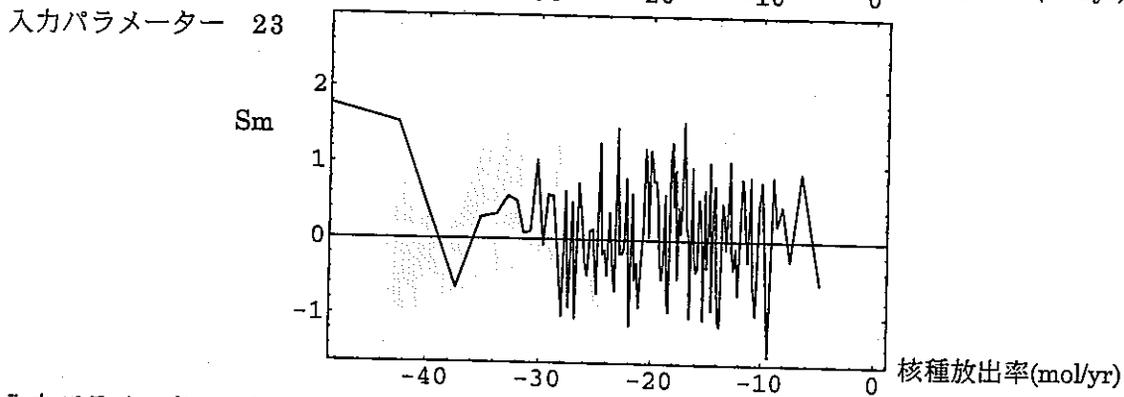
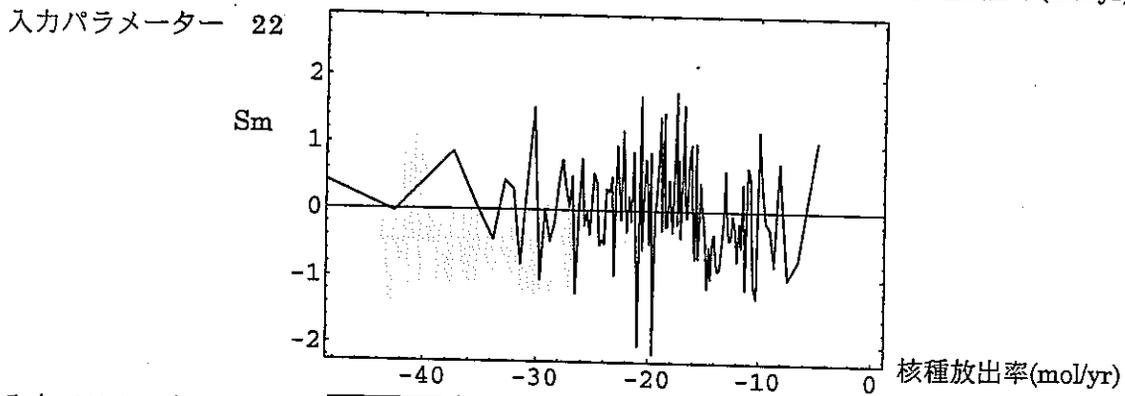
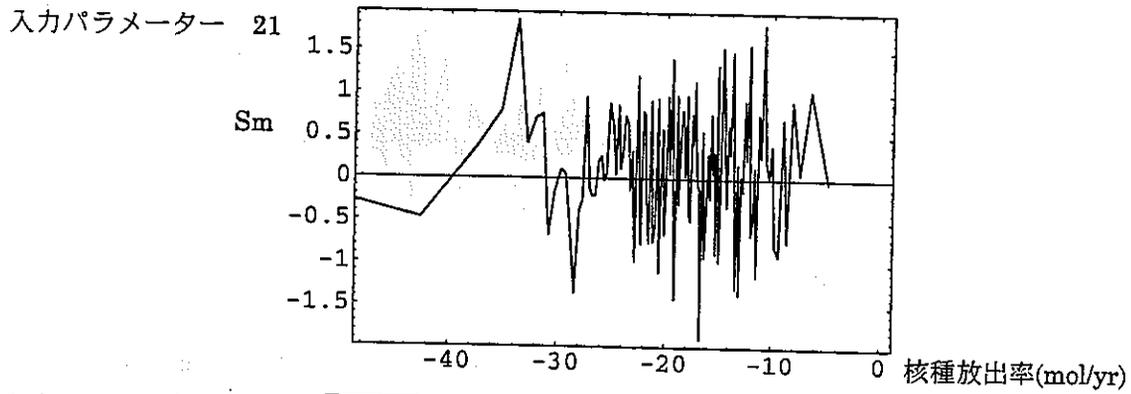


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (6) )

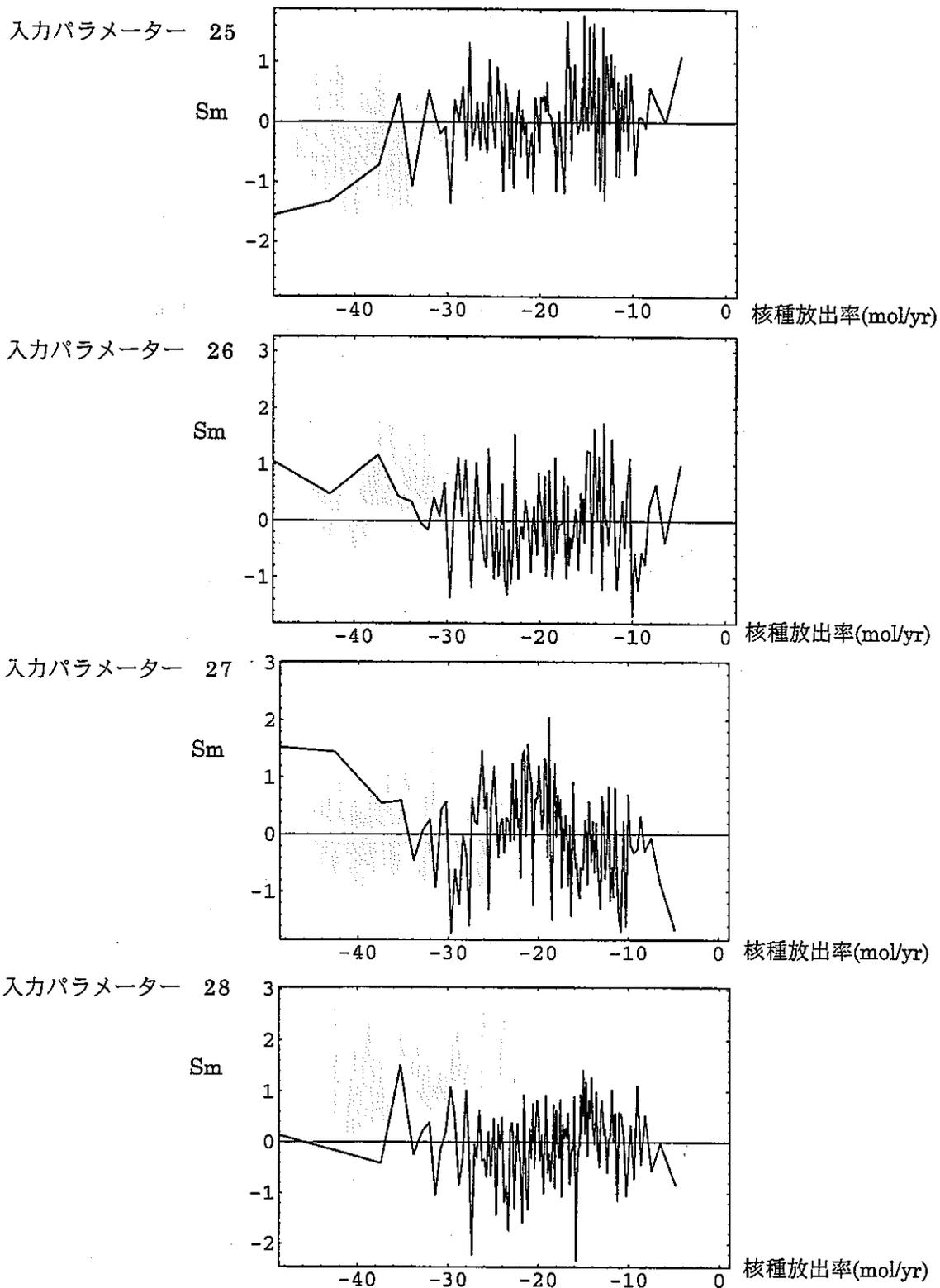


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (7) )

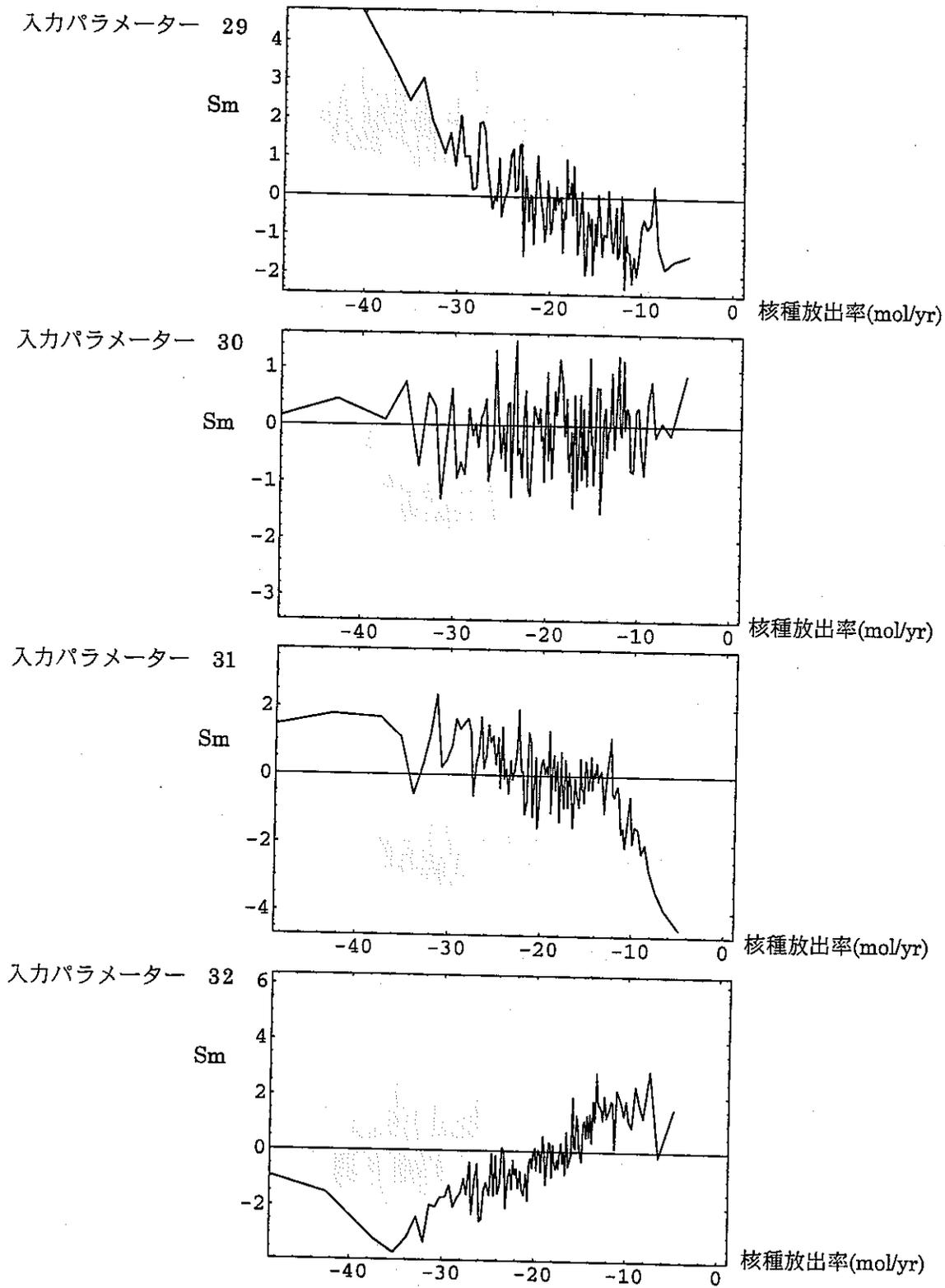


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (8) )

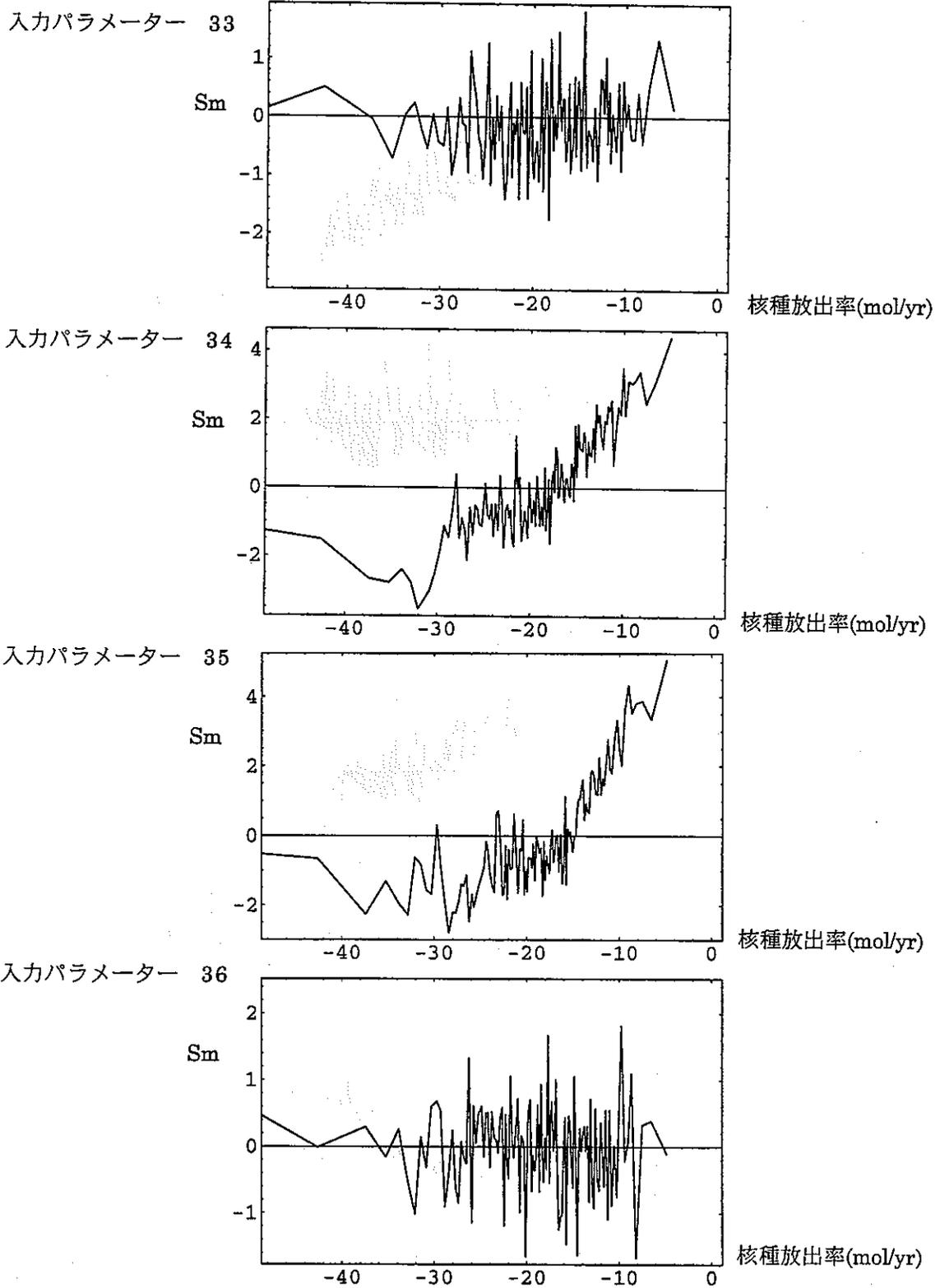


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (9) )

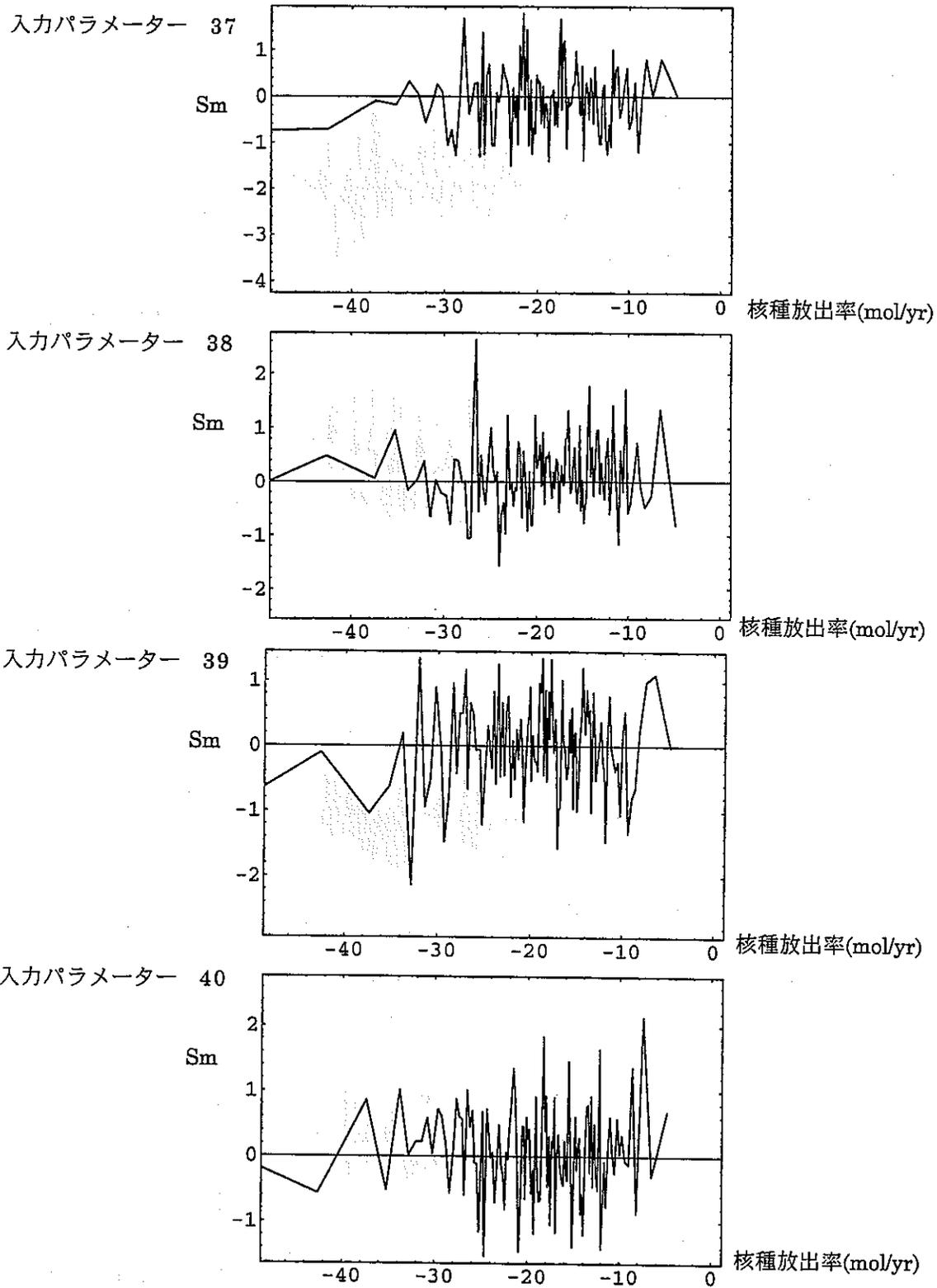
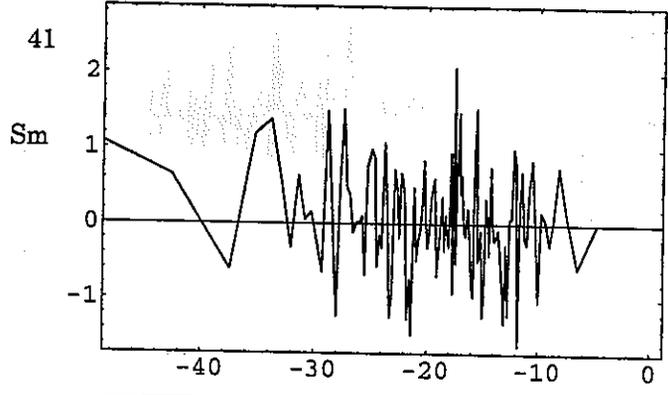


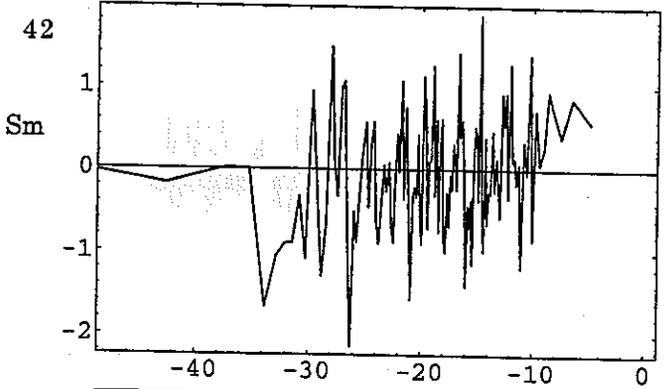
図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (1 0) )

入力パラメーター 41



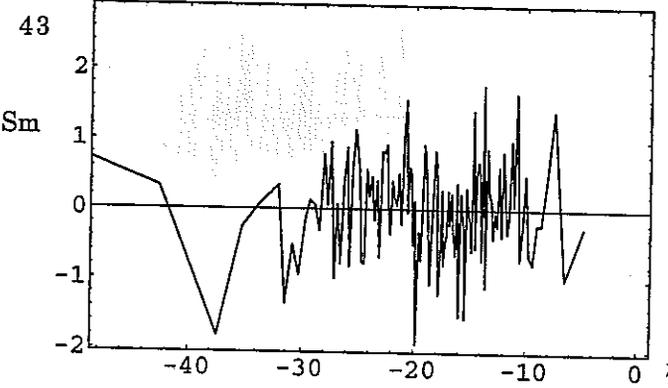
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 42



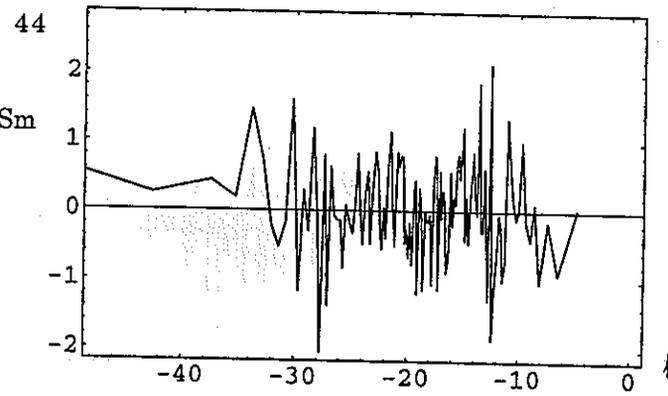
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 43



核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 44



核種放出率(mol/yr)

図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (1 1) )

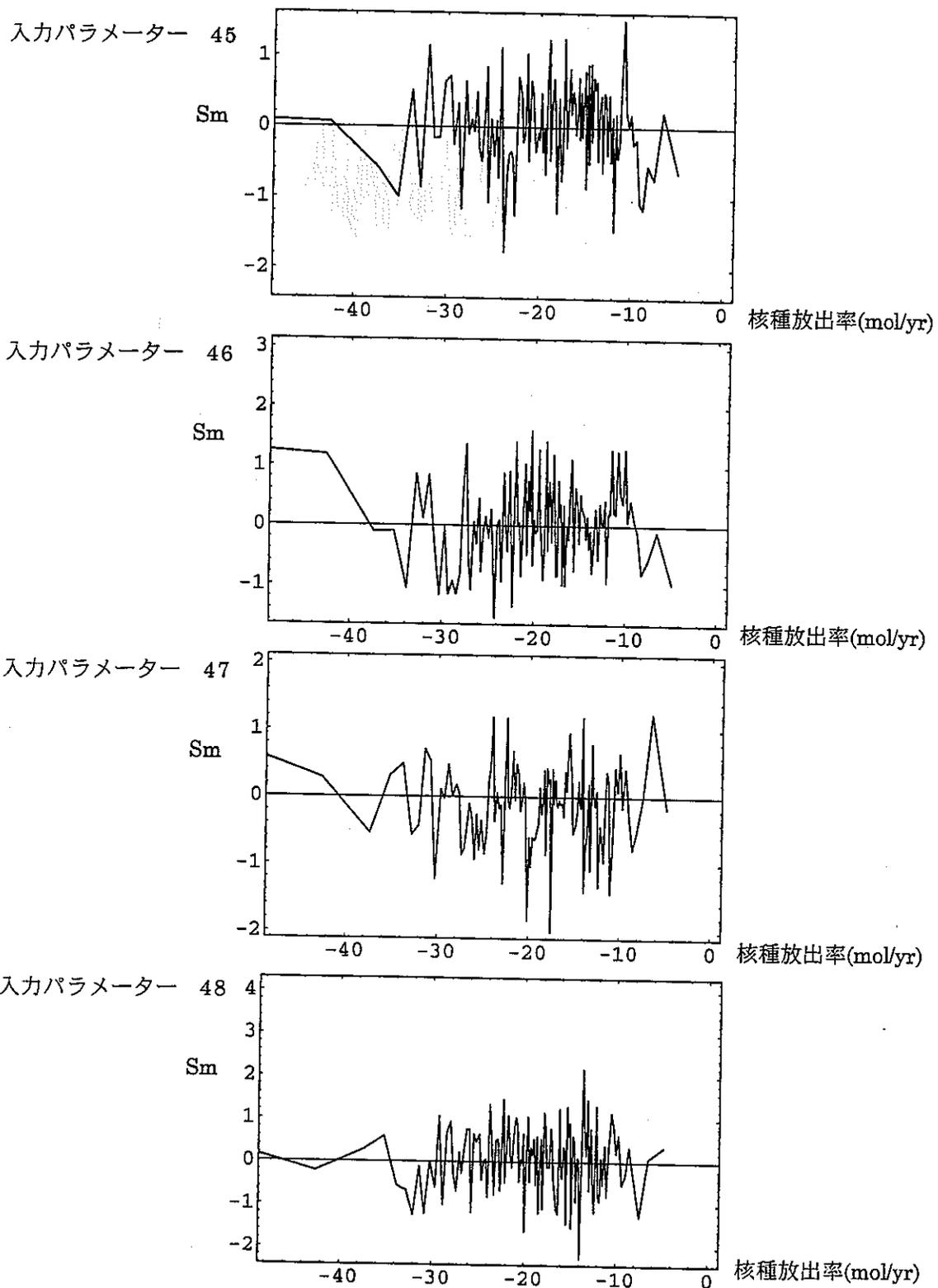


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (1 2))

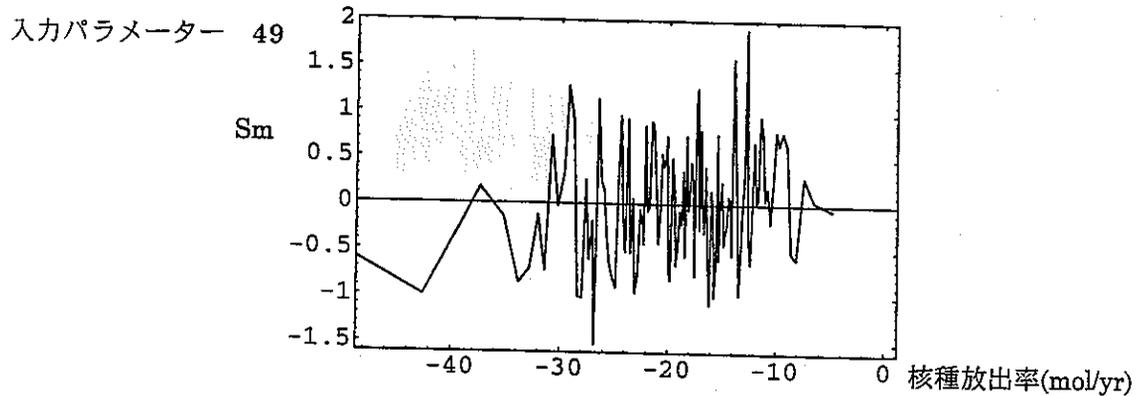
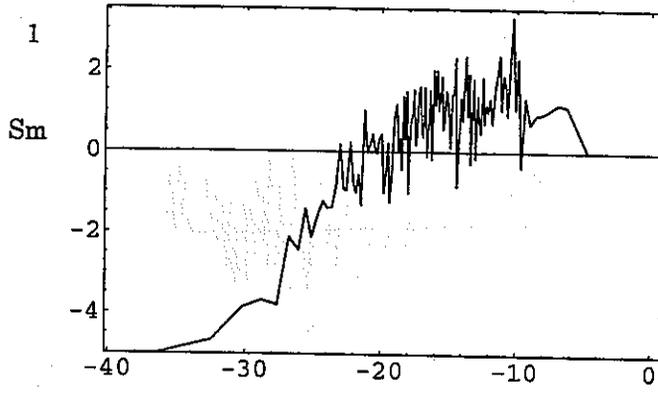


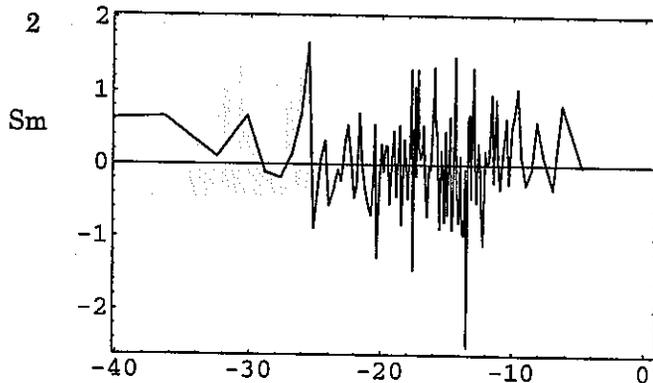
図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (1 3) )

入力パラメーター 1



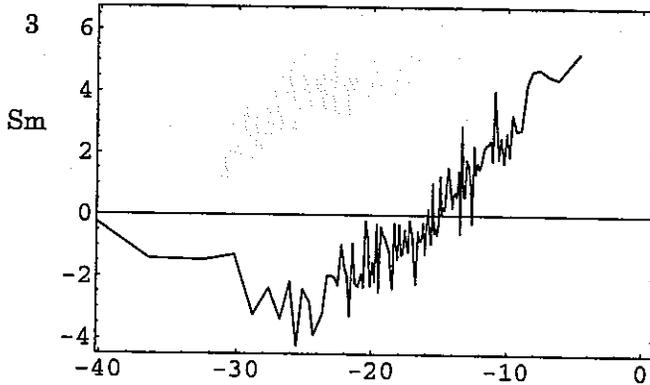
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 2



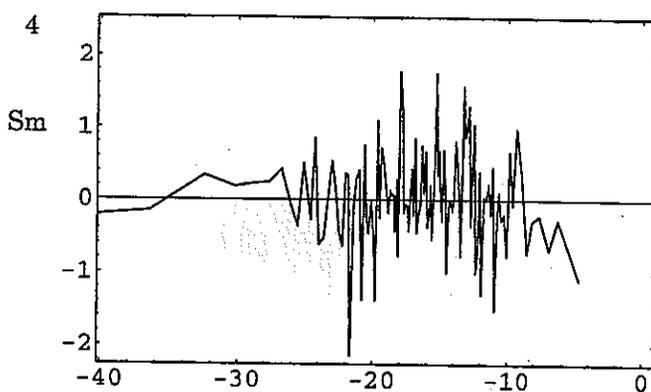
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 3



核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 4



核種放出率(mol/yr)

図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (1) )

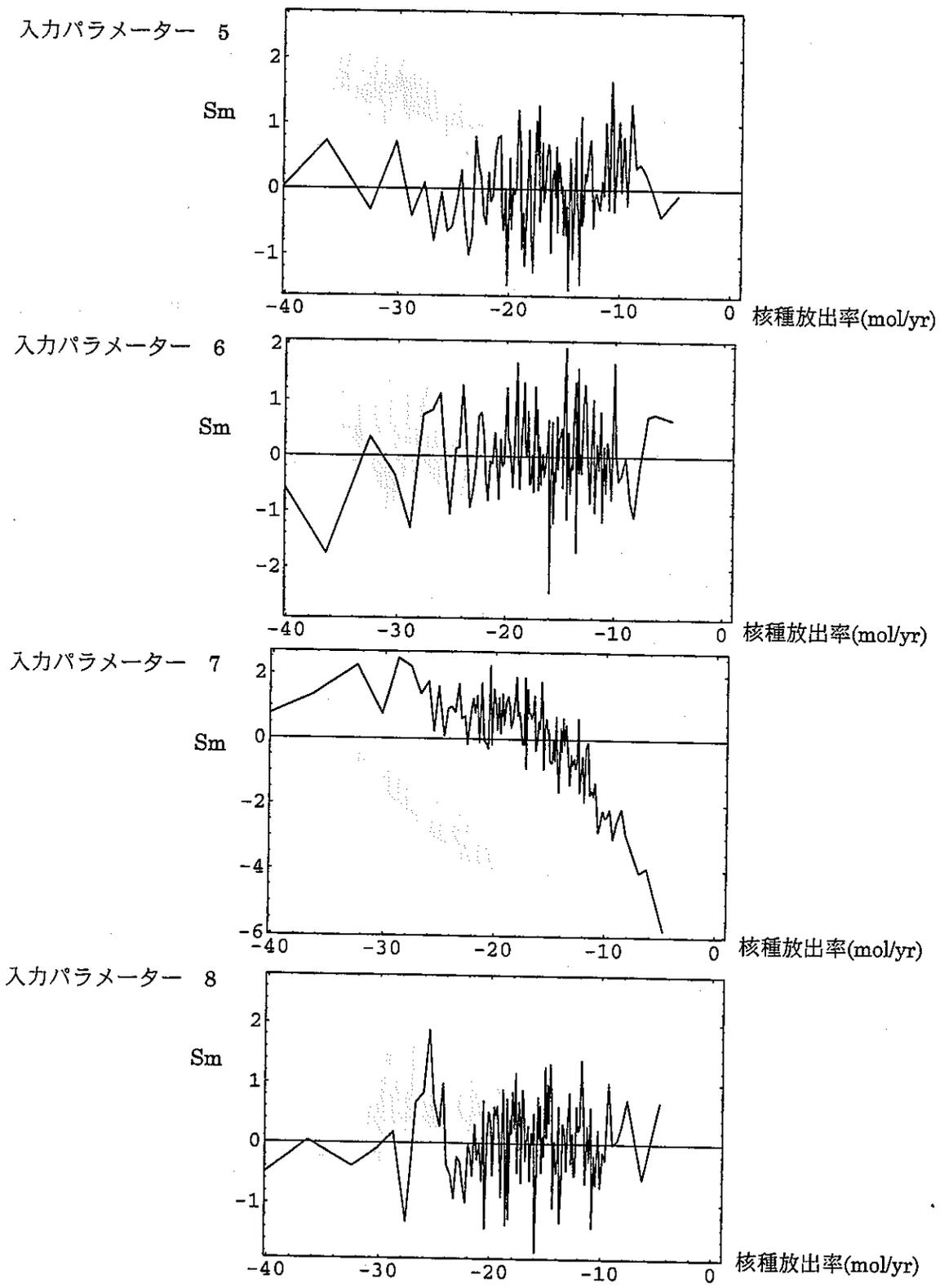


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (2) )

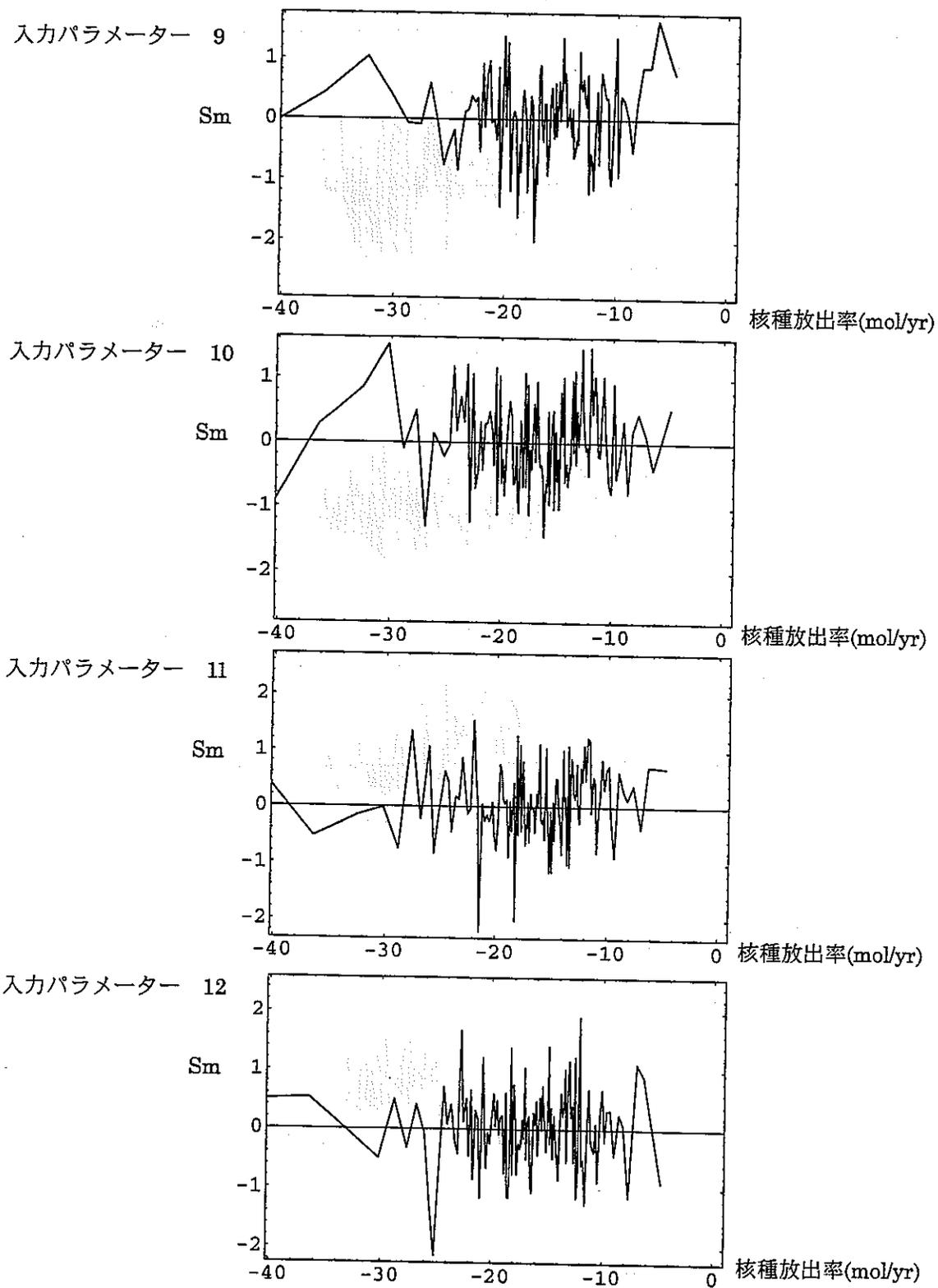


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (3) )

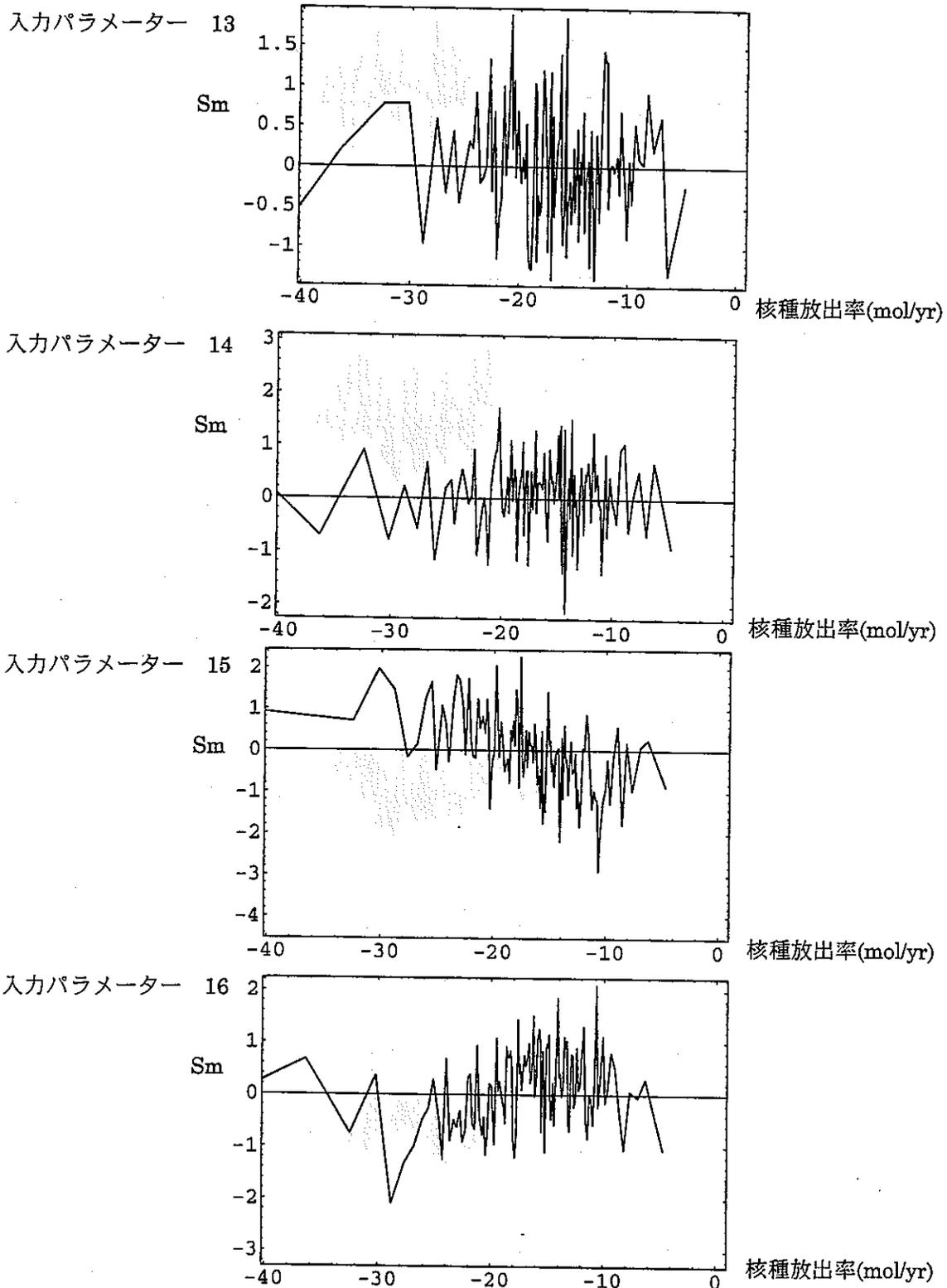


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (4) )

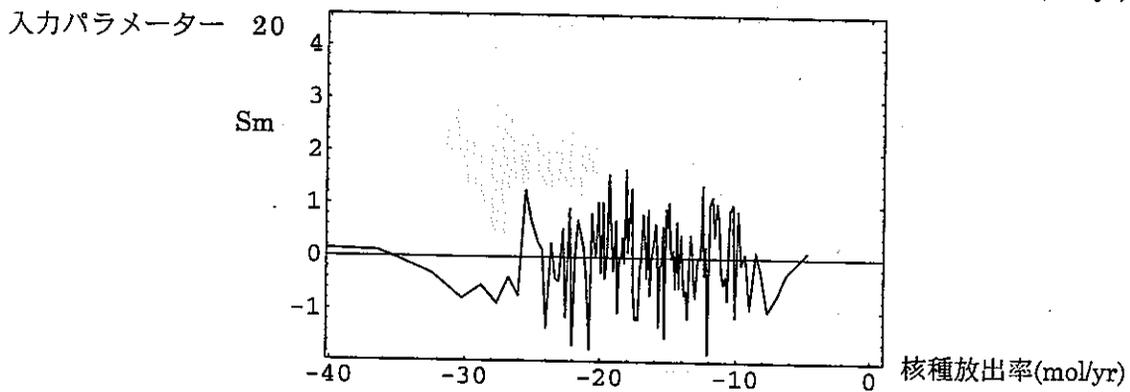
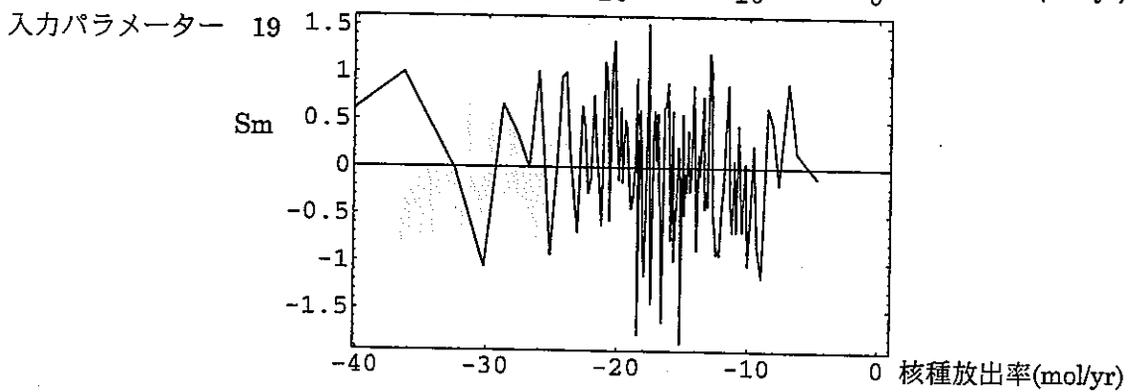
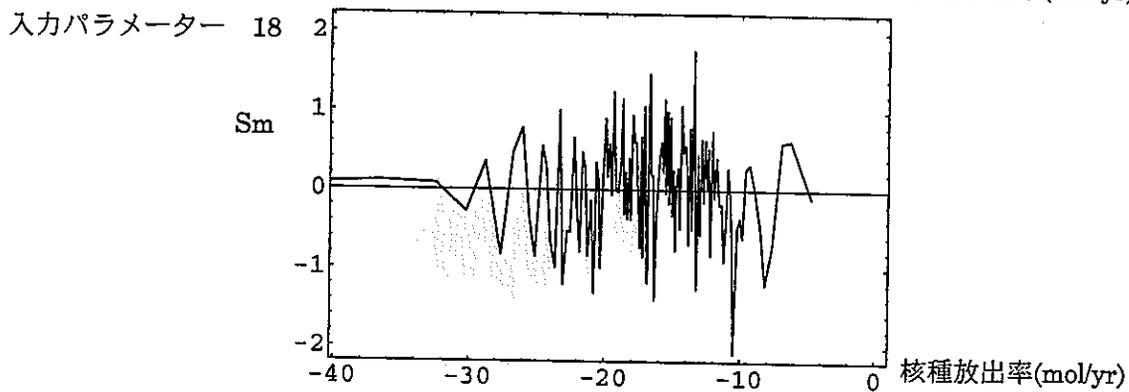
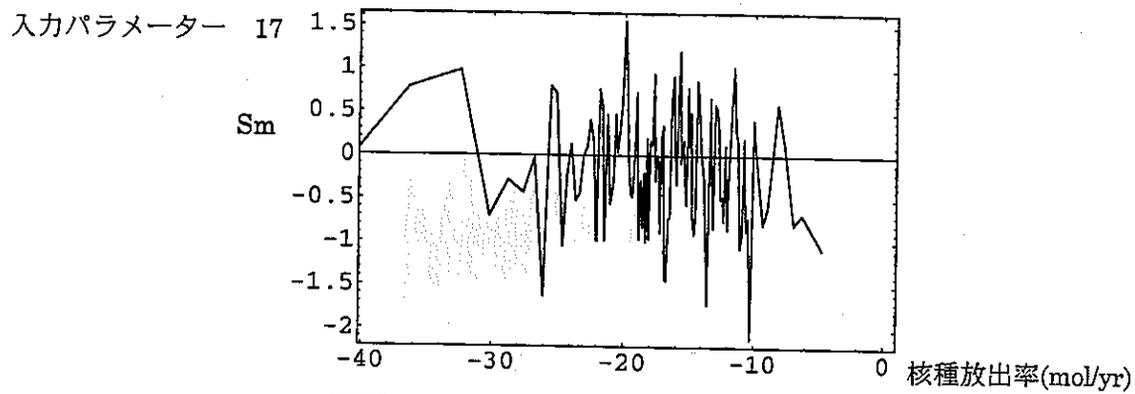


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (5) )

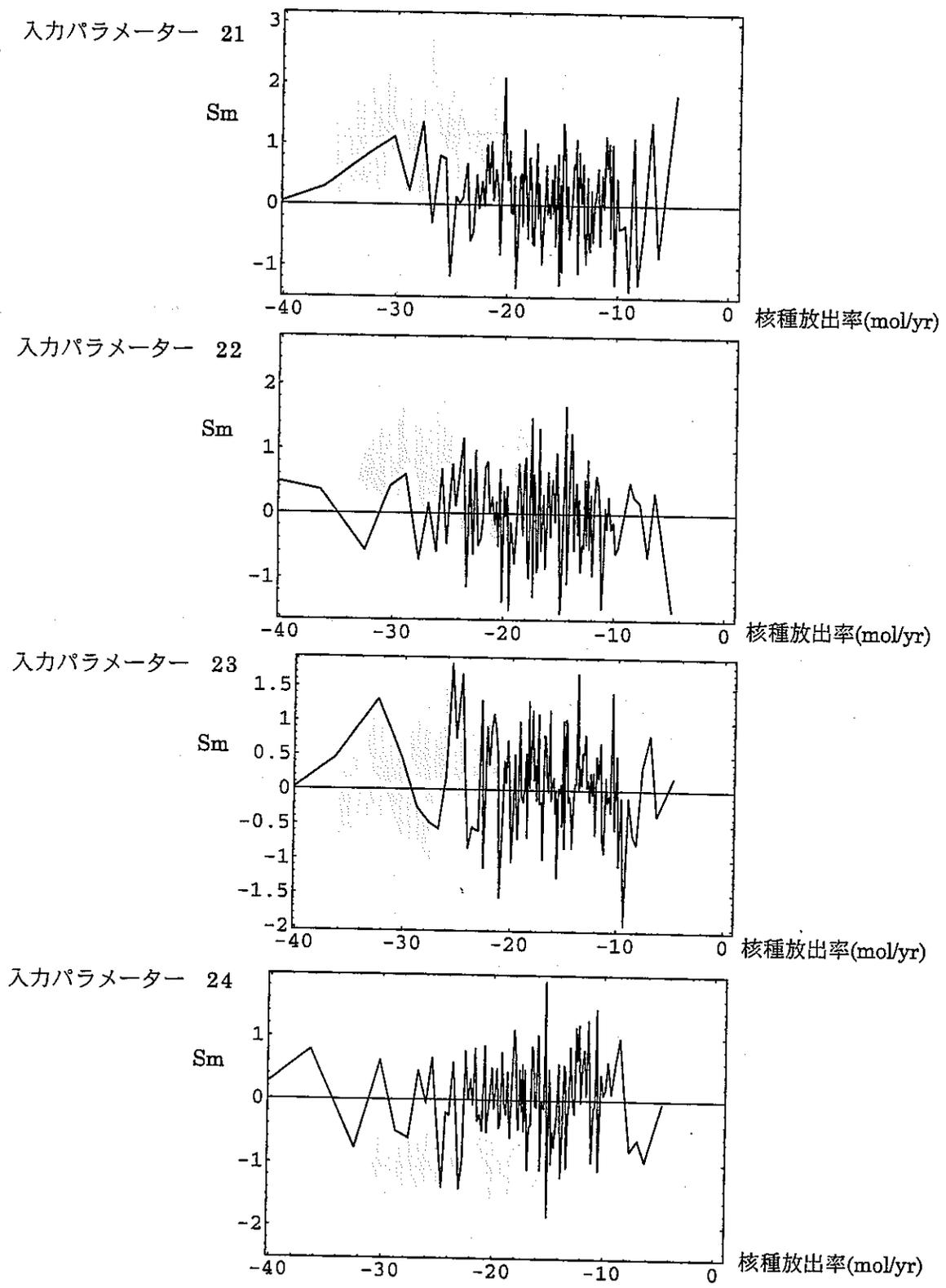


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (6) )

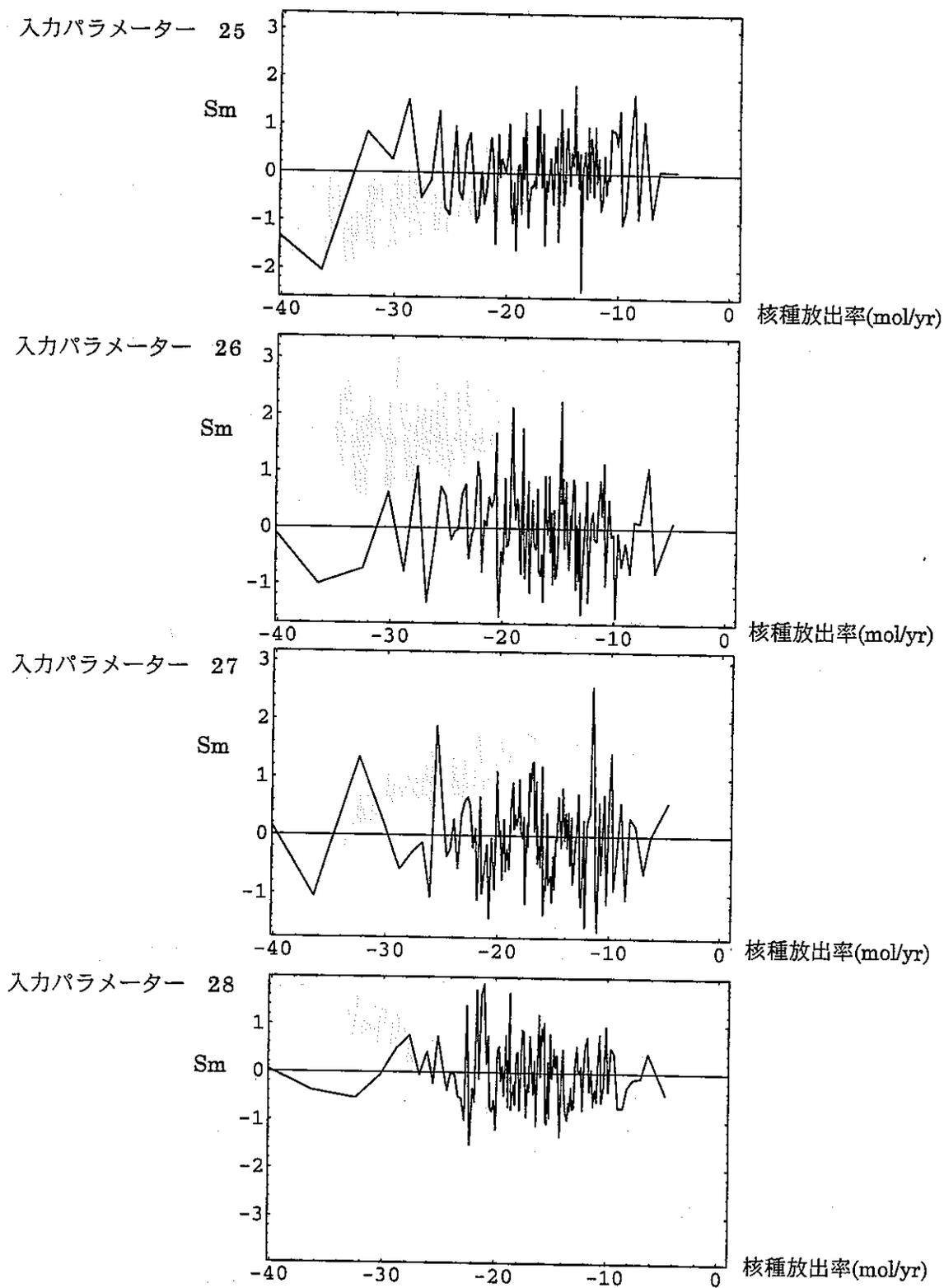


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (7) )

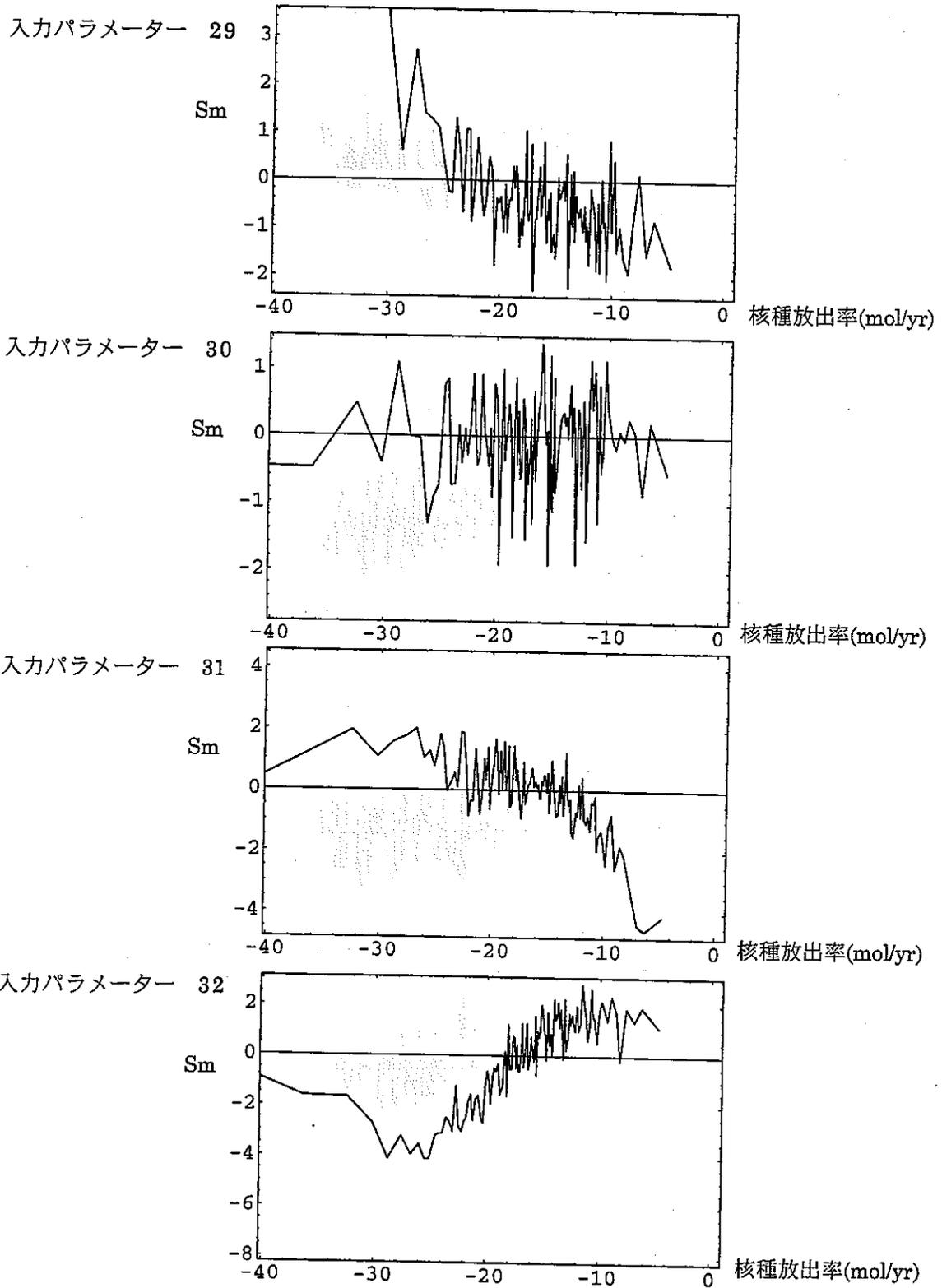


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (8) )

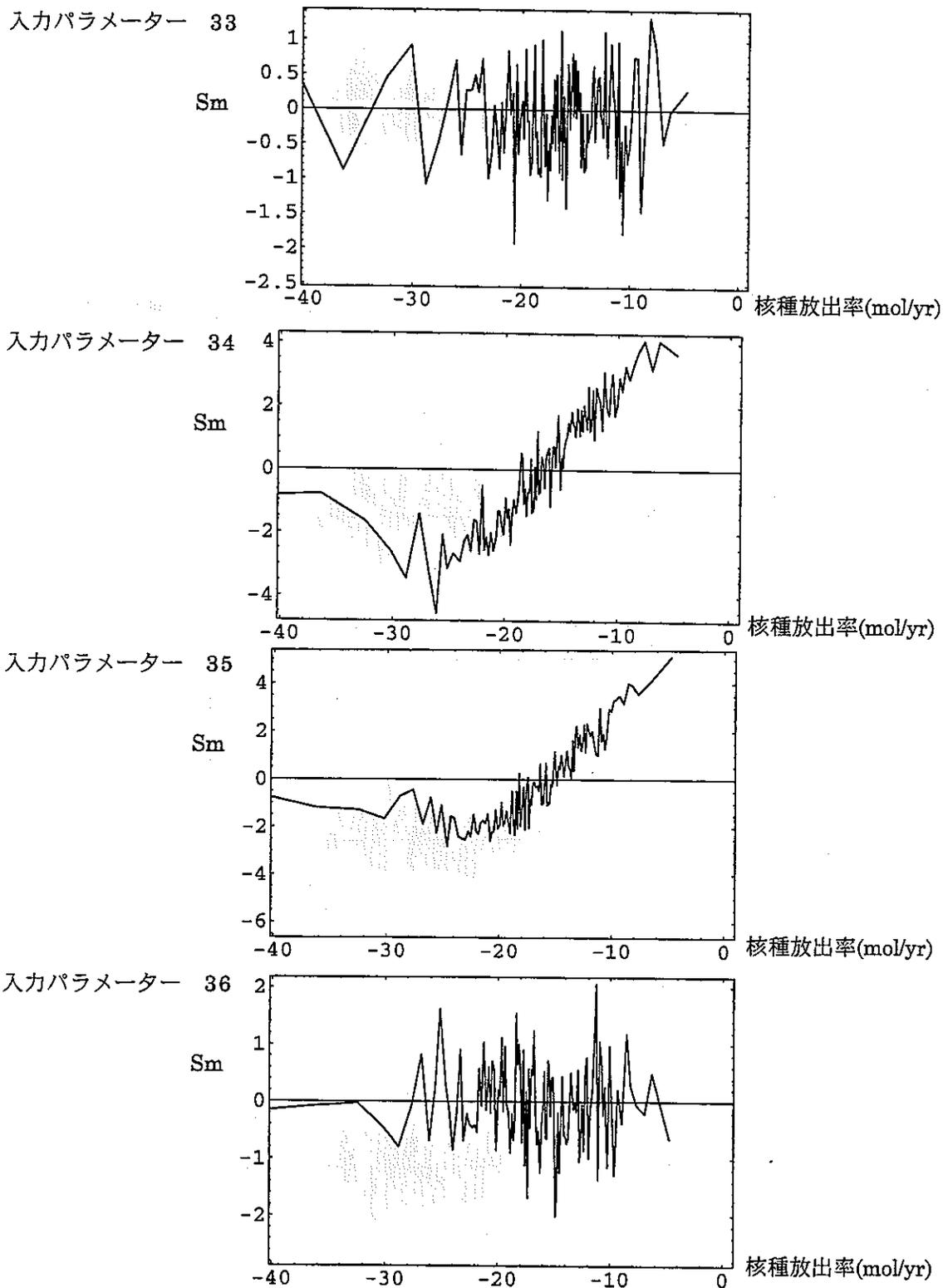


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (9) )

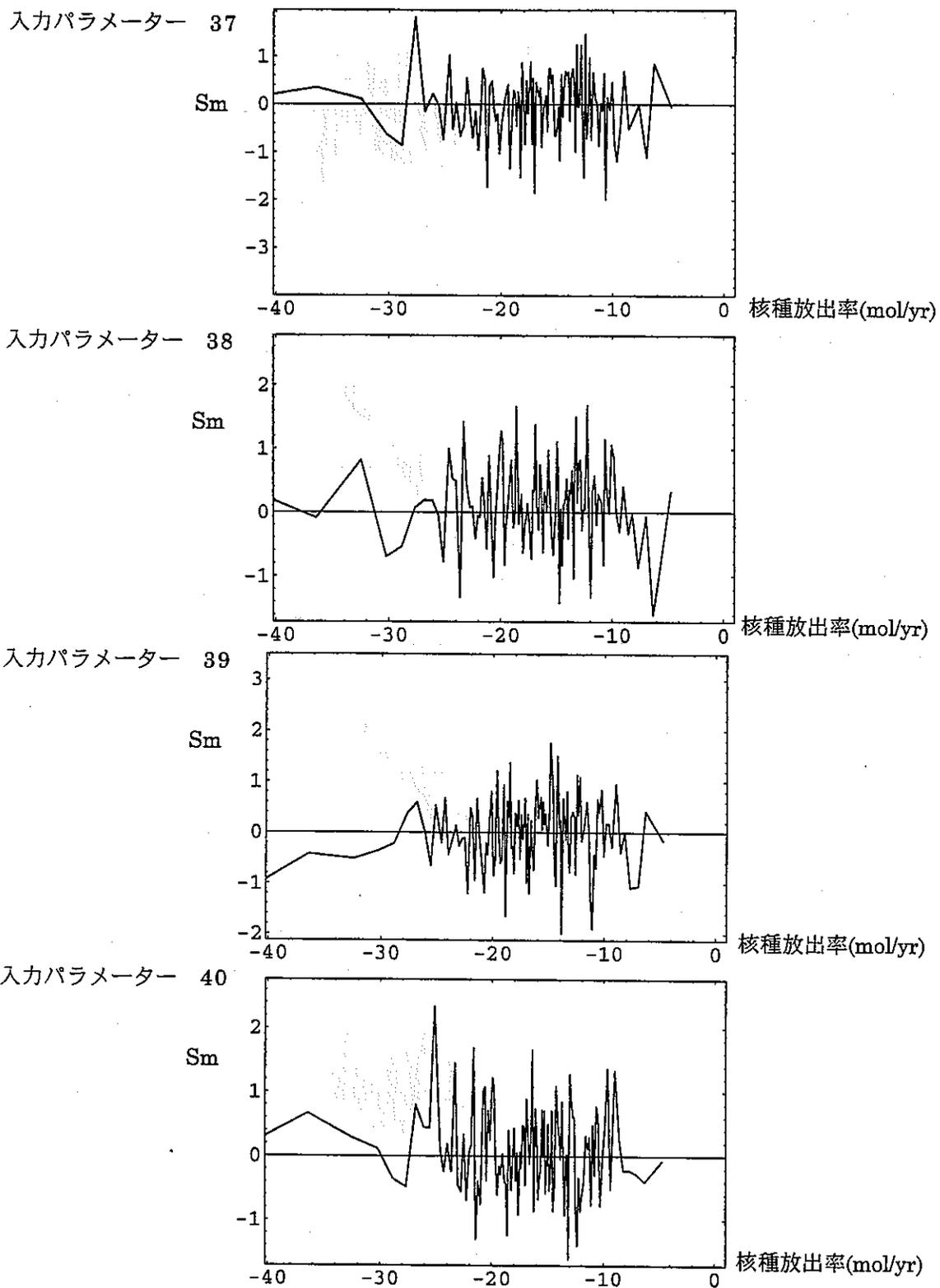


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (1 0) )

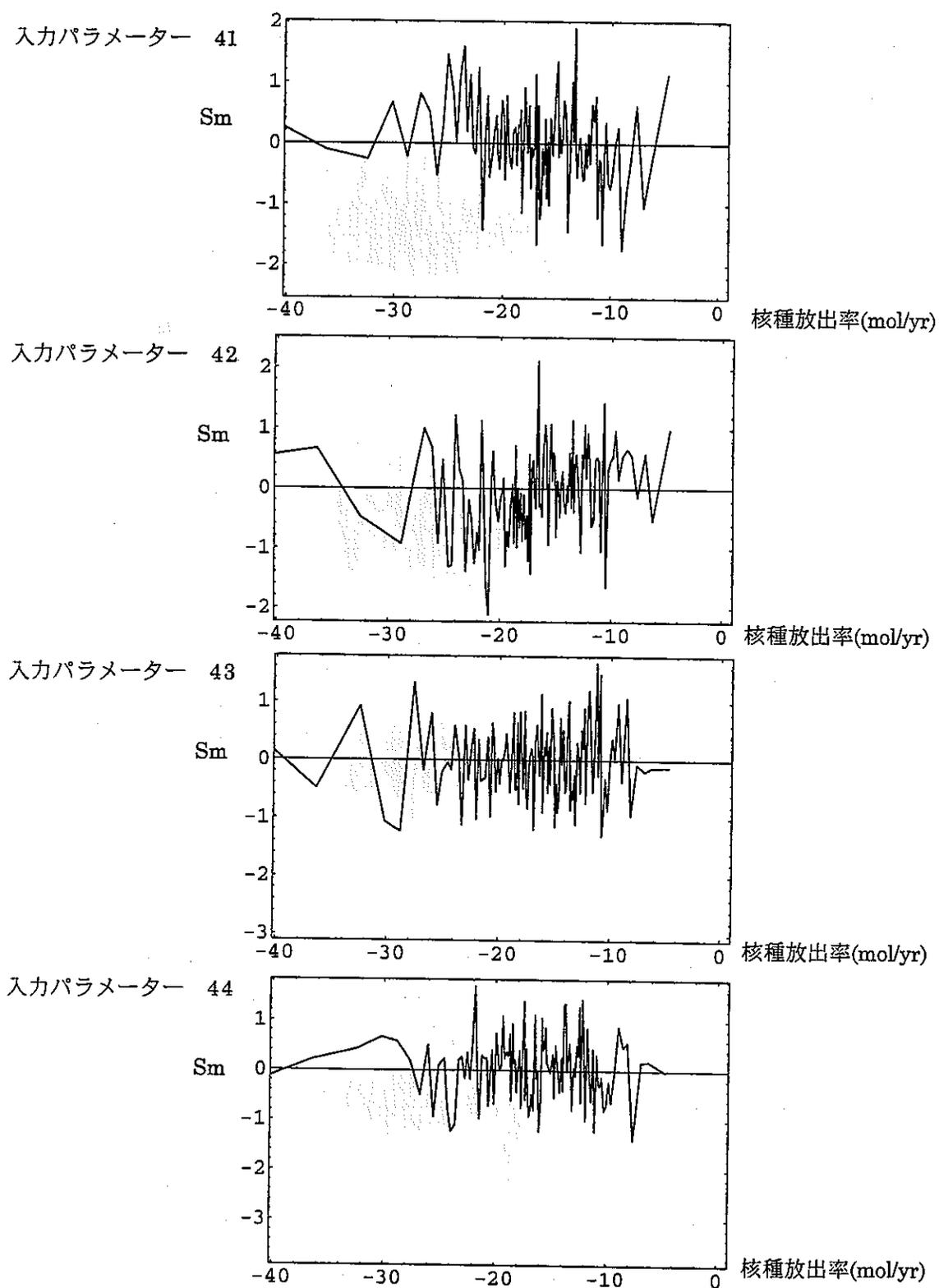


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (1 1))

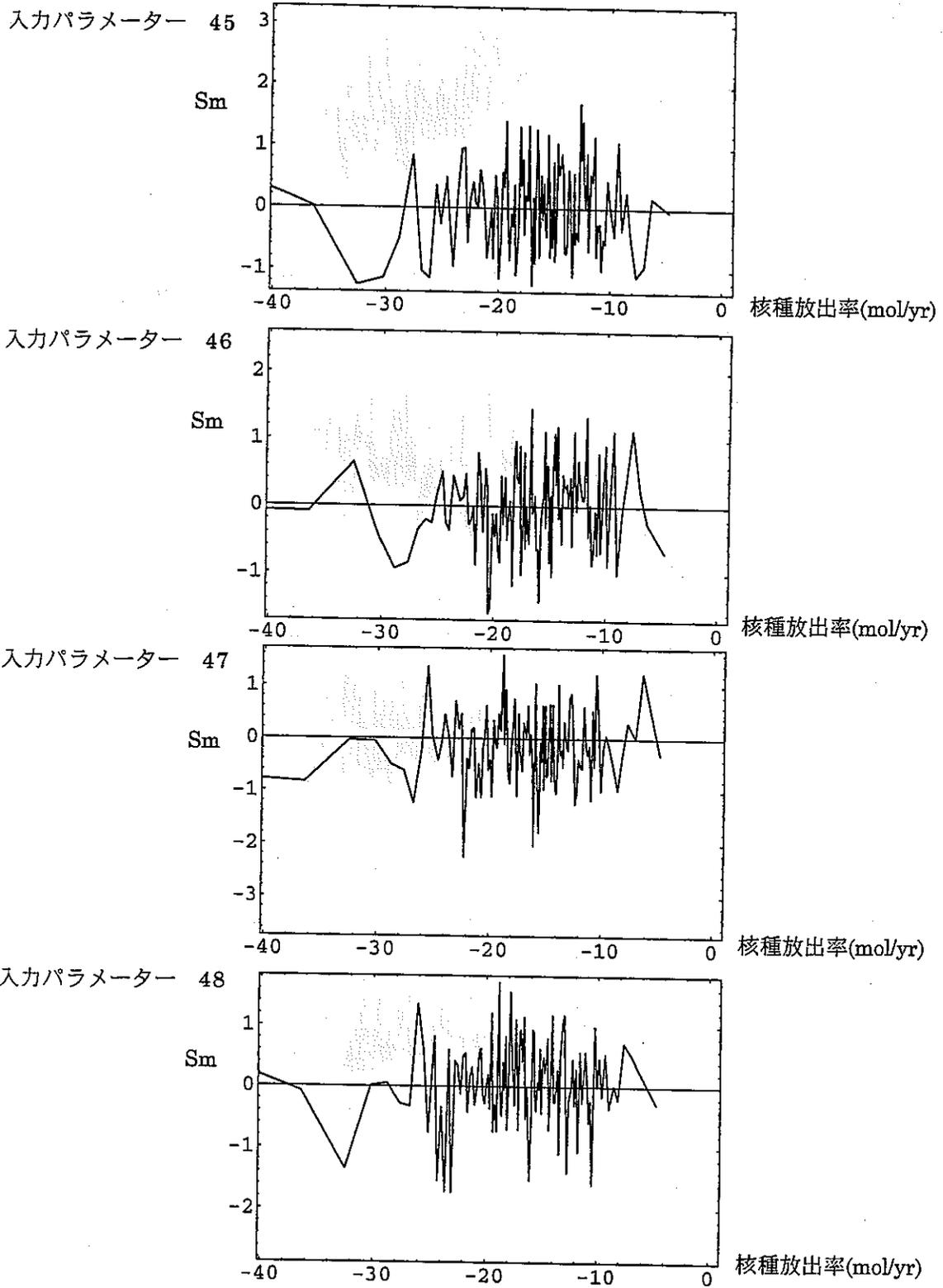


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (1 2))

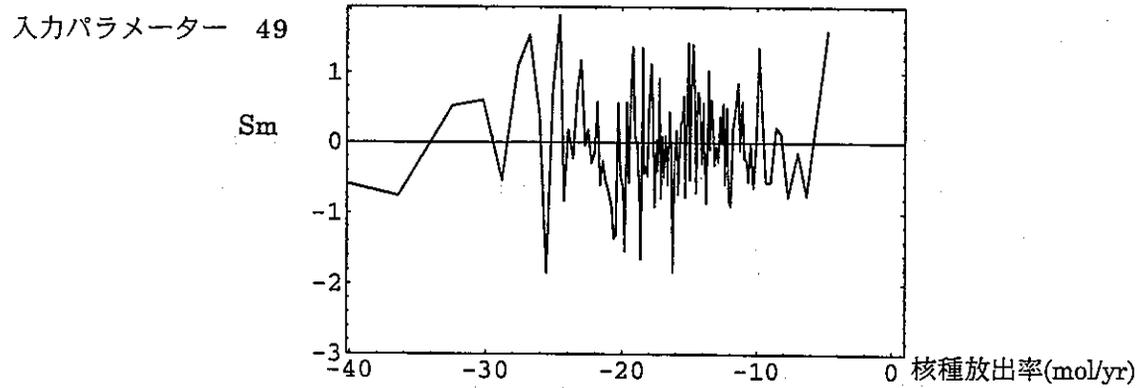


図 4.5.5 全域的サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (1 3) )

### 4.5.3 感度解析

対数スケールにおけるクラスター分析の結果同定された 6 個の主要なクラスター（図 4.5.4 参照）について、まず、主成分分析を行い、出力空間におけるそれぞれのクラスター内の（直交）主成分  $v_i$  を算出した。結果を表 4.5.3 にまとめる。

表 4.5.3 各クラスターにおける出力の主変動成分

	主成分 1 ( $v_1$ )	主成分 2 ( $v_2$ )
クラスター4	(0.99, -0.13)	(0.13, 0.99)
クラスター2	(0.87, -0.49)	(0.49, 0.87)
クラスター10	(0.45, 0.89)	(-0.89, 0.45)
クラスター3	(0.86, -0.50)	(0.86, 0.50)
クラスター7	(-0.25, 0.96)	(0.96, 0.25)
クラスター6	(0.94, 0.33)	(-0.33, 0.94)

次に、昨年度と同様に、 $J^T \cdot v_i$  により各クラスターの主成分毎に各入力パラメータの全体的な感度への寄与を計算した（ただし、 $J$  は当該クラスターについての最良線形回帰モデルに対応する Jacobian 行列）。結果を図 4.5.6 にまとめる。

有意な放出率範囲（例えば  $10^{-20} \text{ mol/yr}$  以上）の諸ケースを含むクラスター 4 及び 2 の主成分 1 及び 2 において支配的な感度を有するパラメータ（表 4.5.4 参照）は、前節のパラメータの特殊性分析によって非零のトレンドを有すると同定されたパラメータとほぼ完全に一致しており、二つの独立な手法によりパラメータの重要性について整合的な知見が得られたこととなる。また、Moving Band 解析では得られなかった知見としては、親核種の低放出率領域に当たるクラスター 7 において不動態化反応速度の感度が顕著に現れているという点が挙げられる。

なお、クラスター 10 は、含まれるサンプル数が 51 に過ぎず、これは入力パラメータ空間の次元（= 49）に比して十分に大きくないために感度解析結果は不安定なものとなっている。

表 4.5.4 各クラスターにおいて支配的な感度を有するパラメータ

		クラスター 4	クラスター 2	クラスター 3	クラスター 7	クラスター 6	Moving Band 法
1	親核種半減期	+	+	+	+	+	+
2	娘核種半減期	+	+	+	+	+	+
3	親核種 インベントリ	+	+	+	+	+	+
4	娘核種 インベントリ	+	+	+			+
7	親核種 遅延係数	+	+		+		+
15	親核種 不動態化速度				+		
19	娘核種 遅延係数	+	+				+
30	オーバーパッ ク腐食期間		+	+	+		
31	ガラス 浸出期間	+	+	+	+		+
32	最小動水勾配		+	+	+	+	
34	ゆるみ域 透水係数	+	+	+	+	+	+
35	母岩 透水係数	+	+	+			+

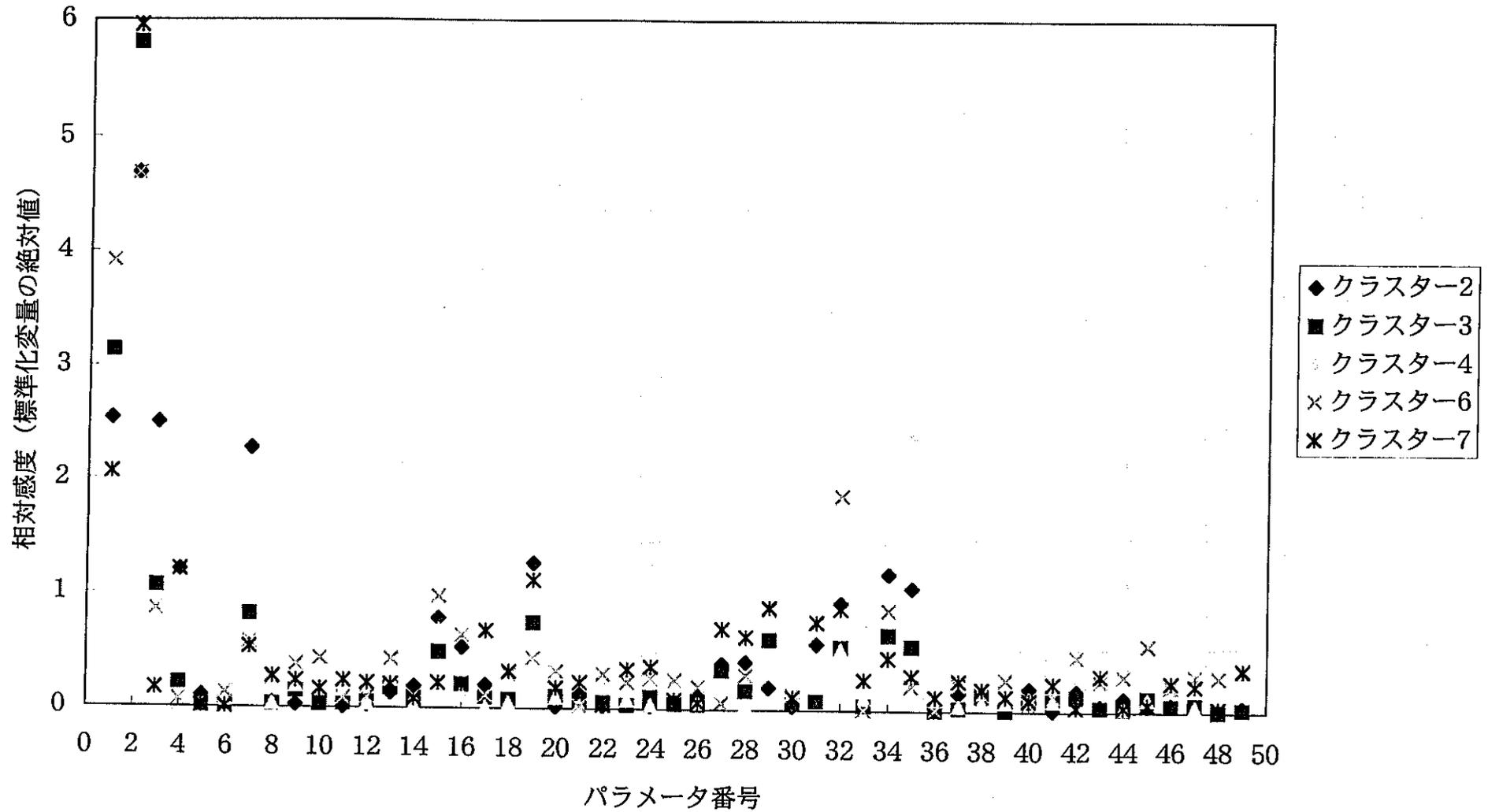


図4.5.6 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(第一次サンプリング：主成分1)

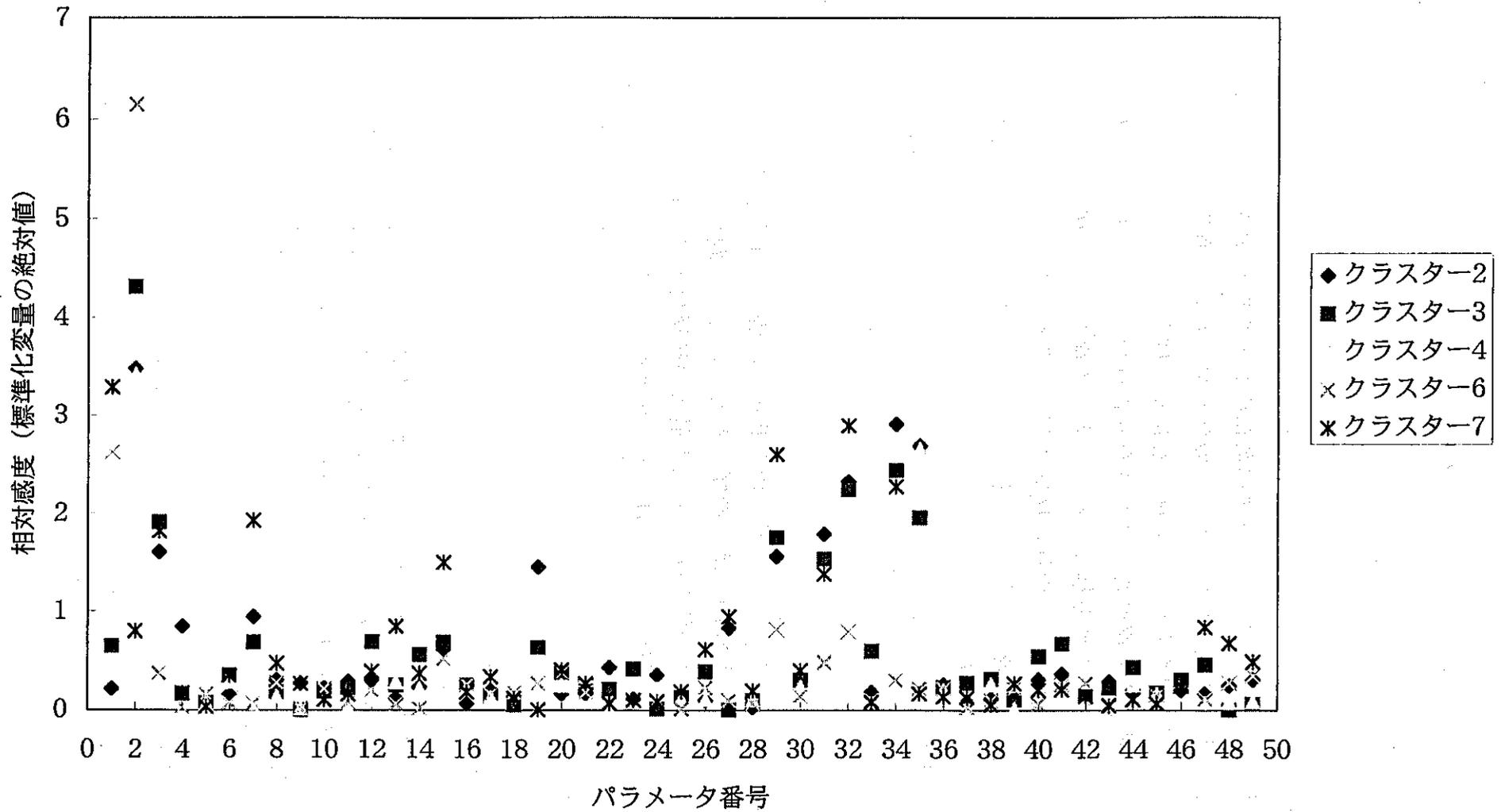


図4.5.6 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(第一次サブリング : 主成分2)

## 4.6 第二次局部サンプリングによる統計的解析

### 4.6.1 局部サンプリングの目的と範囲

昨年度の研究成果と同様、本年度の全域的サンプリングによる統計的解析結果に対する感度解析では、他のパラメータの数値の如何を問わず感度の大きい様なパラメータから順次抽出していくという傾向が見られる。換言すれば、全域的なサンプリングの結果からはまず自明とも言える様なパラメータについての感度が抽出され、他のより微妙な（つまり自分以外のパラメータの入力値に応じて感度の大きさが左右される様な）そして多くの場合はより興味深いパラメータの感度は上記のパラメータの強い傾向の背後に隠れてしまっている。この様な状況においてより「高次の」知見を得るためには、第二次のサンプリングに於いて既に感度の明確化されている入力パラメータを「ある代表点」の値で固定し、未だ感度構造が明らかとはなっていない他の入力パラメータのみについてサンプリングを行うという局部的なサンプリングを行うことが有効と考えられる。

また、上記の「代表点」としては、何らかの意味で評価上の重要性の高いものを採るべきである。より具体的には「影響」が大きいという観点から重要性を有する全域的サンプリングの約 6000 ケース中最大の核種放出率を記録したケース、及び「確からしさ」が高いという観点から重要性を有するリファレンスケースを二つの代表点として選び、それぞれの近傍でより詳細な解析を実施することが適当であると考えられる。

### 4.6.2 第二次サンプリングの解析条件

第二次サンプリングとして、表 4.5.2 に示した 9 個のパラメータ値をそれぞれ第一次サンプリングにおける最高放出率ケース及びリファレンスケースに対応した数値に固定し、他の 40 個のパラメータ値を全域的に変動させた解析を実施した。解析条件を表 4.6.1~4.6.3 に、また、統計的サンプリングの対象とした入力パラメータの一覧表を表 4.6.4 に示す。

なお、解析対象核種としては、Np-237 → Th-229 の崩壊ペアを第一優先順位として選定した。また、リファレンスケース近傍の解析ではこれらに加えて、Am-243 → Pu-239 についても解析を行うこととした。従って、上記の 9 個のパ

ラメータのうち、親及び娘核種の半減期と初期インベントリとはこのことによ  
って自動的に定まることとなる。

なお、解析ケース数としては、前出の収束性についての検討結果を踏まえて  
それぞれ 2000 ケース以上を実施するものとした。

表 4.6.1 全域的サンプリングにおける最高放出率ケースに対応した  
パラメータ固定値

	規格化された入力値	実際の値
親核種半減期	0.833	2.14 E6 年
娘核種半減期	0.552	7.34 E3 年
親核種初期インベントリ	0.857	3.72 mols
娘核種初期インベントリ	-1.21	2.40 E-6 mols
親核種遅延係数	0.0998	3.15
娘核種遅延係数	0.0179	1.23
ガラス浸出期間	0.0958	3.76 年
ゆるみ域透水係数	0.804	6.98 E-6 m/sec
母岩透水係数	0.638	2.92 E-9 m/sec

表 4.6.2 リファレンスケースに対応したパラメータ固定値  
(Np-237 -> Th-229)

	規格化された入力値	実際の値
親核種半減期	0.833	2.14 E6 年
娘核種半減期	0.552	7.34 E3 年
親核種初期インベントリ	0.857	3.72 mols
娘核種初期インベントリ	-1.21	2.40 E-6 mols
親核種遅延係数	0.683	2.59 E3
娘核種遅延係数	0.683	2.59 E3
ガラス浸出期間	0.686	1.3 E4 年
ゆるみ域透水係数	0.705	5.81 E-7 m/sec
母岩透水係数	0.823	5.81 E-8 m/sec

表 4.6.3 リファレンスケースに対応したパラメータ固定値

(Am-243 -> Pu-239)

	規格化された入力値	実際の値
親核種半減期	0.217	7.38 E3 年
娘核種半減期	0.626	2.41 E4 年
親核種初期インベントリ	0.534	4.01 E-1 mols
娘核種初期インベントリ	0.412	1.72 E-1 mols
親核種遅延係数	0.883	2.59 E4
娘核種遅延係数	0.883	2.59 E4
ガラス浸出期間	0.686	1.3 E4 年
ゆるみ域透水係数	0.705	5.81 E-7 m/sec
母岩透水係数	0.823	5.81 E-8 m/sec

表 4.6.4 第二次サンプリングのための統計的入力パラメーター一覧表 (1)

入力パラメータ番号	内容
1	親核種第二区間勾配 (拡散)
2	親核種第二区間勾配 (移流)
3	親核種の低濃度領域での遅延係数 (移流)
4	親核種の第一節点濃度 (拡散)
5	親核種の第二節点濃度 (拡散)
6	親核種の第一節点濃度 (移流)
7	親核種の第二節点濃度 (移流)
8	親核種の第三節点濃度 (移流)
9	地球化学異常での節点のシフト (親核種)
10	親核種の不動態化反応速度
11	親核種の安定相溶解速度
12	娘核種第二区間勾配 (拡散)
13	娘核種第二区間勾配 (移流)
14	娘核種の低濃度領域での遅延係数 (移流)
15	娘核種の第一節点濃度 (拡散)
16	娘核種の第二節点濃度 (拡散)
17	娘核種の第一節点濃度 (移流)
18	娘核種の第二節点濃度 (移流)
19	娘核種の第三節点濃度 (移流)
20	地球化学異常での節点のシフト (娘核種)
21	娘核種の不動態化反応速度
22	娘核種の安定相溶解速度

表 4.6.4 第二次サンプリングのための統計的入力パラメーター一覧表 (2)

入力パラメーター番号	内容
23	オーバーパック腐食継続期間
24	オーバーパック腐食開始時期
25	動水勾配最小値
26	人工バリア内ギャップ透水係数
27	人工バリア内空隙率
28	移流領域の人工バリア内進入距離
29	最大進入時期
30	ギャップ存在期間
31	動水勾配最大値
32	強い流れの開始時期
33	強い流れの継続期間
34	バイパス流の割合
35	外側地球化学異常開始時期
36	外側地球化学異常継続期間
37	外側地球化学異常進入距離
38	内側地球化学異常開始時期
39	内側地球化学異常継続期間
40	内側地球化学異常進入距離

#### 4.6.3 最大放出率ケース近傍の第二次（局部）サンプリングの解析結果

全域的サンプリングにおける最大放出率ケース近傍の局部サンプリングによる統計的解析結果（3800 ケース）を図 4.6.1 のスキッタープロットに示す。ここでは、親及び娘の放出率が共に高い右上の領域から左下の領域にかけて y 字型の構造が明瞭に見られる。このうち、右上から左下に至る y 字の長い辺は、ほぼ完全に親核種である Np-237 と娘の Th-229 との間の放射平衡に対応している。また、y 字のうちの短い辺は、Th-232 の初期インベントリがガラス固化体浸出率律速で放出されている状況に対応している（Np-237 の崩壊による Th-229 の年間生成量が Th-229 の初期インベントリとほぼ等しいために、初期インベントリに fractional release rate を乗じたものよりも若干高めの数値が得られ

ていることに注意)。

図 4.6.2 は、全域的解析の場合と同じ方法で算出した対数スケールでのクラスタ分析の結果を、クラスタ分割数と平均二乗残差 MSE の関係として整理したものである。クラスタ数 12 及び 25 の位置で MSE が顕著に低下していることがわかる。図 4.6.3 は、全クラスタ数 25 の場合の有意な (ケース数が 50 以上の) 10 個のクラスタをまとめたものである。前出の y 字構造の二つの片がそれぞれ異なるクラスタとして認識されていることが明瞭である (クラスタ数 12 の分割では、この様な特徴は得られていない)。

全域的な解析と同様の方法で行った Moving Band 解析の結果を図 4.6.4 にまとめる。非零のトレンドを有する入力パラメータは表 4.6.5 に示す通りである。

表 4.6.5 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ  
(最大放出率ケース近傍第二次サンプリング)

	パラメータ	傾向
23	オーバーパック腐食時間	正 (娘核種放出率について)
25	動水勾配最小値	正 (親及び娘核種放出率について)
32	強い流れの開始時期	逆 (親及び娘核種放出率について)
33	強い流れの継続期間	正 (親及び娘核種放出率について)

このうち、オーバーパック腐食時間及び動水勾配最小値は、全域的解析においても一部のバンドにおいて特殊性が認められており、第二次サンプリングにおいては他の主要パラメータを固定したことによりその感度が顕在化したものと考えられる。

表 4.6.5 に挙げた入力パラメータの特徴は、これらがいずれも物理的な意味での核種の保持あるいは移行制限に関連していることである。この事は、既に述べた様に、感度分析によって他のパラメータ値に依存せず顕著な感度を有するものから順にその重要性が指摘されるという傾向に符合するものである。注意すべき点は、このことが他のパラメータ特に核種の移行形態に関するパラメータ群が重要ではないということの意味するものではないということである。上記の結果から言えることは、むしろ、これらのパラメータの感度がもしあるとすればそれは相互に依存しあつたより複雑な構造を示しているということである。

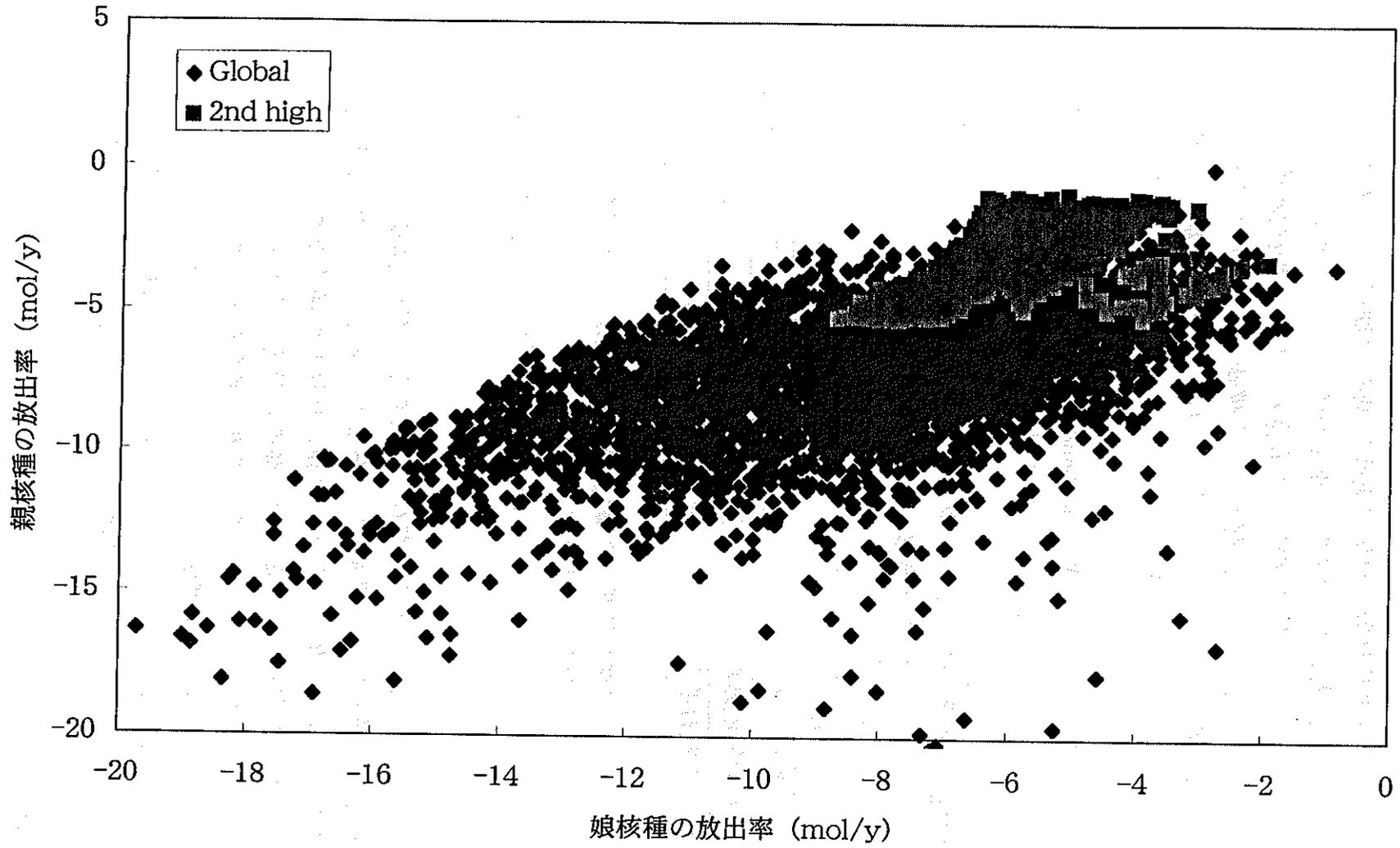


図4.6.1 (I) 最大放出率ケースの第2次サンプリングによる統計的解析結果 (3800ケース)

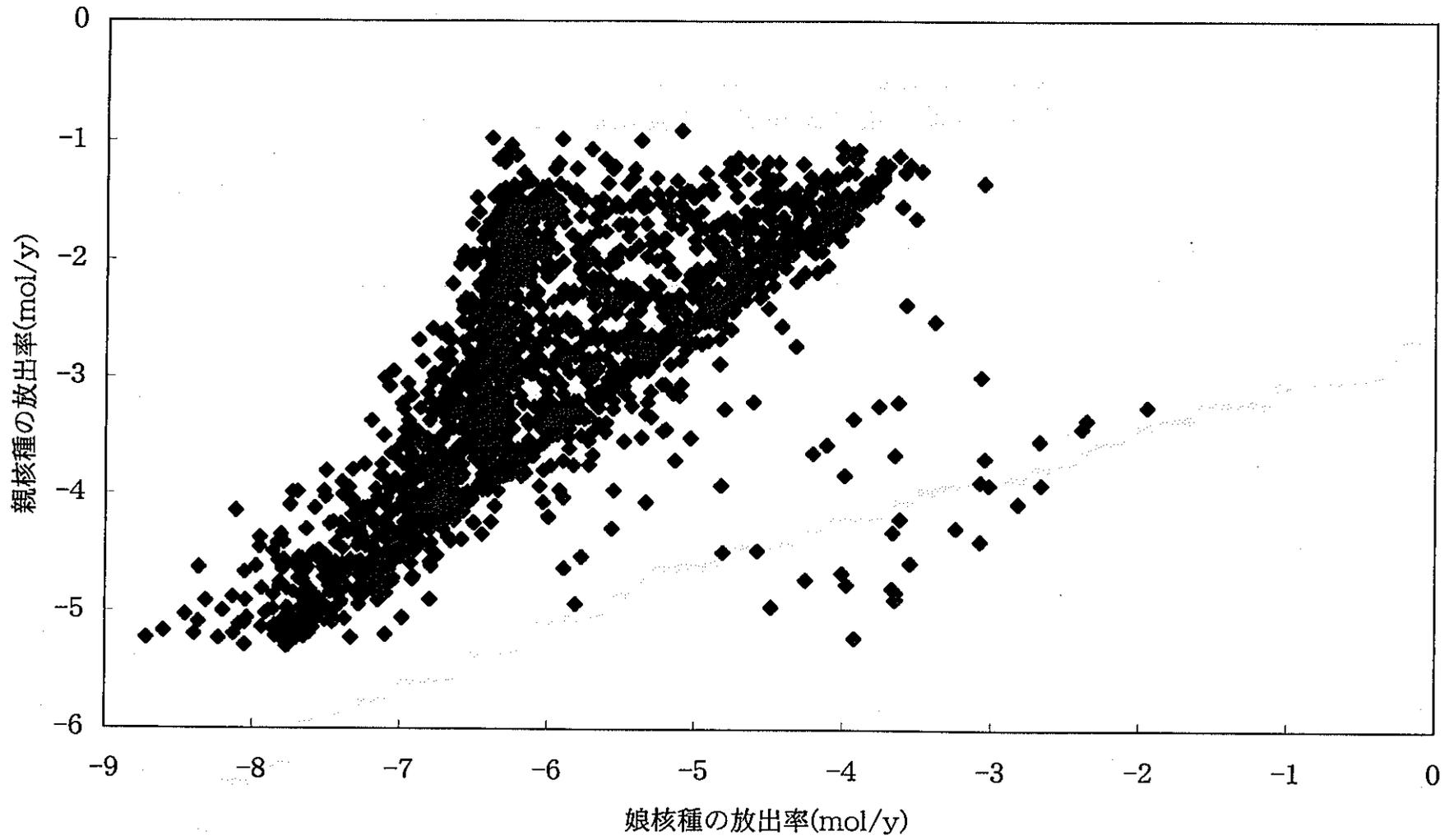


図4.6.1 (2) 最大放出率ケース近傍の第二次サブリングによる統計的解析結果 (3800ケース)

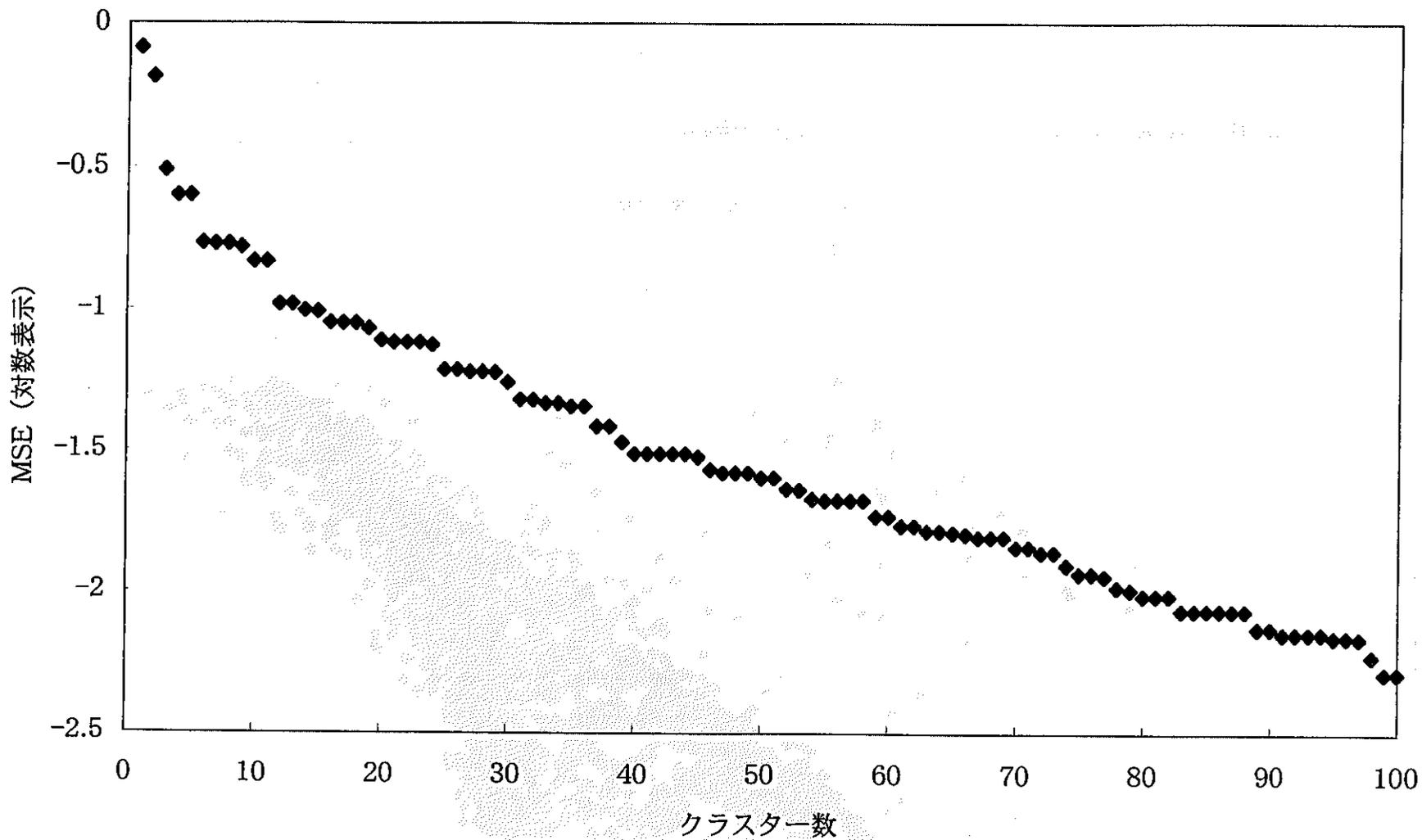


図4.6.2 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング についての  
クラスター数と平均二乗残差の関係

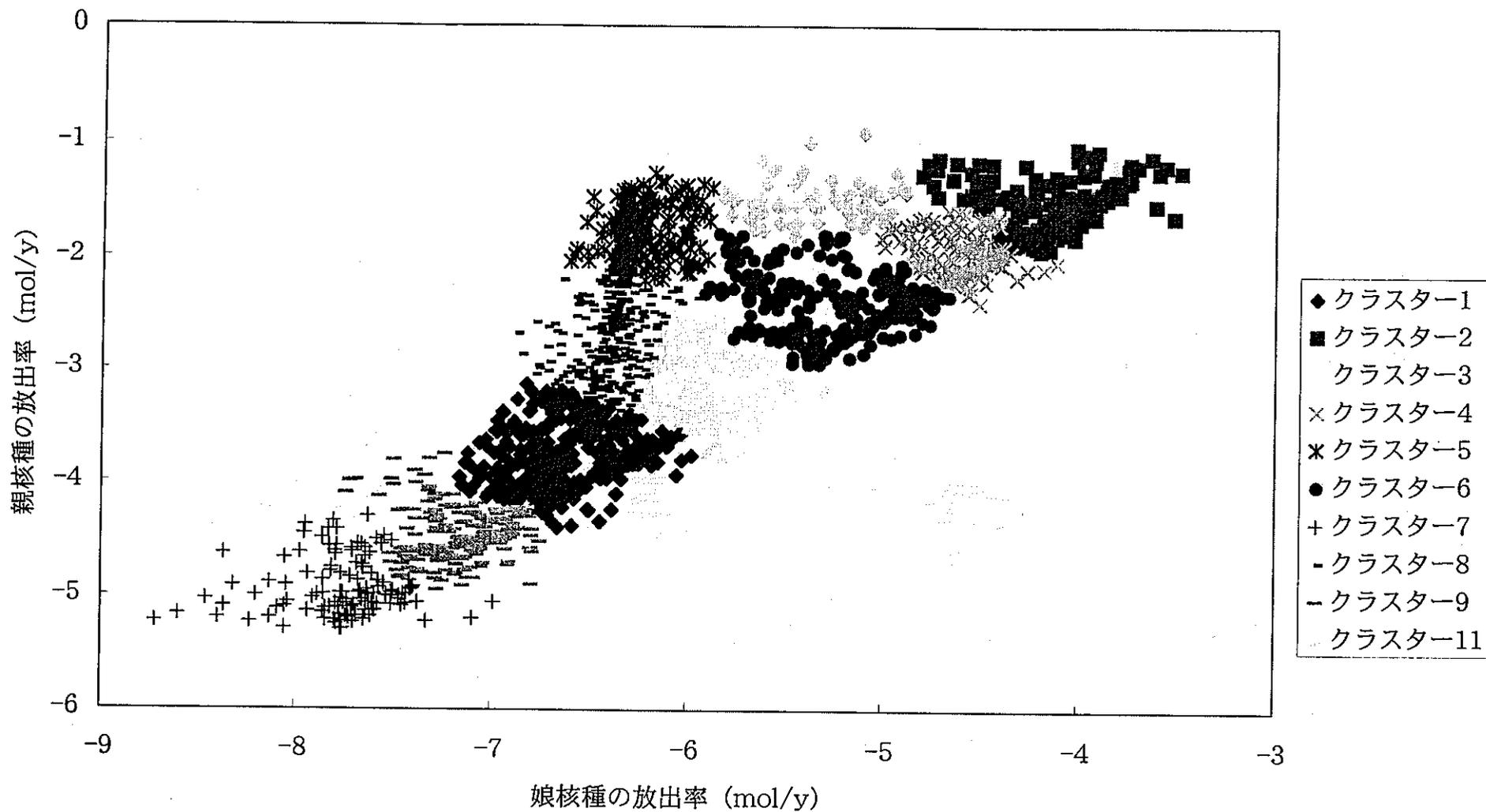


図4.6.3 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング についてのクラスタ分析結果

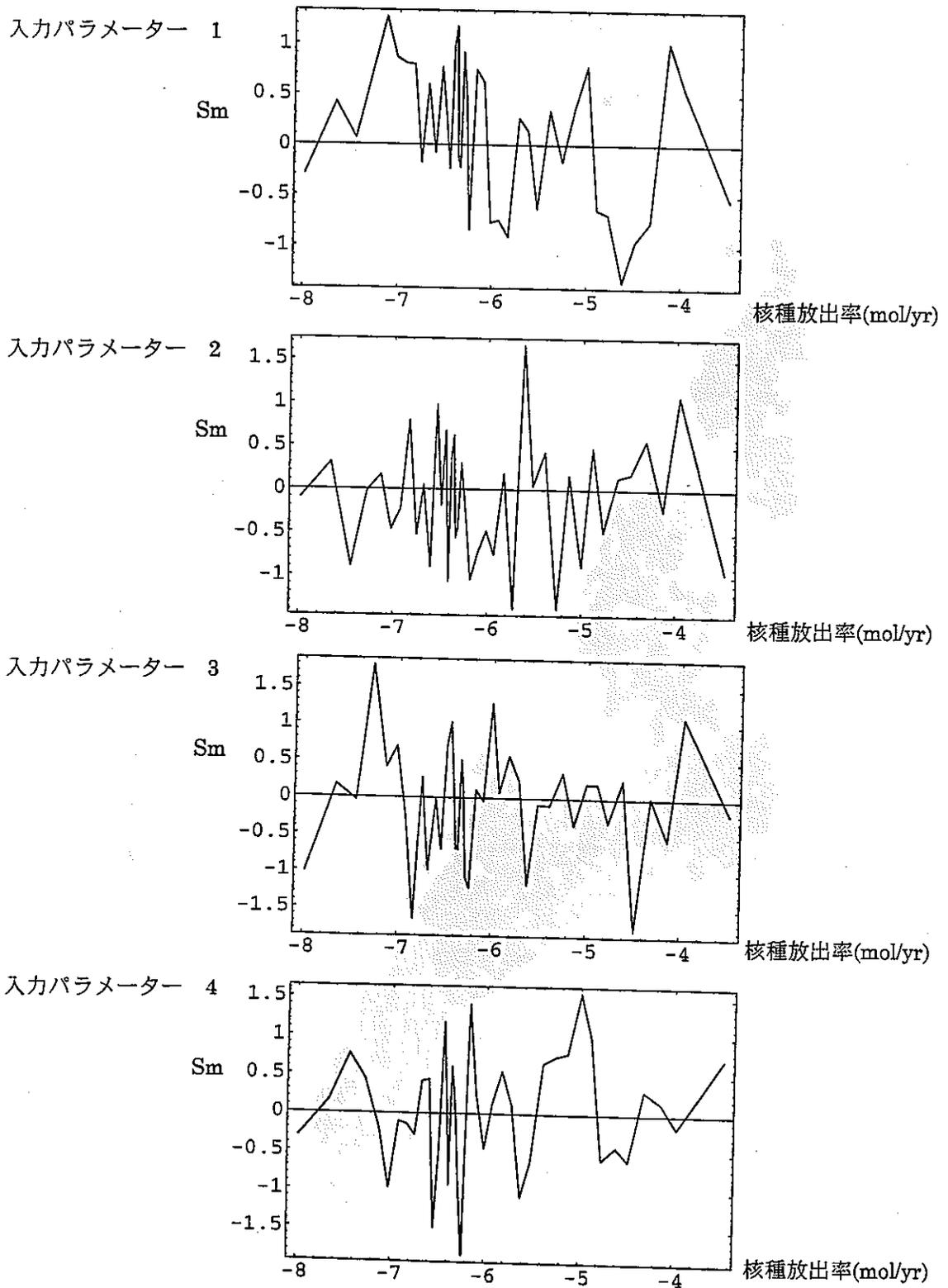


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (1) )

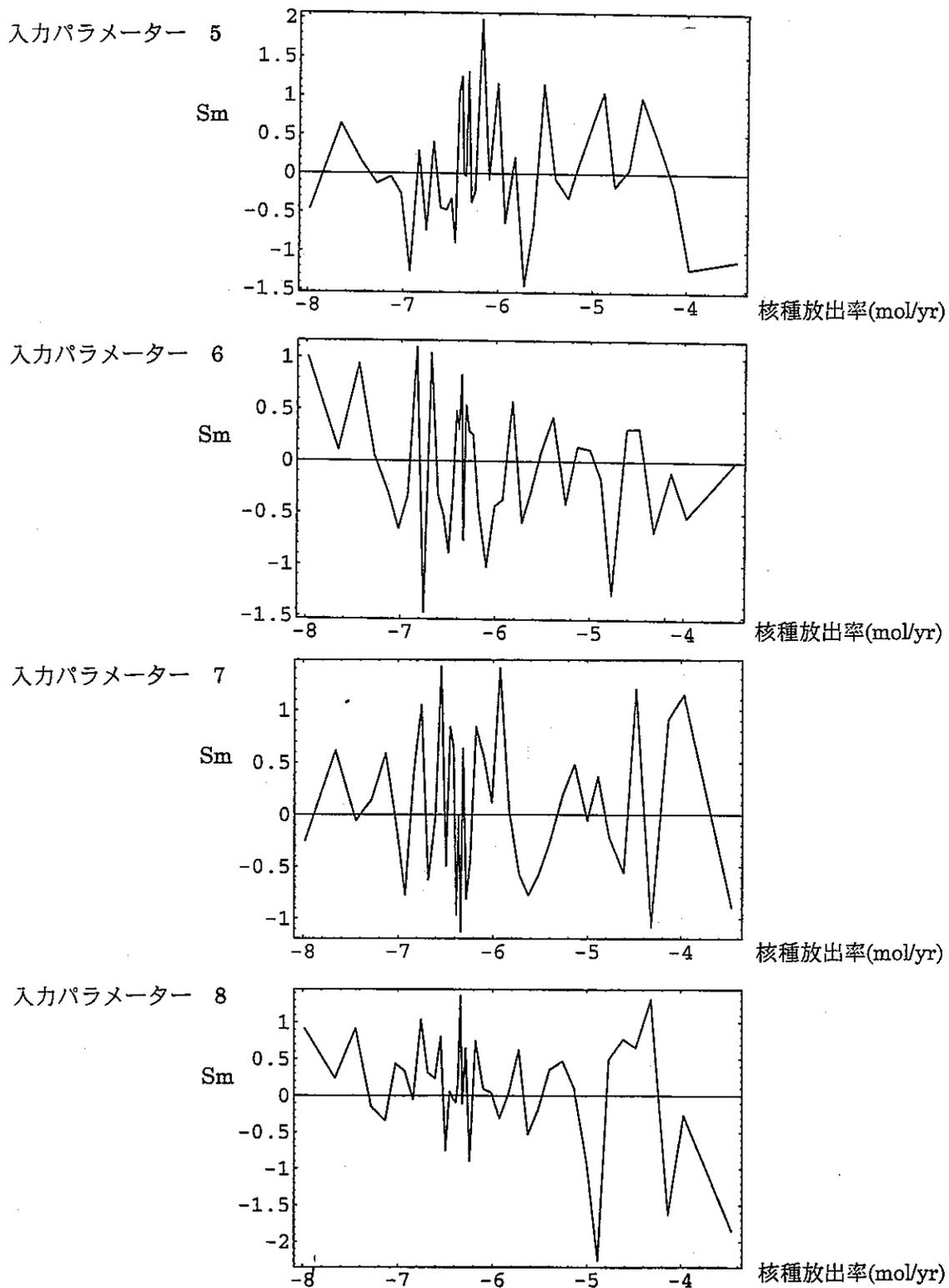


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (2) )

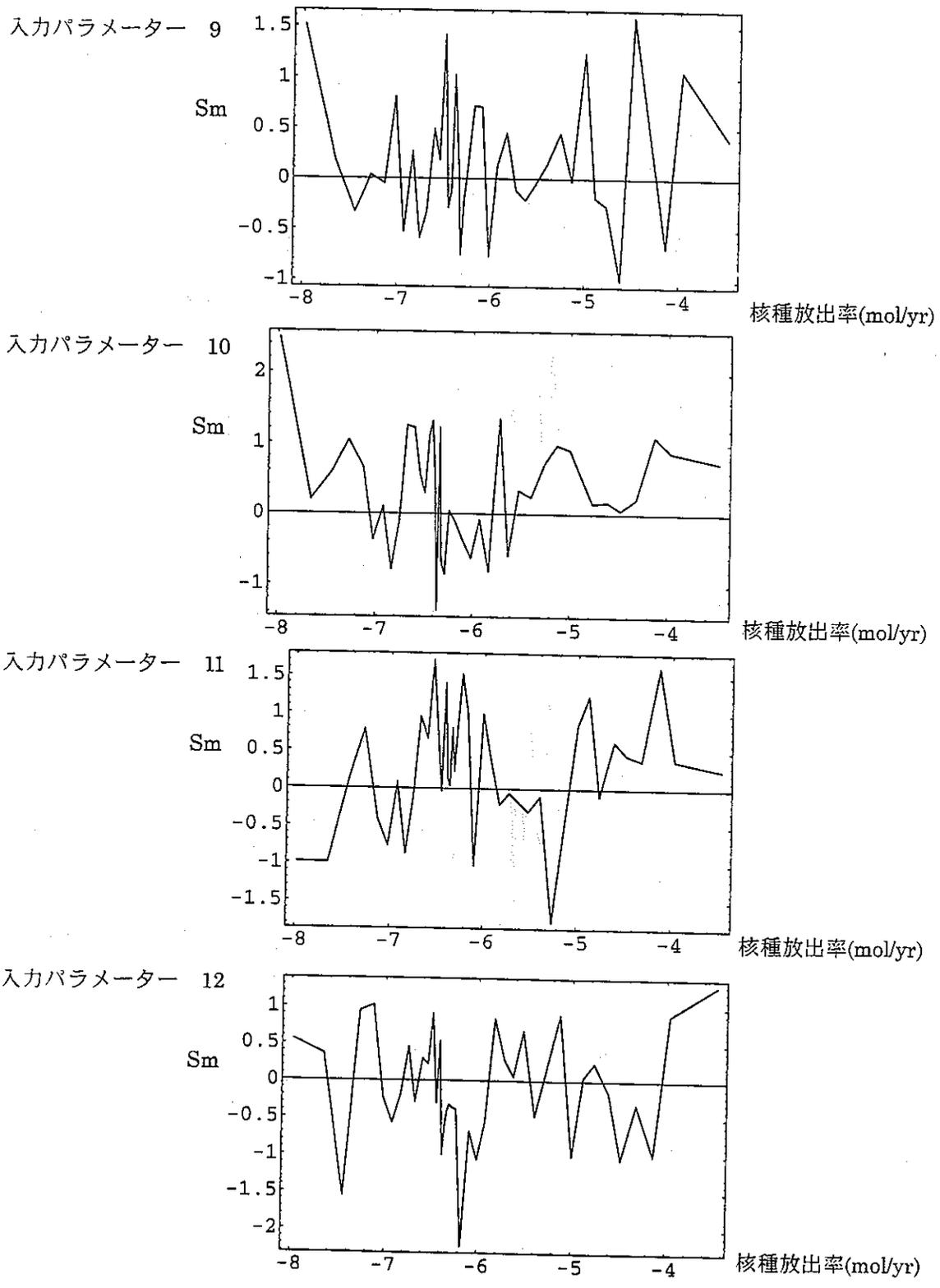


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (3) )

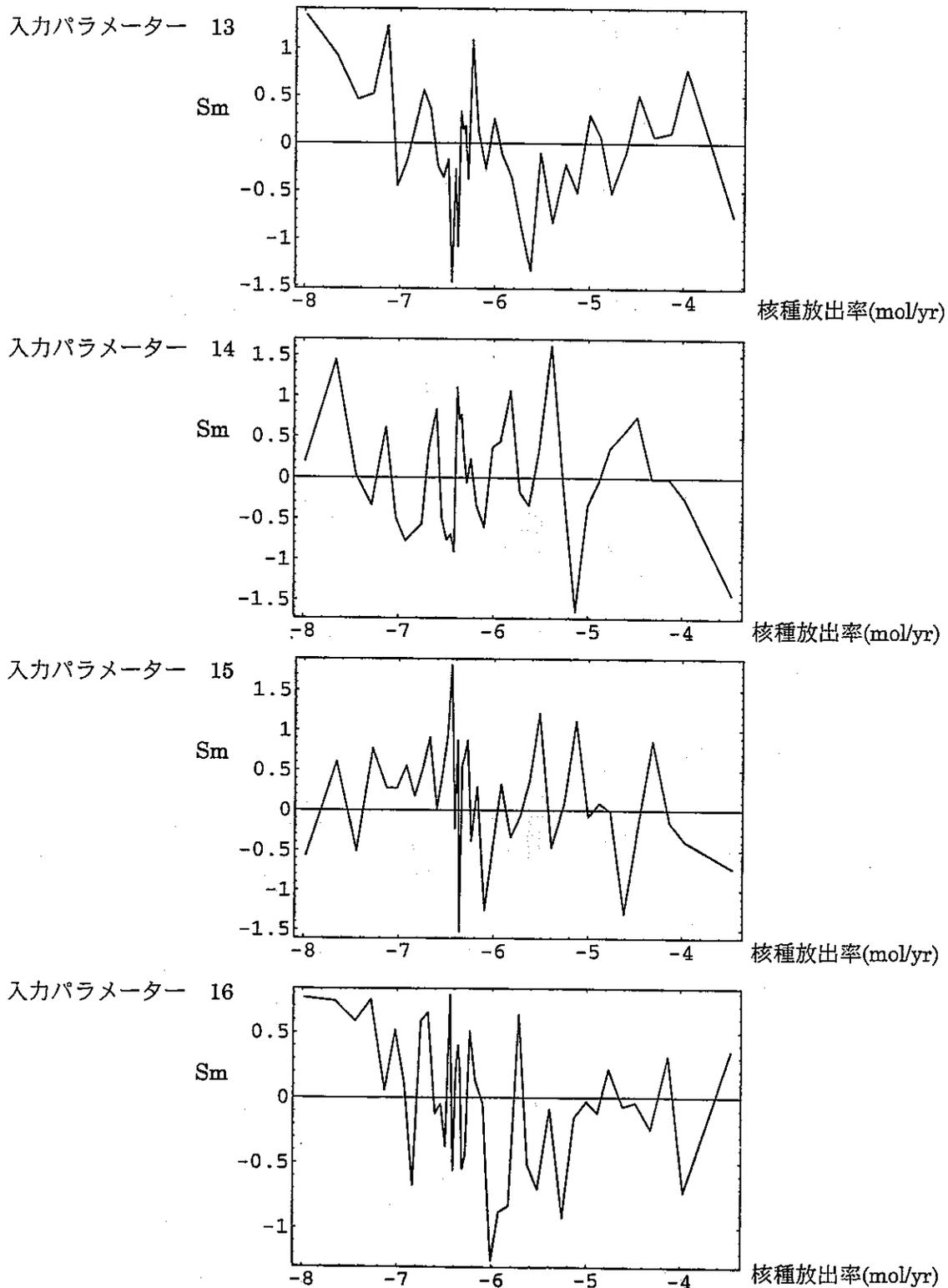


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 親核種 (4)

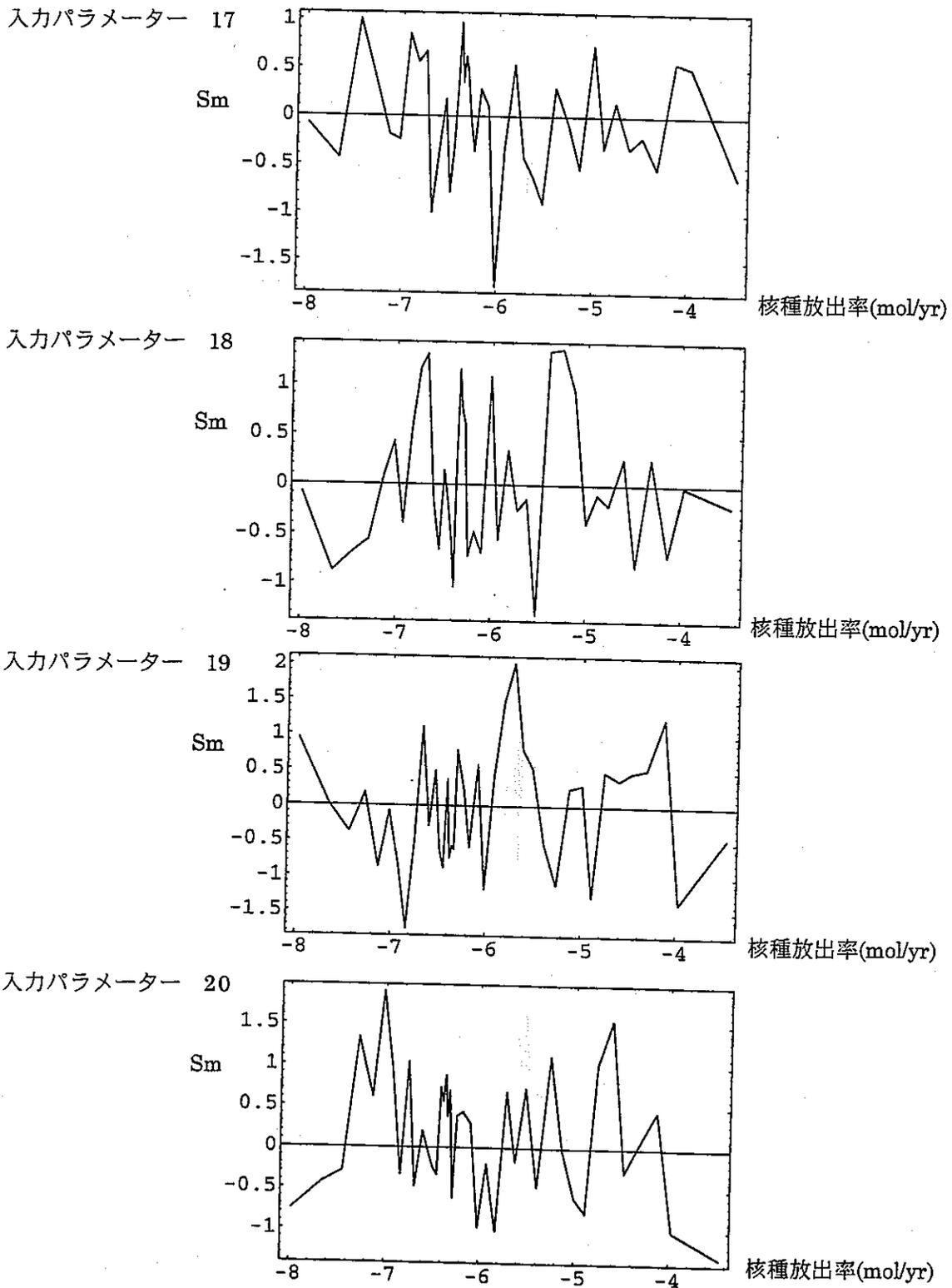


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (5) )

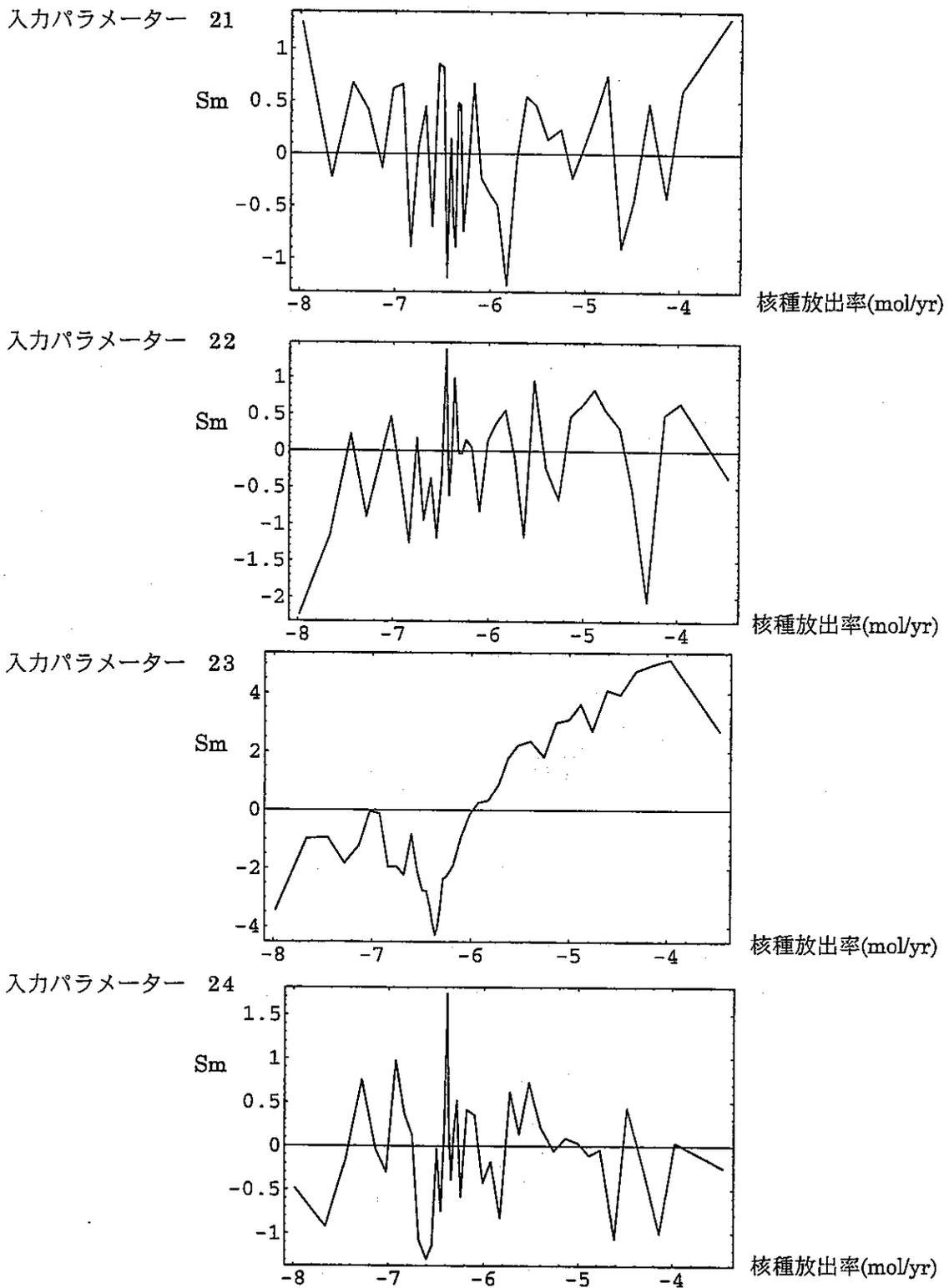


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (6) )

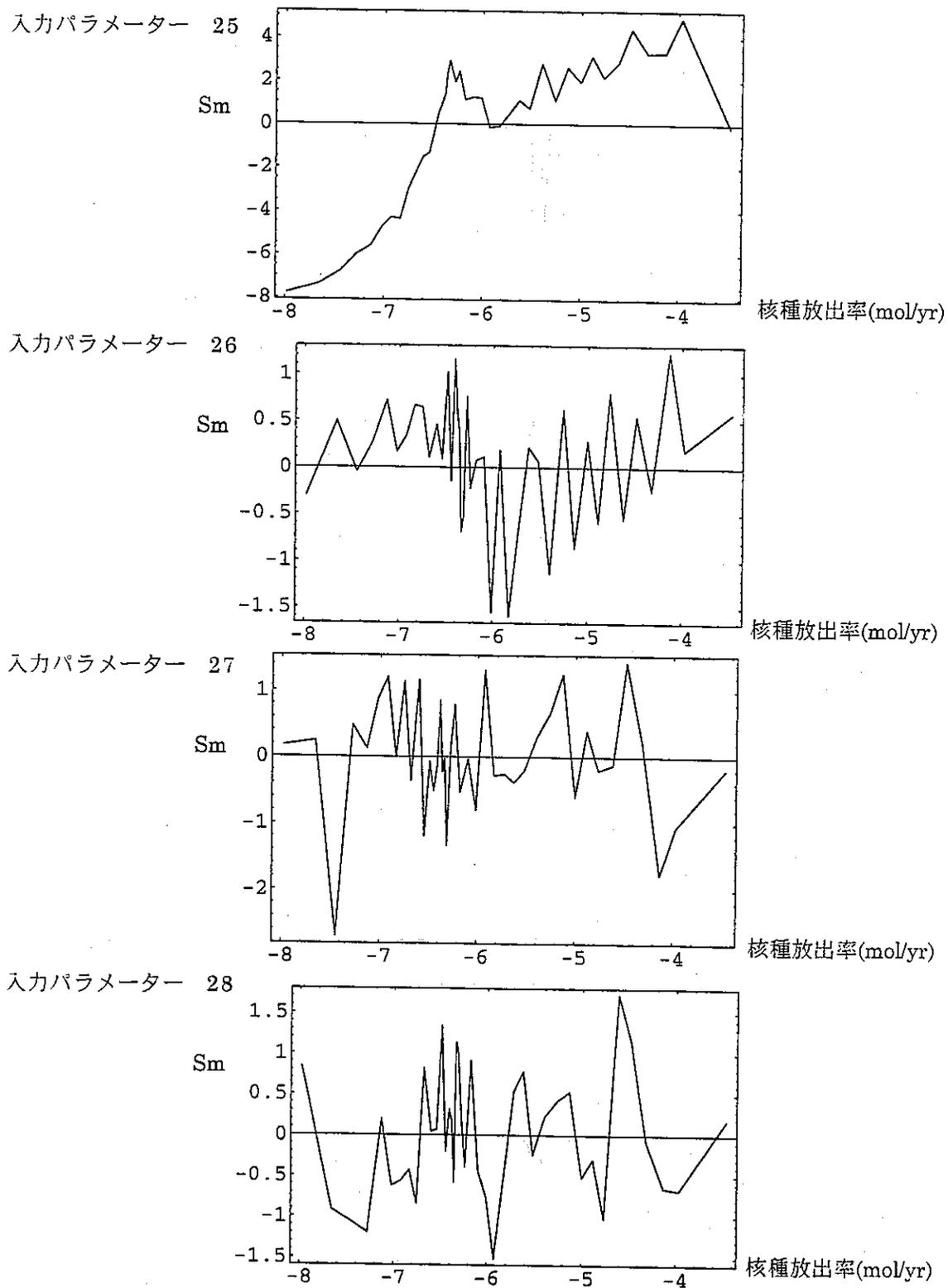
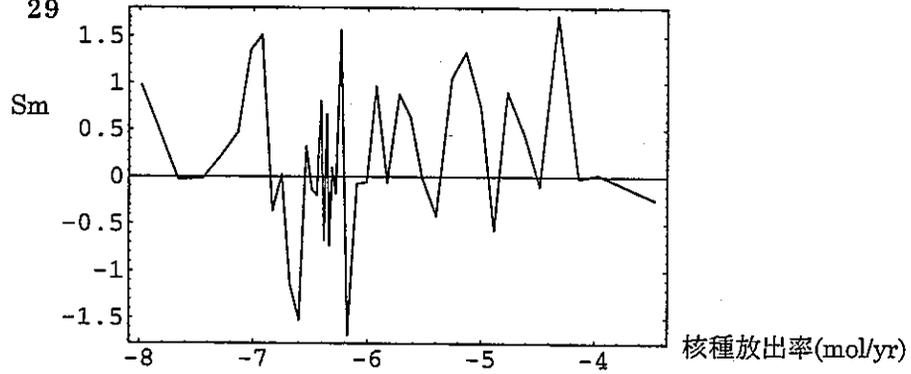
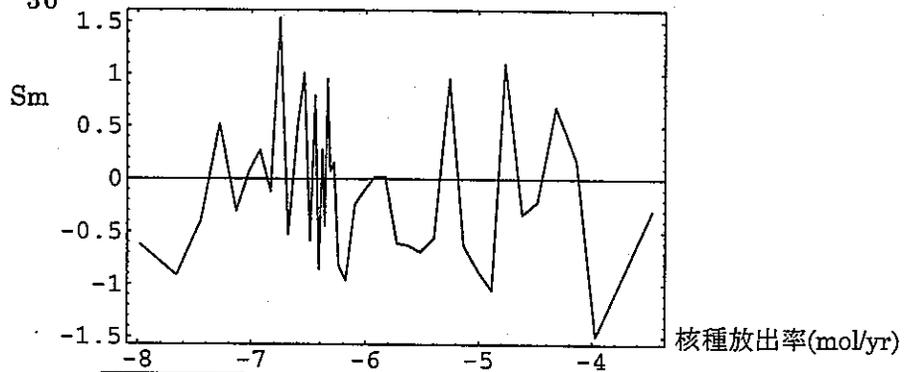


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (7) )

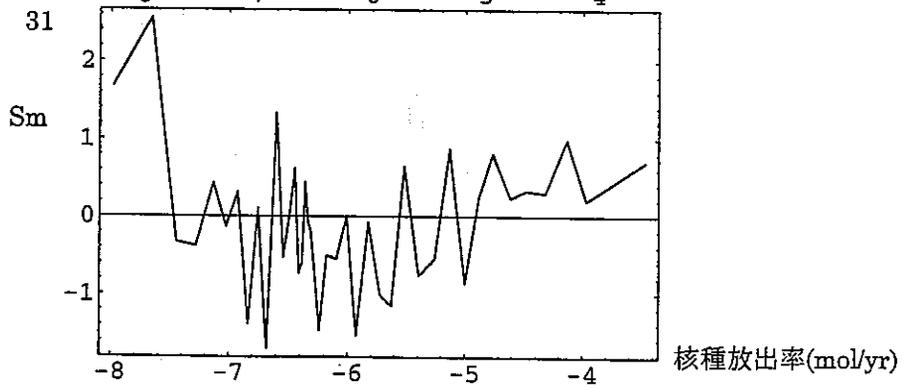
入力パラメーター 29



入力パラメーター 30



入力パラメーター 31



入力パラメーター 32

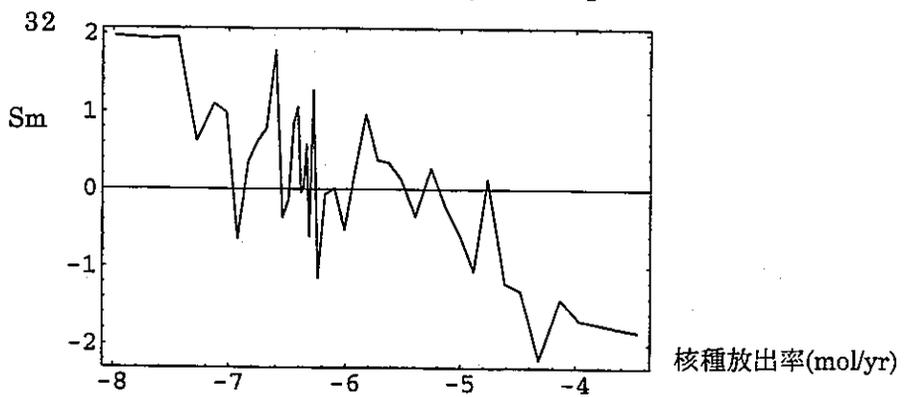


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (8) )

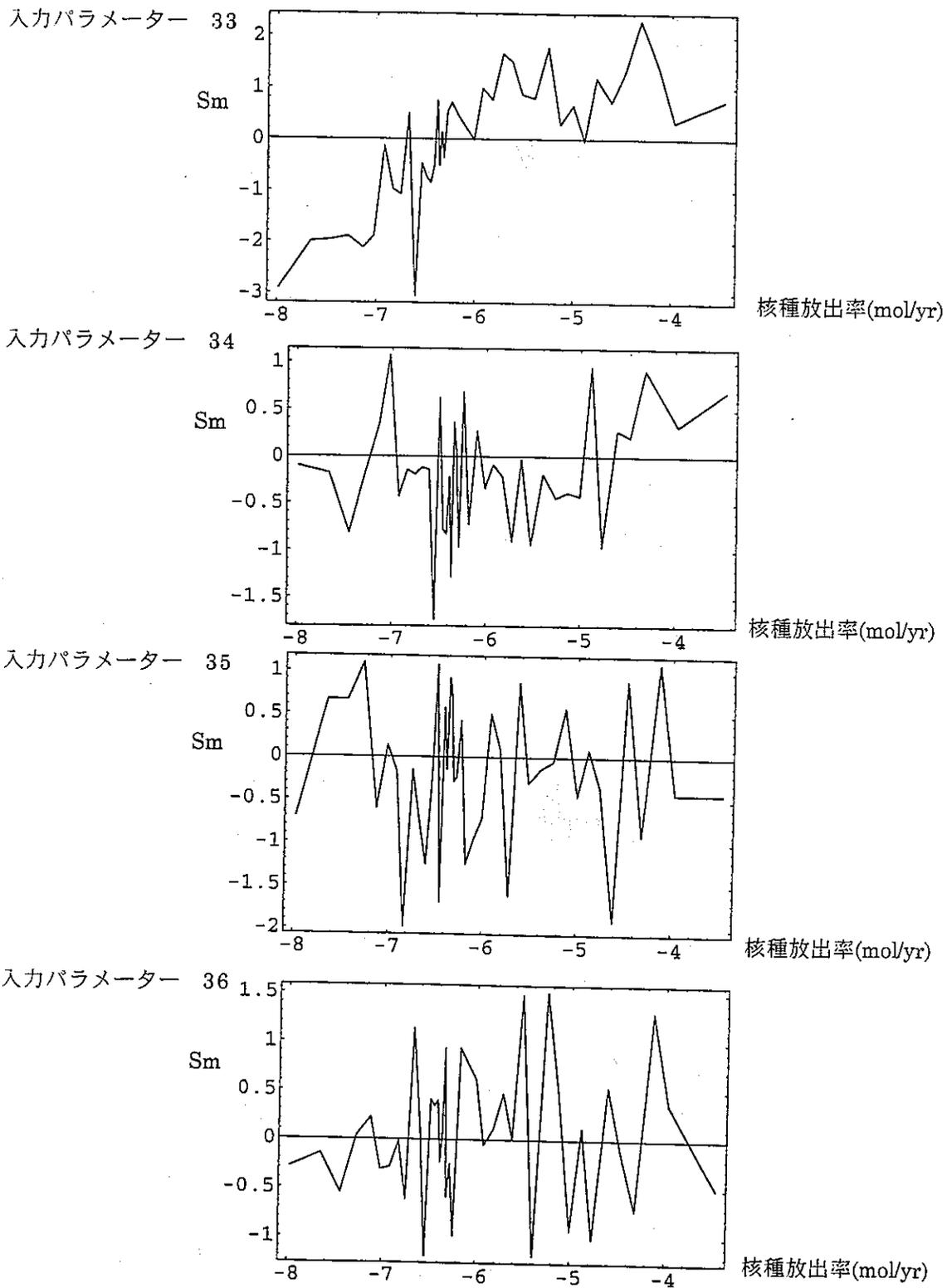
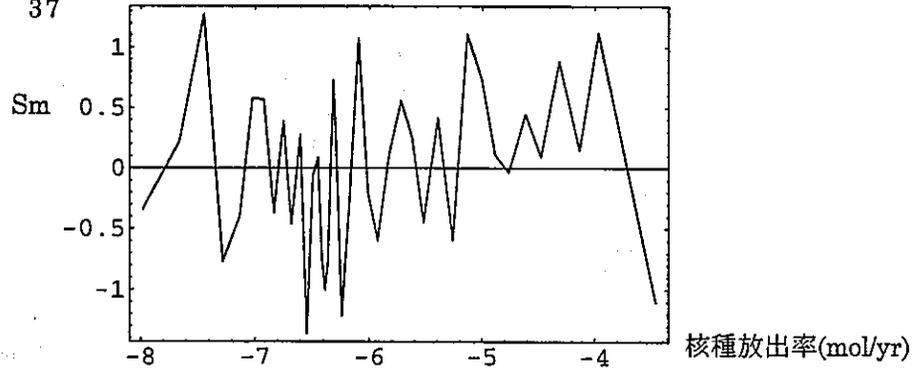
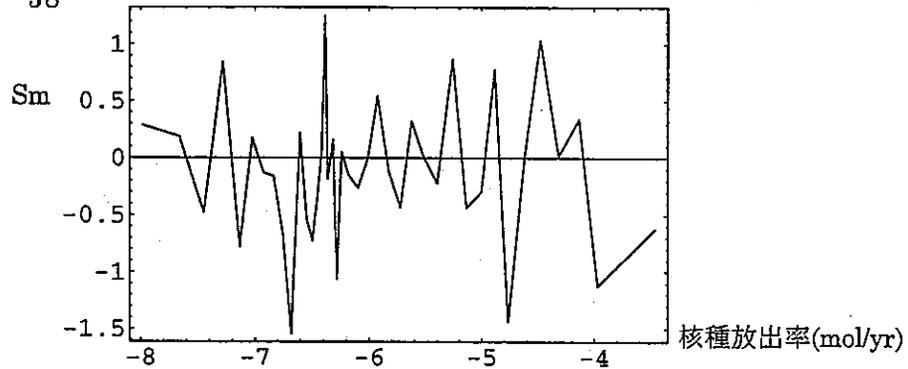


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (9) )

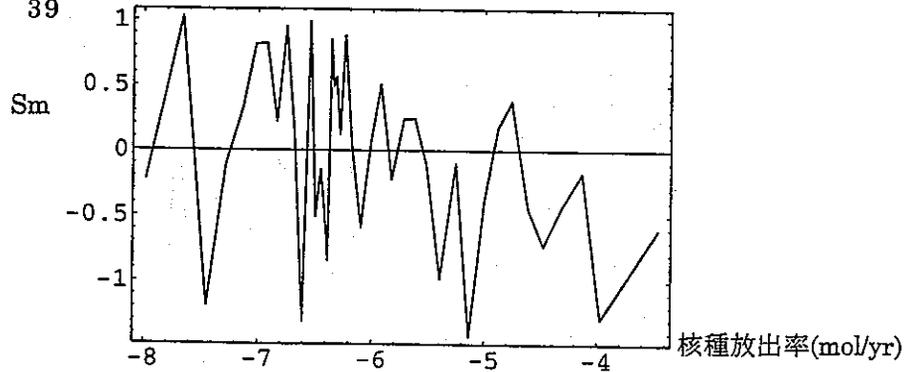
入力パラメーター 37



入力パラメーター 38



入力パラメーター 39



入力パラメーター 40

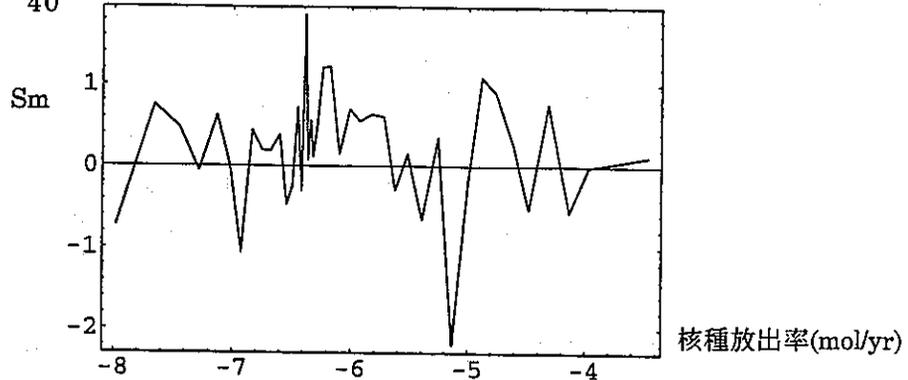
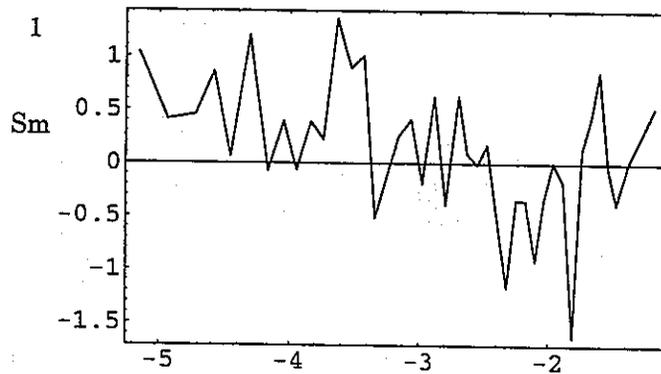


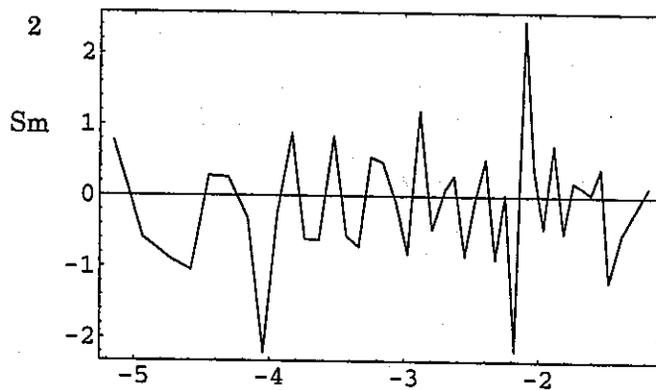
図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(親核種 (10) )

入力パラメーター 1



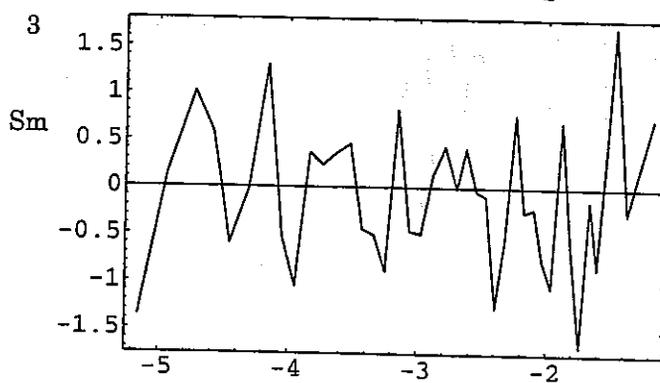
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 2



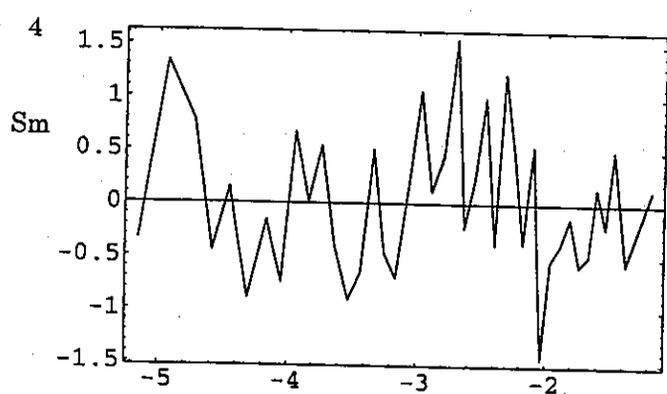
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 3



核種放出率(mol/yr)

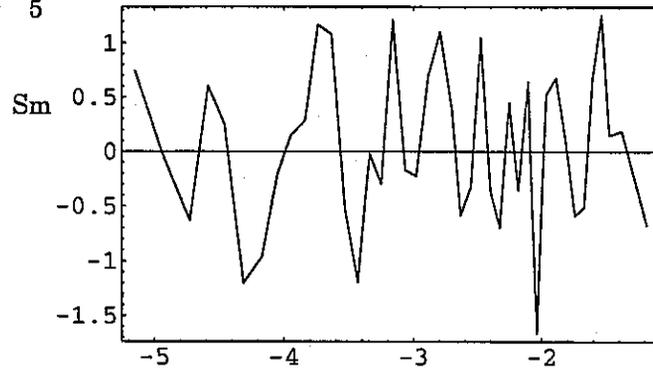
入力パラメーター 4



核種放出率(mol/yr)

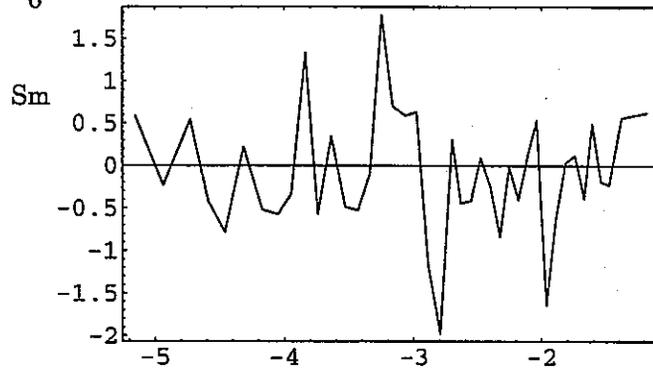
図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (1) )

入力パラメーター 5



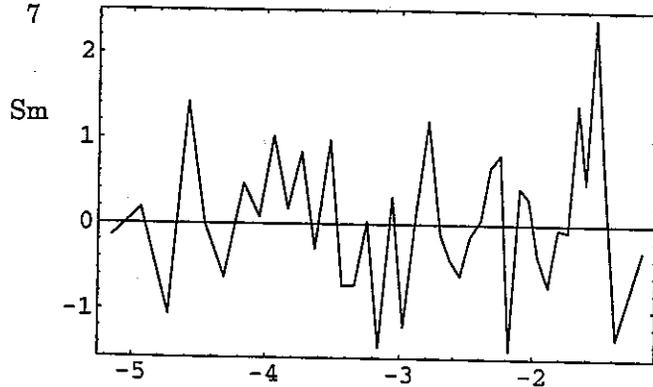
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 6



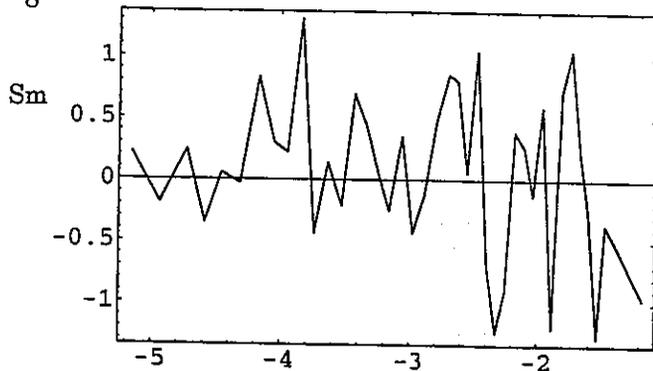
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 7



核種放出率(mol/yr)

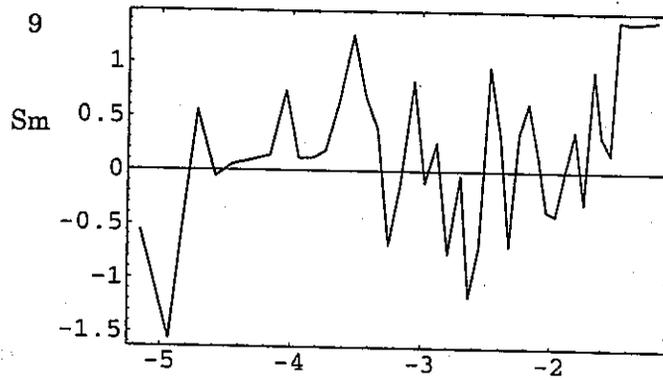
入力パラメーター 8



核種放出率(mol/yr)

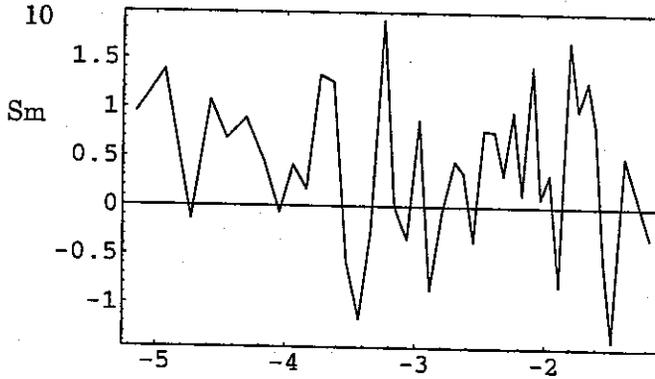
図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (2) )

入力パラメーター 9



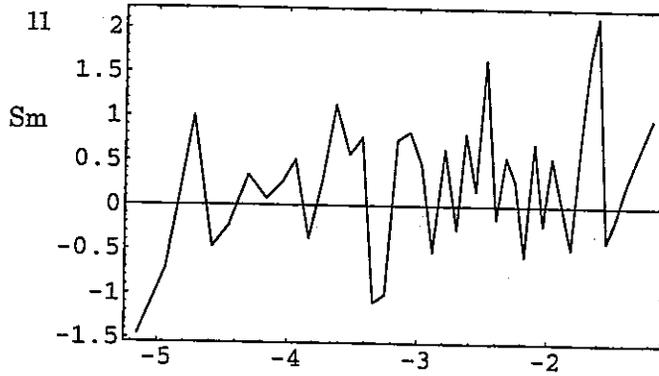
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 10



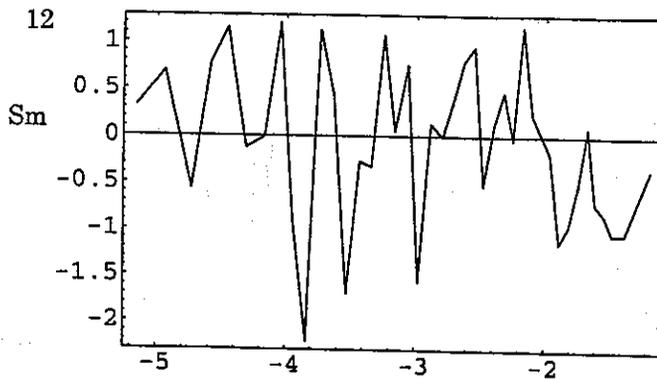
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 11



核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 12



核種放出率(mol/yr)

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (3) )

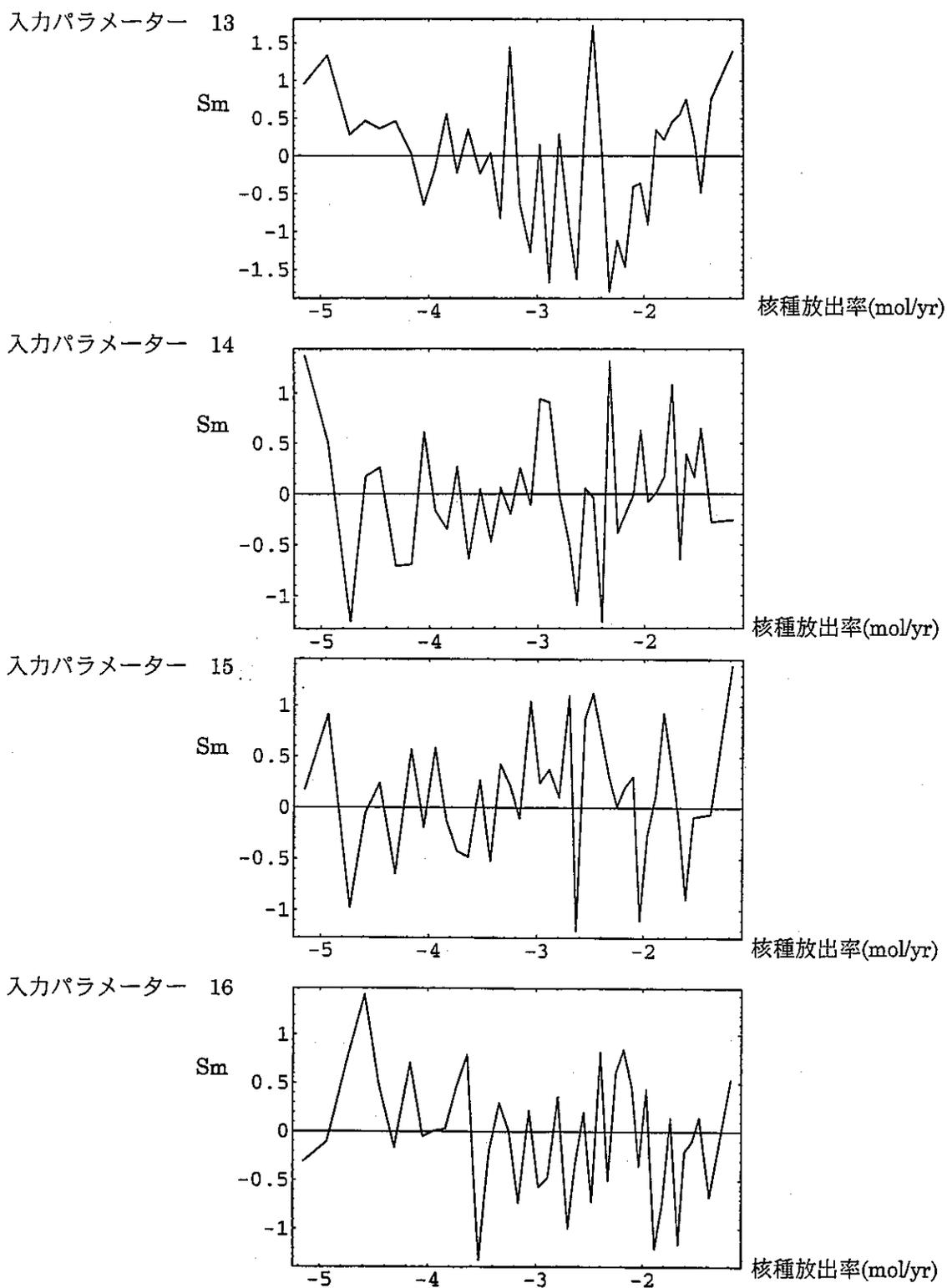
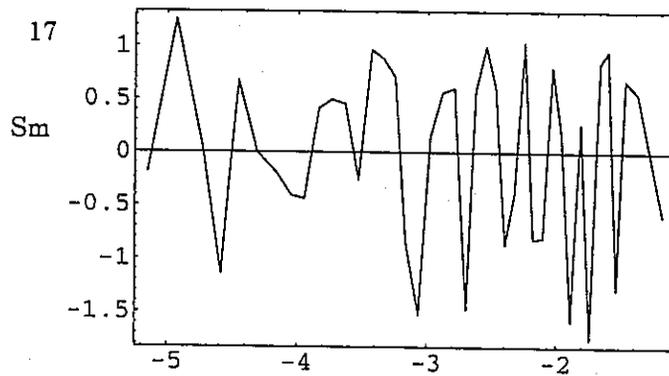


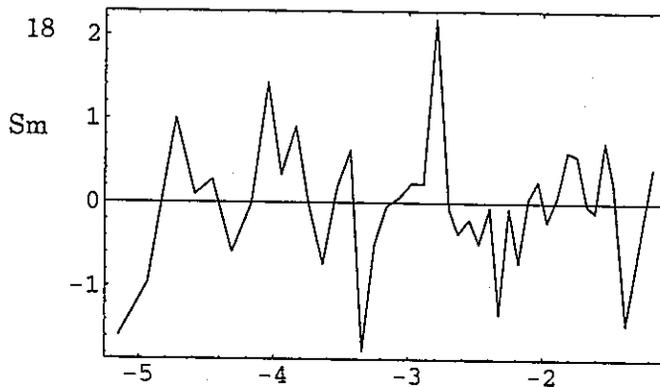
図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
 娘核種 (4) )

入力パラメーター 17



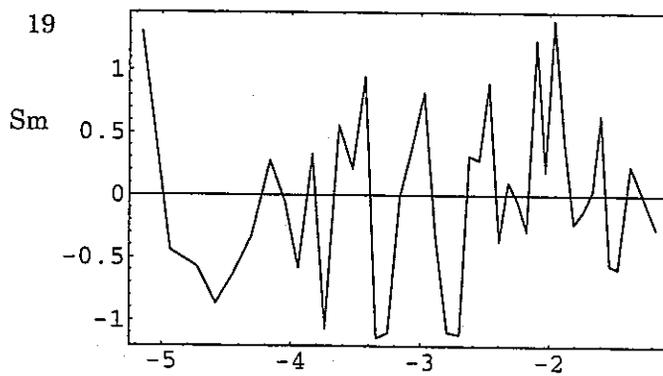
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 18



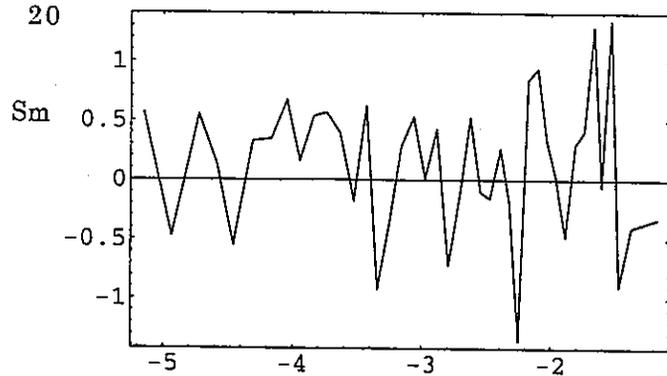
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 19



核種放出率(mol/yr)

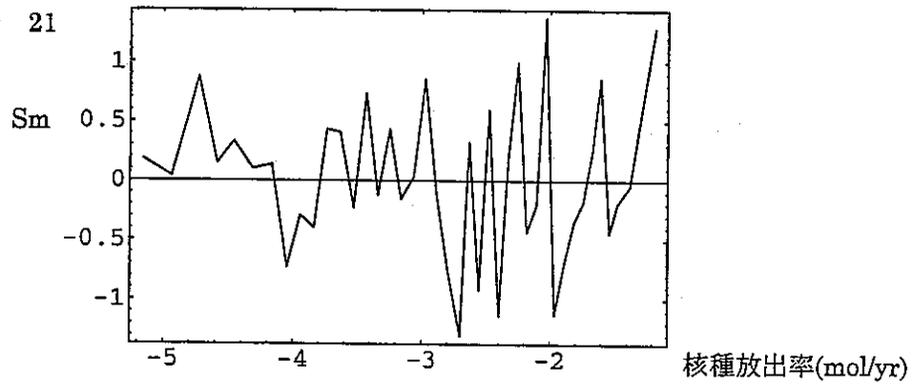
入力パラメーター 20



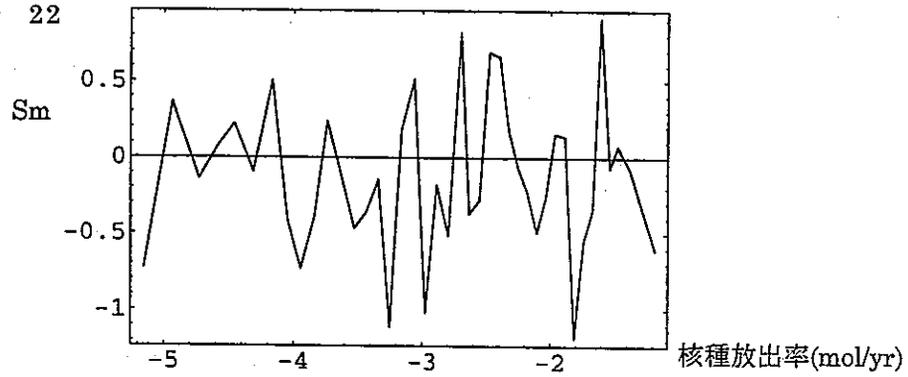
核種放出率(mol/yr)

図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (5) )

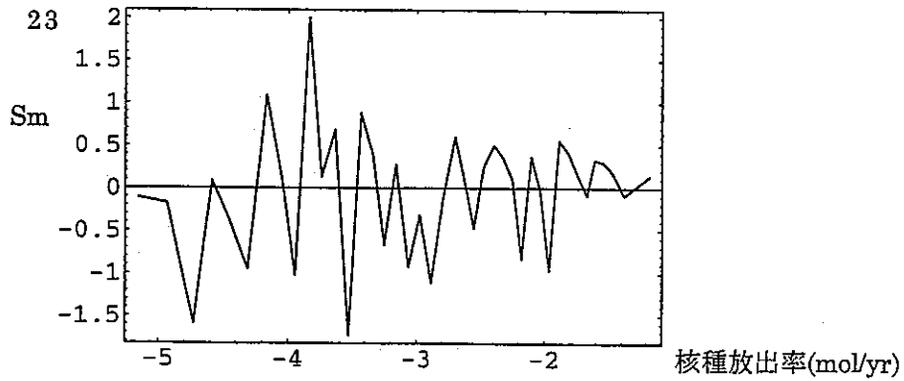
入力パラメーター 21



入力パラメーター 22



入力パラメーター 23



入力パラメーター 24

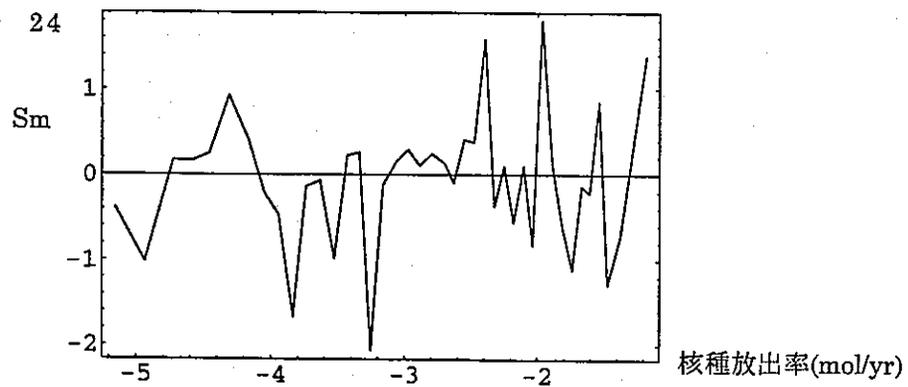


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (6) )

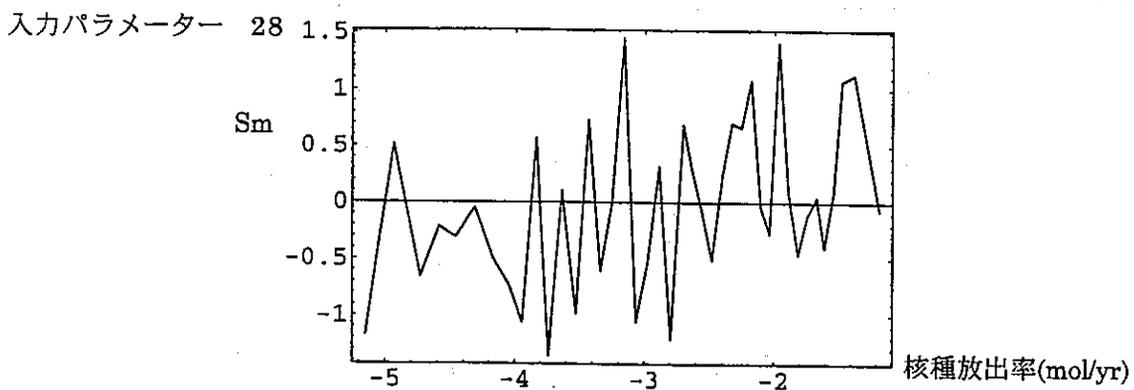
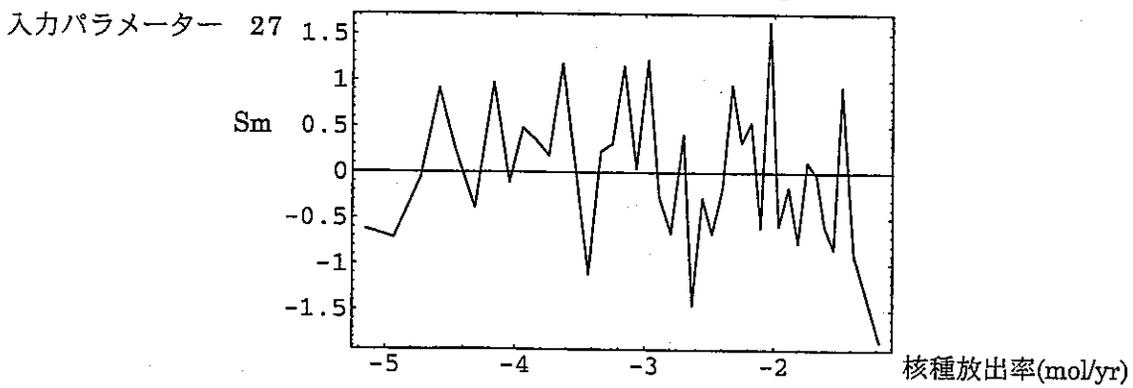
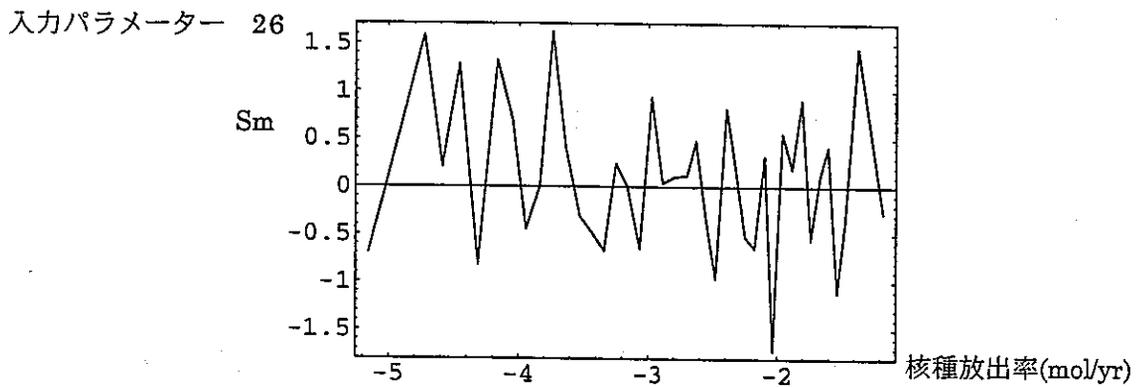
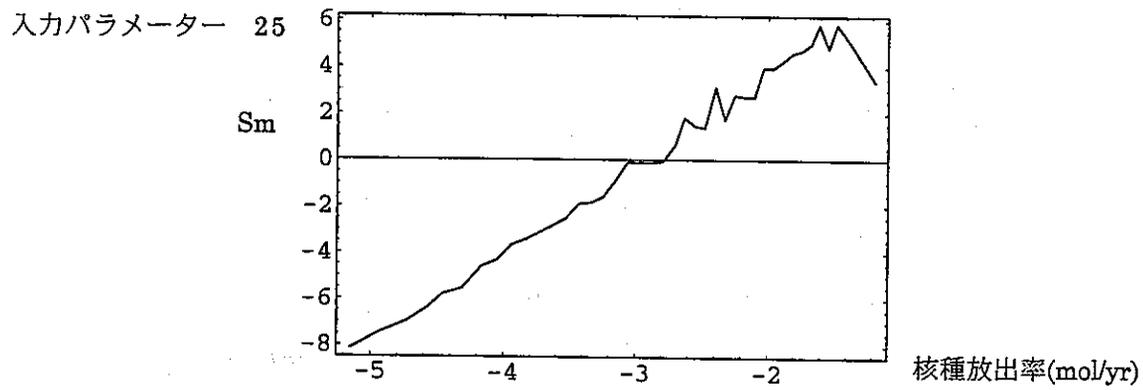


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (7) )

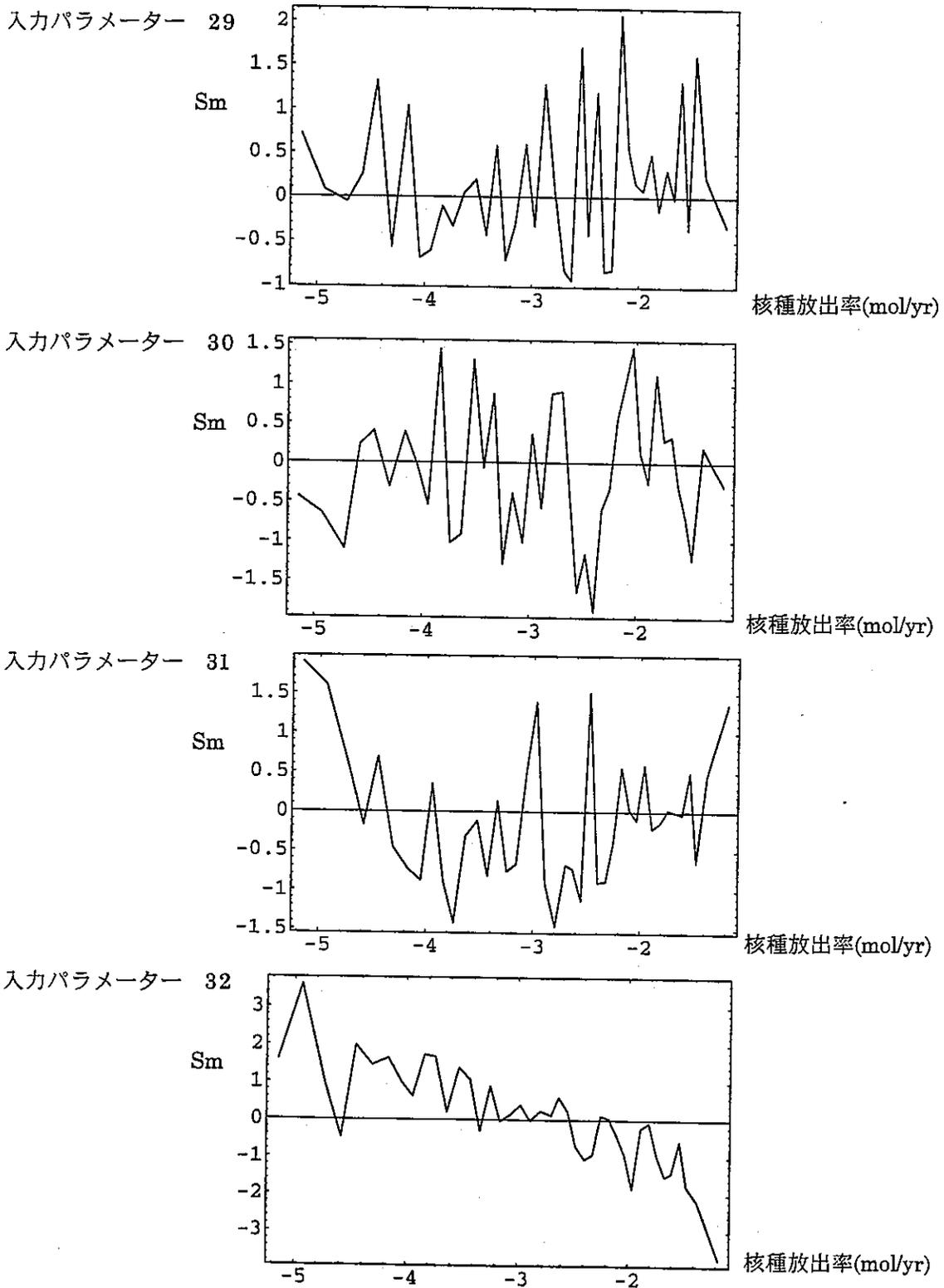


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (8) )

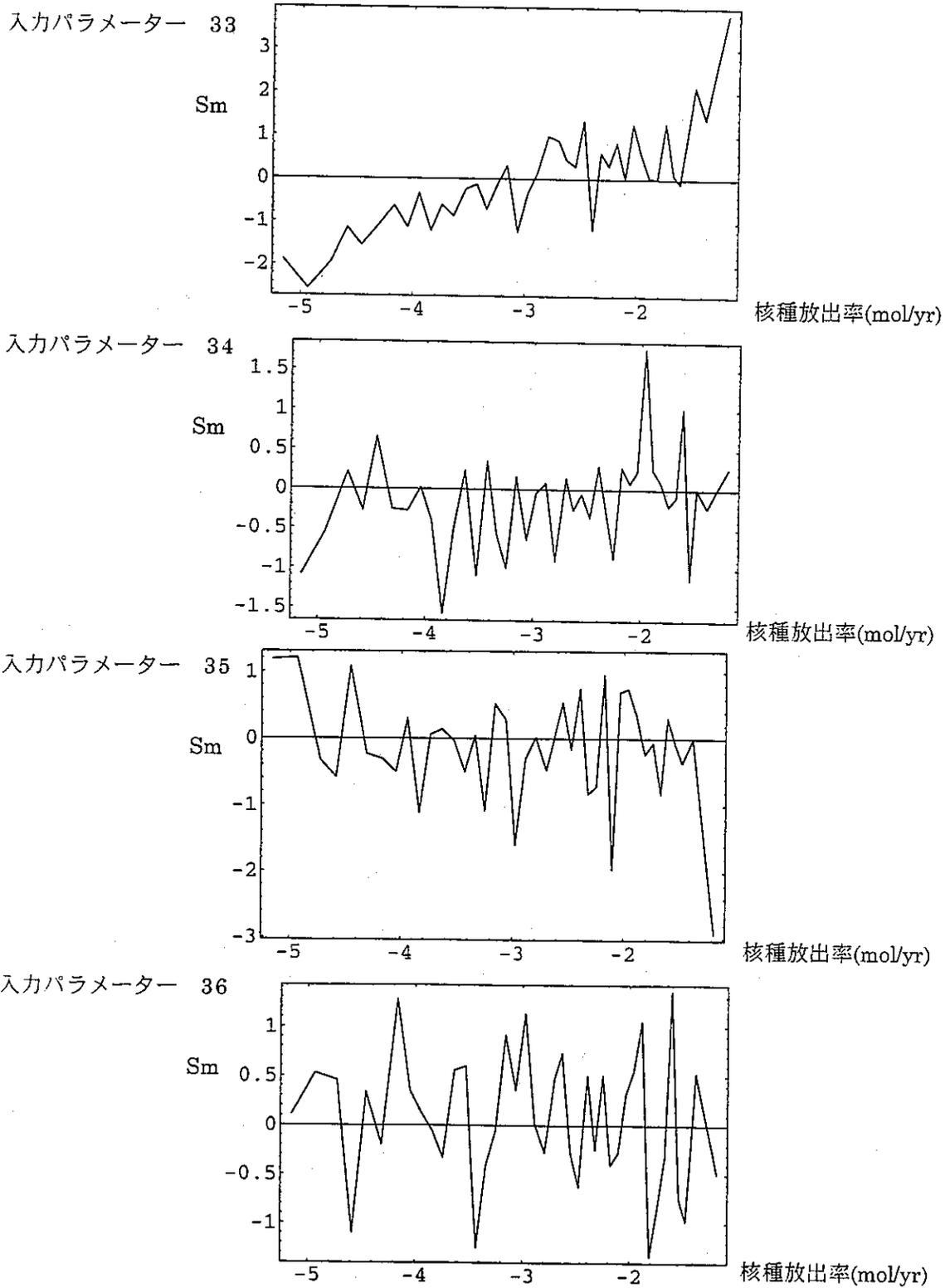


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (9) )

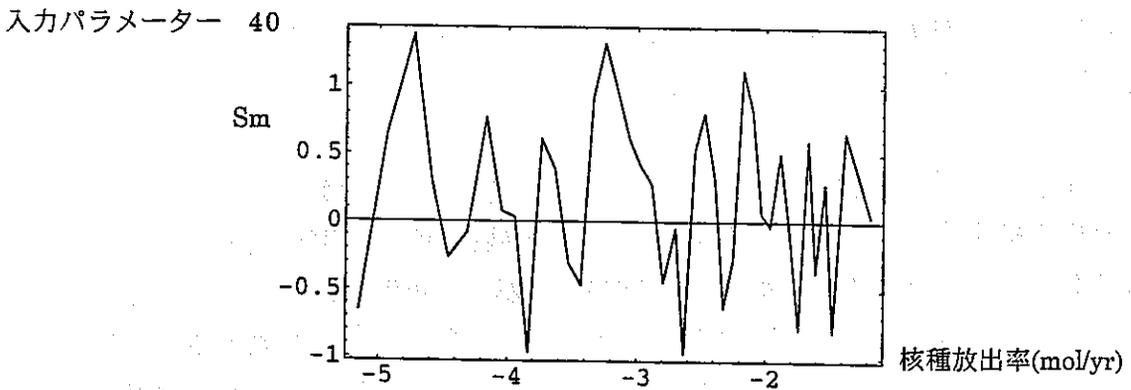
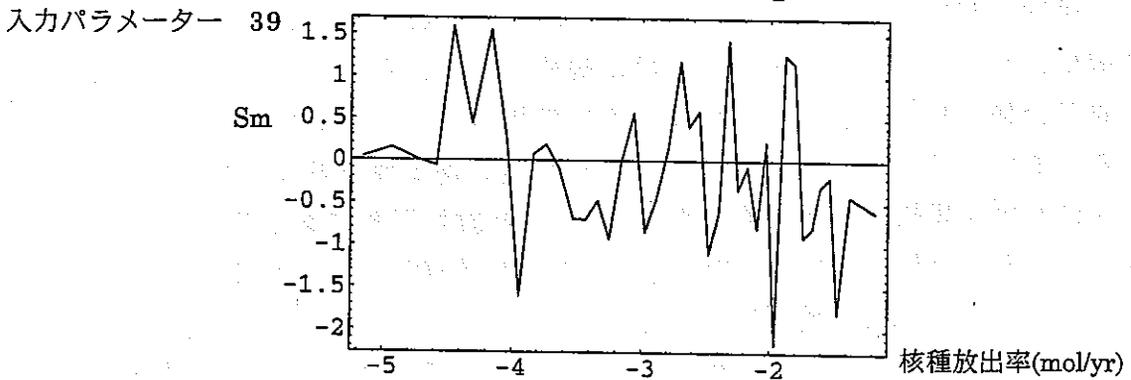
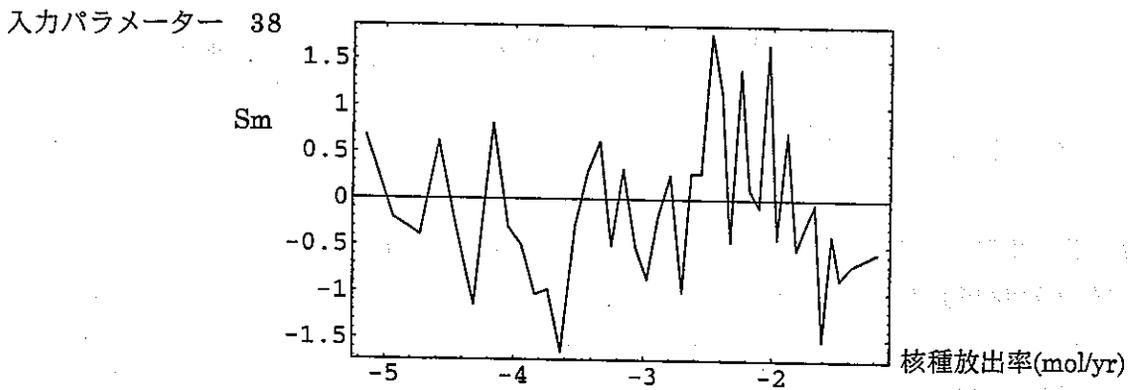
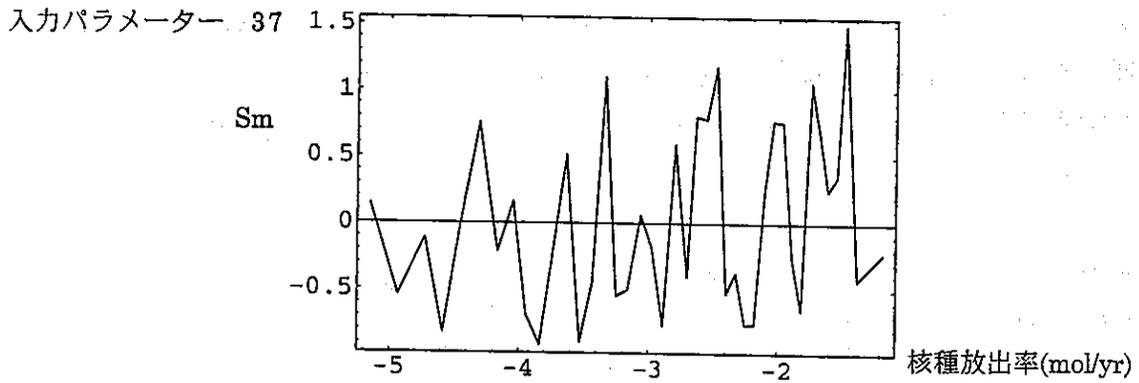


図 4.6.4 最大放出率ケース近傍の第二次サンプリングについての Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (10) )

図 4.6.5 は、各クラスタにおけるそれぞれの入力パラメータの感度 (Jacobian 行列) をプロットしたものである。いずれのクラスタにおいても、オーバーパック腐食時間及び動水勾配最小値の感度が突出しており他のより複雑な感度構造を隠してしまっているものと考えられる。

他のパラメータ群についての感度を見るためには、表 4.6.5 に挙げたパラメータ値を固定した第三次のサンプリングを行うことが必要と考えられる。

#### 4.6.4 リファレンスケース近傍の第二次 (局部) サンプリングの解析結果

##### (1) Np-237 及び Th-229

Np-237 及び Th-229 についてリファレンスケース近傍の局部サンプリングによる統計的解析結果 (2200 ケース) を図 4.6.6 のスキッタープロットに示す。ここでは、親及び娘の放出率の対数値がそれぞれ-3~-4 及び-6 の付近で境界線を持つ構造が明瞭に見られる。このうち、Np-237 の対数放出率で-3~-4 にある境界線は、リファレンスケースにおける規格化ガラス浸出率に初期インベントリを乗じた値に相当し、つまりガラス浸出率律速に対応するものであることがわかる。また、Th-229 の対数放出率で-6 付近にある境界線は、リファレンスケースにおける規格化ガラス浸出率に Np-237 と放射平衡にある Th-229 のインベントリを乗じた値に相当し、やはりガラス浸出率律速に対応するものである。興味深い点は、これらの境界線を上回るケースが比較的少数ながら存在していることである。このことは、核種の全量が可動な状態でガラスからの放出率による制限のみで移動する場合以上の放出率が、他の何らかの機構で生じる可能性を示唆している。

図 4.6.7 は、全域的解析の場合と同じ方法で算出した対数スケールでのクラスタ分析の結果を、クラスタ分割数と平均二乗残差 MSE の関係として整理したものである。クラスタ数 10 及び 14 の位置で MSE が顕著に低下していることがわかる。図 4.6.8 は、全クラスタ数 14 の場合の有意な (ケース数が 50 以上の) 4 個のクラスタをまとめたものである。ここで、前述した代替的な移動機構による高い (つまりガラス浸出率律速の値を上回る様な) 放出率に対応するケース群は比較的少数であるために有意な大きさのクラスタにはほとんど含まれていない。

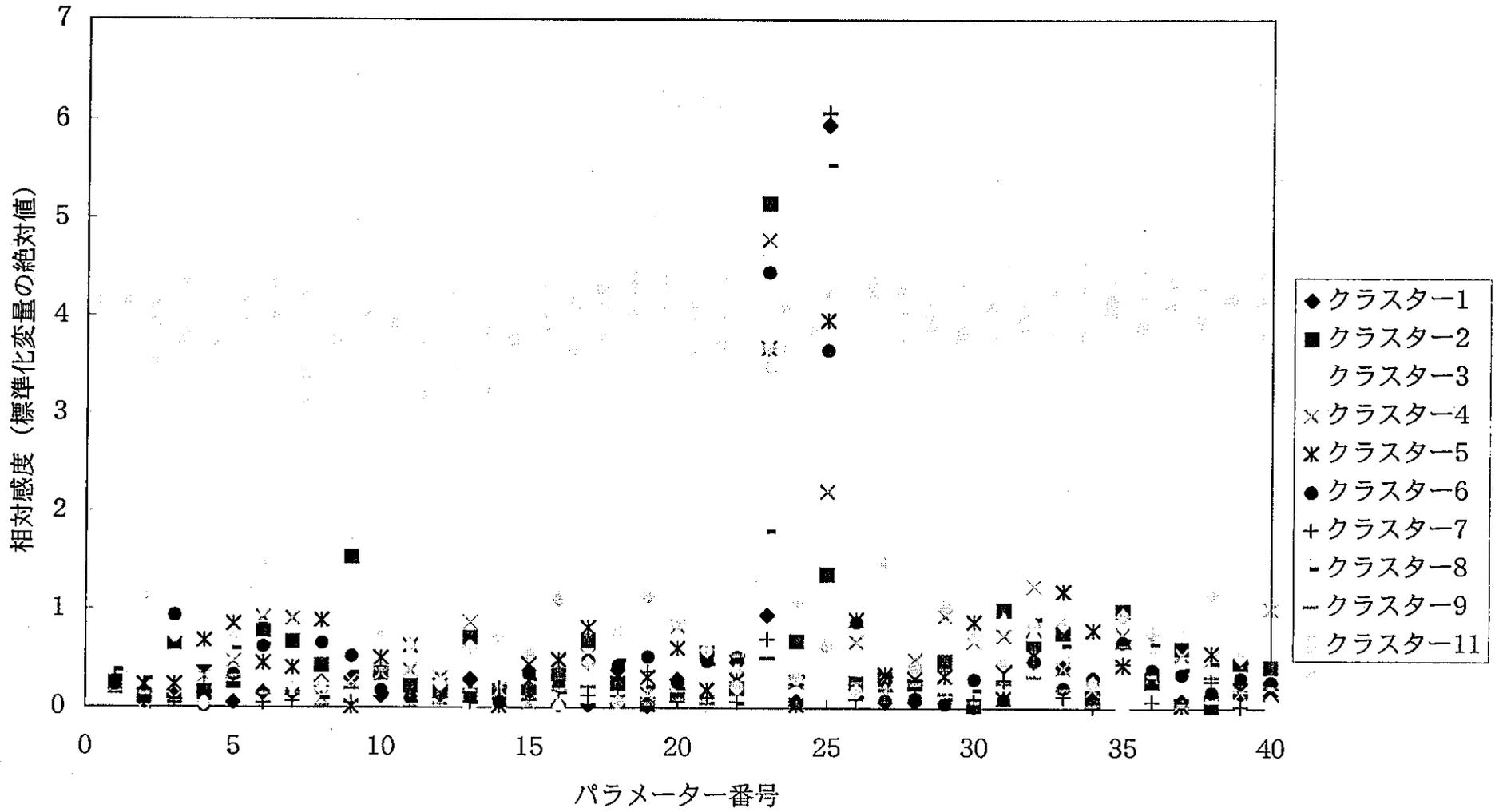


図4.6.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング：親核種)

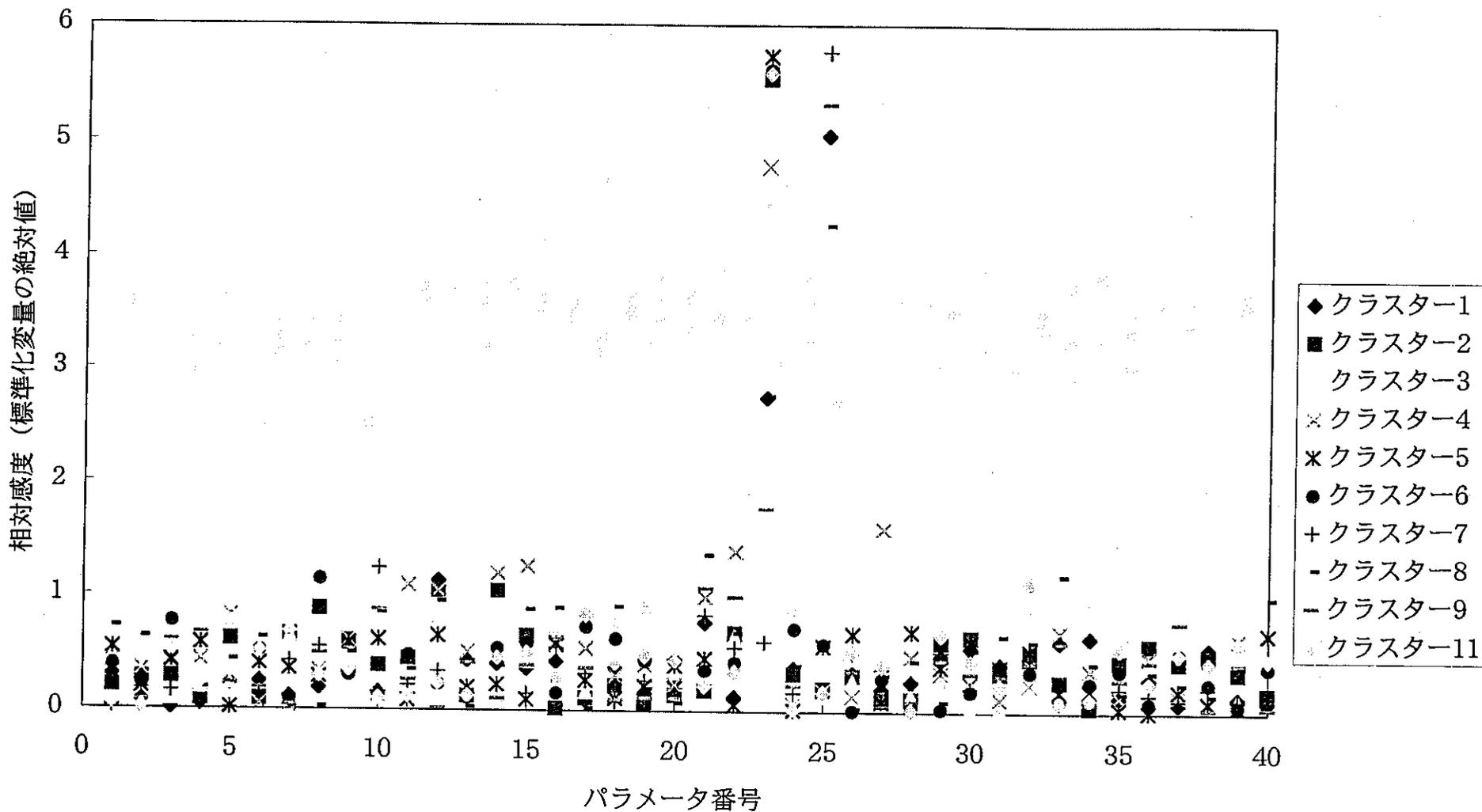


図4.6.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(最大放出率ケース近傍の第二次サブリング：娘核種)

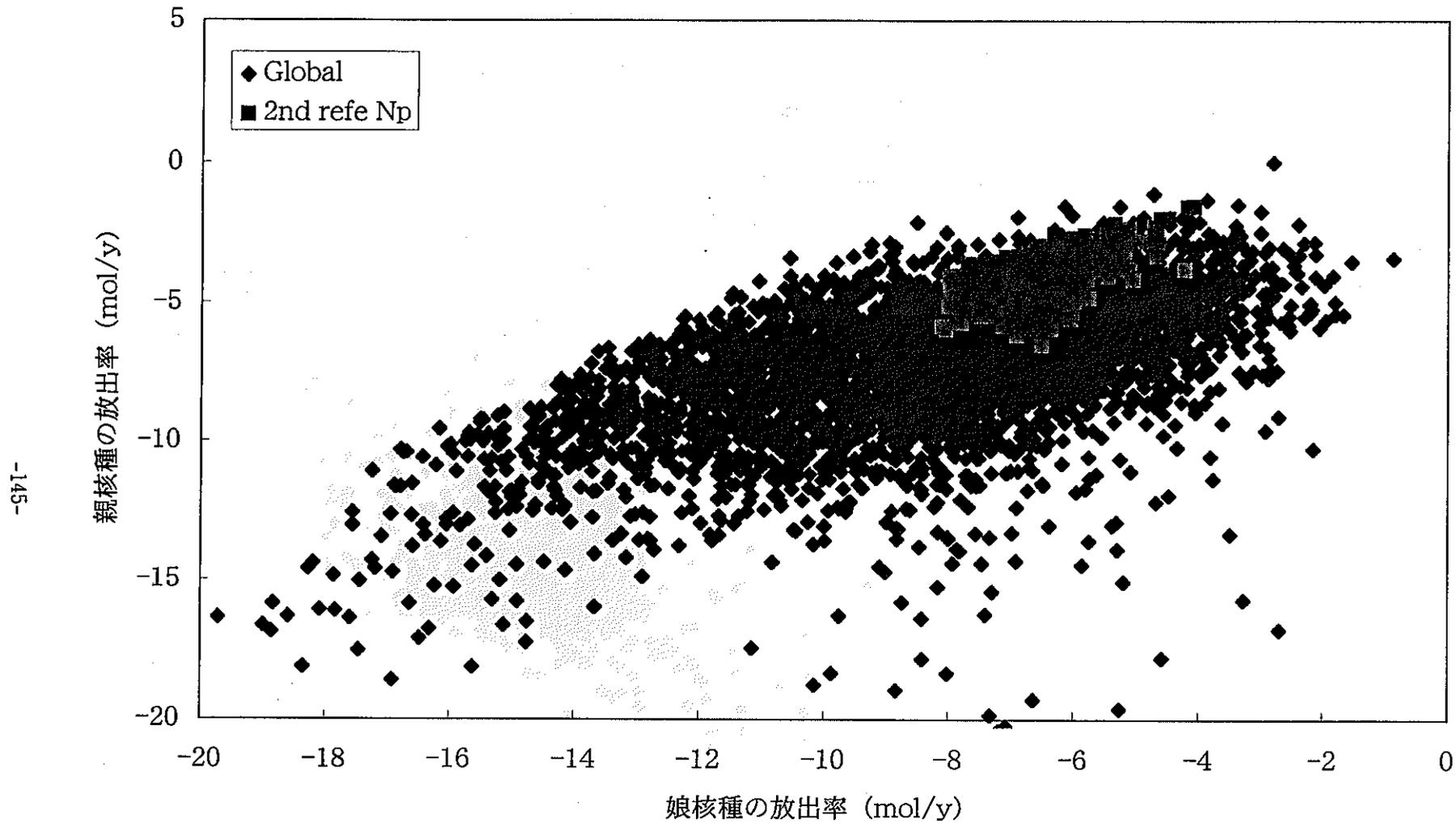


図4.6.6 (1) リファレンスケース近傍の第2次サンプリングによる統計的解析結果  
(Np237, Th229 : 2200ケース)

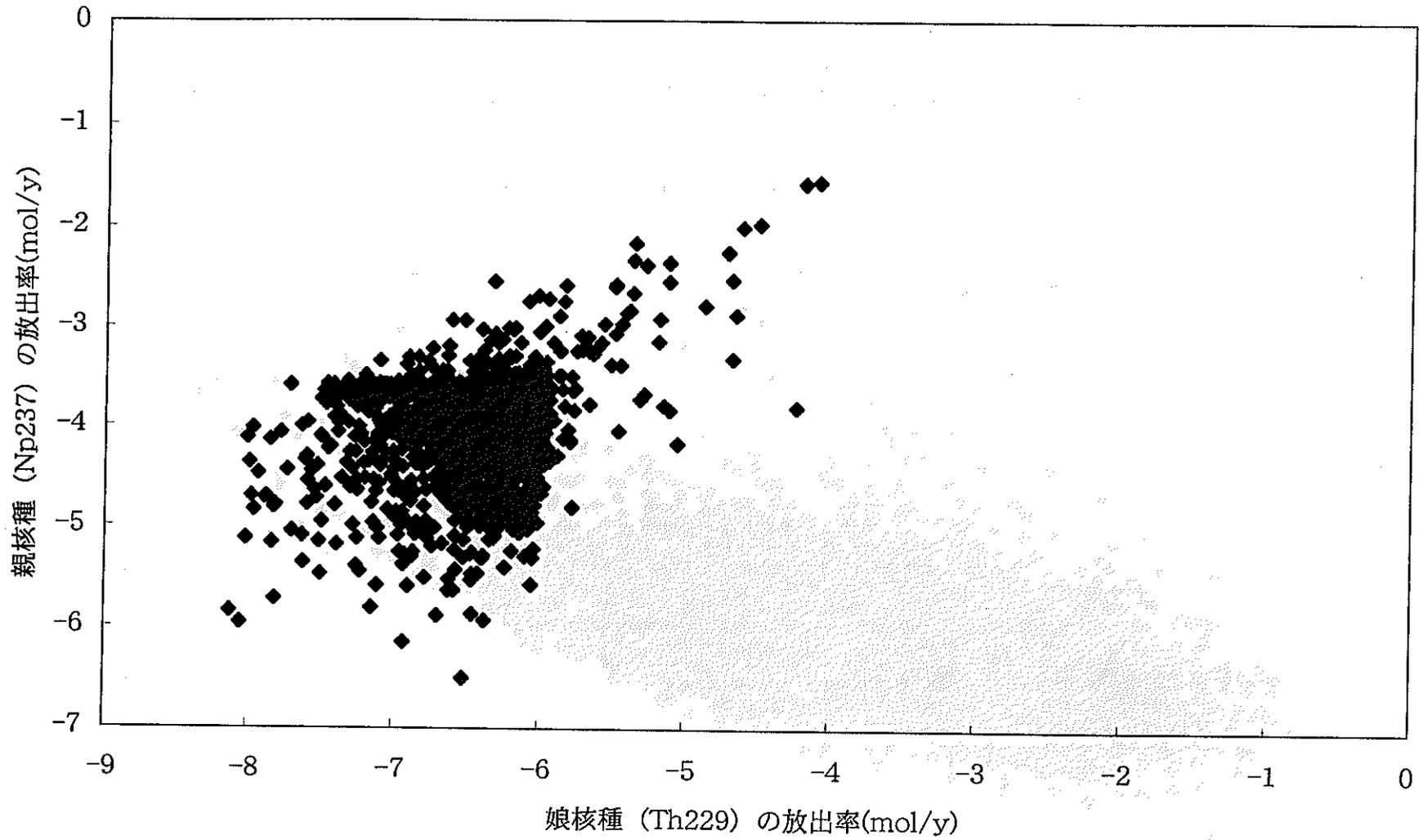


図4.6.6 (2) リファレンスケース近傍の第二次サンプリングによる統計的解析結果 (Np237,Th229 : 2200ケース)

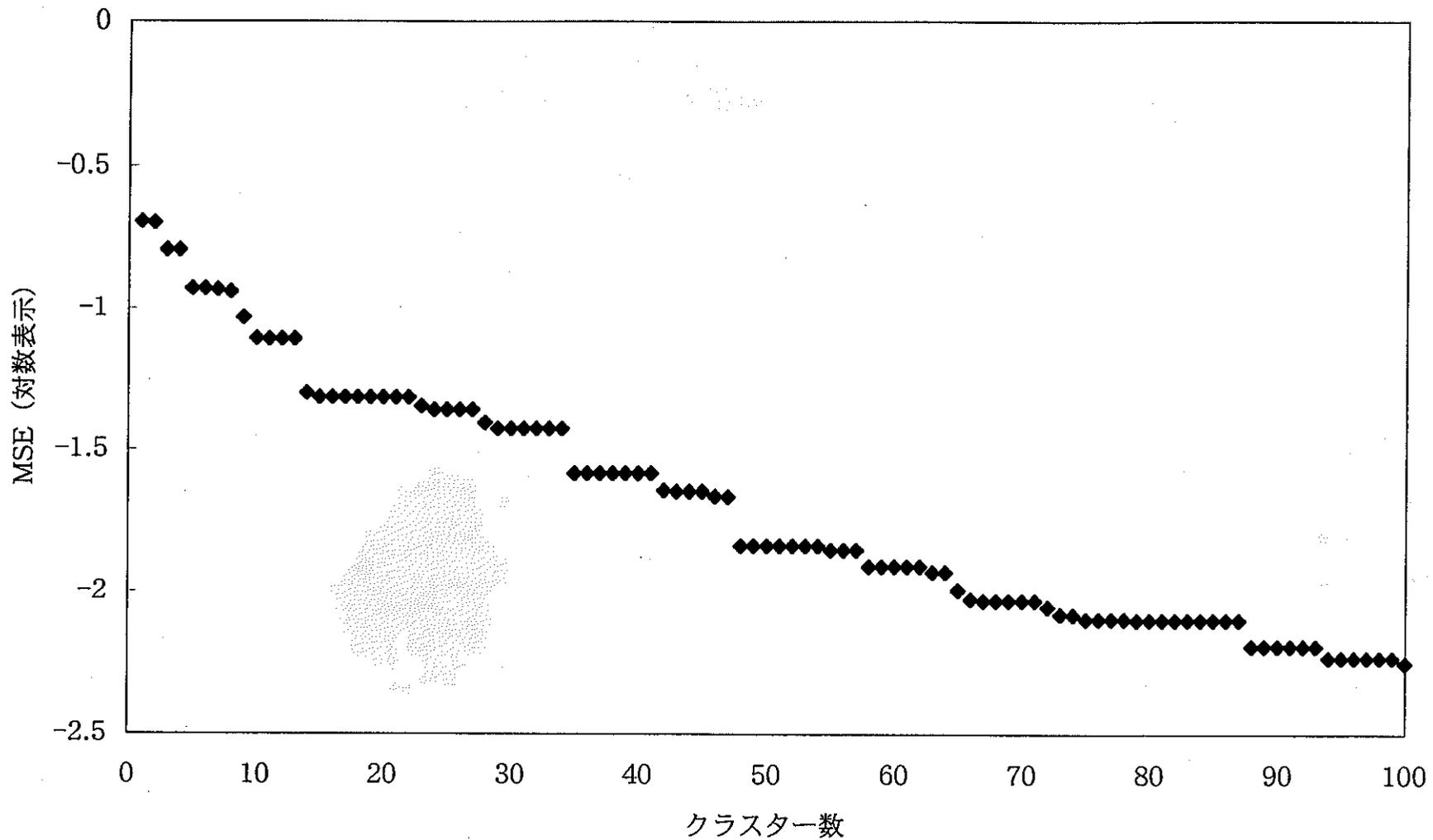


図4.6.7 リファレンスケース近傍の第二次サブリングについての  
クラスター数と平均二乗残差の関係 (Np237,Th229)

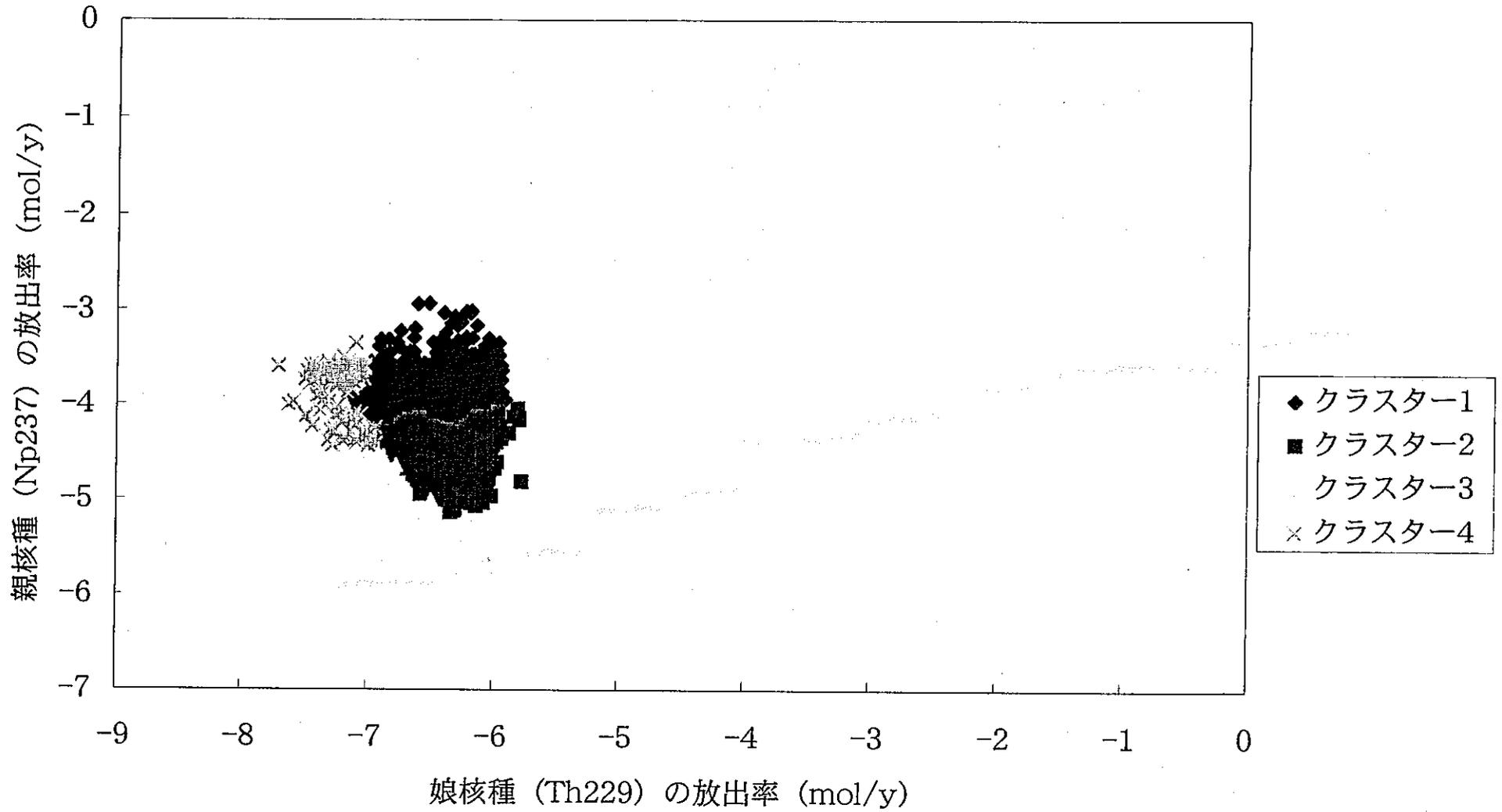


図4.6.8 リファレンスケース近傍の第二次サブリング\* についての  
クラスター分析結果 (Np237, Th229)

Moving Band 解析は、クラスタ分割によらず全域的に実施可能なものであり、従って前出の有意なクラスタに含まれない比較的少数のケース群も含めた横断的な解析を行うことが可能である。結果を図 4.6.9 にまとめる。非零のトレンドを有する入力パラメータは表 4.6.6 に示す通りである。

表 4.6.6 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ  
( Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース  
近傍第二次サンプリング)

	パラメータ	傾向
1	親核種第二区間勾配 (拡散)	正* (親核種放出率について)
10	親核種の不動態化速度	逆* (親核種放出率について)
11	親核種の安定相溶解速度	正* (親核種放出率について)
12	娘核種第二区間勾配 (拡散)	正* (娘核種放出率について)
21	娘核種の不動態化速度	逆* (娘核種放出率について)
22	娘核種の安定相溶解速度	正* (娘核種放出率について)
25	動水勾配最小値	正 (親及び娘核種放出率について)
31	動水勾配最大値	逆 (親及び娘核種放出率について)
33	強い流れの継続期間	正 (親及び娘核種放出率について)
39	内側地球化学異常継続期間	正 (親及び娘核種放出率について)

上表のうち、\*を付したものはいずれもガラス浸出率律速に対応した境界線を下回る放出率のケース群と上回るケース群において傾向が大きく異なるものである。上記境界線以下の領域では、平均拡散係数が大きい程 (つまり可動なもの割合が増す程) 放出率は上昇するが、境界線以上の領域ではむしろ平均拡散係数は再び減少する傾向を示している。このことは、前出のガラス固化体浸出律速の数値を上回る放出率をもたらすような代替的な移行機構が、核種の沈澱フロント (あるいはより一般的には低平均拡散係数フロント) の生成と伝播によるものであることを物語っている。このことは、内側地球化学異常継続期間が重要なパラメータに含まれることとも符合する (内側地球化学以上の進入距離も重要性を有するものと考えられるが、これについてはサンプリング範囲が広く、規格化された値で 0.5 を超えるものについてはフロントが緩衝材外側に達することから顕在化していないものと考えられる)。

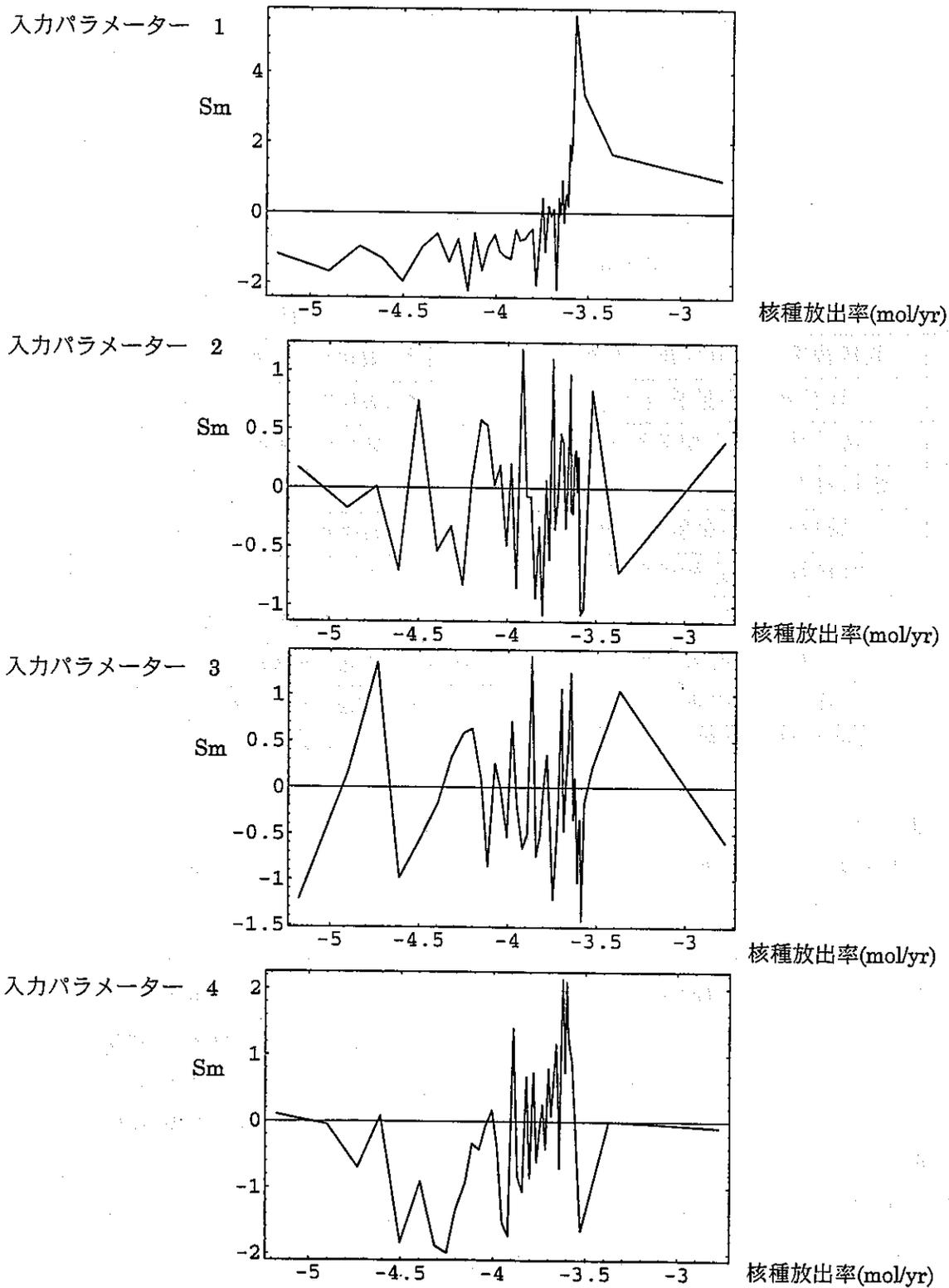


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (1) )

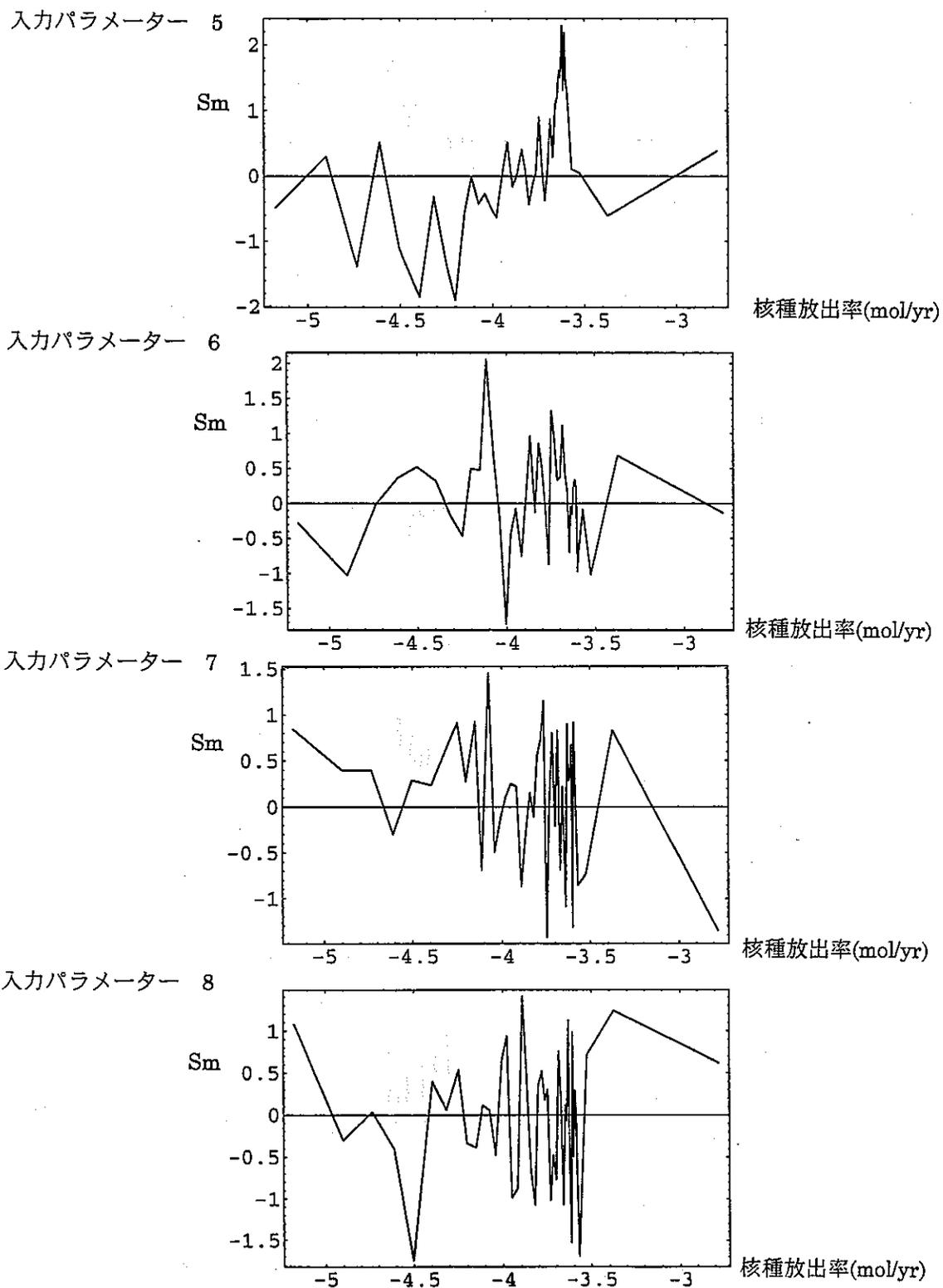


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (2) )

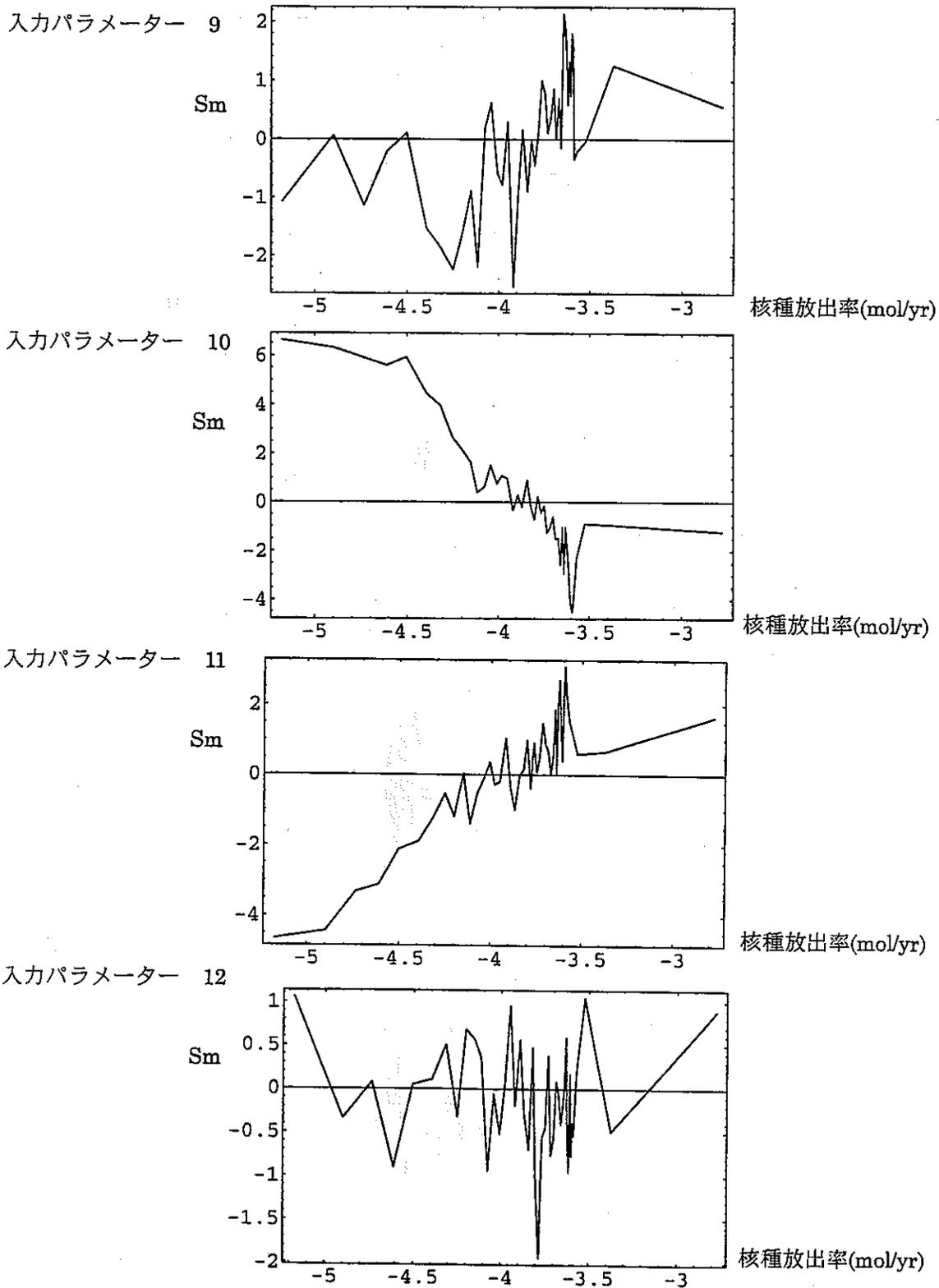


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (3) )

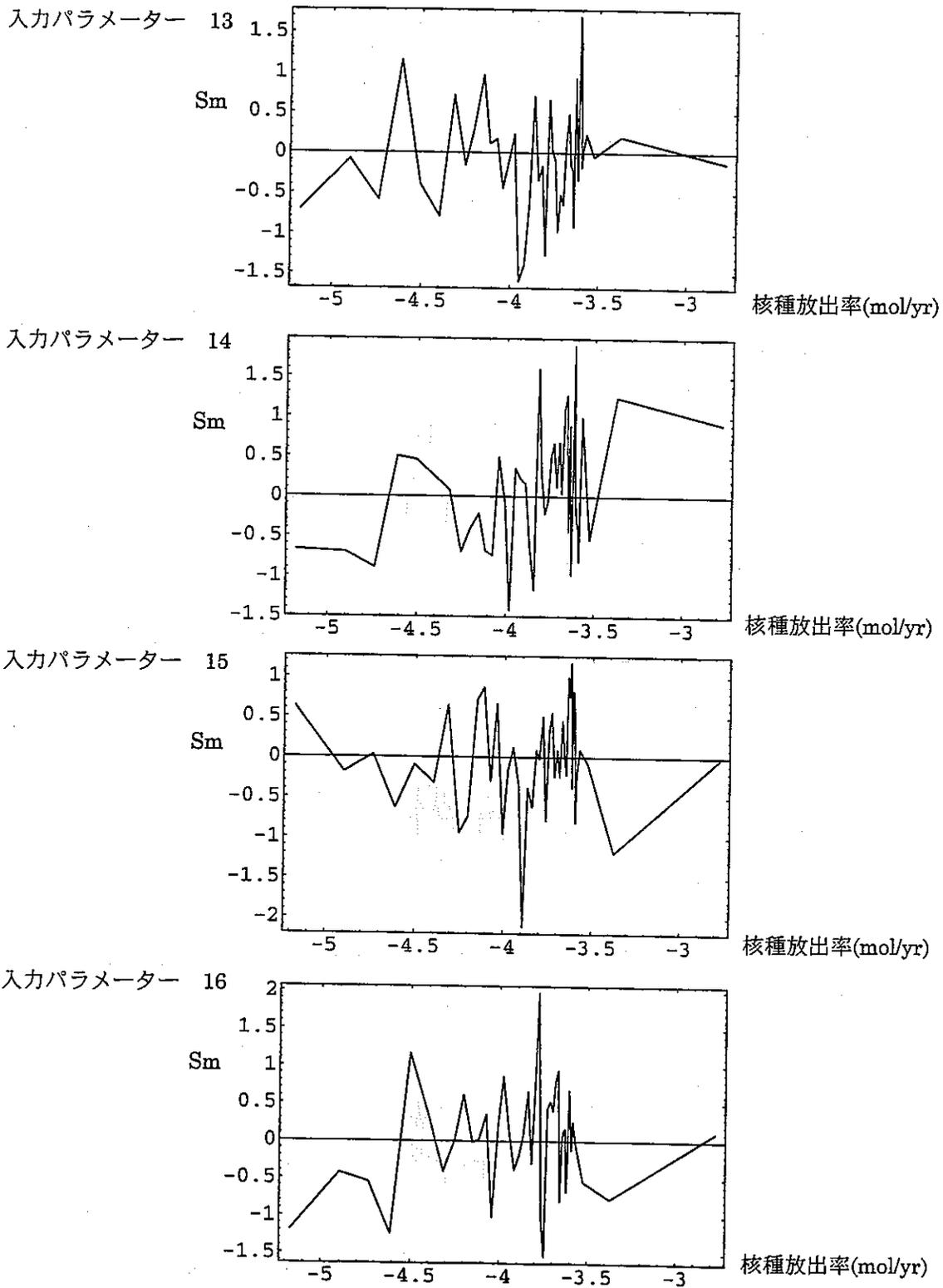


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 親核種 (4)

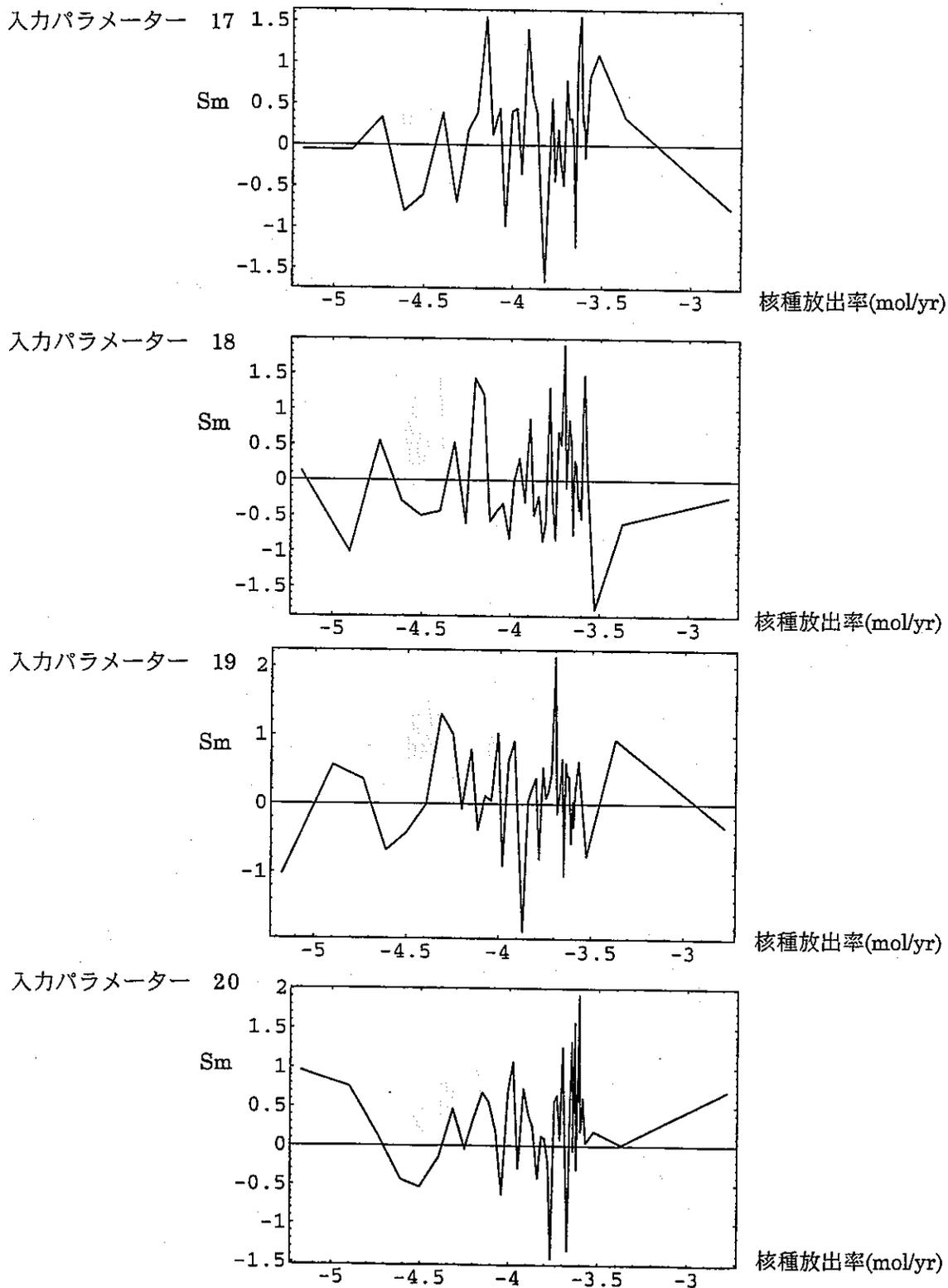


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (5) )

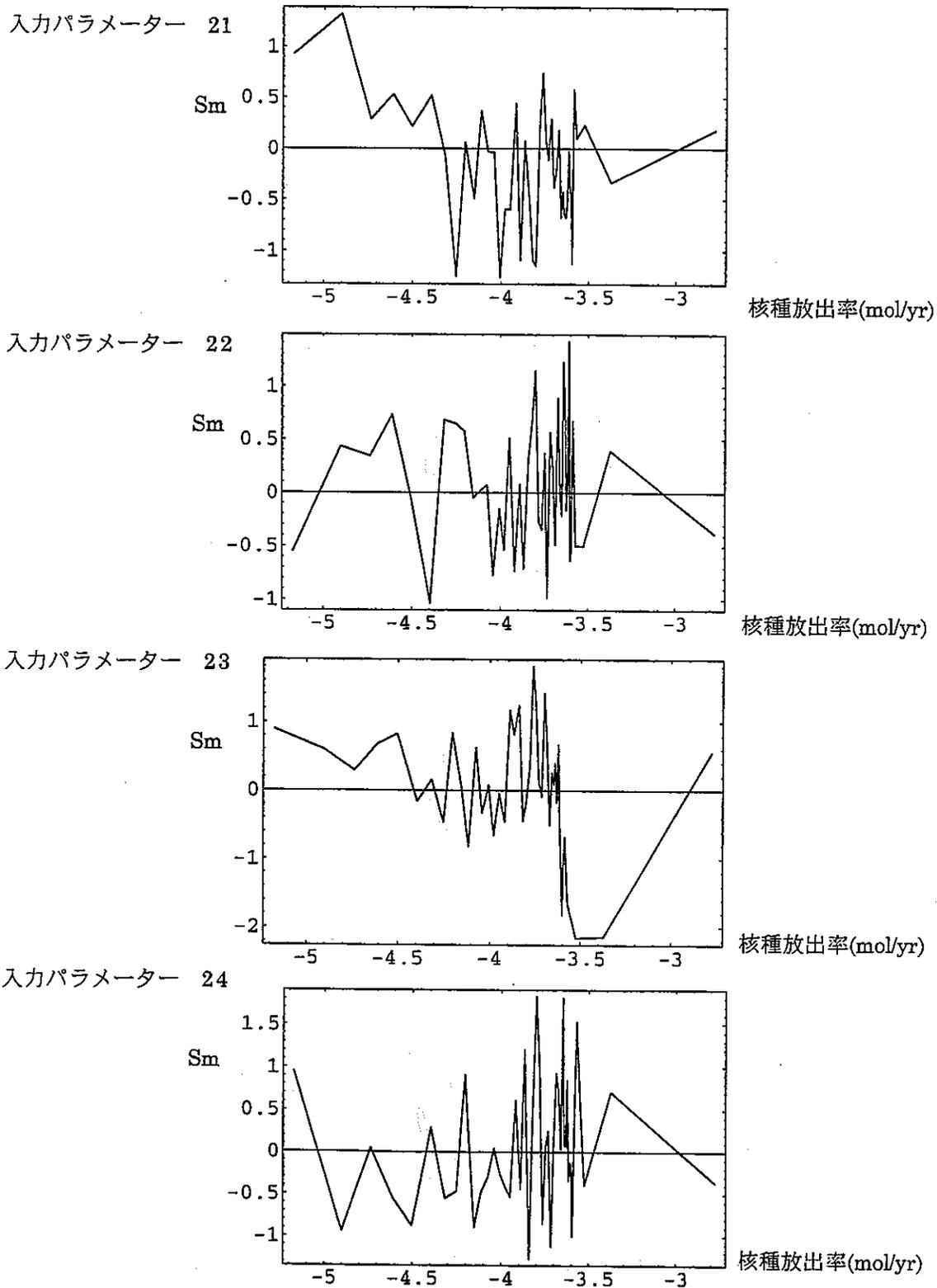


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (6) )

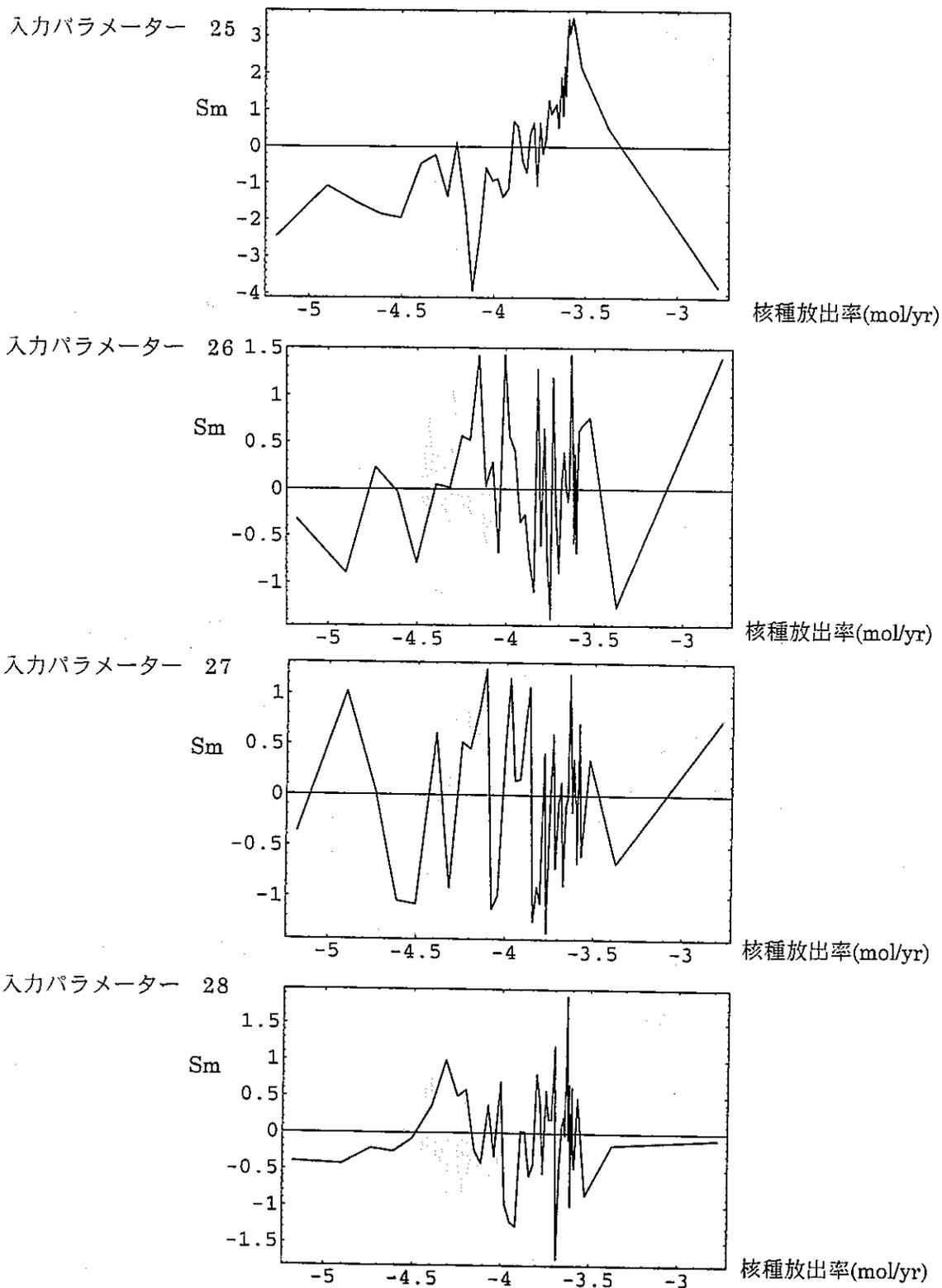


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (7) )

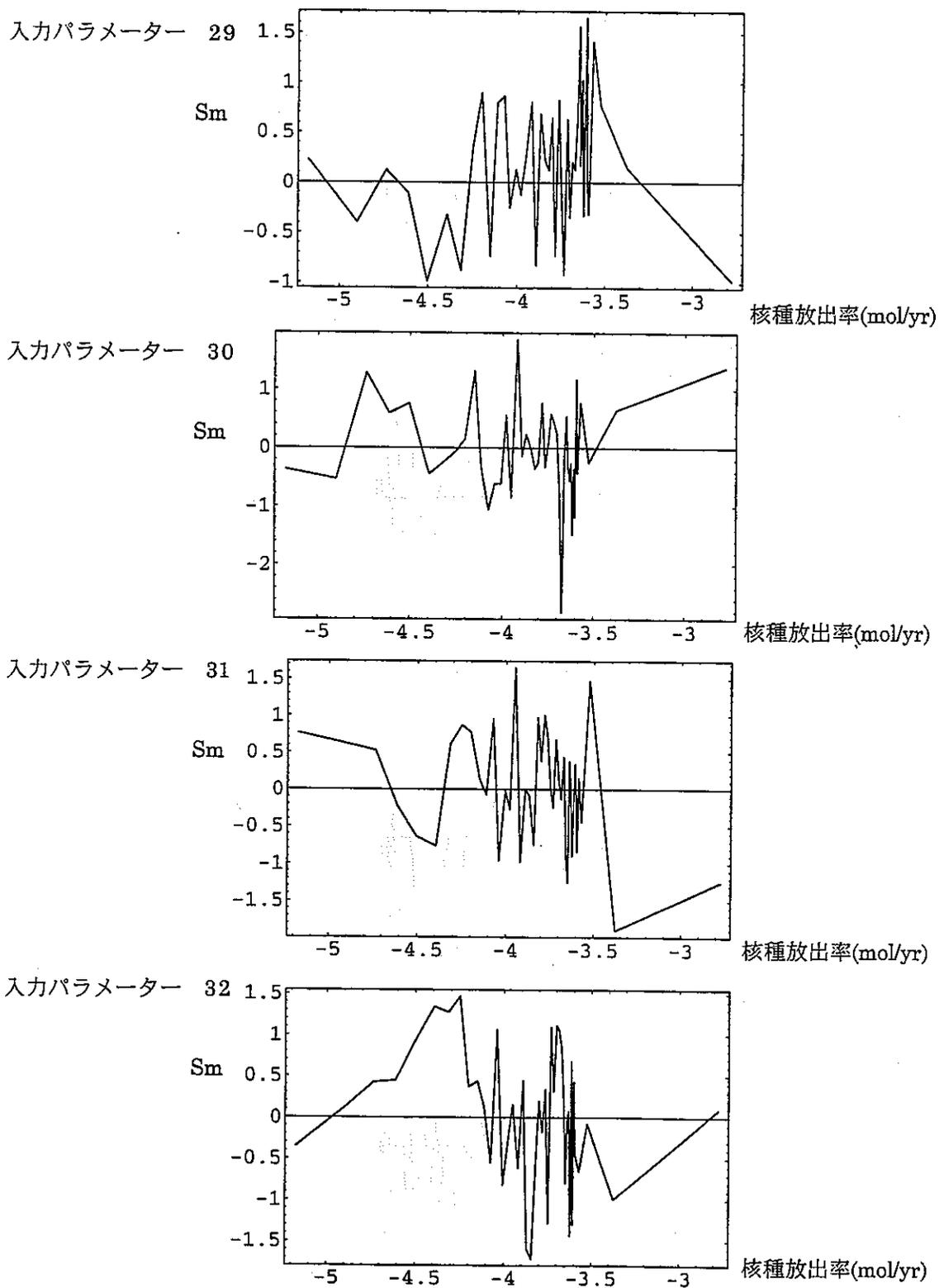


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (8) )

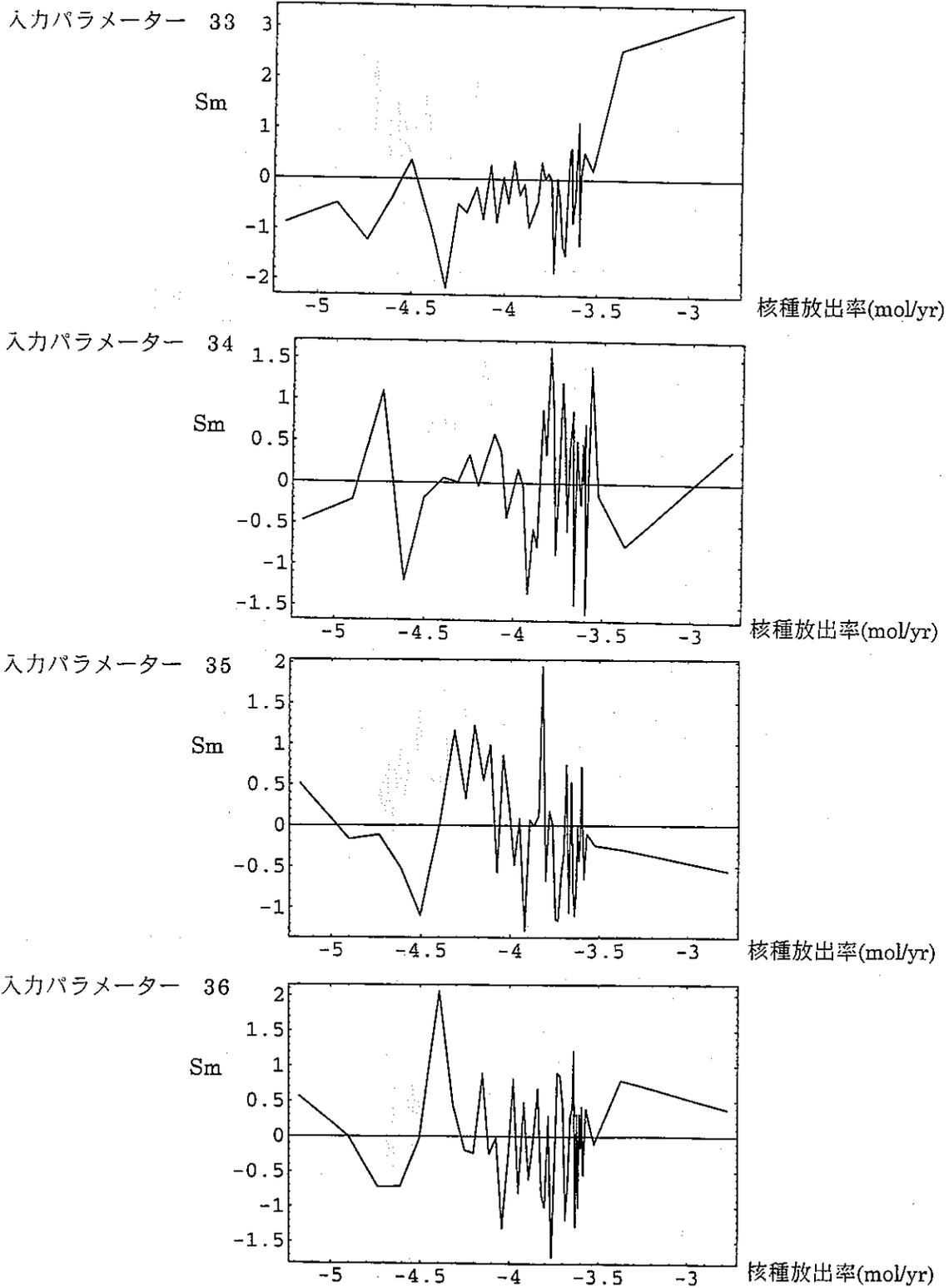


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (9) )

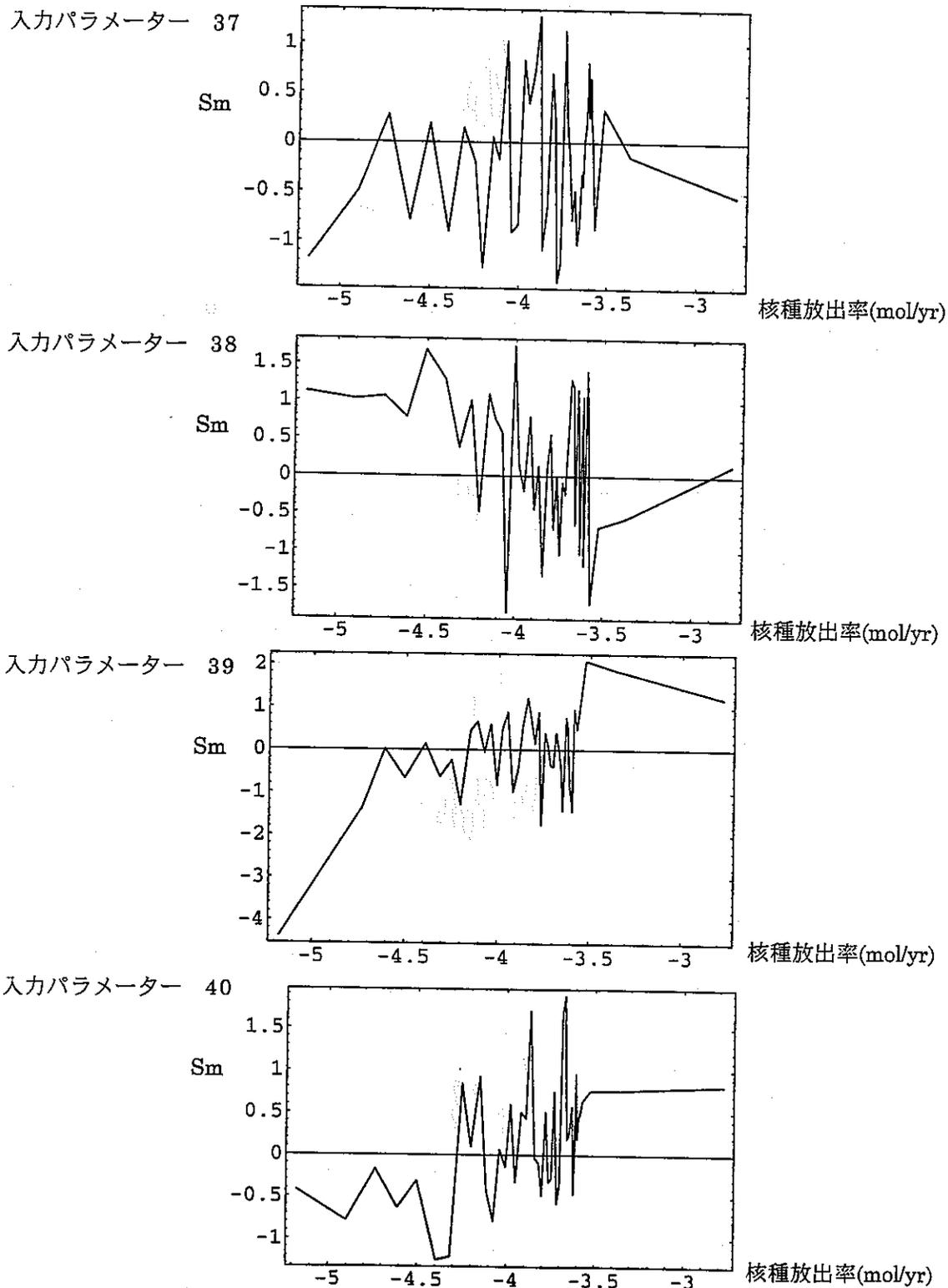


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (10) )

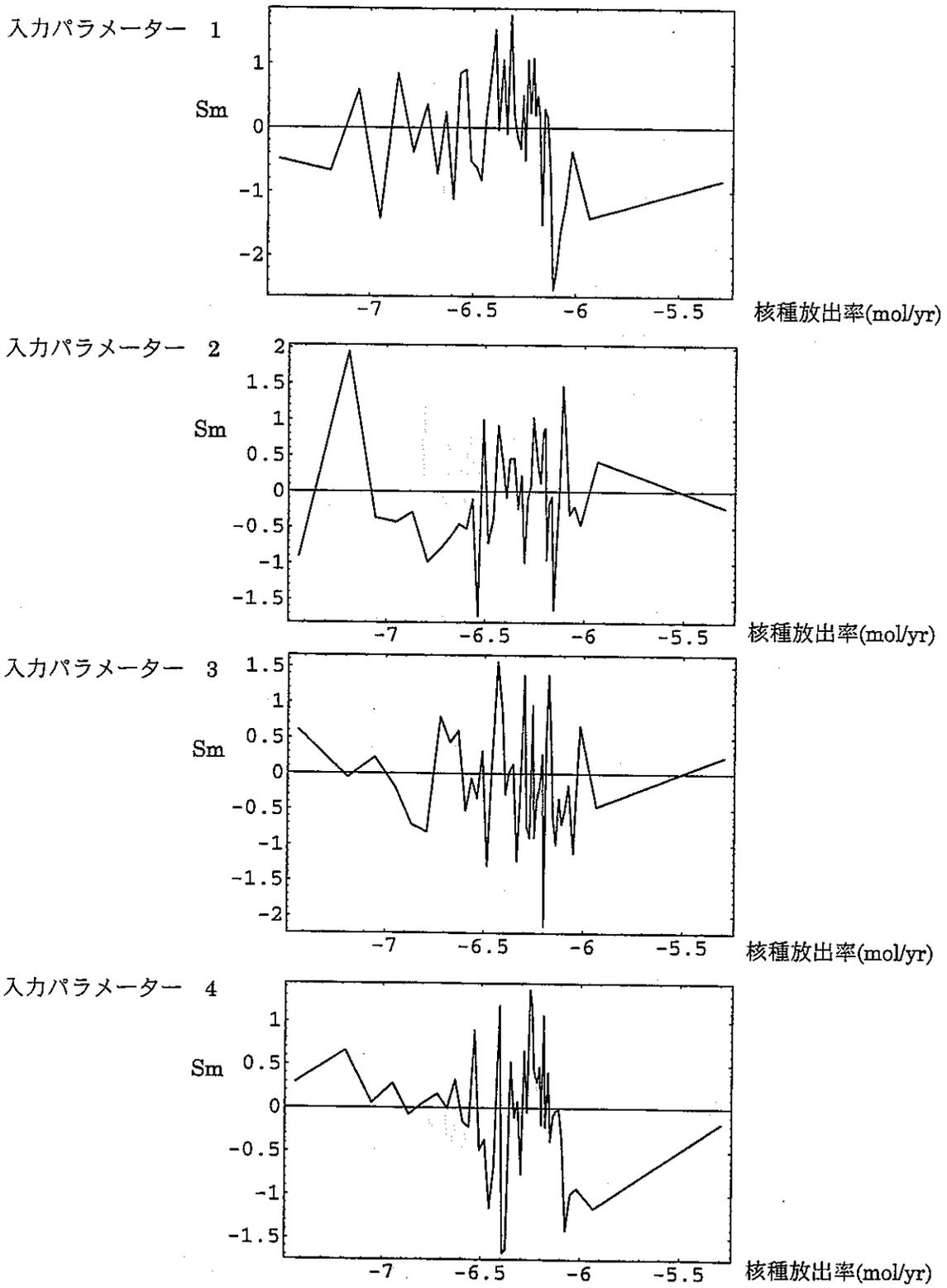


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (1) )

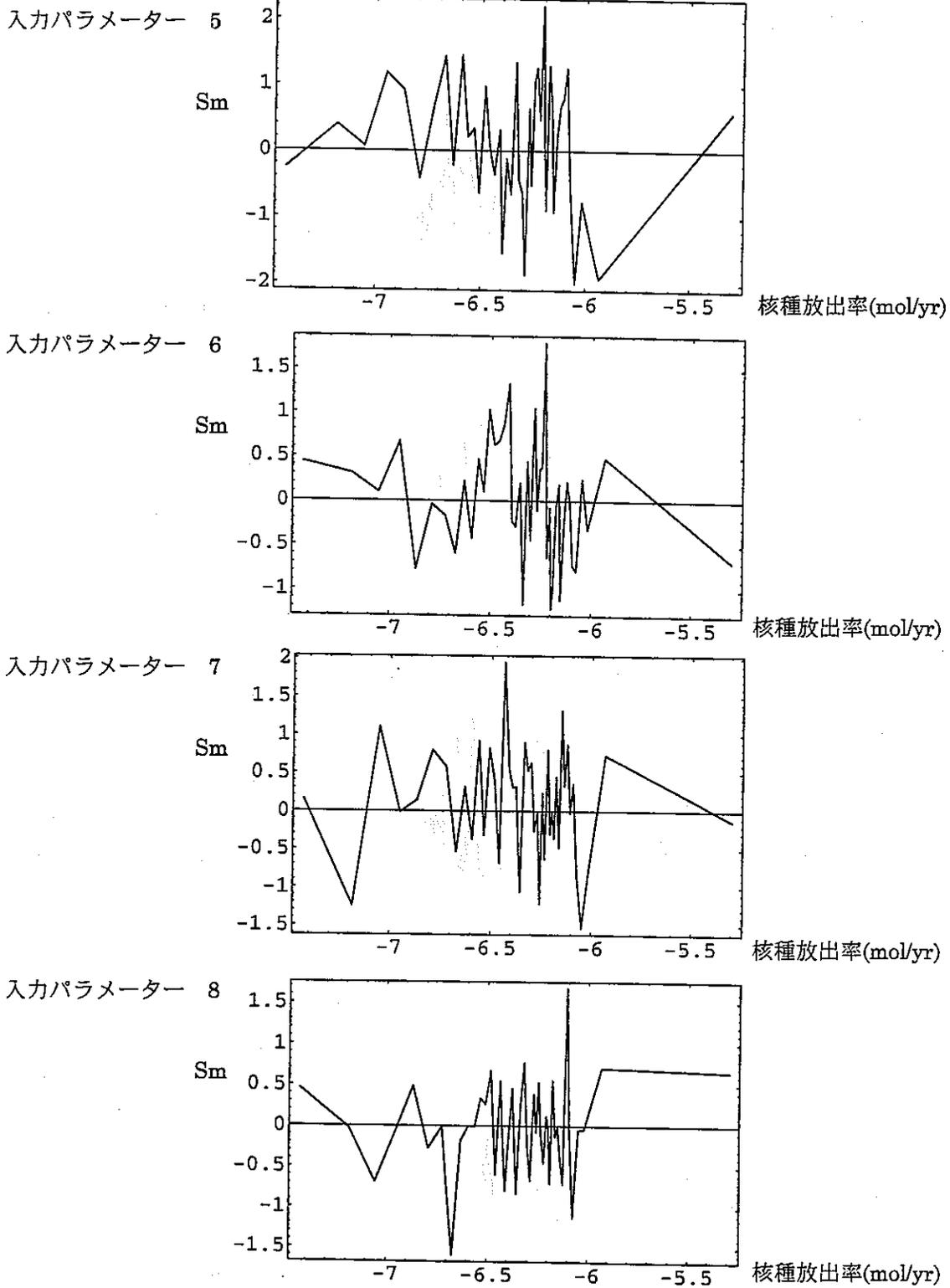
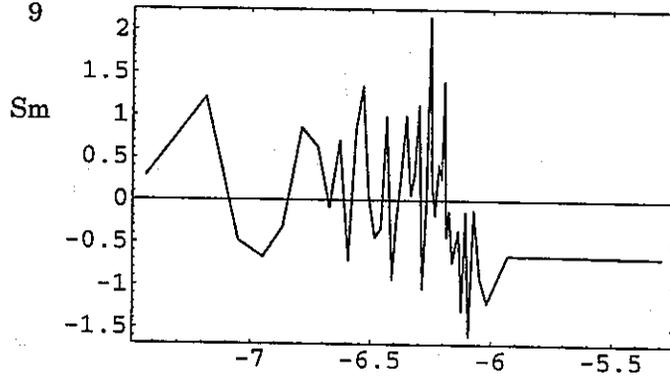


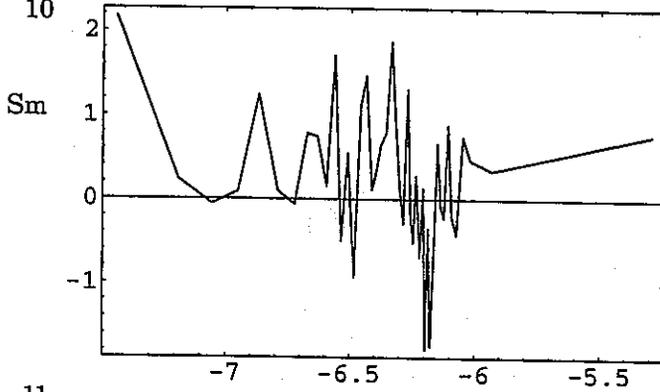
図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (2) )

入力パラメーター 9



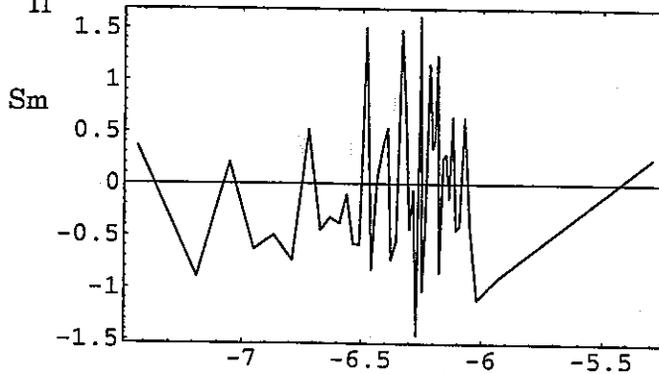
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 10



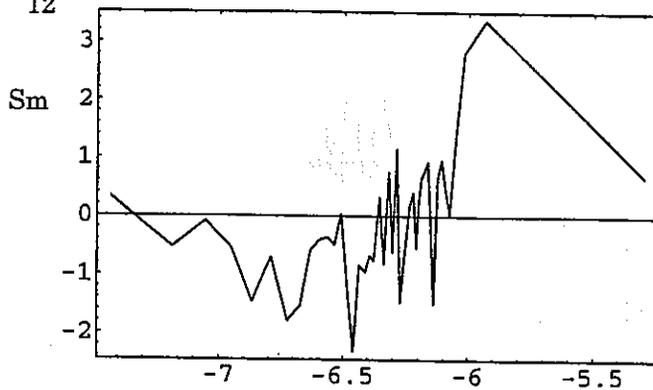
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 11



核種放出率(mol/yr)

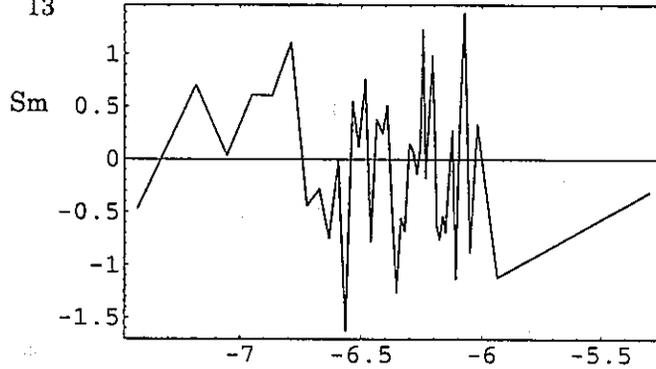
入力パラメーター 12



核種放出率(mol/yr)

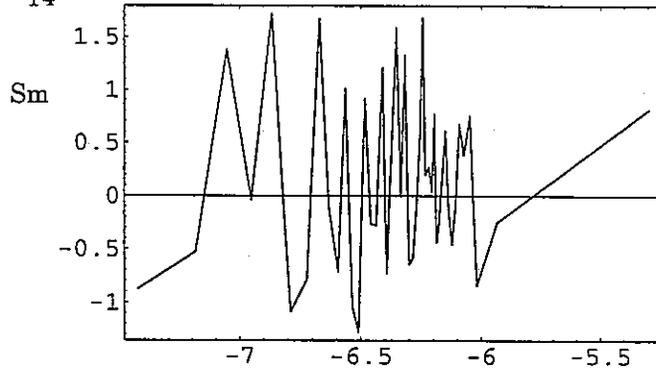
図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
(娘核種 (3) )

入力パラメーター 13



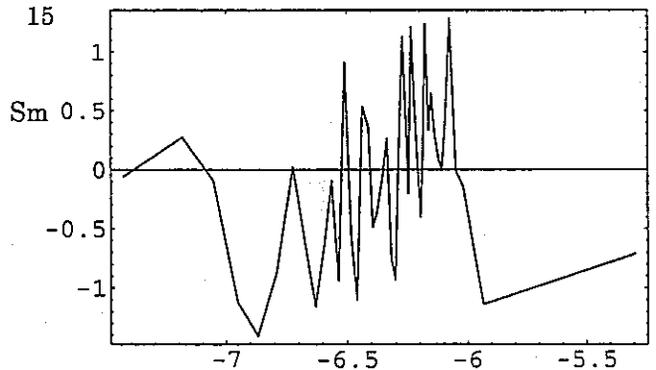
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 14



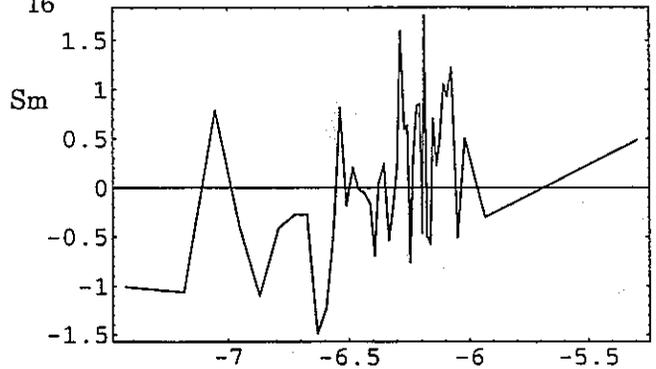
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 15



核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 16



核種放出率(mol/yr)

図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
娘核種 (4)

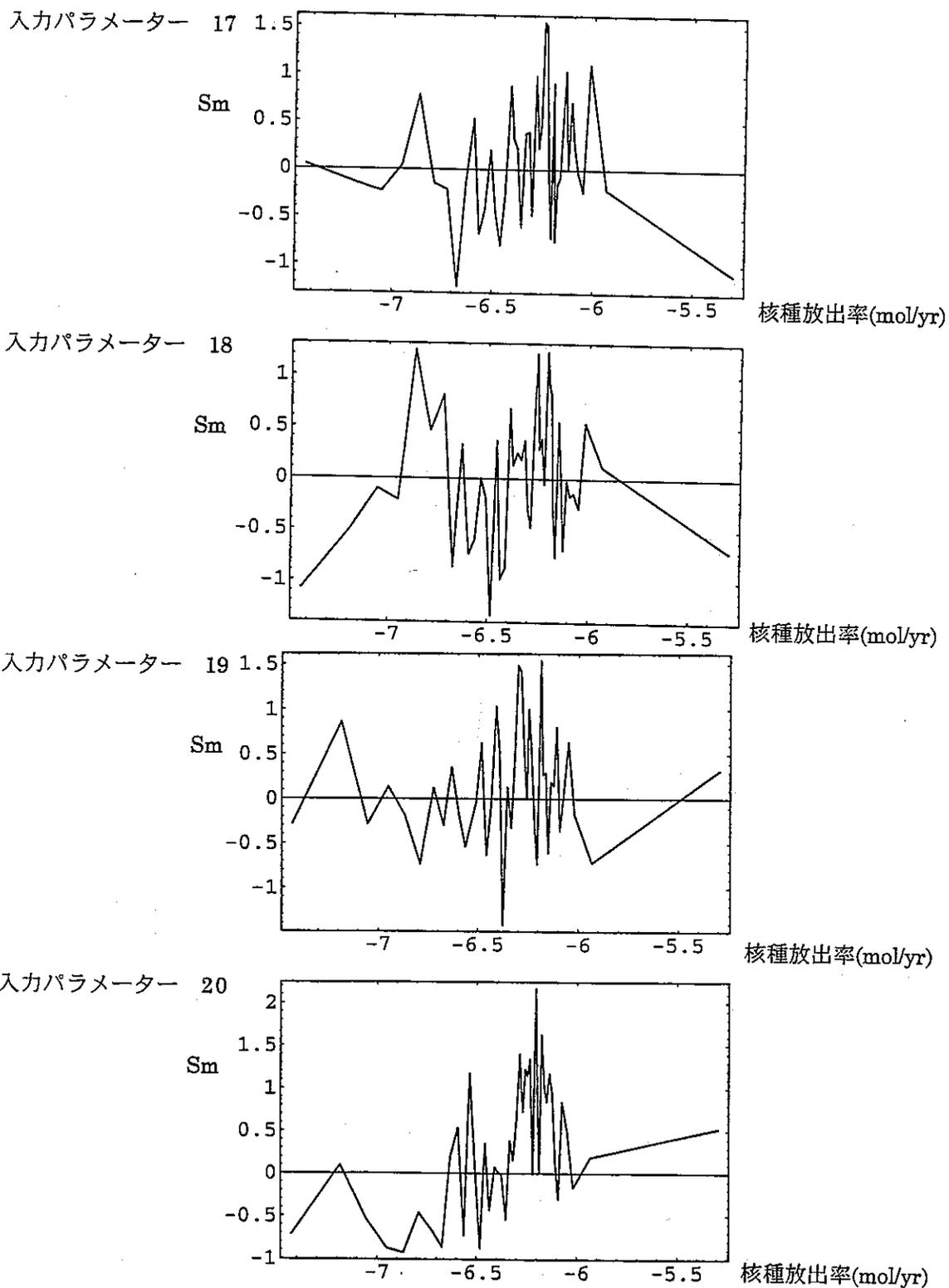


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (5) )

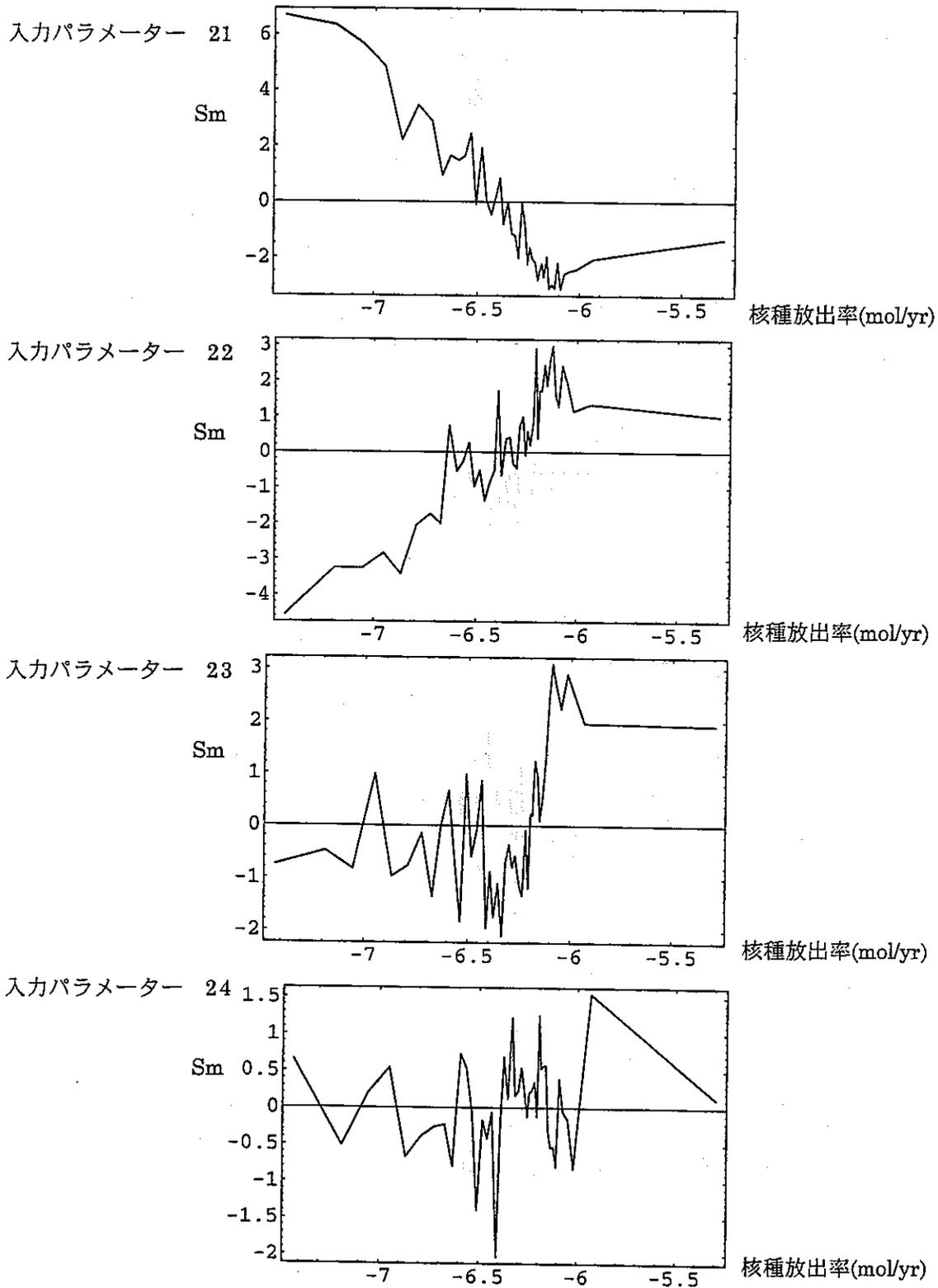


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (6) )

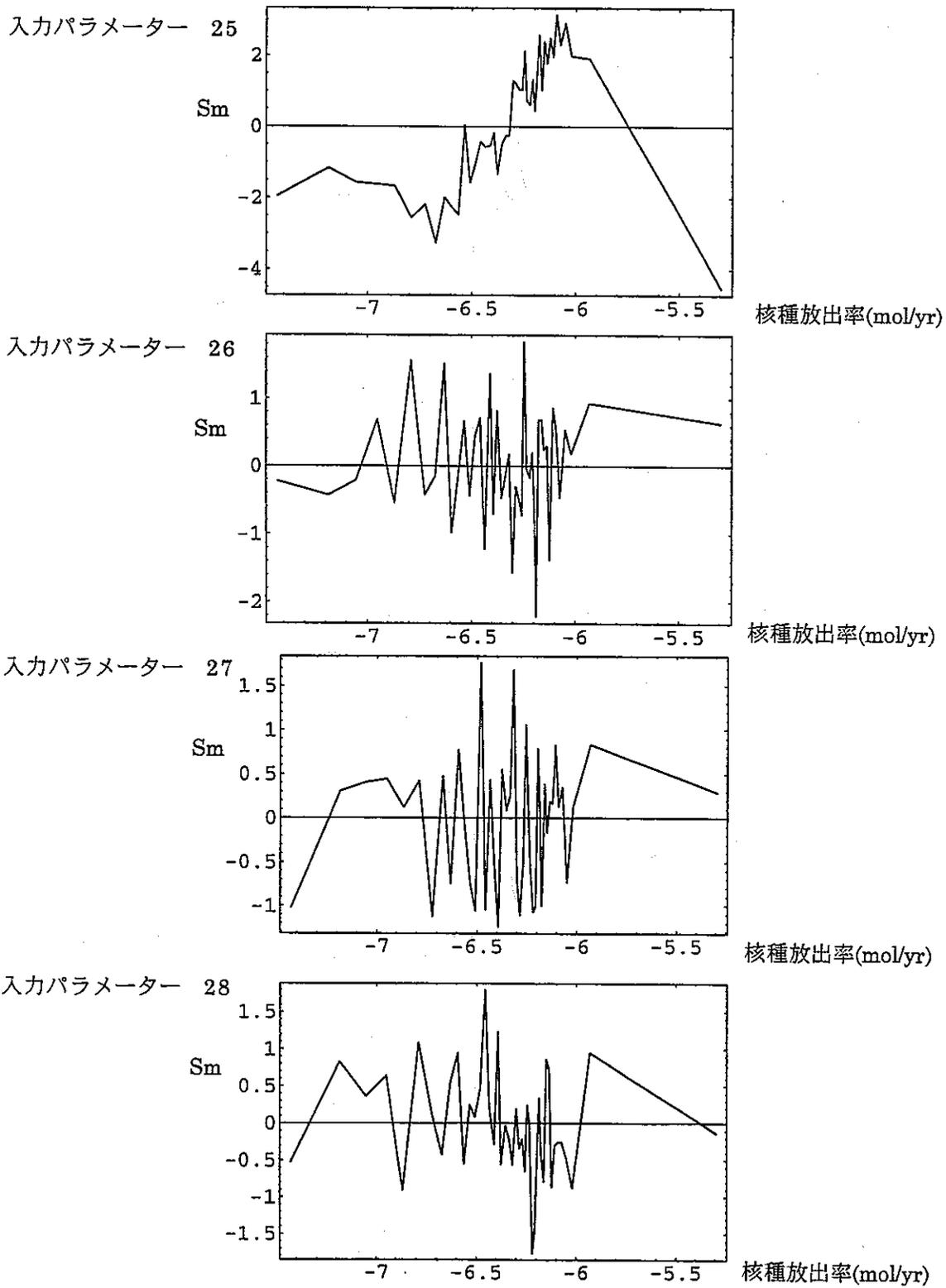


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (7) )

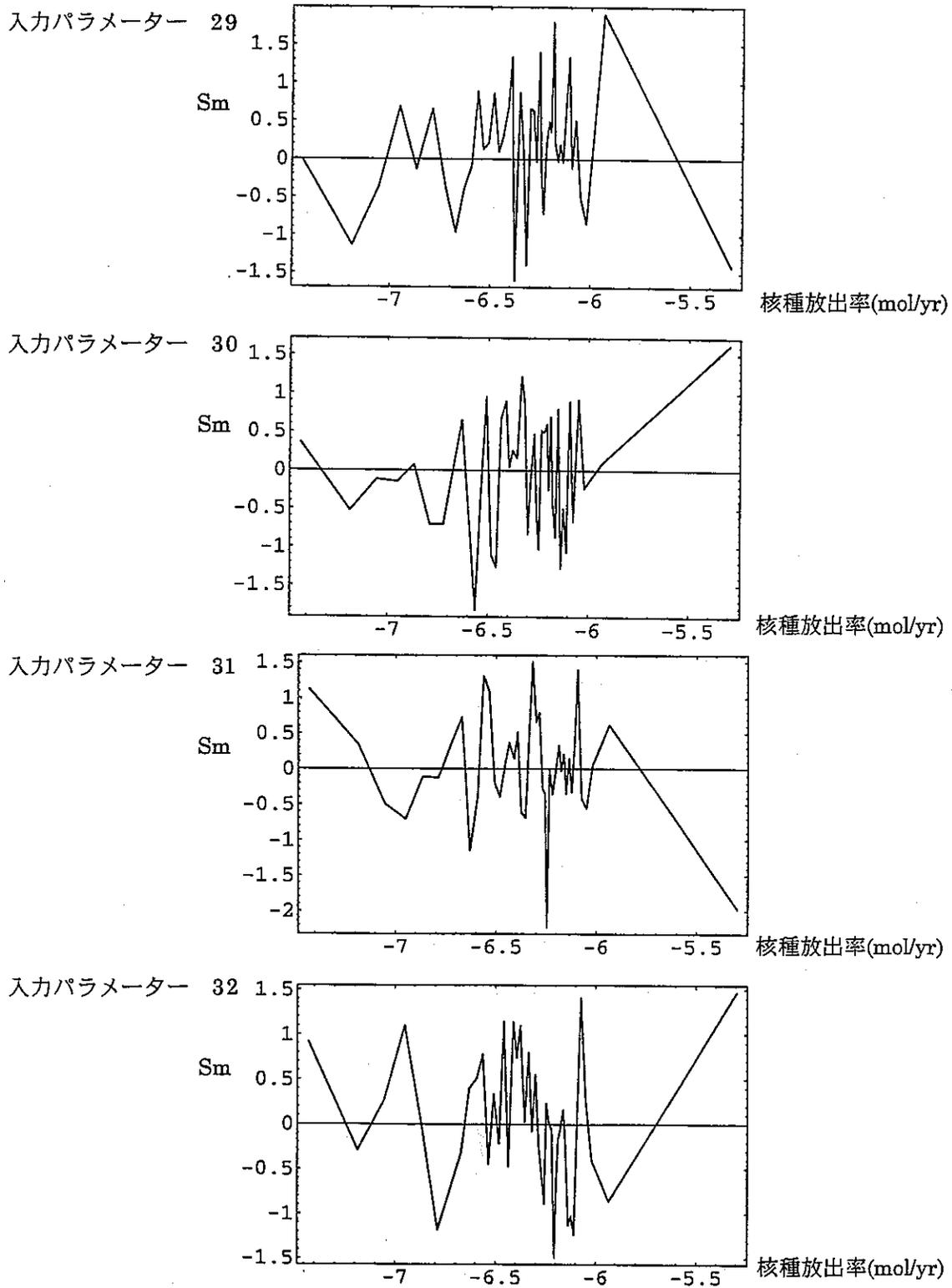


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (8) )

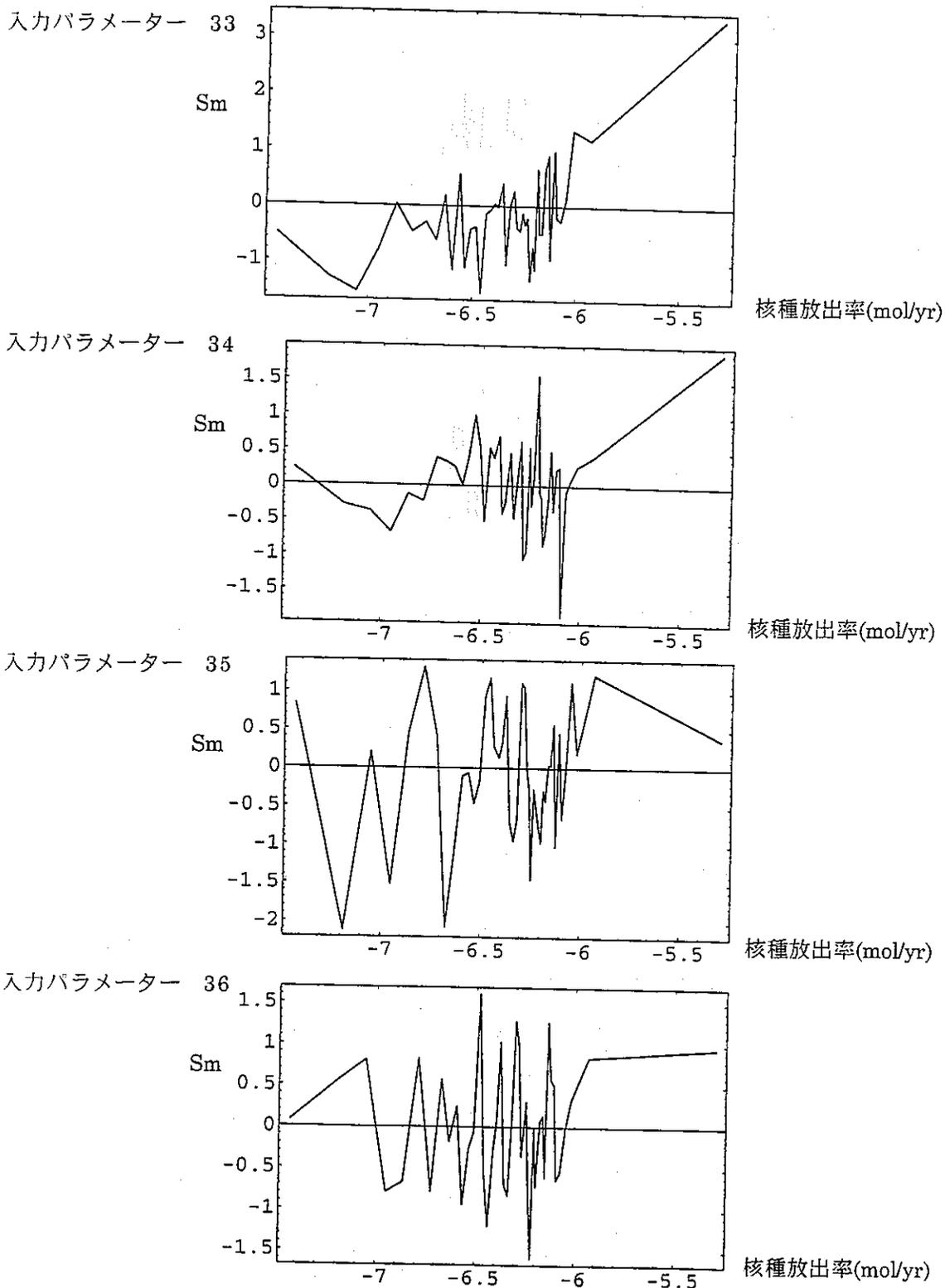


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (9) )

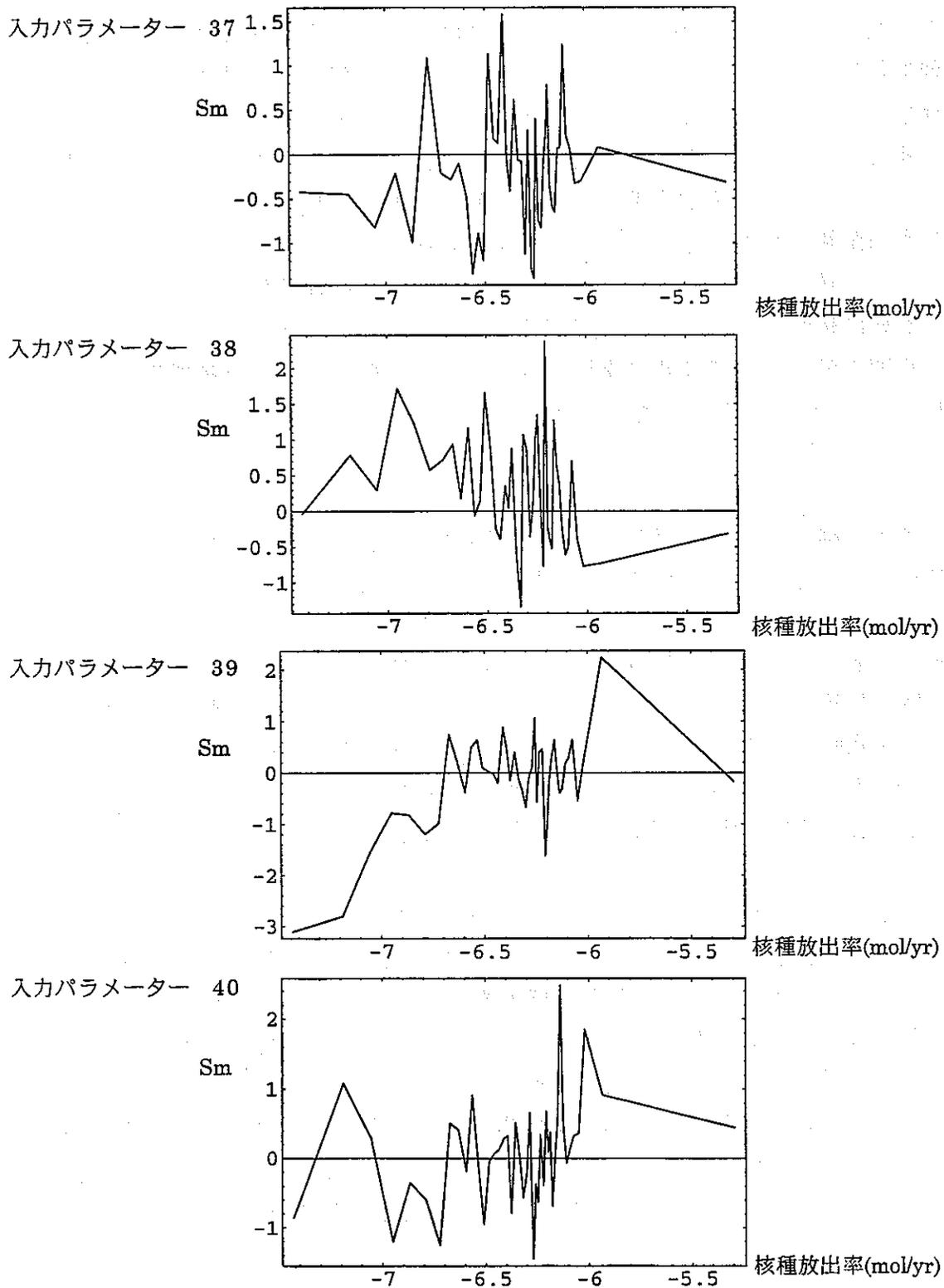


図 4.6.9 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (10) )

また、表 4.6.6 にはこれらの化学的な入力パラメータ群に加えてゆるみ域中の水理条件に関するものが含まれており、特にガラス浸出率律速の境界線を上回る様なケース群においては、ゆるみ域内に至った沈澱フロントが比較的速い流れと組み合わされることによって「洗い流される」状態にあることを示唆している。ここで、更に説明を要する点は、動水勾配最大値の傾向が逆転し、つまり動水勾配最大値が小さい方が最大放出率が高くなっている点である。このことは、入力値のサンプリングにおいて、強い流れの継続期間とその最大動水勾配とが負に相関していたこと（4章参照）によって説明される。つまり、与えられた相関の制約の下では真に重要なものはむしろ強い流れの継続期間が一定以上長いことであり、動水勾配最大値はこのパラメータの傾向を逆転して表しているに過ぎない。

既に述べた様に（4.6.1 節冒頭）、ここでもまた、感度分析は、他のパラメータの数値の如何を問わず感度の大きい様な比較的少数の（グループ内では相互に相関を持つ）パラメータ群から、順次、感度を抽出していくという傾向が見られる。注意すべき点は、このことが、ここでは抽出されなかった他のパラメータ、特に核種の移行形態に関する上記以外のパラメータ群が重要ではないということを意味するものではないということである。上記の結果から言えることは、むしろ、これらのパラメータの感度がもしあるとすればそれは相互に依存しあったより複雑な構造を示しているということである。

図 4.6.10 は、各クラスタにおけるそれぞれの入力パラメータの感度 (Jacobian 行列) をプロットしたものである。表 4.6.6 に挙げた各入力パラメータは、4 個のクラスタのいずれにおいても重要な感度を示していることが明らかである。また、クラスタリングの過程において、ガラス浸出率律速に対応する境界線を上回るケース群のほとんどは有意な大きさのクラスタからふるい落とされているが、クラスタ 1 には Np-237 について境界線を越えたケースのうちのいくつかが含まれている。また、このクラスタにおいては表 4.6.6 に示したパラメータ群に加えて以下のものの感度が顕在化していることが特徴である。

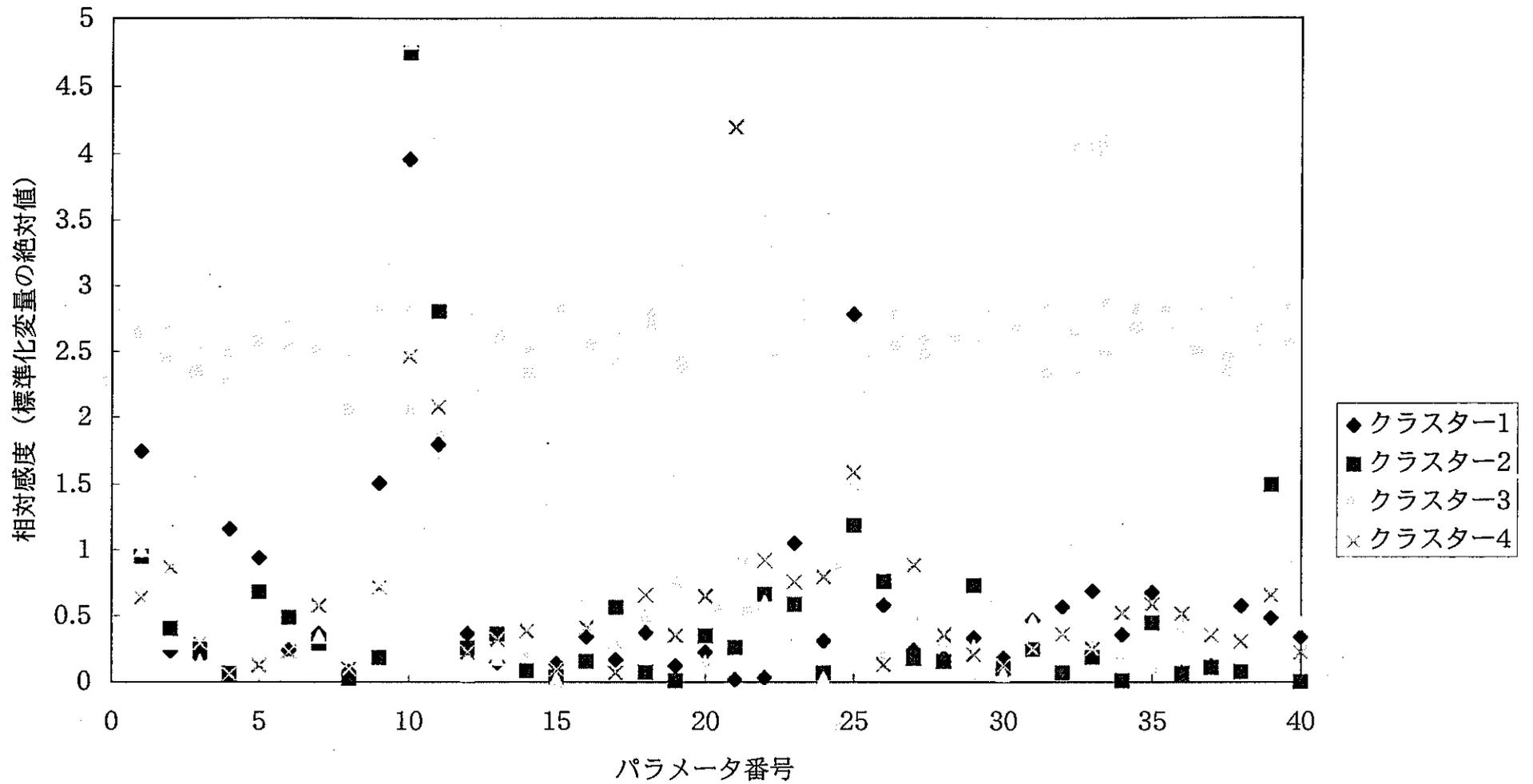


図4.6.10 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(リファレンスケース近傍の第二次サブリング : Np237)

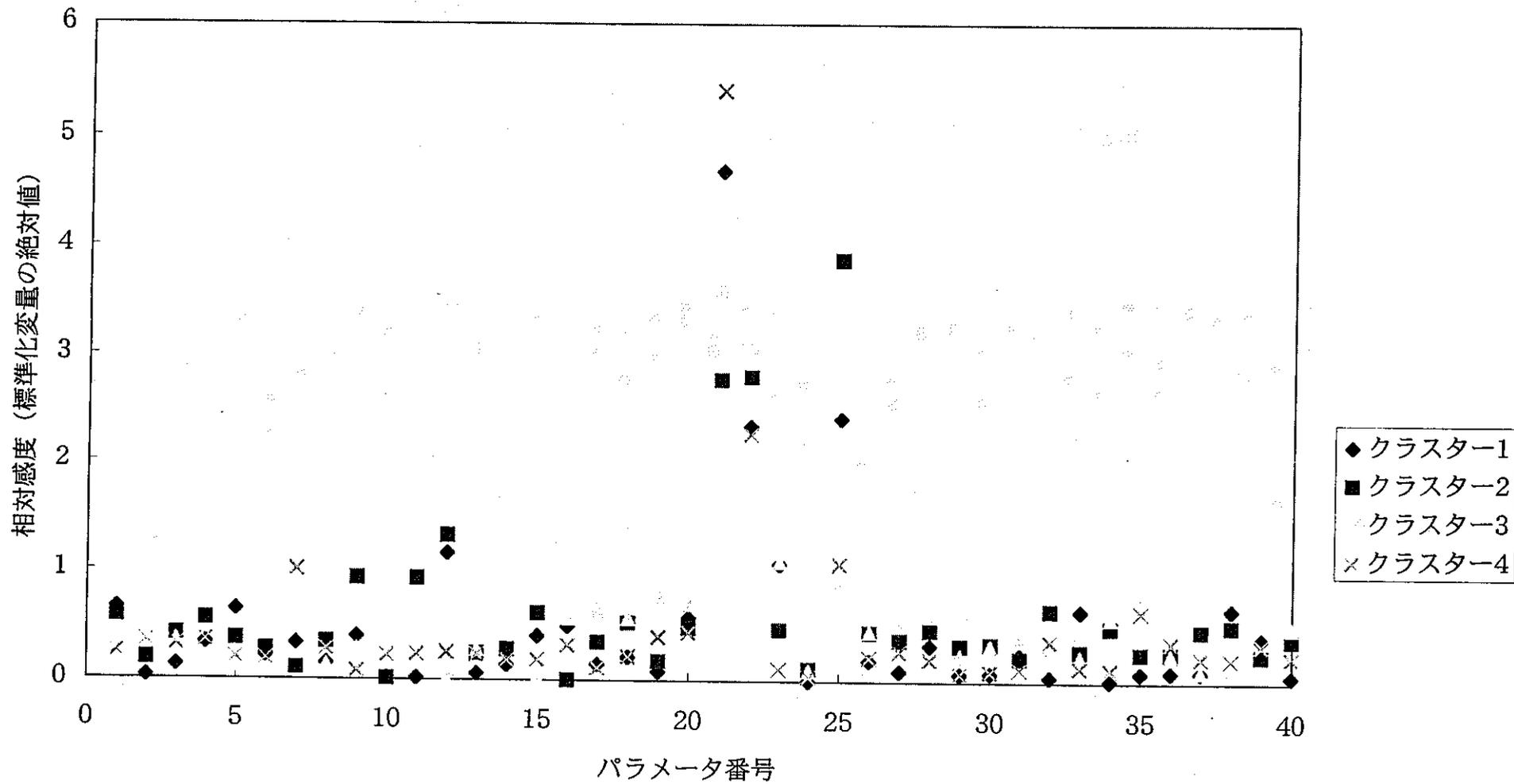


図4.6.10 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(リファレンスケース近傍の第二次サブリング : Th229)

表 4.6.7 Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍の第二次  
 サンプルング中クラスター1において付加的に重要となるパラメータ

4	親核種の第一節点濃度 (拡散)
5	親核種の第二節点濃度 (拡散)
9	地球化学異常での節点のシフト (親核種)

他のパラメータ群についての感度を見るためには、表 4.6.6 に挙げたパラメータ値を固定した第三次のサンプルングを行うことが必要と考えられる。

## (2) Am-243 及び Pu-239

Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍の局部サンプルングによる統計的解析結果 (2600 ケース) を図 4.6.11 のスキッタープロットに示す。ここでは、親及び娘の放出率が共に高い右上の領域から左下の領域にかけての直線状の構造が明瞭に見られる。これは、Am-243 及び Pu-239 のそれぞれが経年的に減衰していく際の同位対比に対応したものである (この場合には必ずしも放射平衡ではない)。

図 4.6.12 は、全域的解析の場合と同じ方法で算出した対数スケールでのクラスタ分析の結果を、クラスタ分割数と平均二乗残差 MSE の関係として整理したものである。クラスタ数 5、10 及び 16 の位置で MSE が顕著に低下していることがわかる。図 4.6.13 は、全クラスタ数 10 の場合の有意な (ケース数が 50 以上の) 6 個のクラスタをまとめたものである。

全域的な解析と同様の方法で行った Moving Band 解析の結果を図 4.6.14 にまとめる。非零のトレンドを有する入力パラメータは表 4.6.8 に示す通りである。

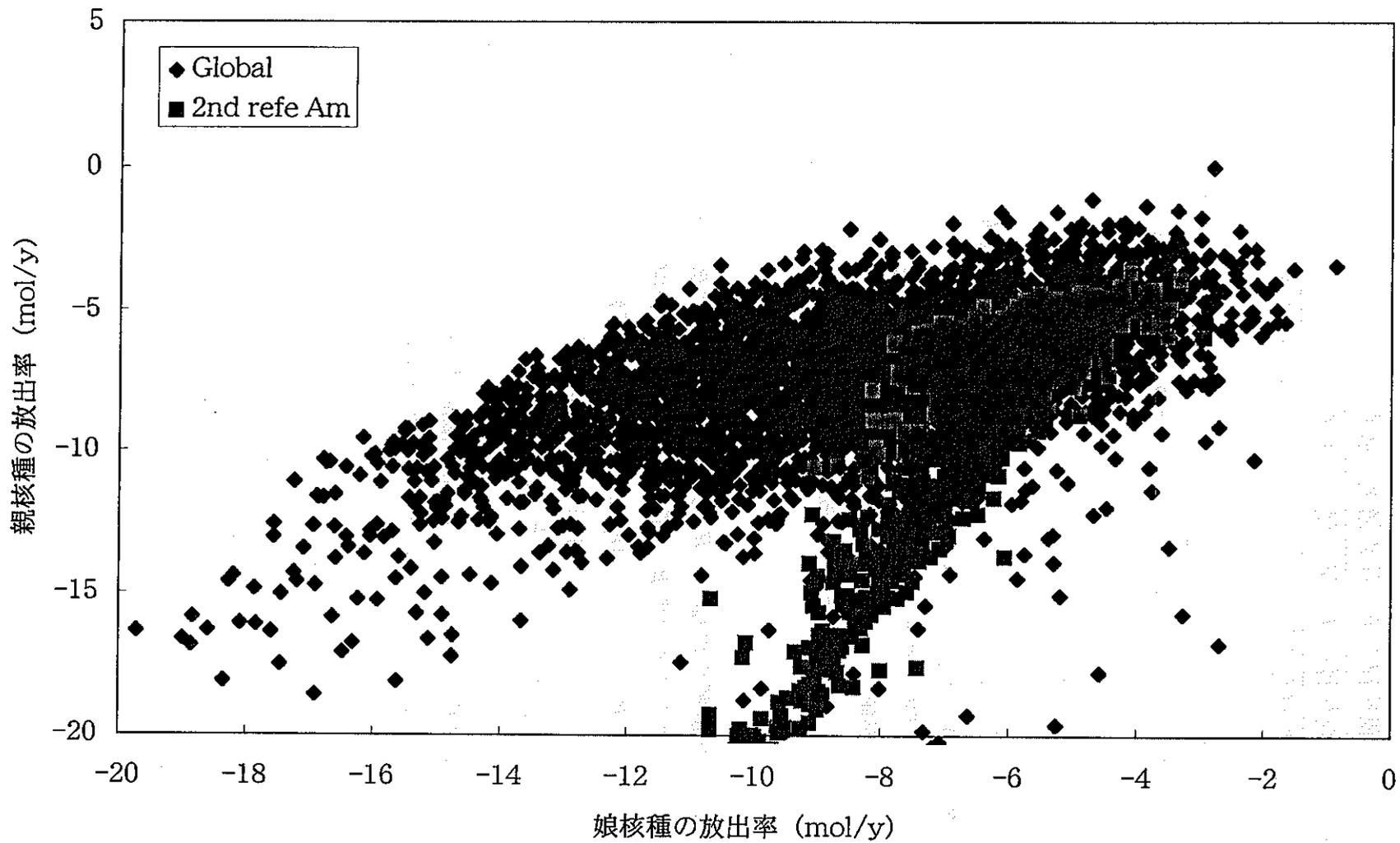


図4.6.11 (1) リファレンスケース近傍の第2次サンプリングによる統計的解析結果  
(Am243, Pu239 : 2600ケース)

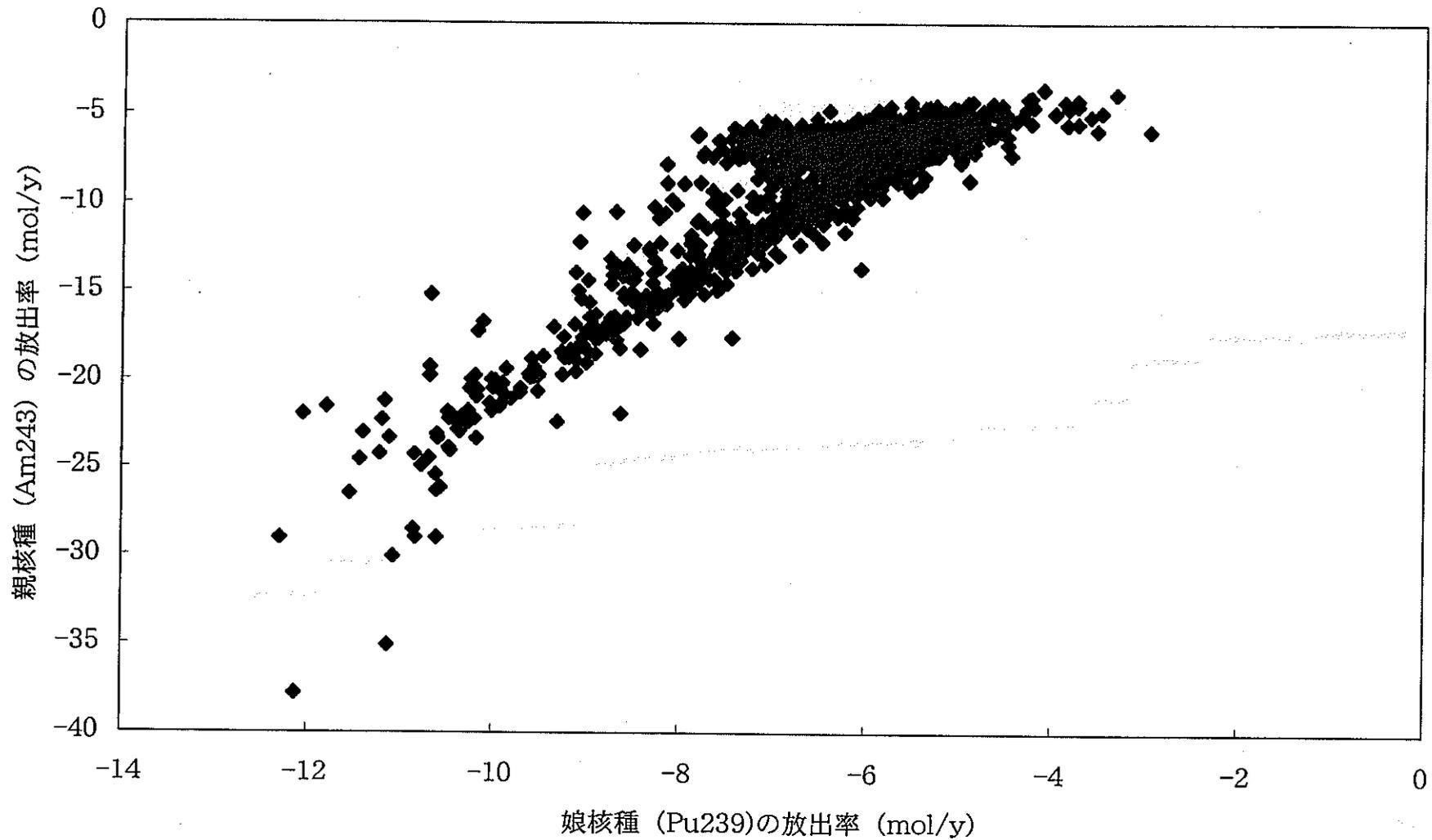


図4.6.11 (2) リファレンスケース近傍の第二次サンプリングによる統計的解析結果  
(Am243,Pu239 : 2600ケース)

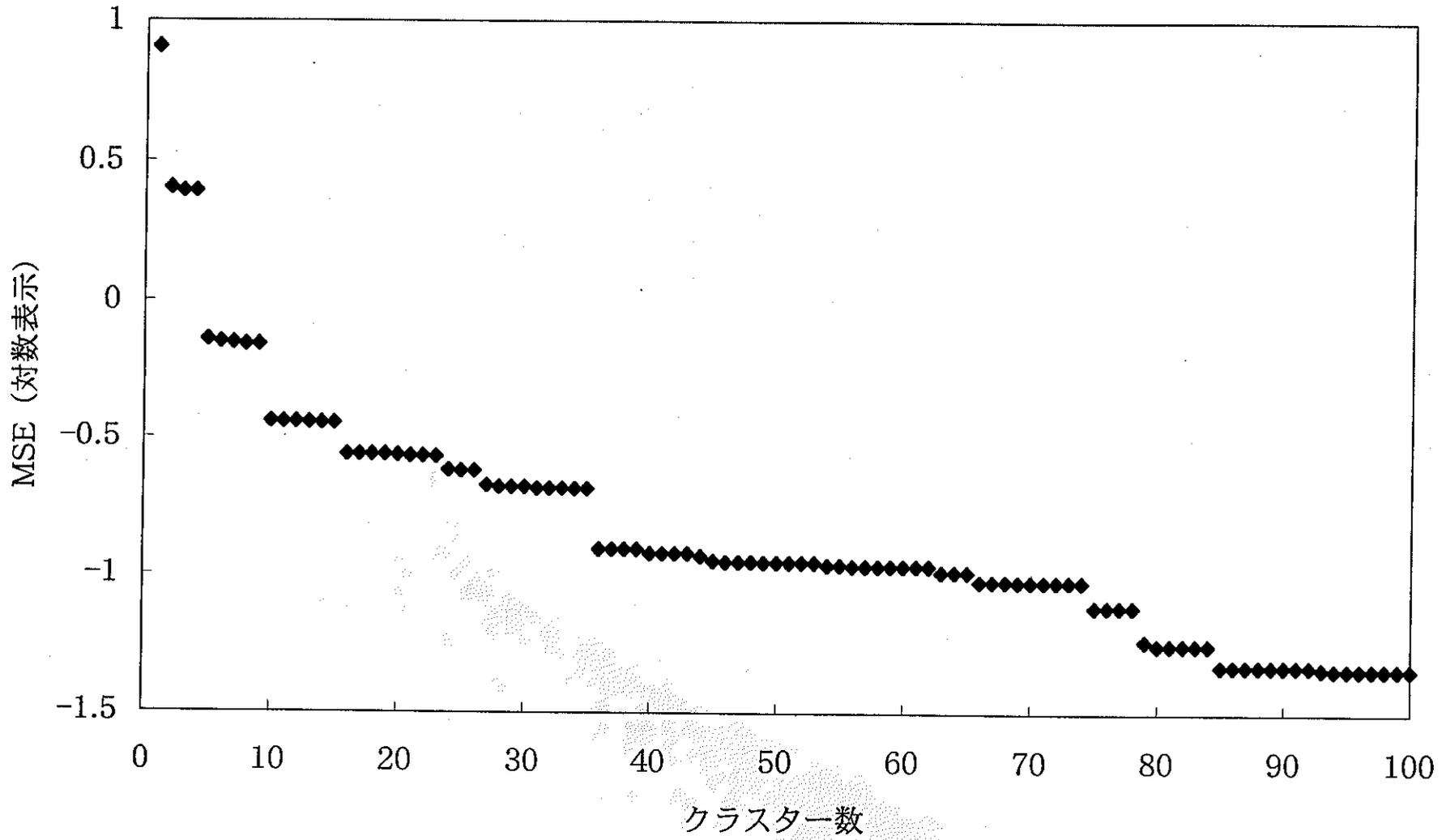


図4.6.12 リファレンスケース近傍の第二次サブリングについての  
クラスター数と平均二乗残差の関係 (Am243,Pu239)

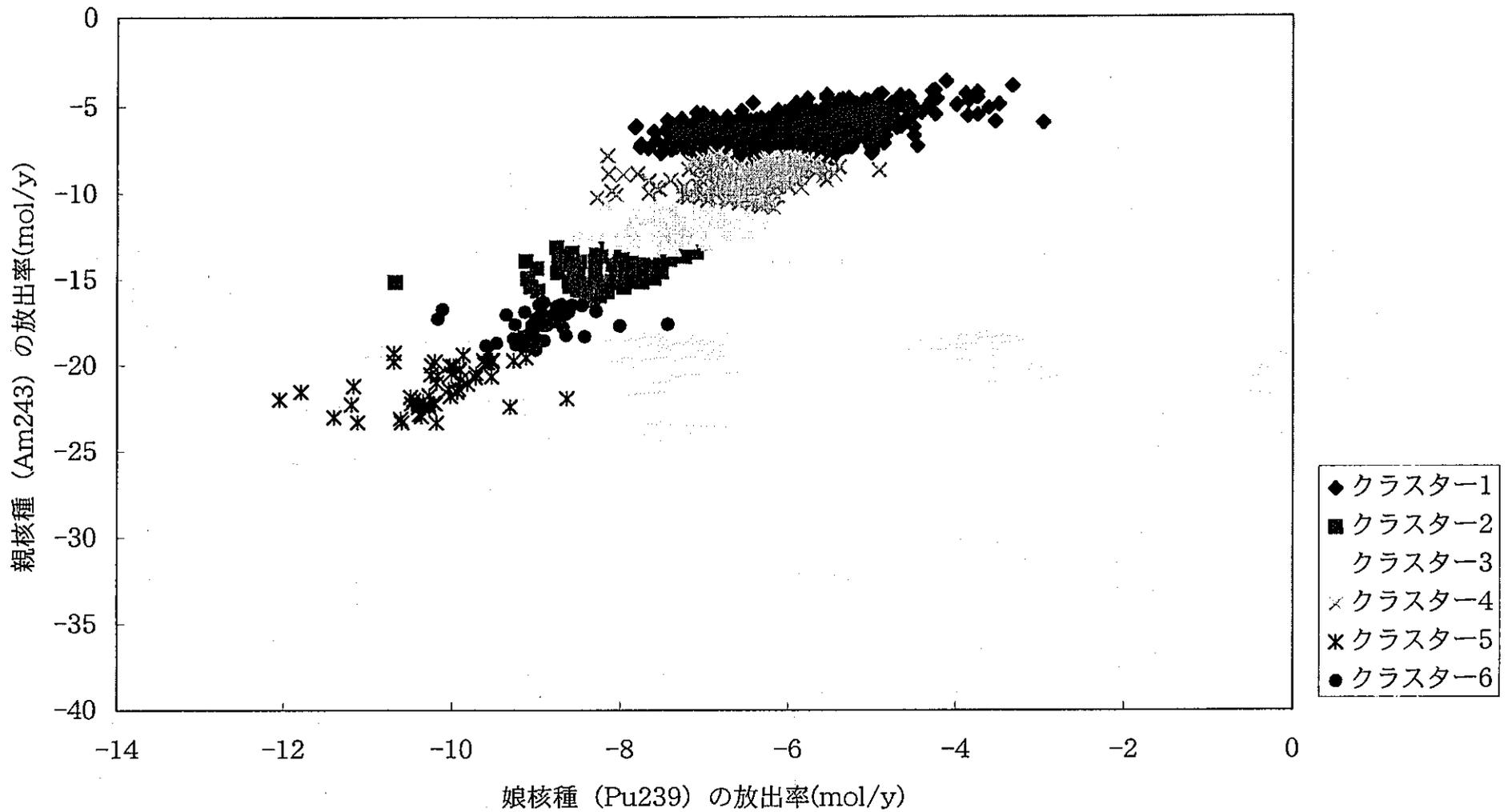


図4.6.13 リファレンスケース近傍の第二次サンプリング についての  
クラスタ分析結果 (Am243,Pu239)

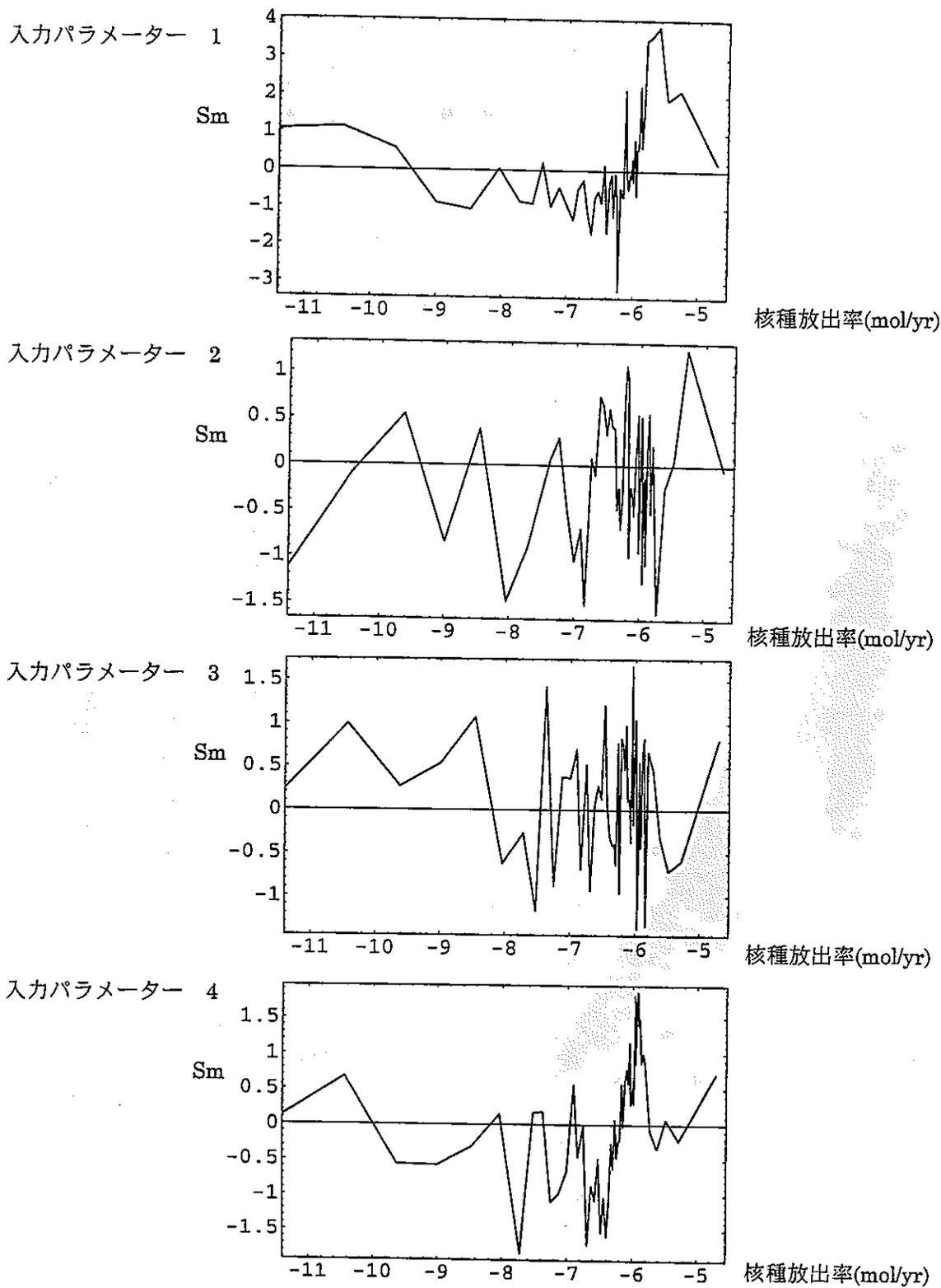


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (1))

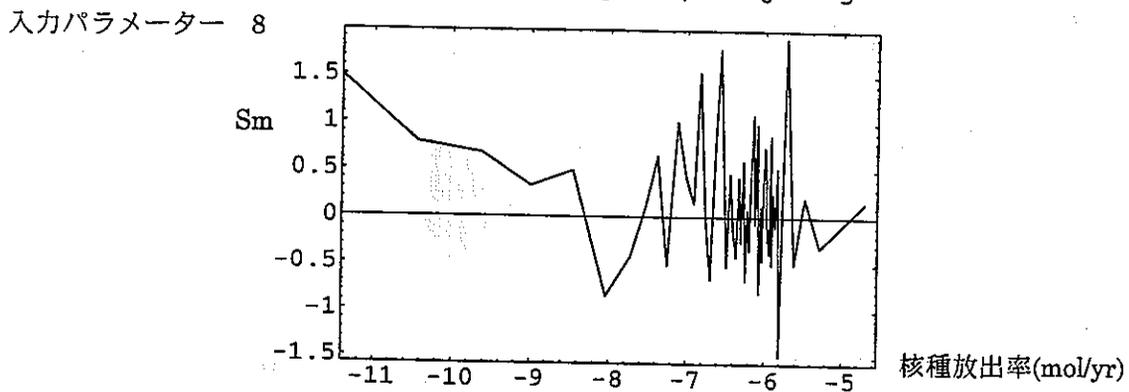
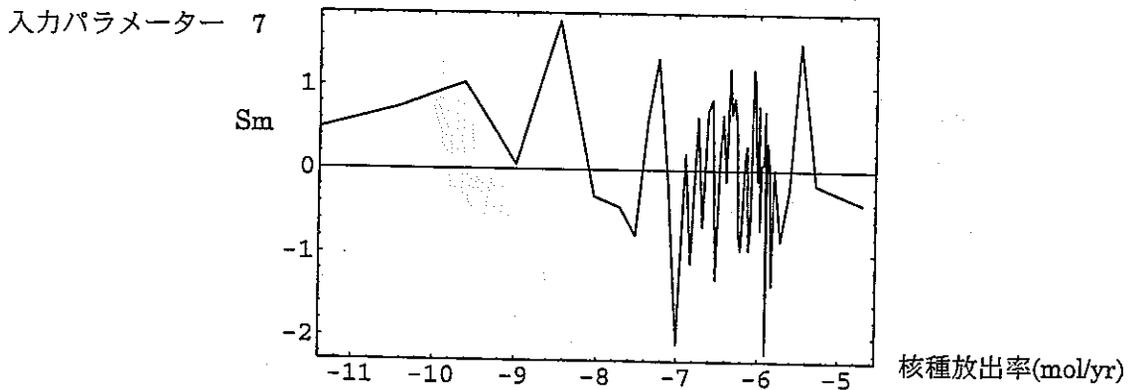
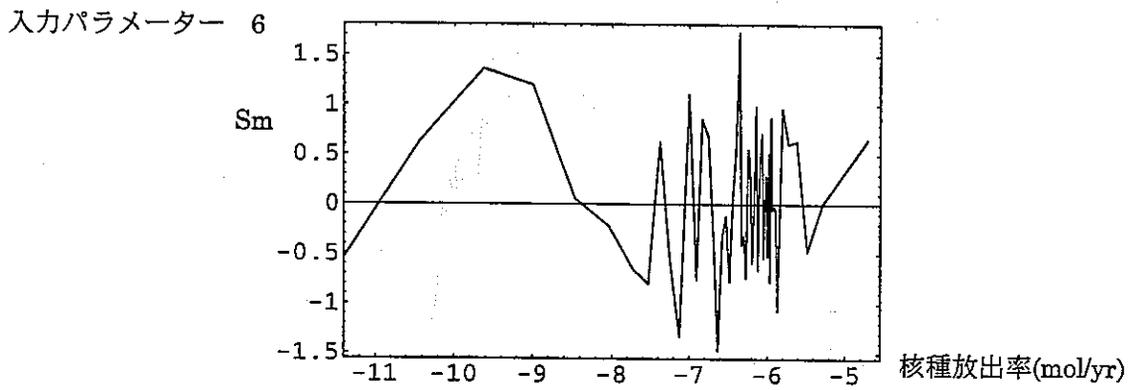
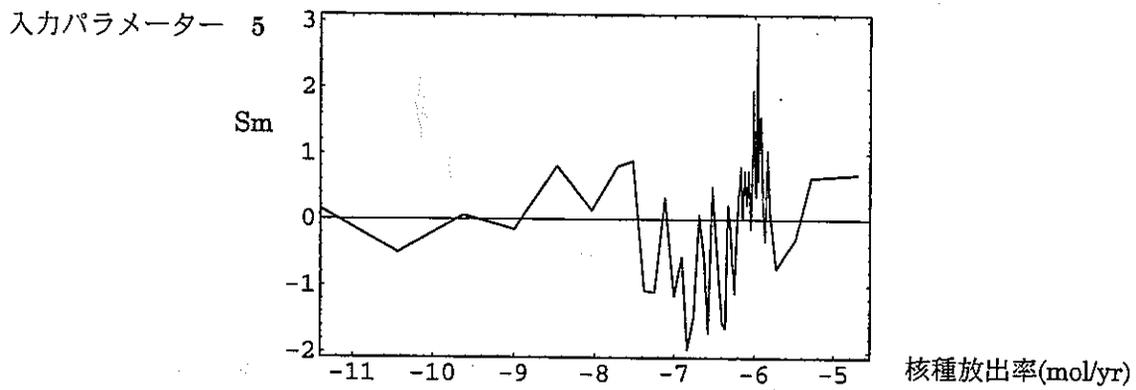


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (2) )

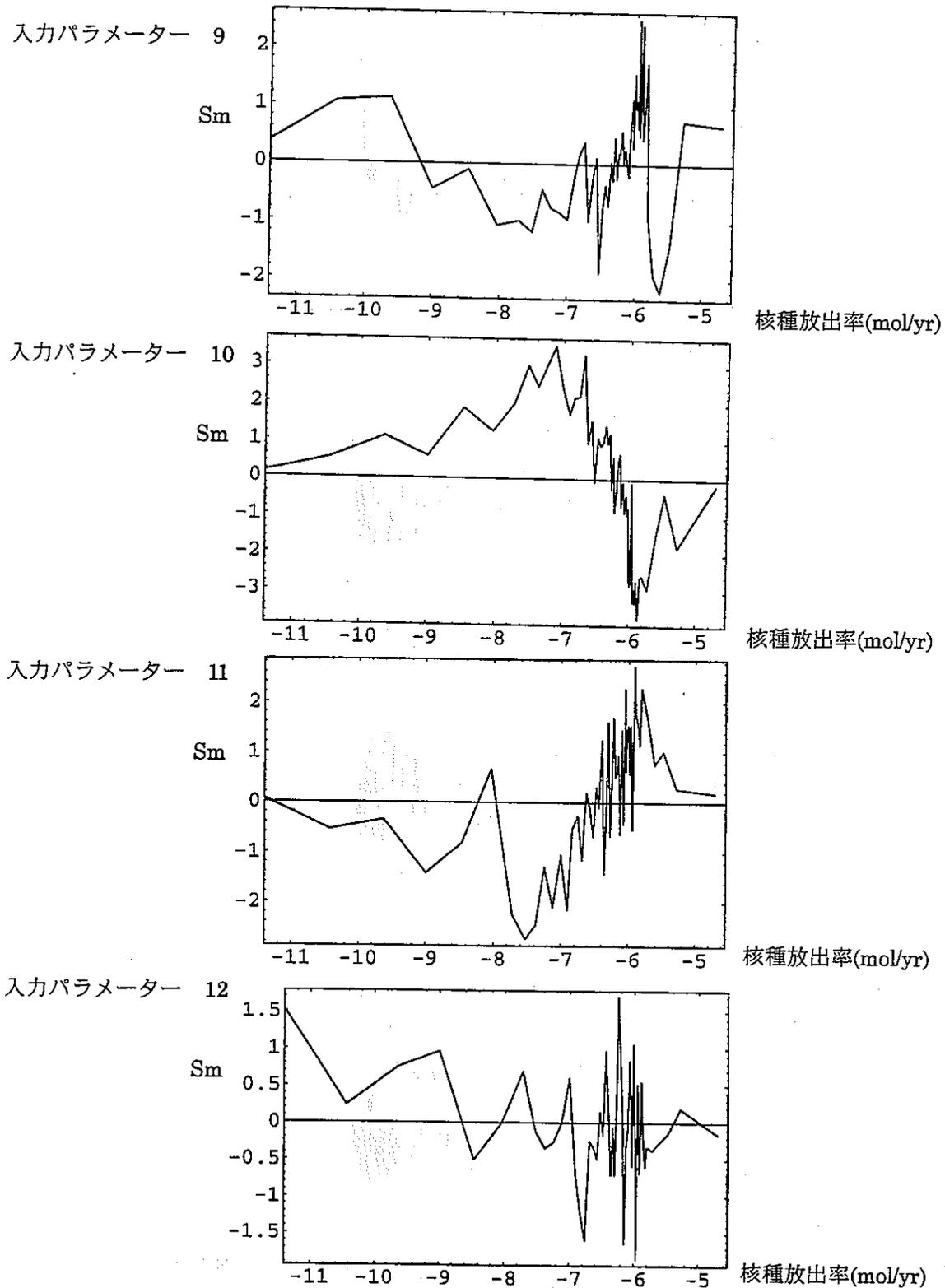


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (3) )

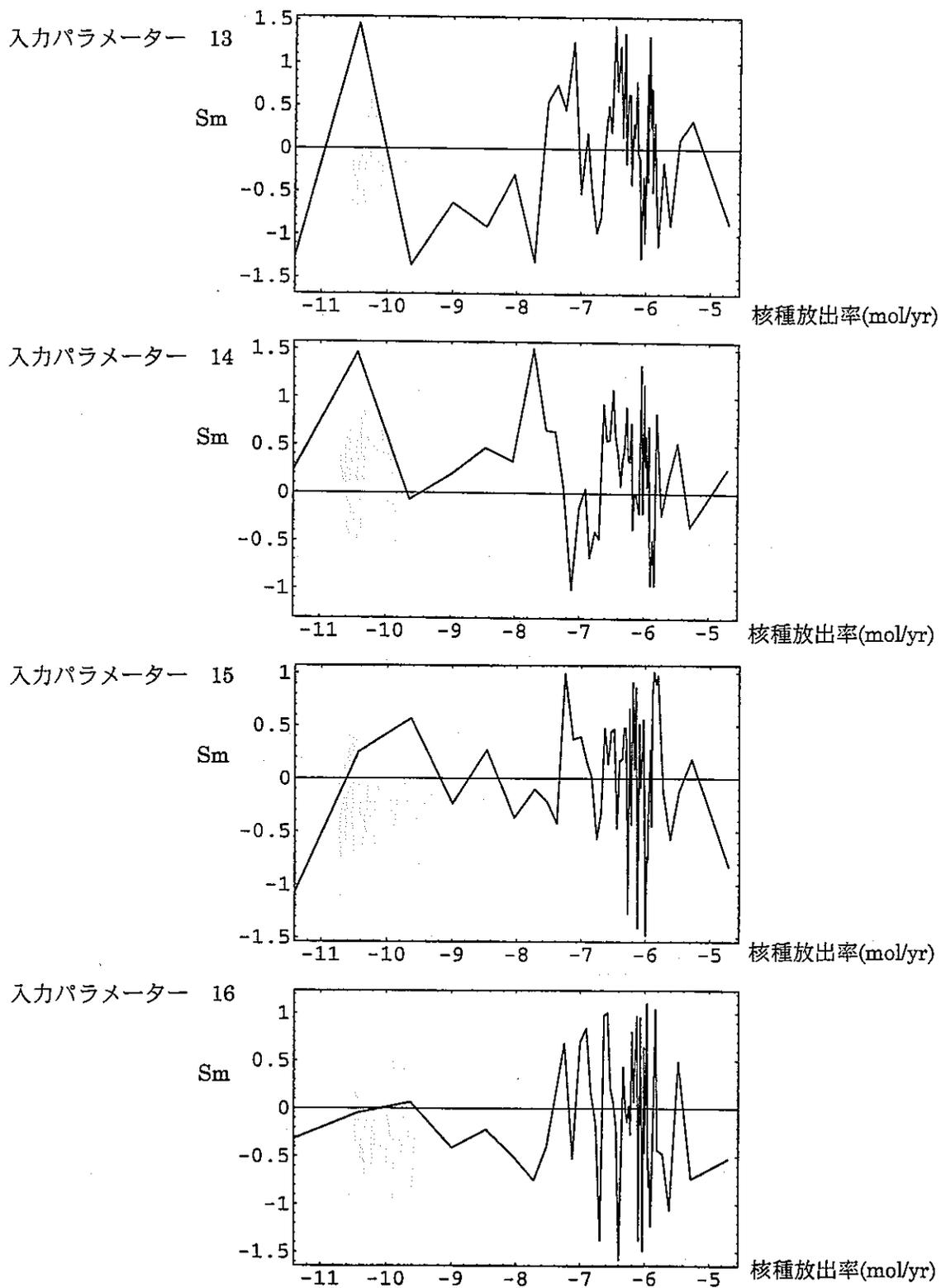


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 親核種 (4)

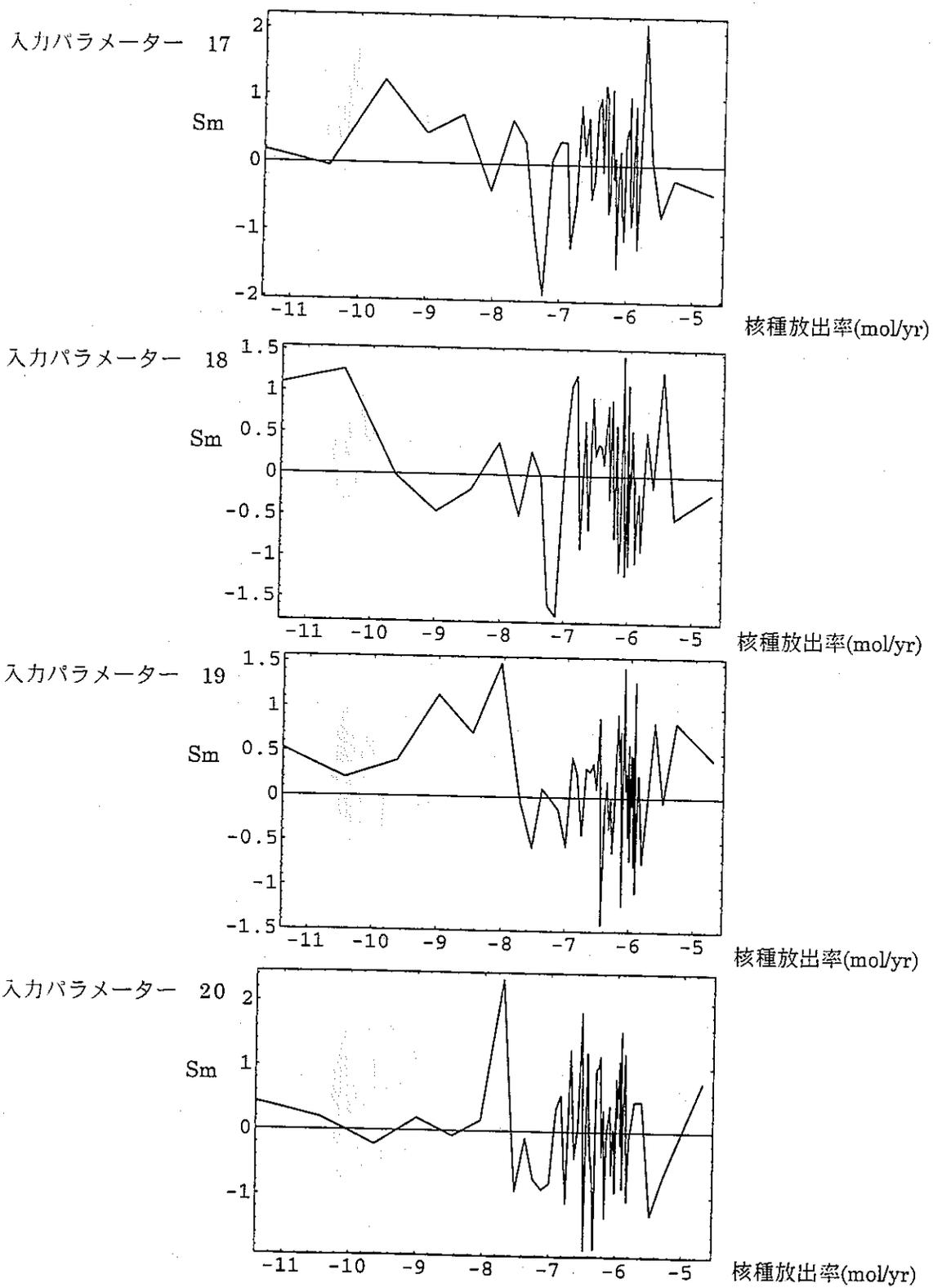


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (5) )

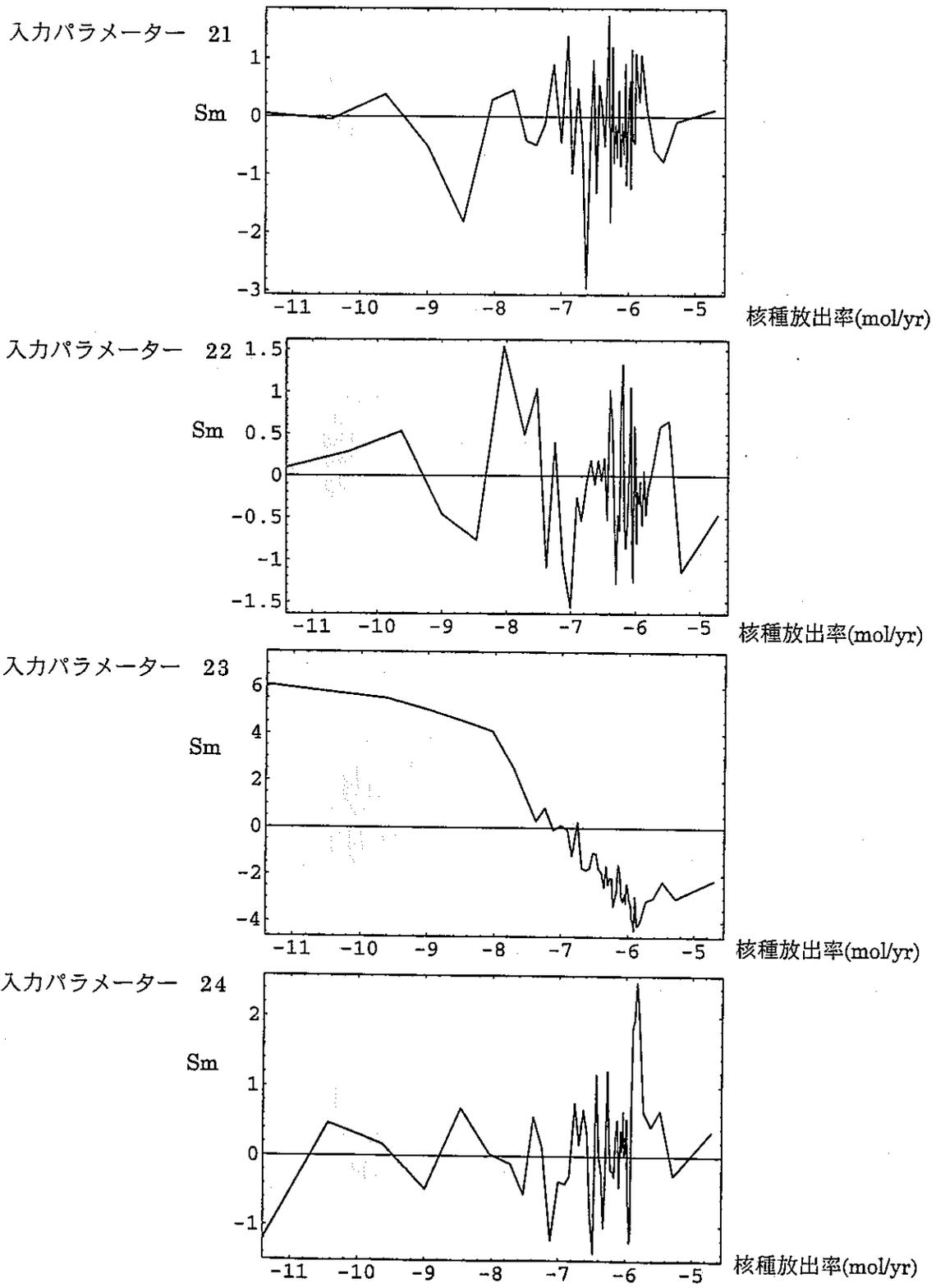


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (6) )

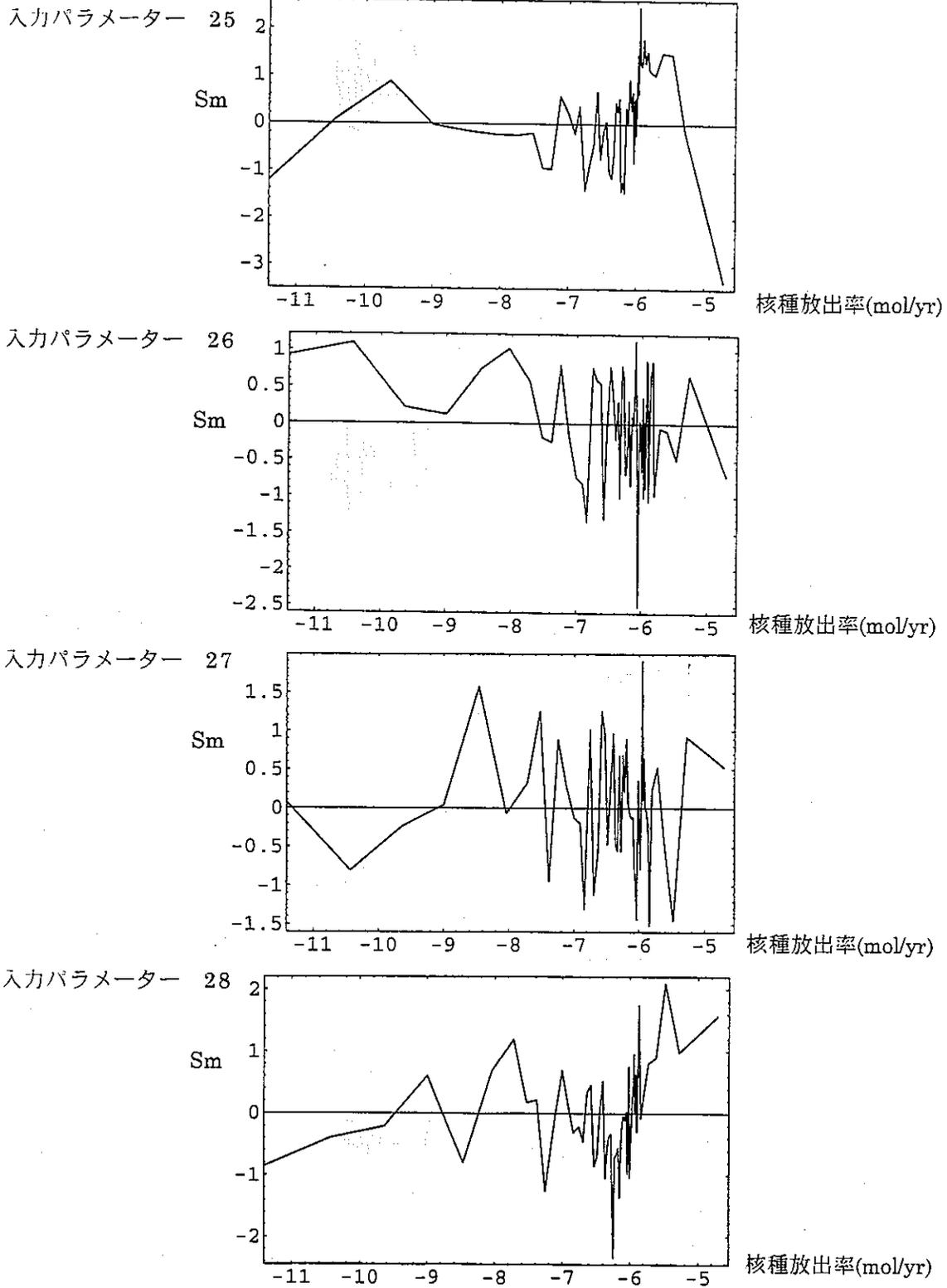


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (7) )

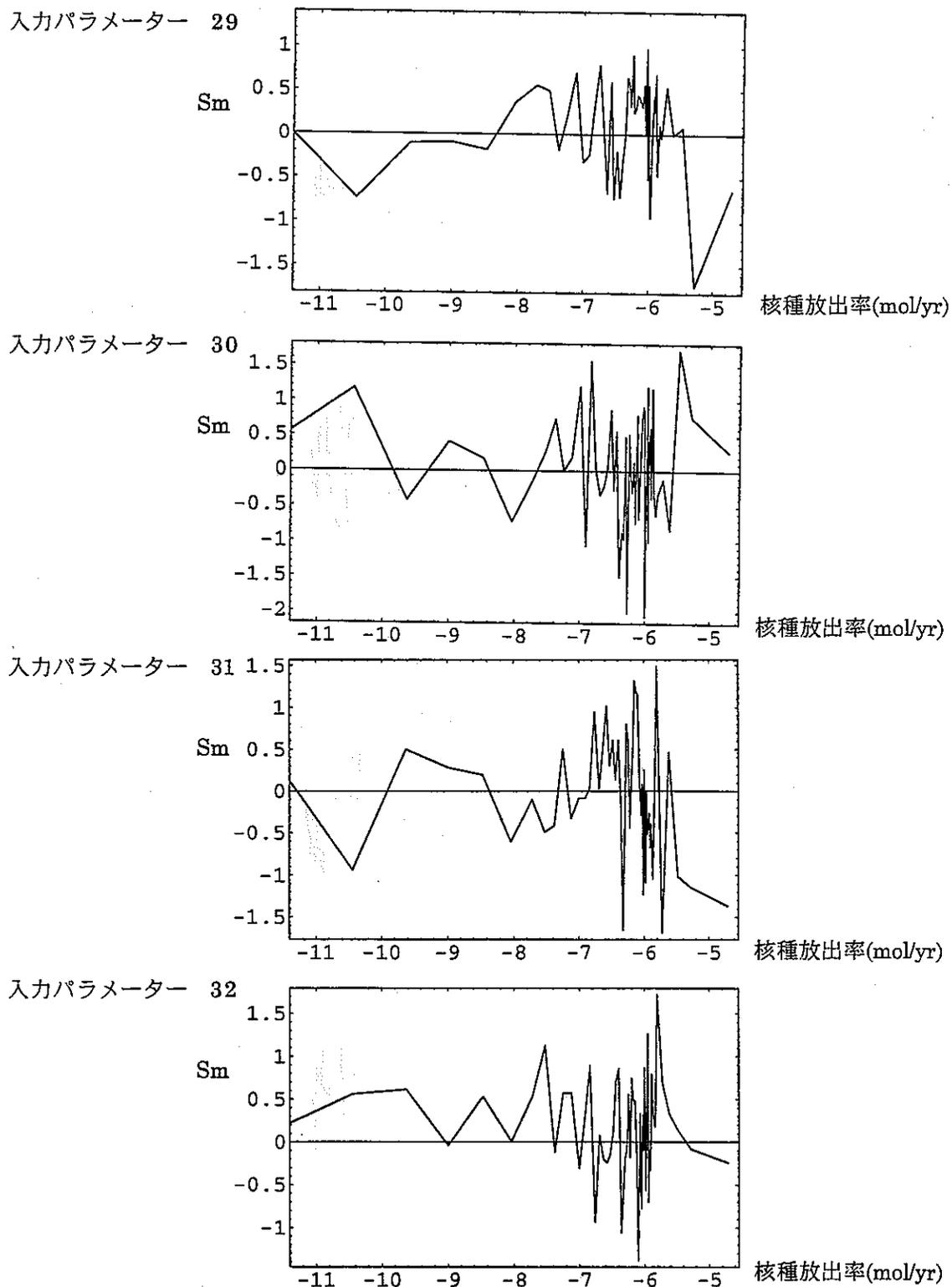


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (8) )

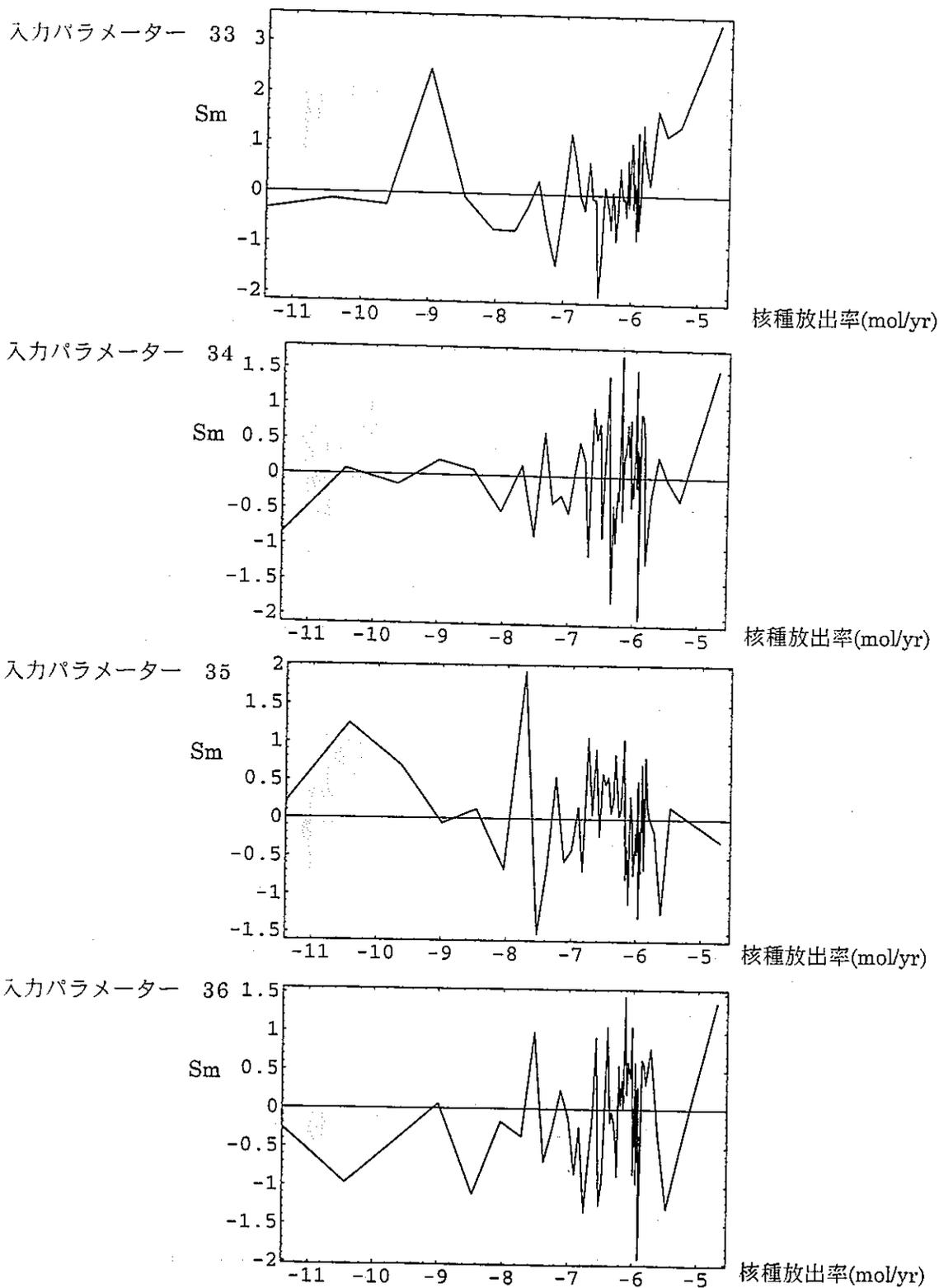


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (9) )

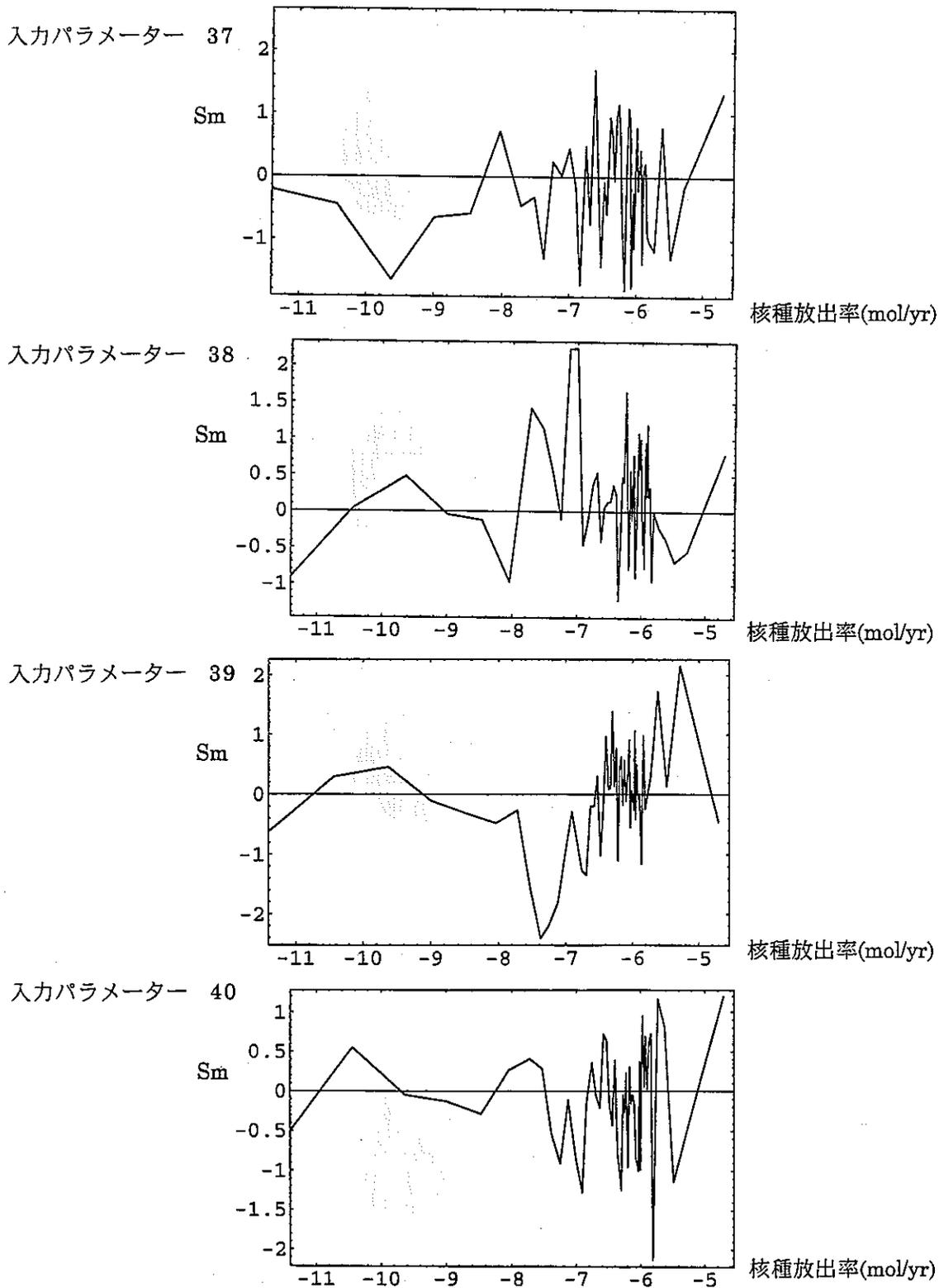


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (10) )

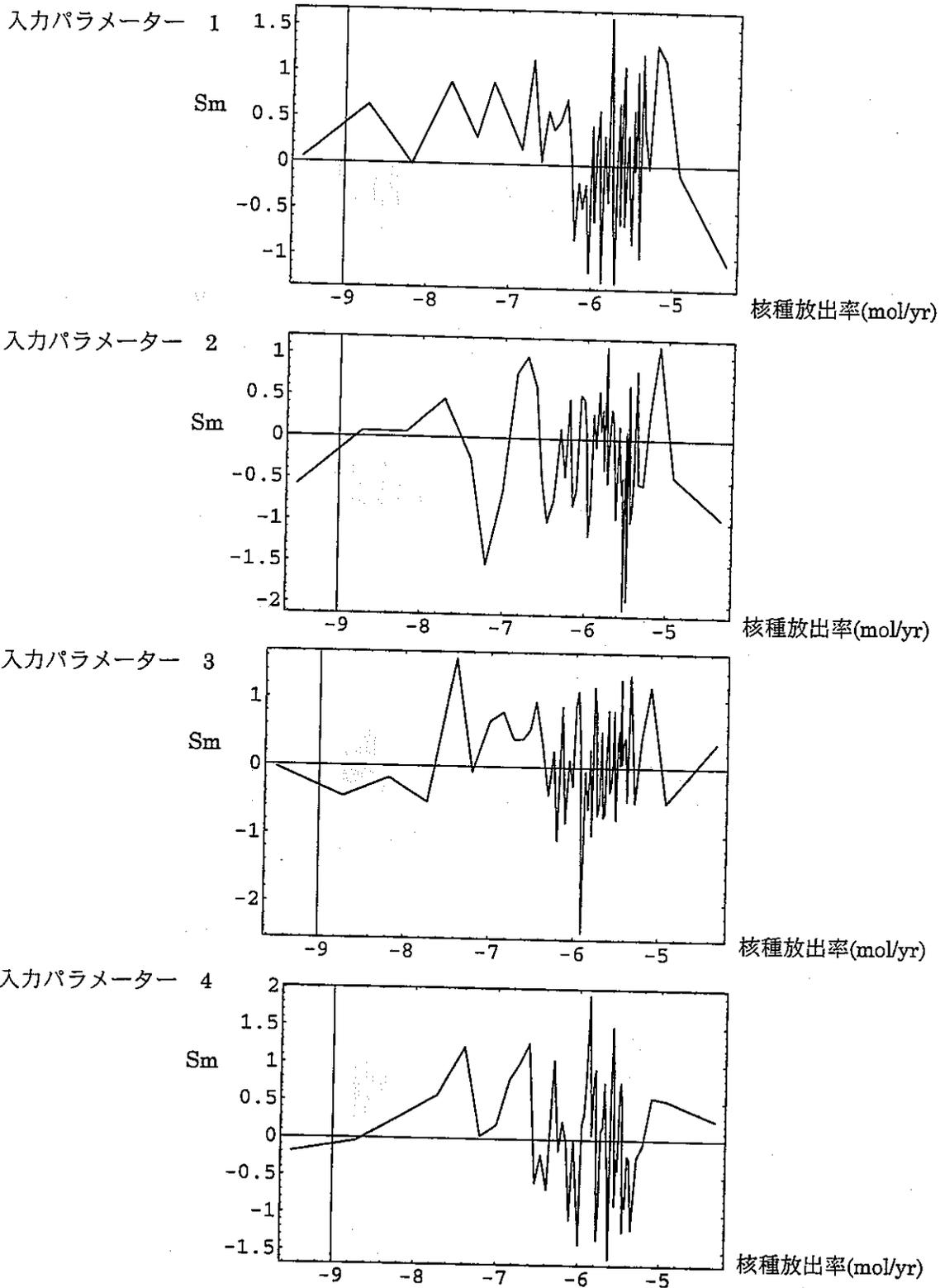


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (1))

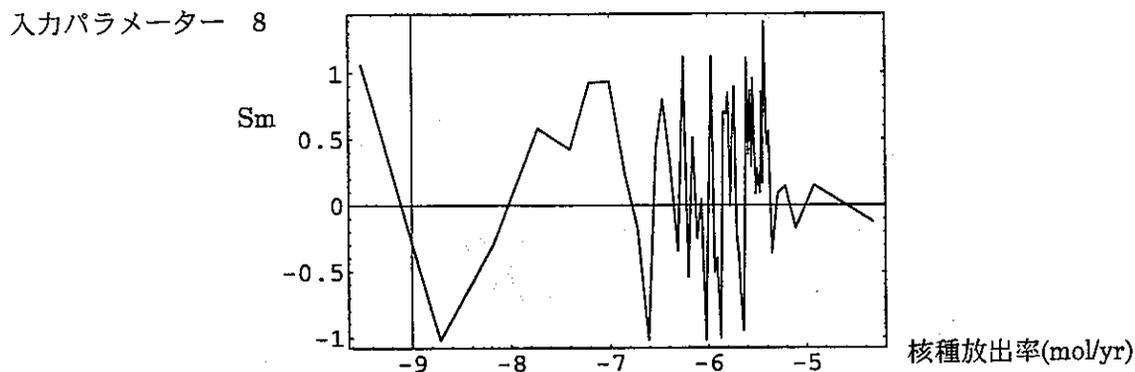
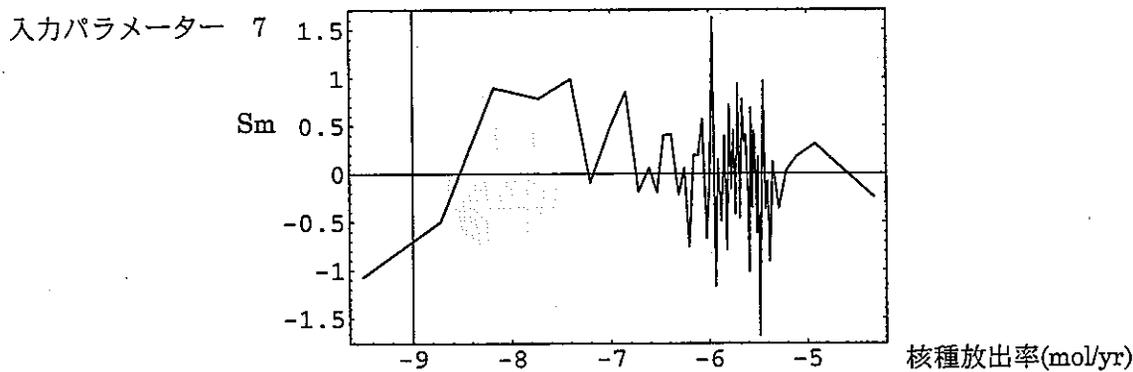
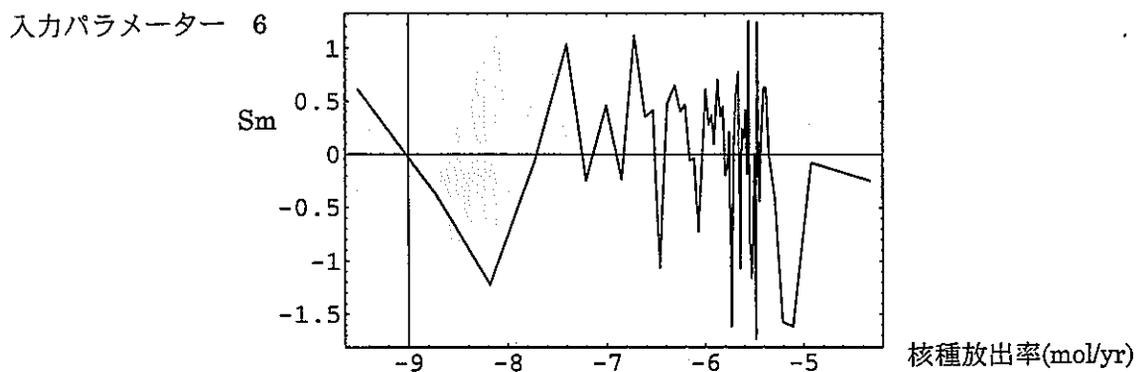
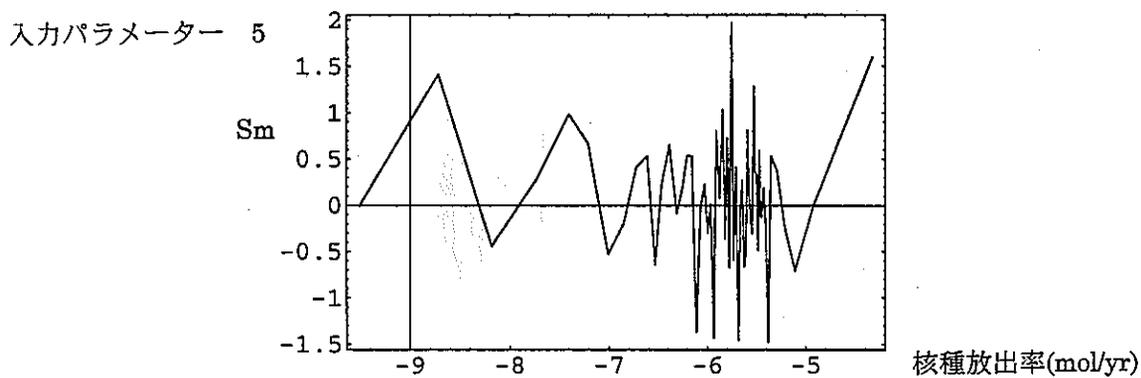


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (2) )

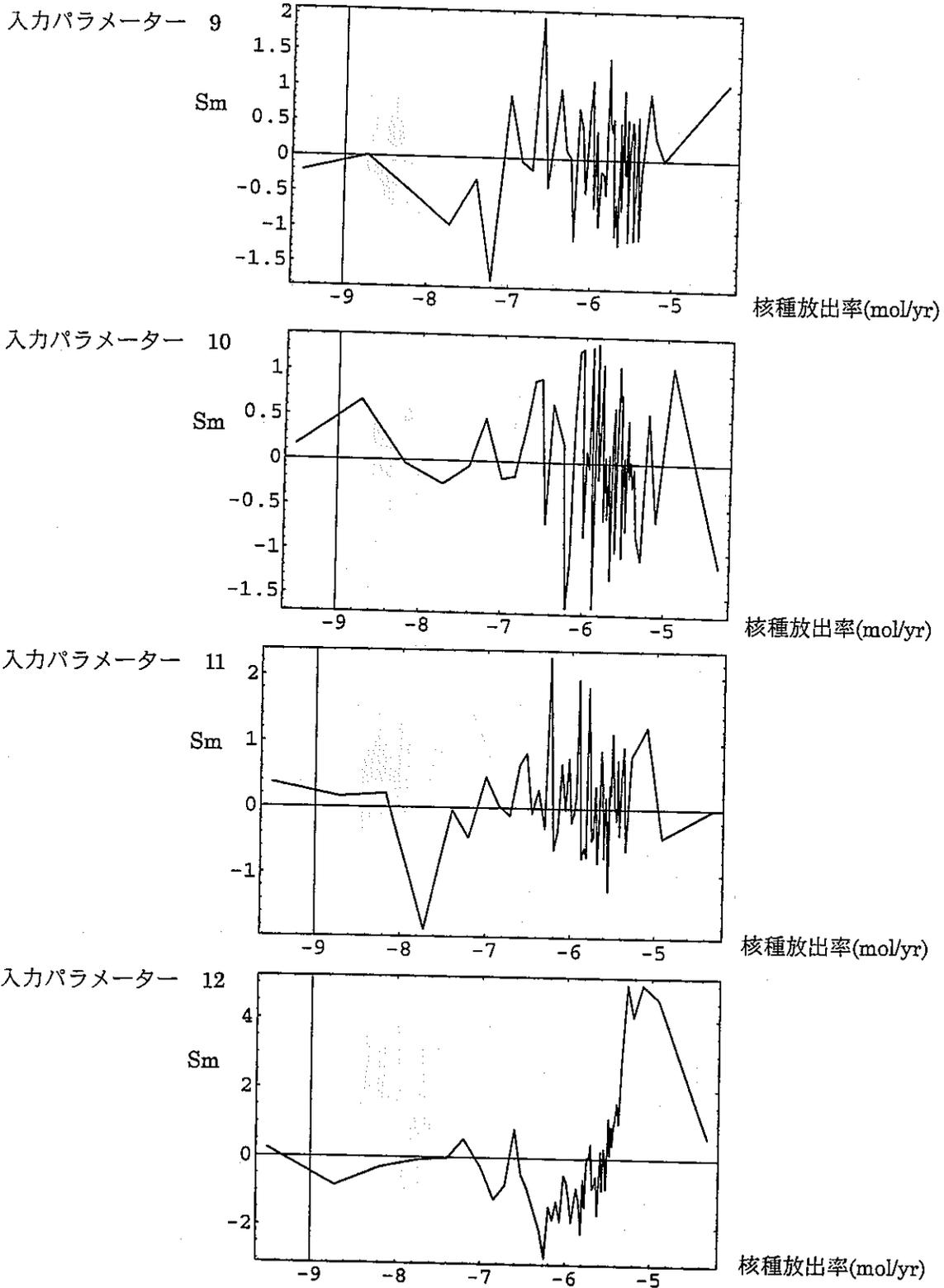


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (3) )

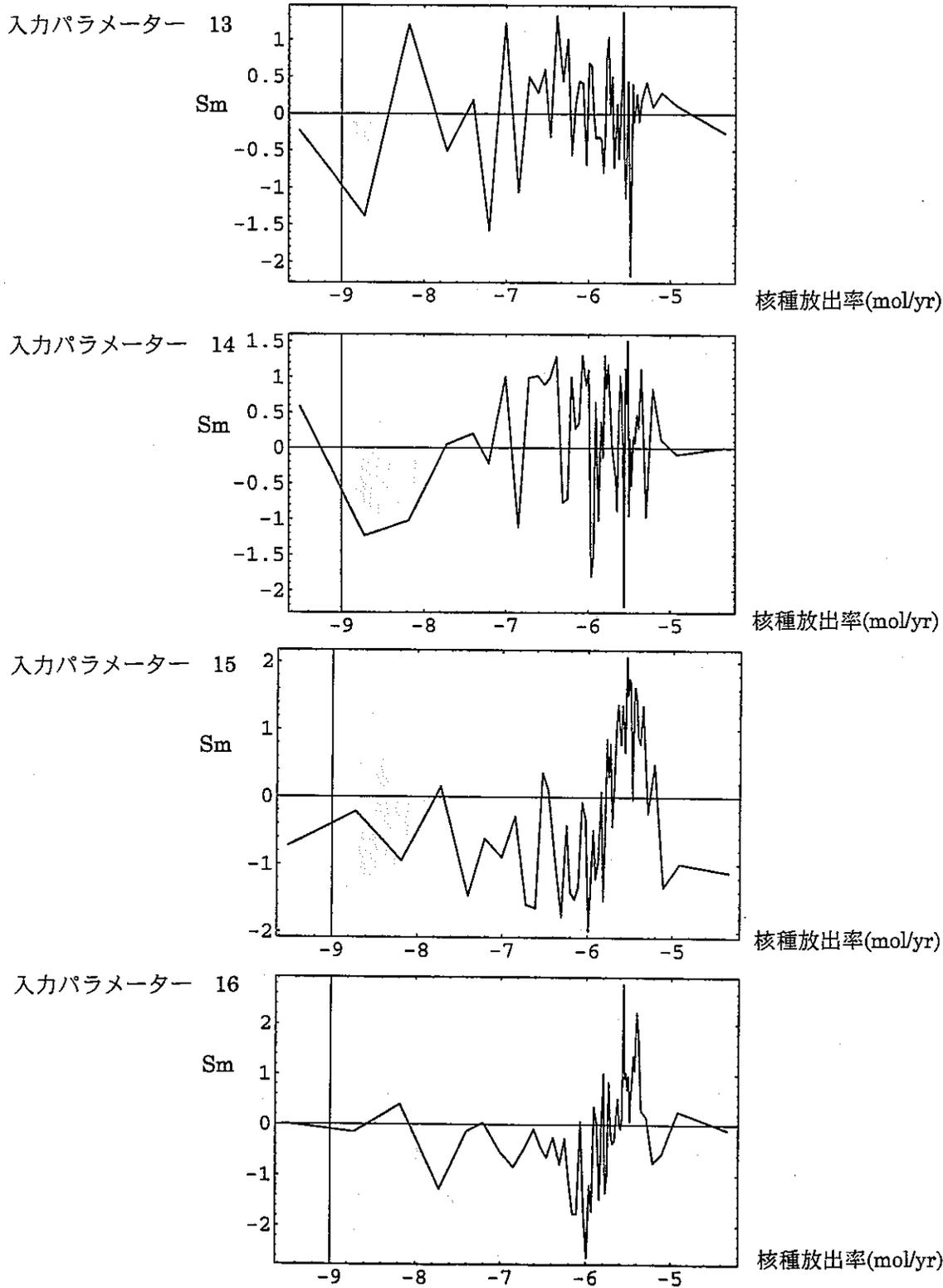


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 娘核種 (4)

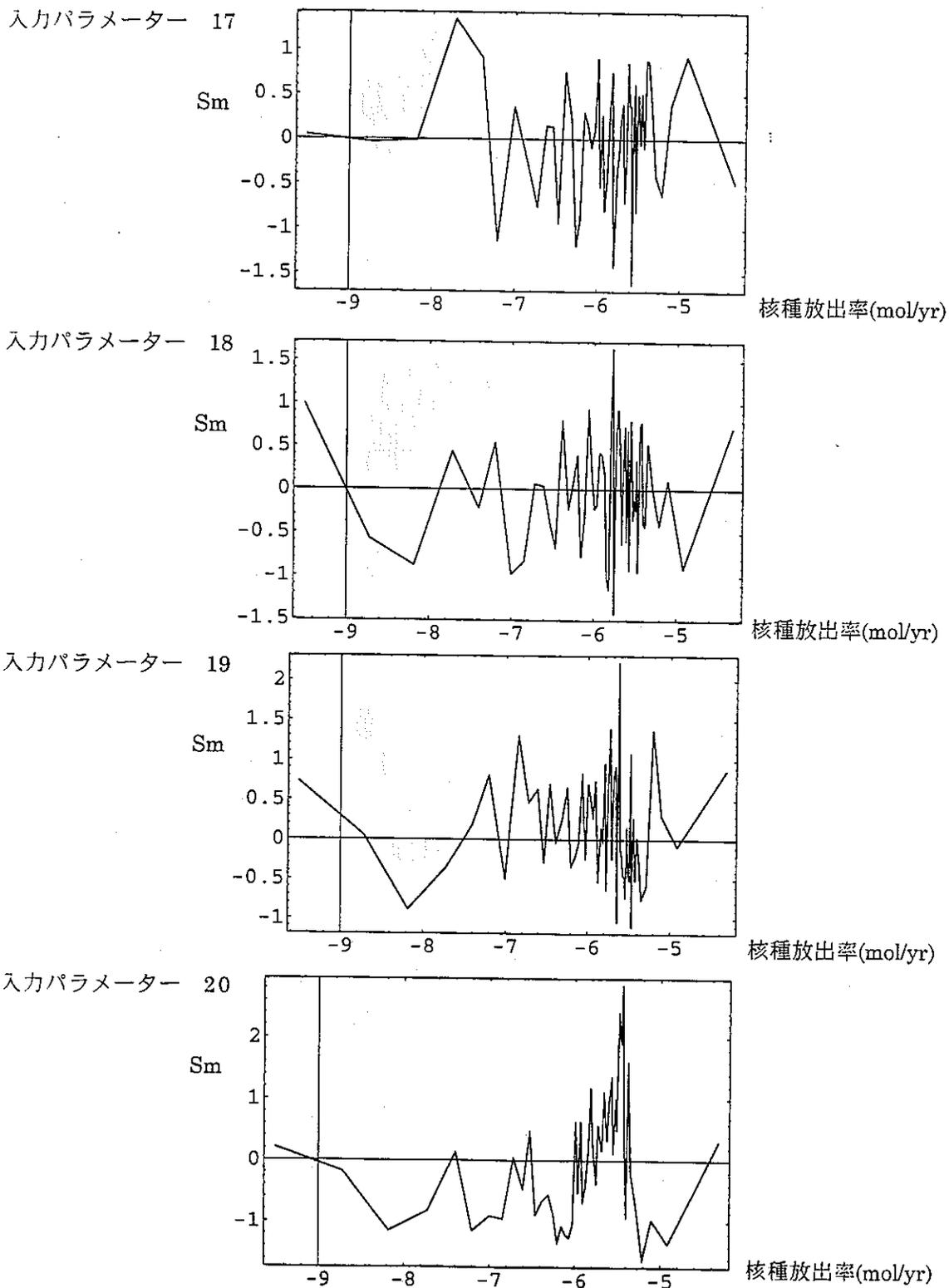


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (5) )

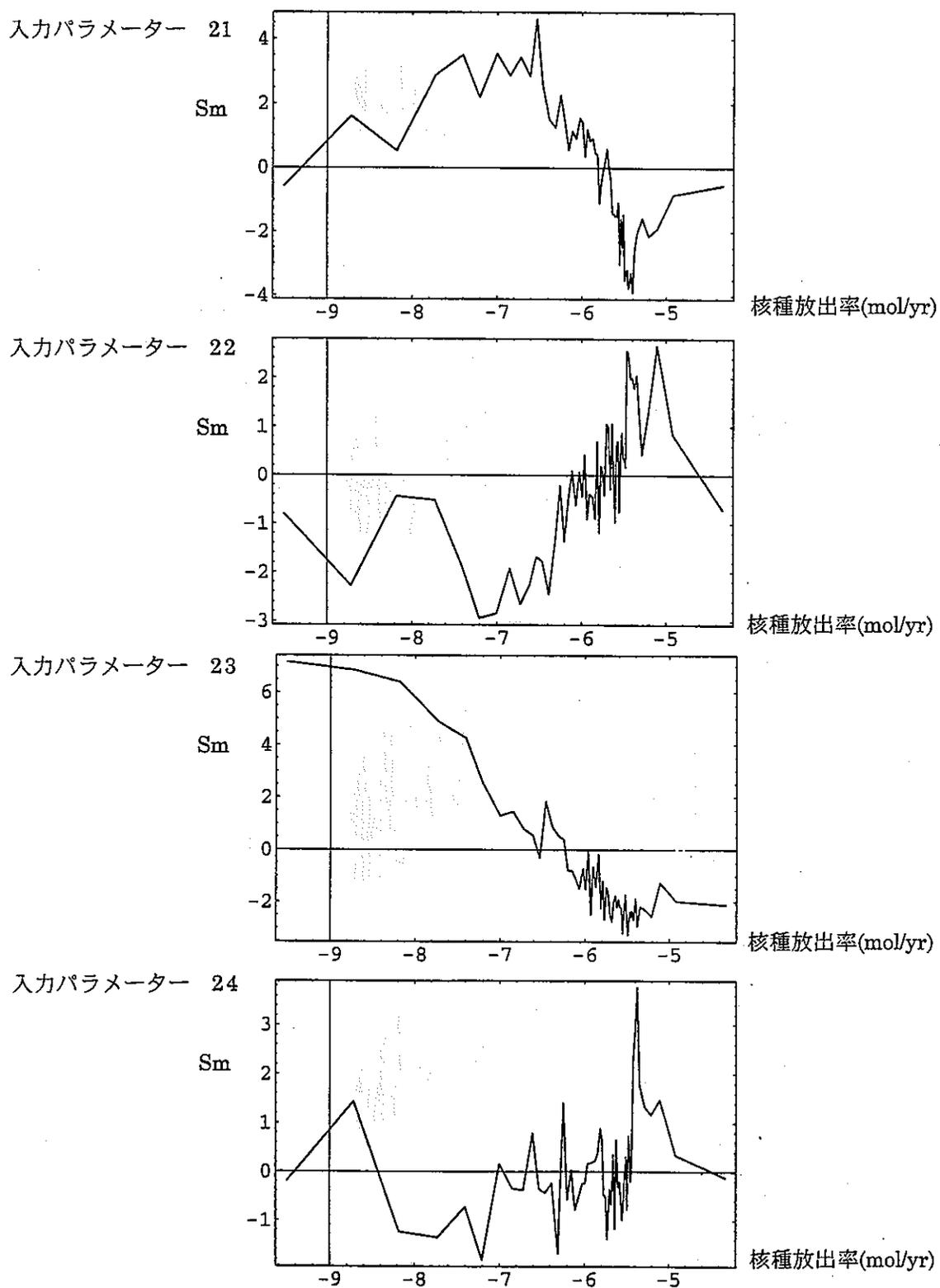


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (6) )

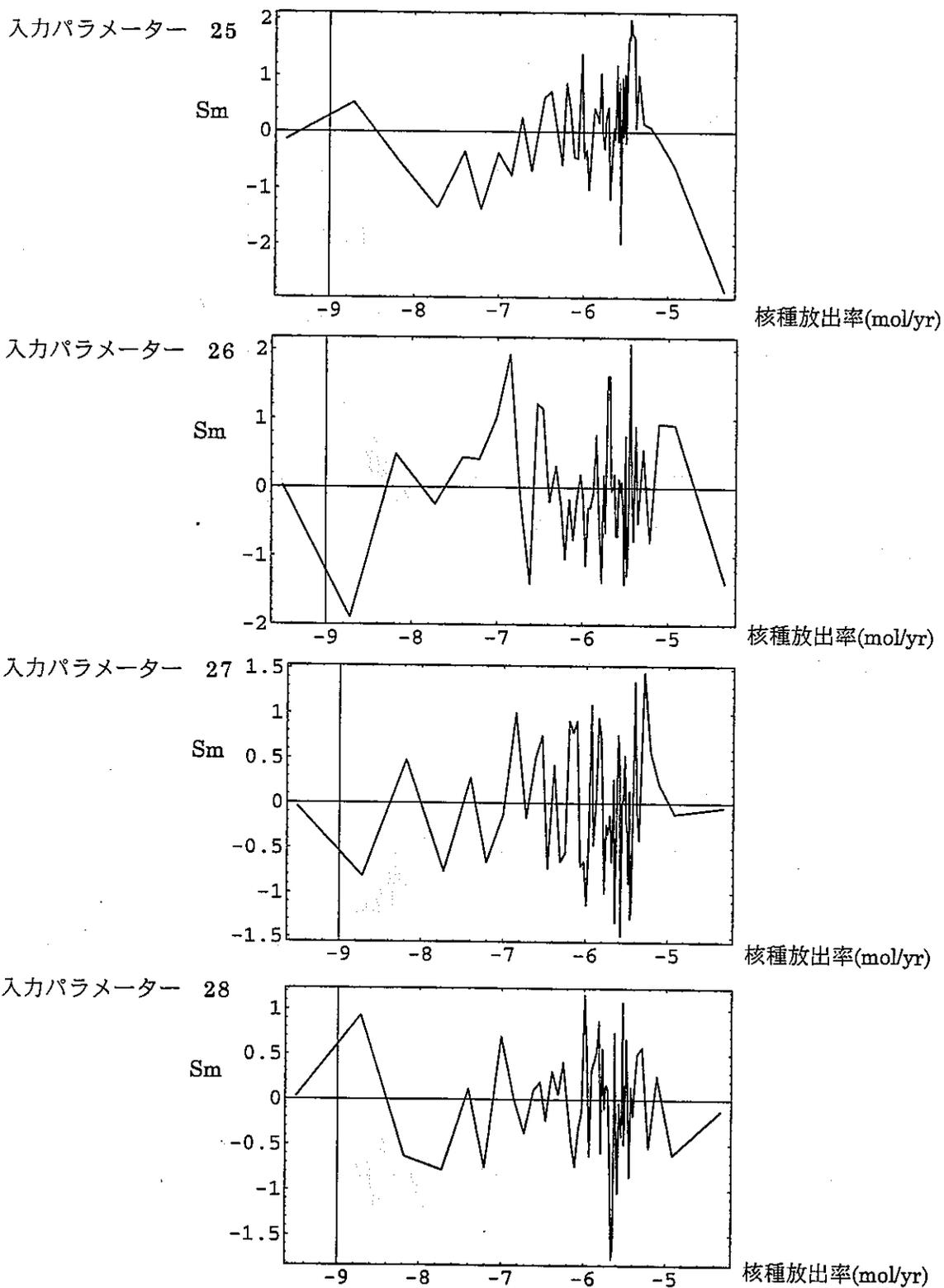


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (7) )

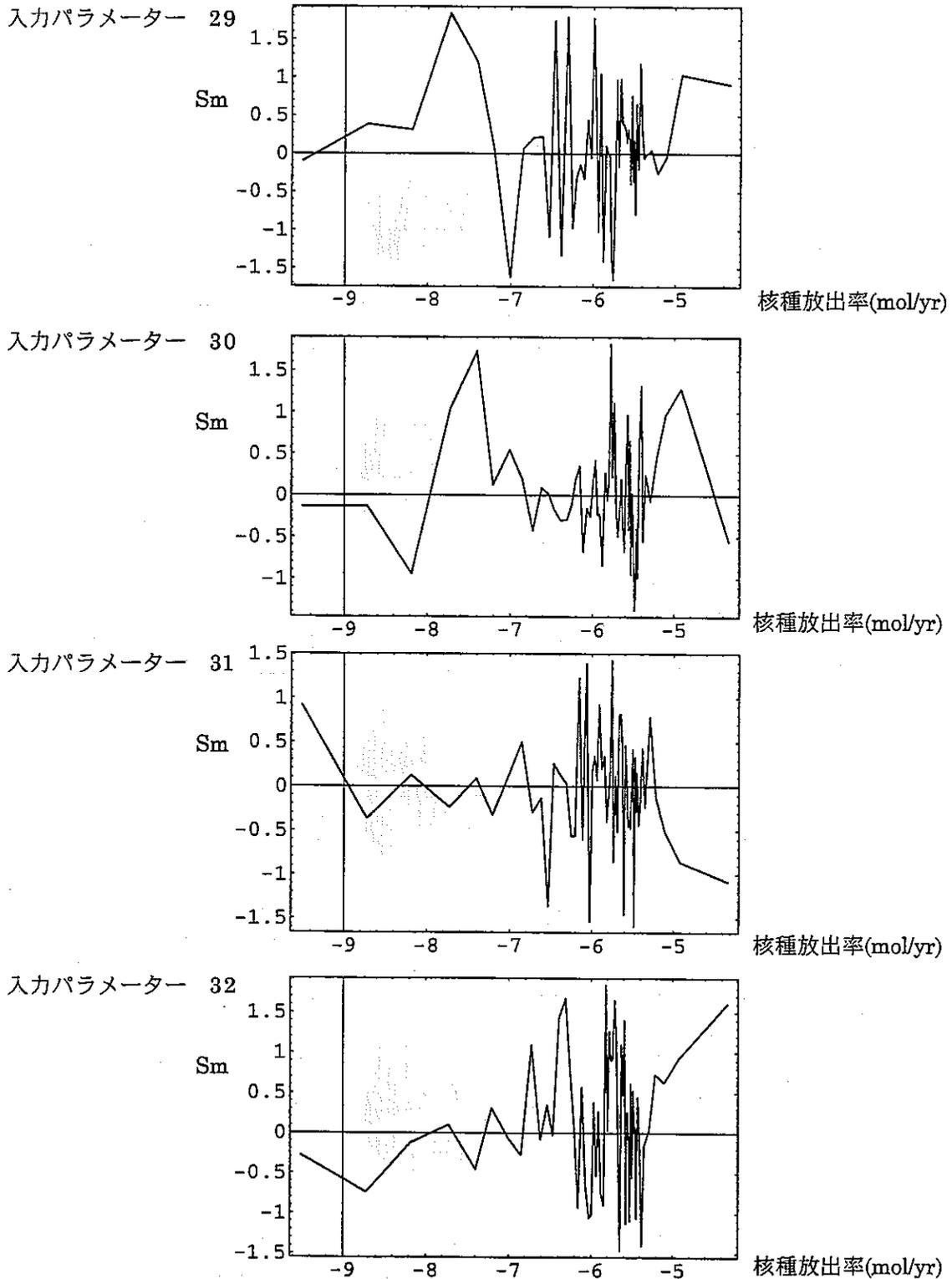


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (8) )

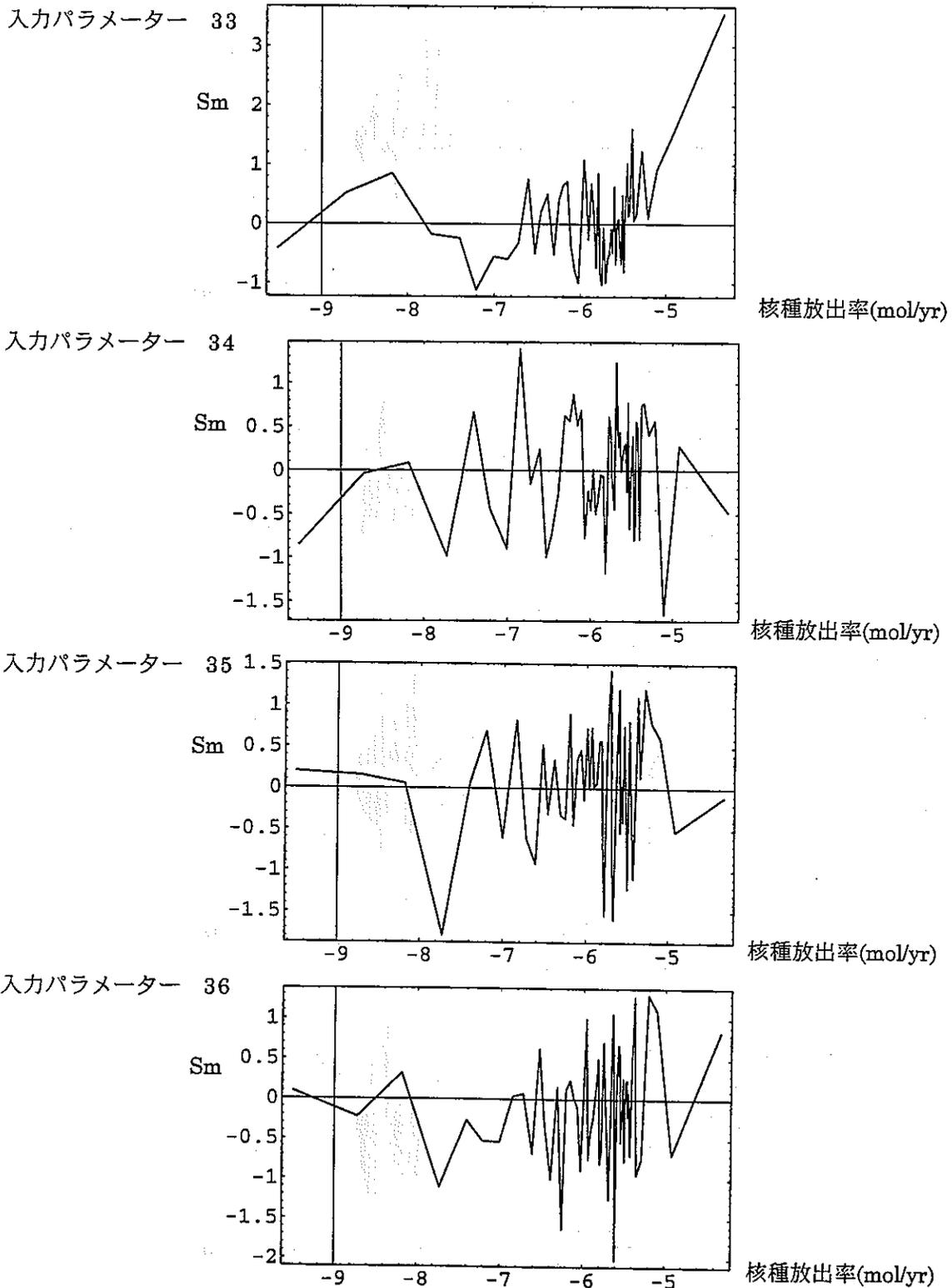


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (9) )

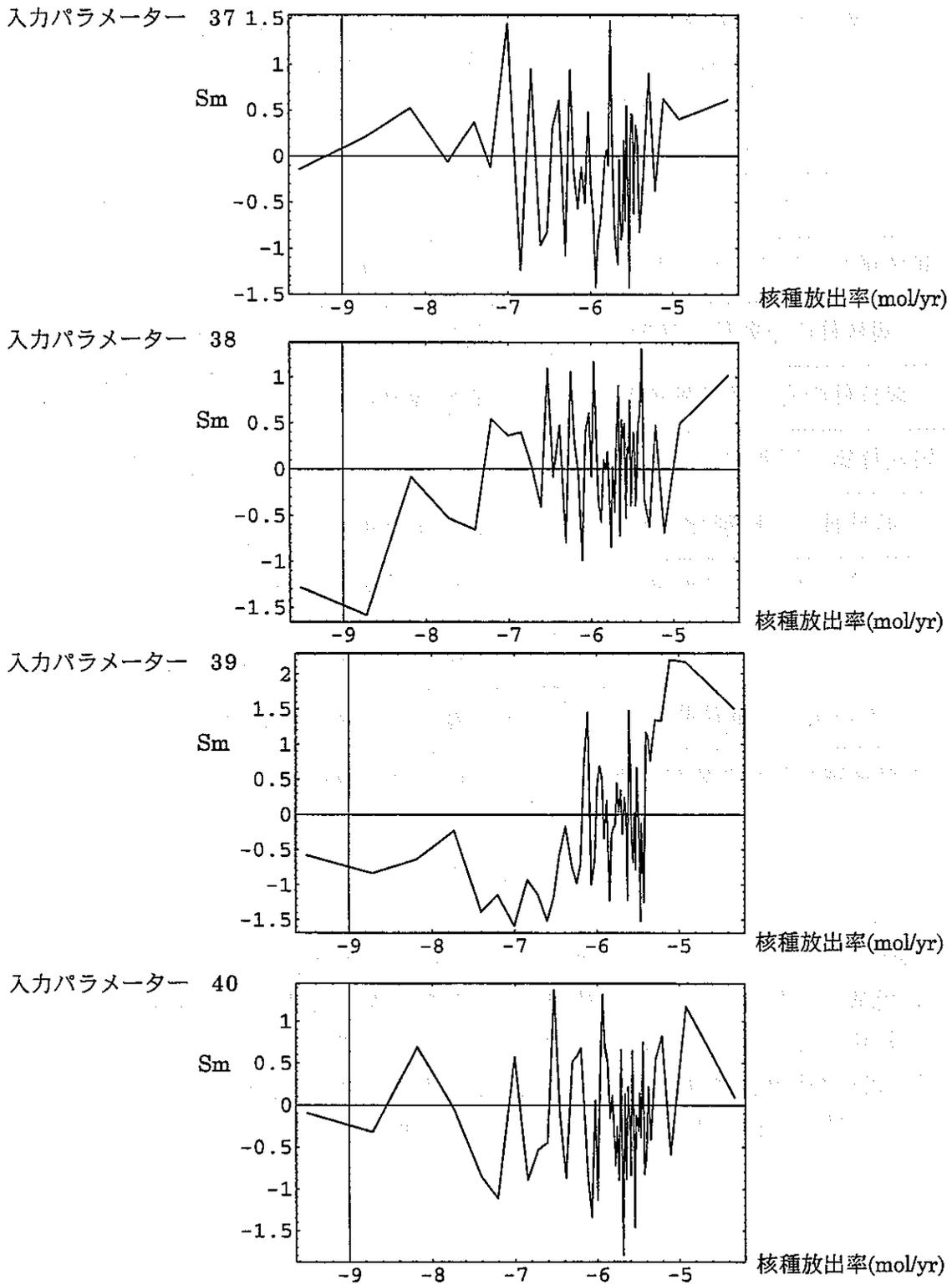


図 4.6.14 Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース近傍  
 第二次サンプリングに関する Moving Band 解析の結果  
 (娘核種 (10) )

表 4.6.8 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ  
 ( Am-243 及び Pu-239 についてのリファレンスケース  
 近傍第二次サンプリング)

	パラメータ	傾向
1	親核種第二区間勾配 (拡散)	正* (親核種放出率について)
10	親核種の不動態化速度	逆* (親核種放出率について)
11	親核種の安定相溶解速度	正* (親核種放出率について)
12	娘核種第二区間勾配 (拡散)	正* (娘核種放出率について)
21	娘核種の不動態化速度	逆* (娘核種放出率について)
22	娘核種の安定相溶解速度	正* (娘核種放出率について)
23	オーバーパック腐食時間	逆 (親及び娘核種放出率について)
33	強い流れの継続期間	正 (親及び娘核種放出率について)
39	内側地球化学異常継続期間	正 (親及び娘核種放出率について)

表 4.6.8 に挙げた入力パラメータは、Np-237 及び Th-229 の場合とほぼ同じであり、\*を付したパラメータの示す傾向も放出率の高い領域ではほぼ同等である。但し、低放出率側においては、核種の化学形態に関する各パラメータの感度が著しく鈍化していることが Np-237 及び Th-229 とは異なる。これは、Am-243 及び Pu-239 が比較的短寿命であるために、低放出率側ではオーバーパックによる閉じこめ期間が最も支配的な制限因子として働いているためである。

図4.6.15は、各クラスタにおけるそれぞれの入力パラメータの感度(Jacobian行列)をプロットしたものである。いずれのクラスタにおいても、オーバーパック腐食時間の感度が突出しており、比較的短寿命の Am-243 及び Pu-239 に対して全域的な重要性を持つことがわかる。また、オーバーパックによる閉じこめは他のバリア状態に依らず有効なものであることを考慮すれば、感度分析が他のパラメータ値に依存しない顕著な感度を有するパラメータから順に抽出する傾向を再び示しているものと考えられる。

他のパラメータ群についての感度を見るためには、表 4.6.8 に挙げたパラメータ値を固定した第三次のサンプリングを行うことが必要と考えられる。

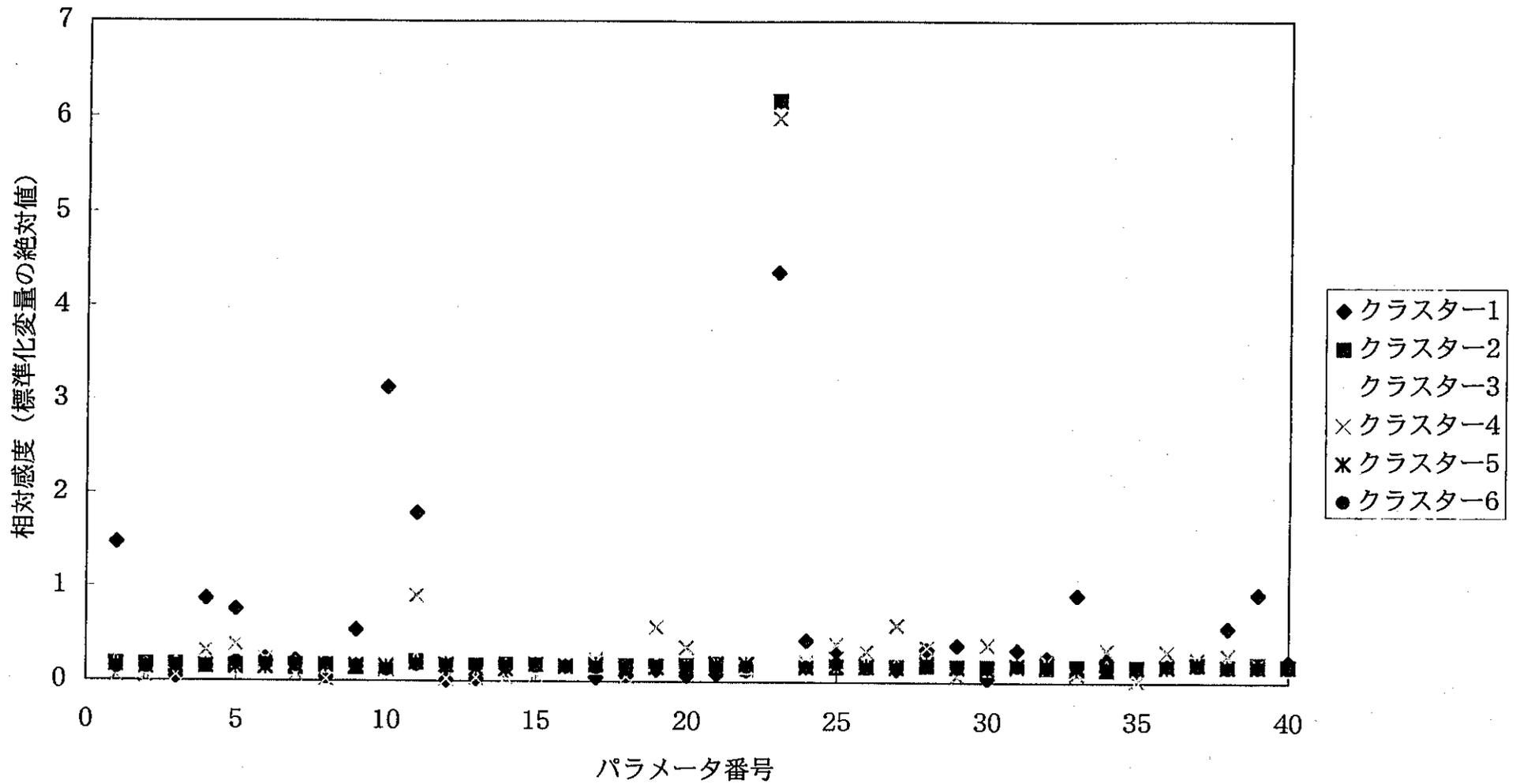


図4.6.15 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(リファレンスケース近傍の第二次サブリング : Am243)

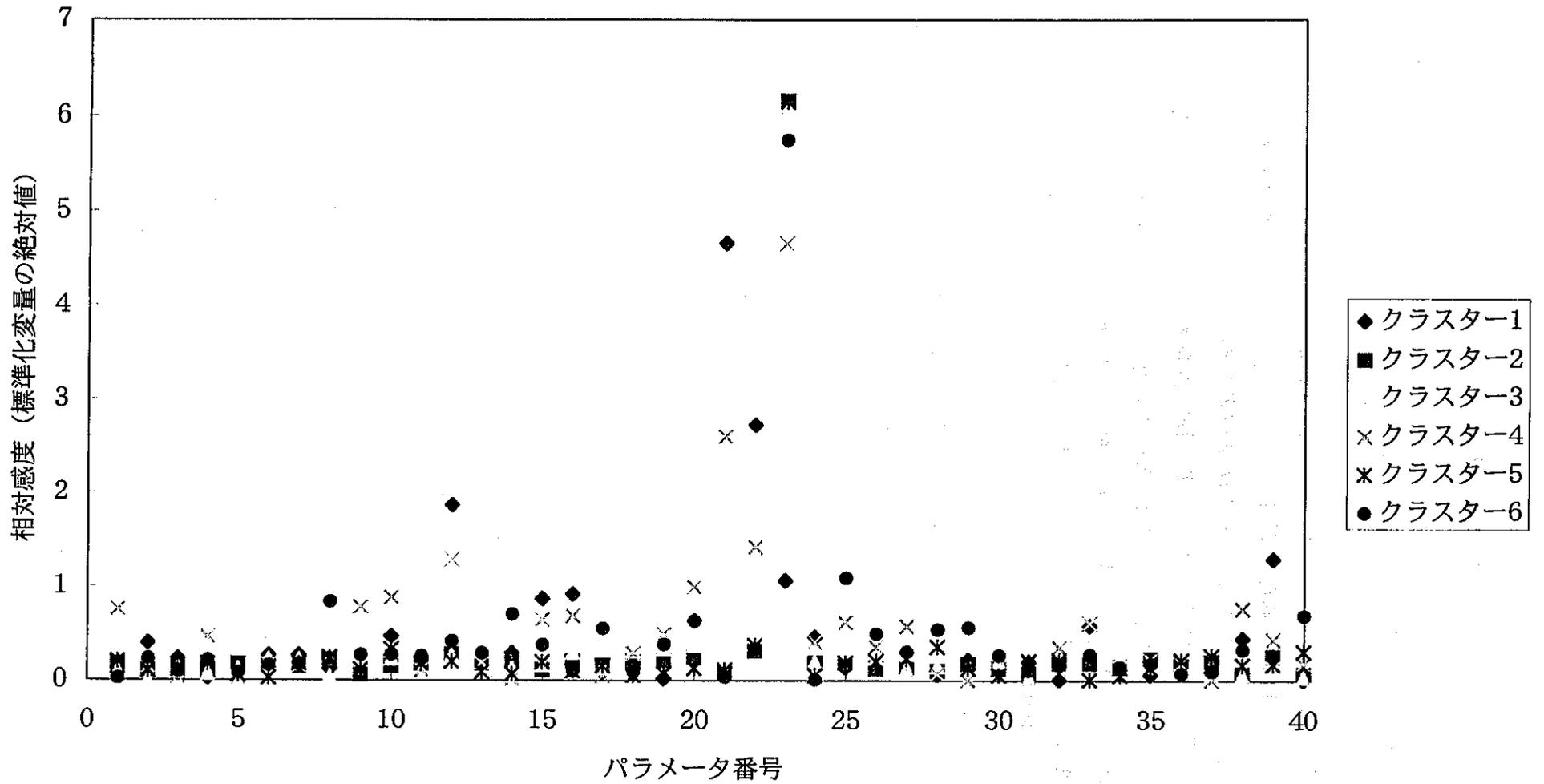


図4.6.15 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(リファレンスケース近傍の第二次サンプリング : Pu239)

## 4.7 第三次局部サンプリングによる統計的解析

### 4.7.1 第三次サンプリングの解析条件

第二次サンプリングにおける3種類の統計的解析の結果は、いずれも、ここで抽出されなかったより複雑な感度を示すパラメータについての感度解析を行うためには、第二次サンプリングによって傾向が明らかとなったパラメータ群を固定した第三次の局部サンプリングと一連の統計的解析を行うことが必要であることを示している。そこで、ここでは、Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケースの近傍において、表 4.6.6 に挙げた 10 個の入力パラメータの値を更に固定し（表 4.7.1 参照）、残りの 30 個のパラメータ（表 4.7.2 参照）について 4 章に述べた範囲での統計的サンプリングを実施した。

なお、解析ケース数としては、前出の収束性についての検討結果を踏まえてそれぞれ 2000 ケース以上を実施するものとした。

表 4.7.1 リファレンスケース近傍での第三次サンプリングのための  
パラメータ固定値

(Np-237 -> Th-229)

	規格化された入力値	実際の値
親核種第二区間勾配 (拡散)	0	0 <sup>*1</sup>
親核種の不動態化速度	0	1.0 E-6 /年 <sup>*2</sup>
親核種の安定相溶解速度	1	1.0 /年 <sup>*2</sup>
娘核種第二区間勾配 (拡散)	0	0 <sup>*1</sup>
娘核種の不動態化速度	0	1.0 E-6 /年 <sup>*2</sup>
娘核種の安定相溶解速度	1	1.0 /年 <sup>*2</sup>
動水勾配最小値	0.5	1.0 E-2 <sup>*3</sup>
動水勾配最大値	0	1.0 E-2 <sup>*3</sup>
強い流れの継続期間	0	0 年 <sup>*3</sup>
内側地球化学異常 継続期間	1	1.0 E6 年 <sup>*4</sup>

注

- 1) リファレンスケースに於ける溶解度限界の仮定に対応する。
- 2) リファレンスケースでは、核種の移行形態変化（溶解・沈澱あるいは吸着、等）は瞬時に平衡を達成することが仮定されており、これと整合的なシャドウモデルの設定は、速度論的な不動態化の効果を無視小とすることである。そこで、ここでは、不動態化速度を下限値とし、安定相溶解速度を上限値とすることにより、不動態化は生じにくくかつ生じたとしても直ちに液相に戻される条件を選んだ。
- 3) 動水勾配の値は、既に固定したゆるみ域及び母岩中透水係数と併せて、0.05m<sup>3</sup>/年というリファレンスケースでのゆるみ域内地下水流量の設定値を再現するように設定されている。また、リファレンスケースでは強い流れは考慮されていないため、動水勾配最大値は最小値と同じであり強い流れの継続期間は0であるとした。
- 4) 内側地球化学異常については、放射線分解による酸化剤の生成は長期にわたって生じ、従って、ガラス直近も含めれば常に存在すると考えられることから、長い継続期間を想定した。但し、内側地球化学異常の進入距離は統計的にサンプリングされることから、計算結果としてはフロントが有意に進展するケースからしないケースまでが幅広く含まれることとなる。

表 4.7.2 第三次サンプリングのための統計的入力パラメーター一覧表 (1)

入力パラメーター番号	内容
1	親核種第二区間勾配 (移流)
2	親核種の低濃度領域での遅延係数 (移流)
3	親核種の第一節点濃度 (拡散)
4	親核種の第二節点濃度 (拡散)
5	親核種の第一節点濃度 (移流)
6	親核種の第二節点濃度 (移流)
7	親核種の第三節点濃度 (移流)
8	地球化学異常での節点のシフト (親核種)
9	娘核種第二区間勾配 (移流)
10	娘核種の低濃度領域での遅延係数 (移流)
11	娘核種の第一節点濃度 (拡散)
12	娘核種の第二節点濃度 (拡散)
13	娘核種の第一節点濃度 (移流)
14	娘核種の第二節点濃度 (移流)
15	娘核種の第三節点濃度 (移流)
16	地球化学異常での節点のシフト (娘核種)

表 4.7.2 第三次サンプリングのための統計的入力パラメーター一覧表 (2)

入力パラメーター番号	内容
17	オーバーパック腐食継続期間
18	オーバーパック腐食開始時期
19	人工バリア内ギャップ透水係数
20	人工バリア内空隙率
21	移流領域の人工バリア内進入距離
22	最大進入時期
23	ギャップ存在期間
24	強い流れの開始時期
25	バイパス流の割合
26	外側地球化学異常開始時期
27	外側地球化学異常継続期間
28	外側地球化学異常進入距離
29	内側地球化学異常開始時期
30	内側地球化学異常進入距離

#### 4.7.2 リファレンスケース近傍の第三次（局部）サンプリングの解析結果

Np-237 及び Th-229 についてリファレンスケース近傍の局部サンプリングによる統計的解析結果（2000 ケース）を図 4.7.1 のスキッタープロットに示す。ここでもやはり、親及び娘の放出率の対数値がそれぞれ-3~-4 及び-6 の付近でガラス浸出率律速に対応した境界線を持つ構造が明瞭に見られる。また、第二次サンプリングに比して、これらの境界線を上回るケースの数が著しく減っていることが特徴である。

図 4.7.2 は、全域的解析の場合と同じ方法で算出した対数スケールでのクラスタ分析の結果を、クラスタ分割数と平均二乗残差 MSE の関係として整理したものである。クラスタ数 12 及び 18 の位置で MSE が顕著に低下していることがわかる。図 4.7.3 は、全クラスタ数 18 の場合の有意な（ケース数が 50 以上の）10 個のクラスタをまとめたものである。ここで、前述した代替的な移動機構による高い（つまりガラス浸出率律速の値を上回る様な）放出率に対応するケース群は比較的少数であるために有意な大きさのクラスタにはほとんど含まれていない。

Moving Band 解析の結果を図 4.7.4 にまとめる。非零のトレンドを有する入力パラメータは表 4.7.3 に示す通りである。

表 4.7.3 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ  
（ Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース  
近傍第三次サンプリング）

	パラメータ	傾向
3	親核種第一節点濃度（拡散）	正（親核種放出率について）
8	地球化学異常での節点のシフト （親核種）	正（親核種放出率について）
11	娘核種第一節点濃度（拡散）	正（娘核種放出率について）
16	地球化学異常での節点のシフト （娘核種）	正（娘核種放出率について）
17	オーバーパック腐食時間	正（娘核種放出率について）
29	内側地球化学異常開始時期	正（親核種放出率について）

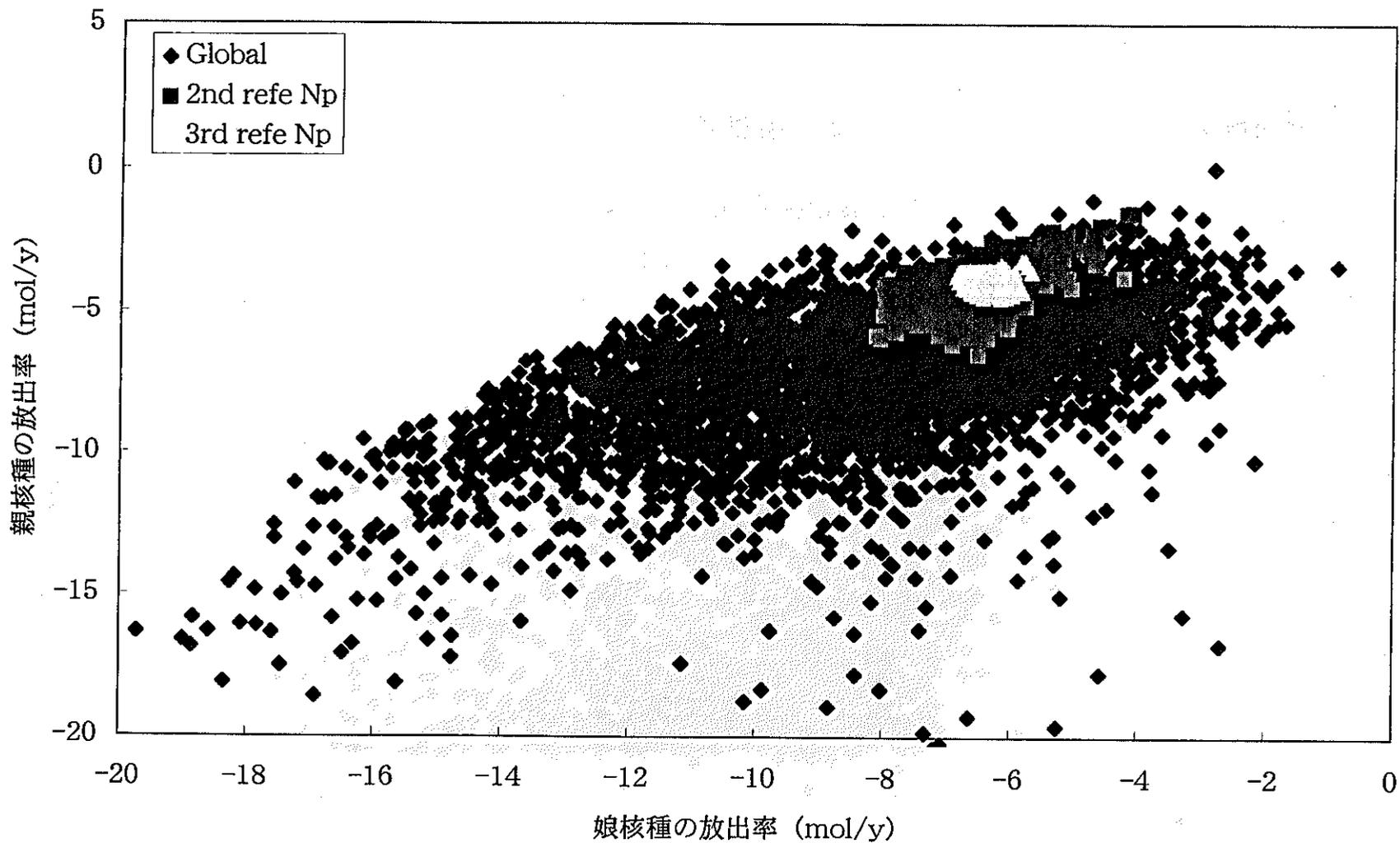


図4.7.1 (1) リファレンスケース近傍の第3次サンプリングによる統計的解析結果  
(Np237, Th229 : 2000ケース)

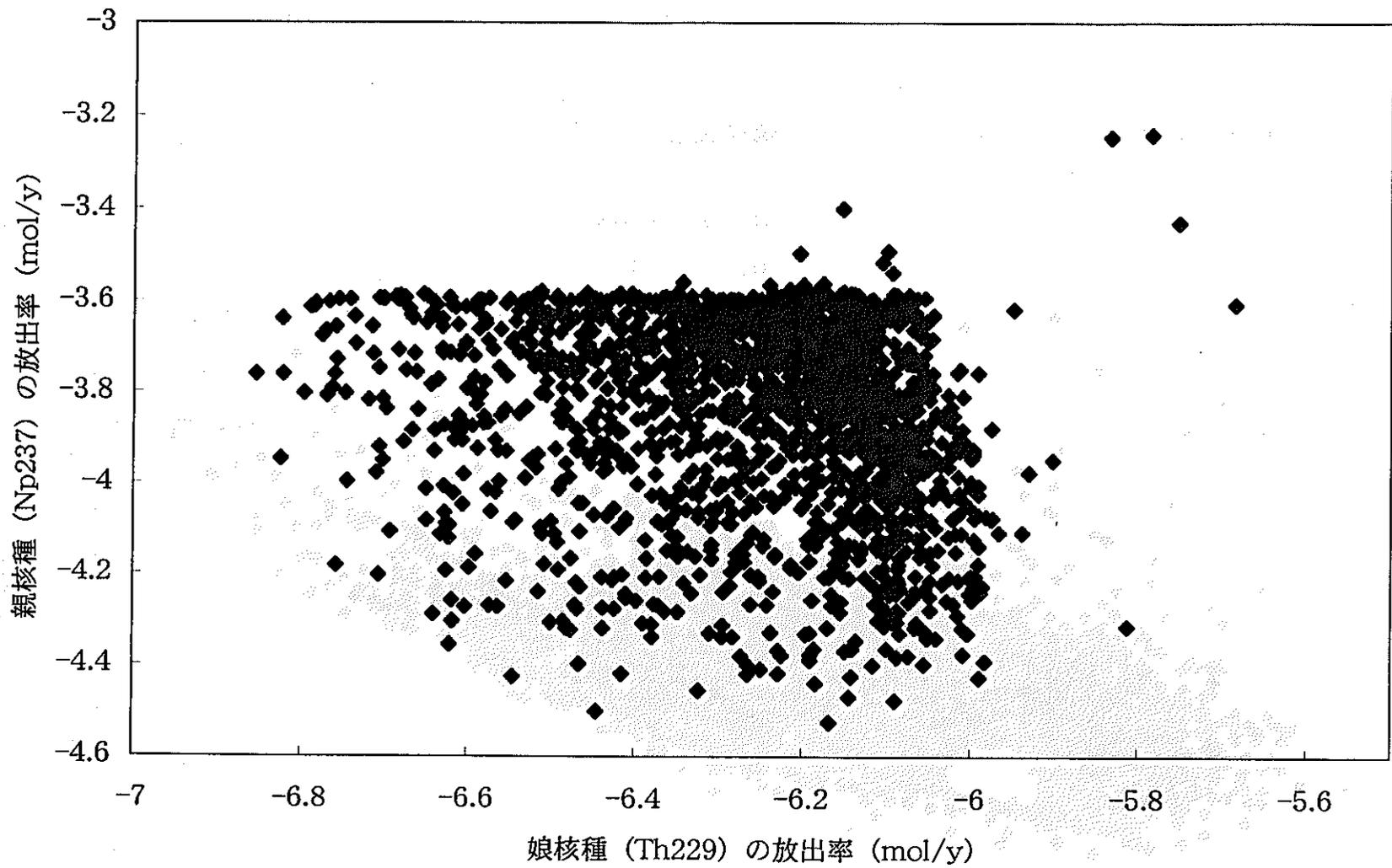


図4.7.1 (2) リファレンスケース近傍の第三次サブプリカによる統計的解析結果 (Np237,Th229 : 2000)

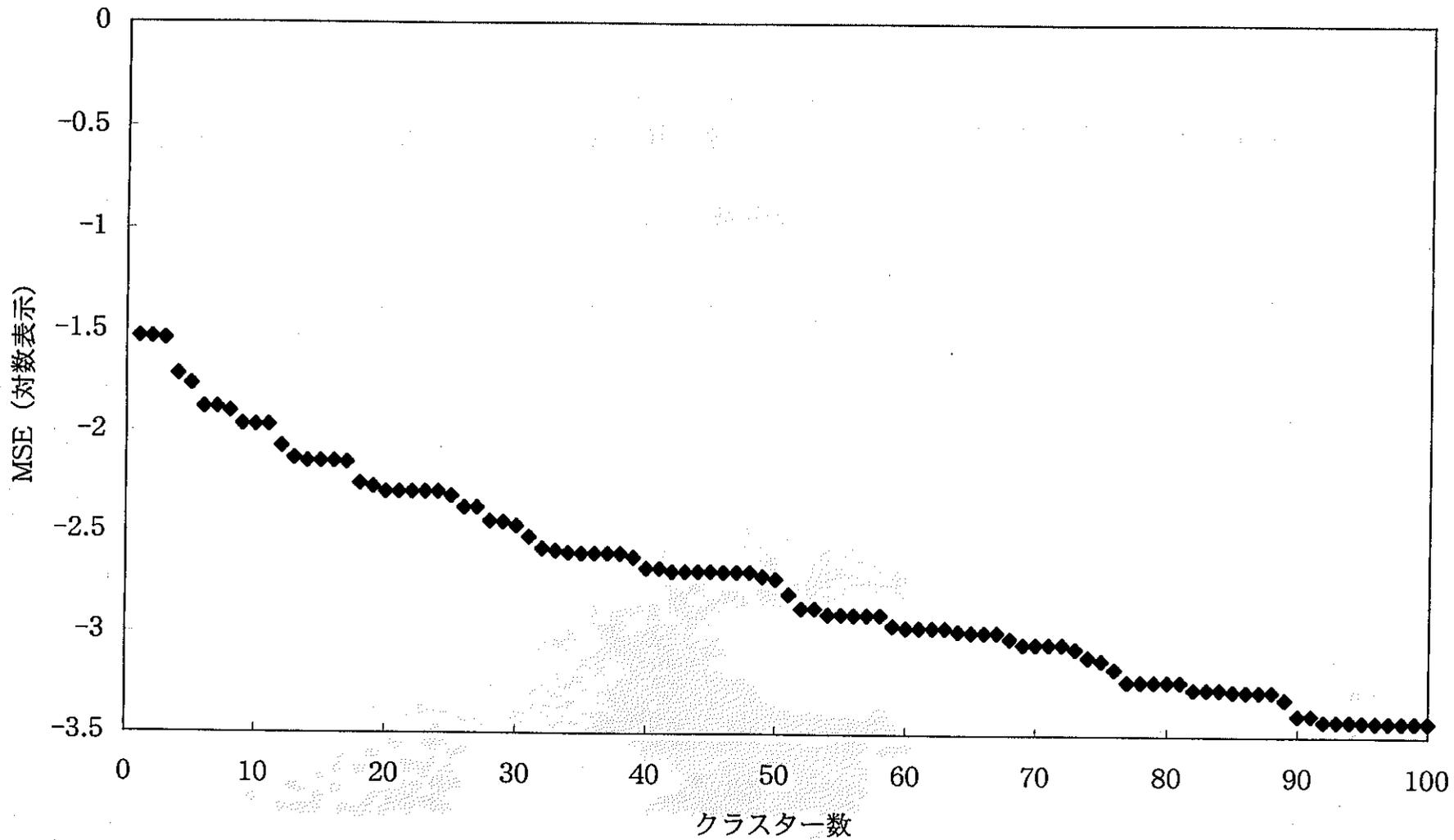


図4.7.2 リファレンスケース近傍の第三次サブリングについての  
クラスター数と平均二乗残差の関係 (Np237,Th229)

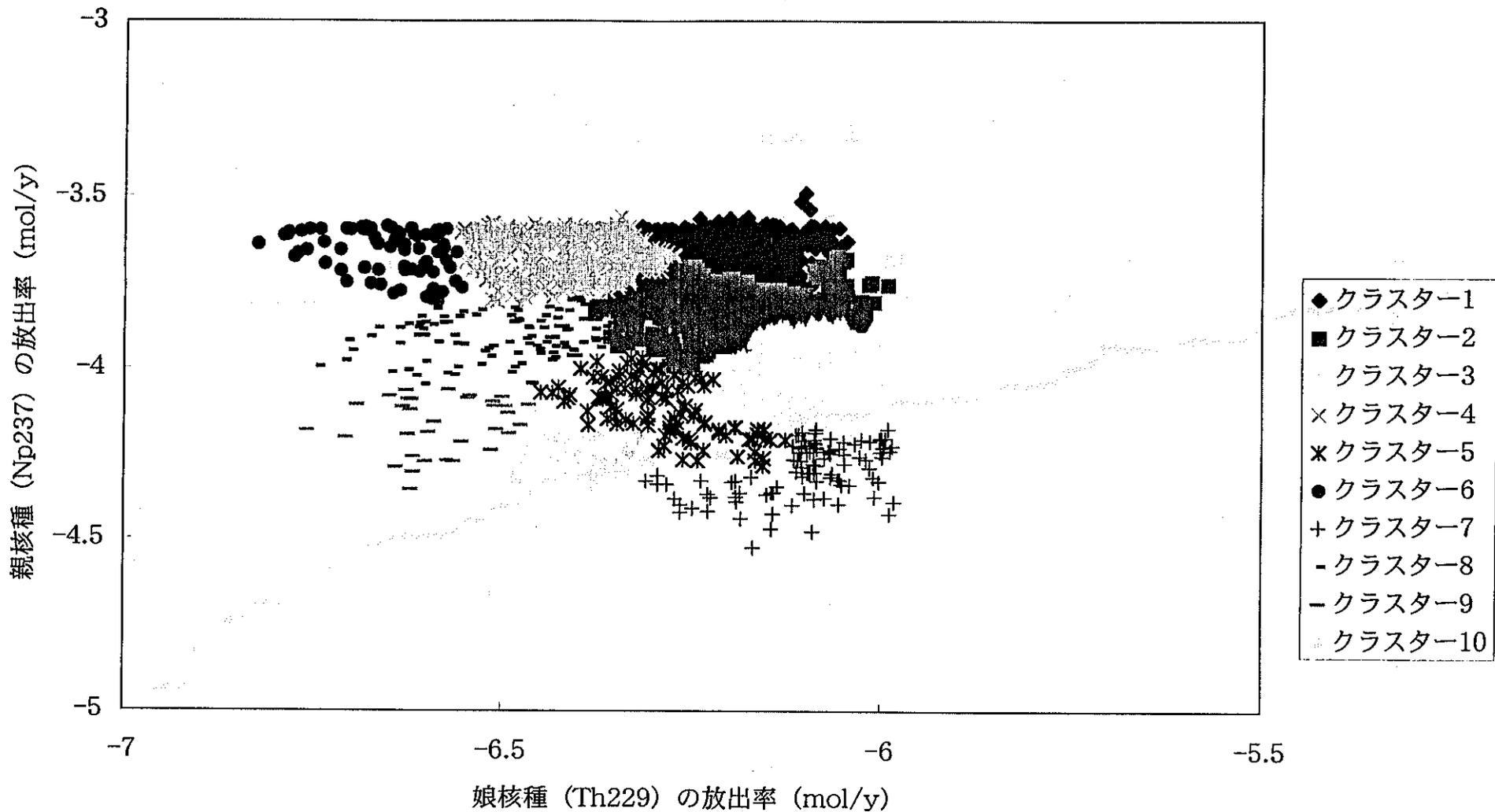


図4.7.3 リファレンスケース近傍の第三次サブリング\* についてのクラスタ分析結果 (Np237, Th229)

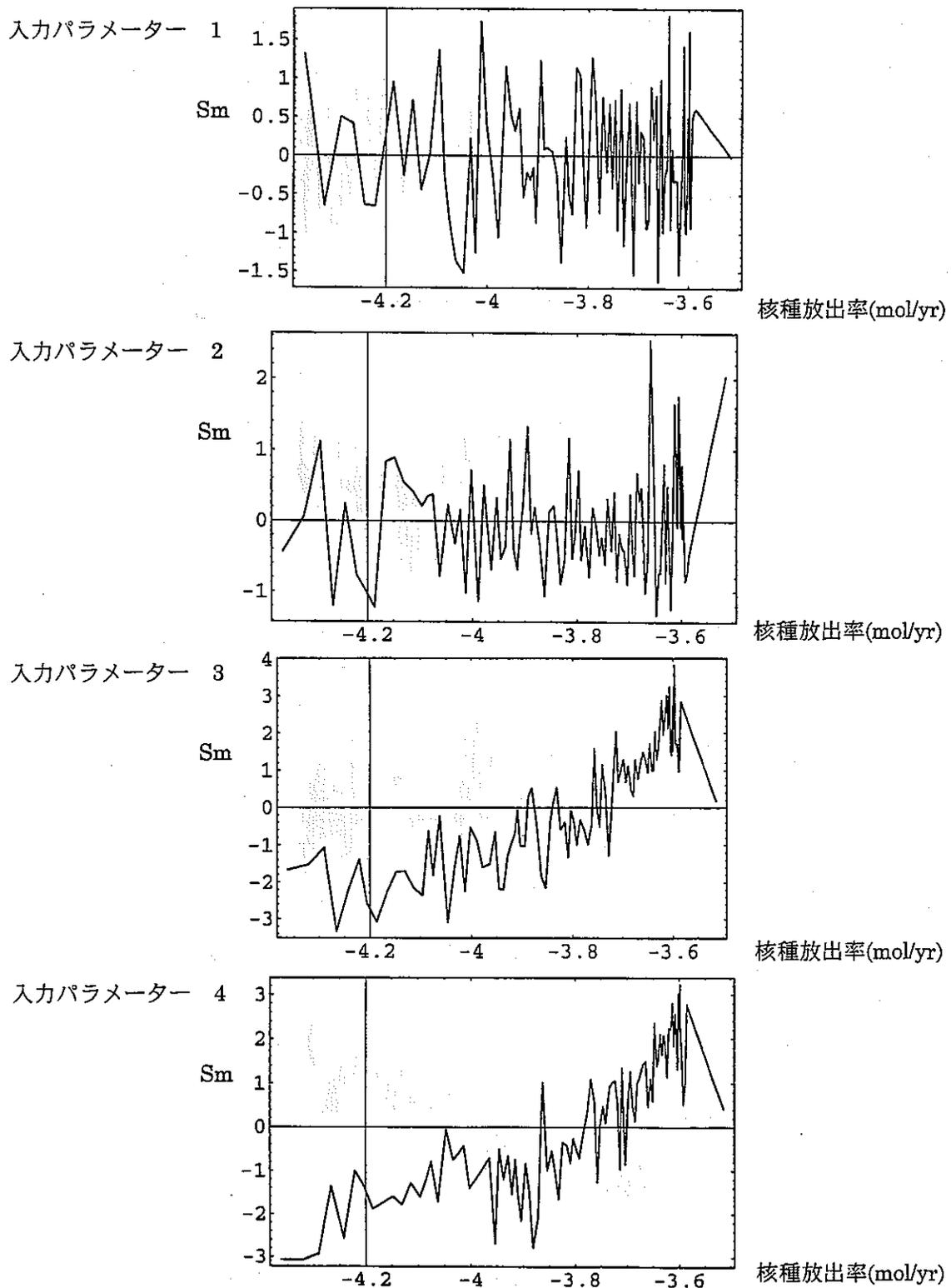


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237,Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種 (1) )

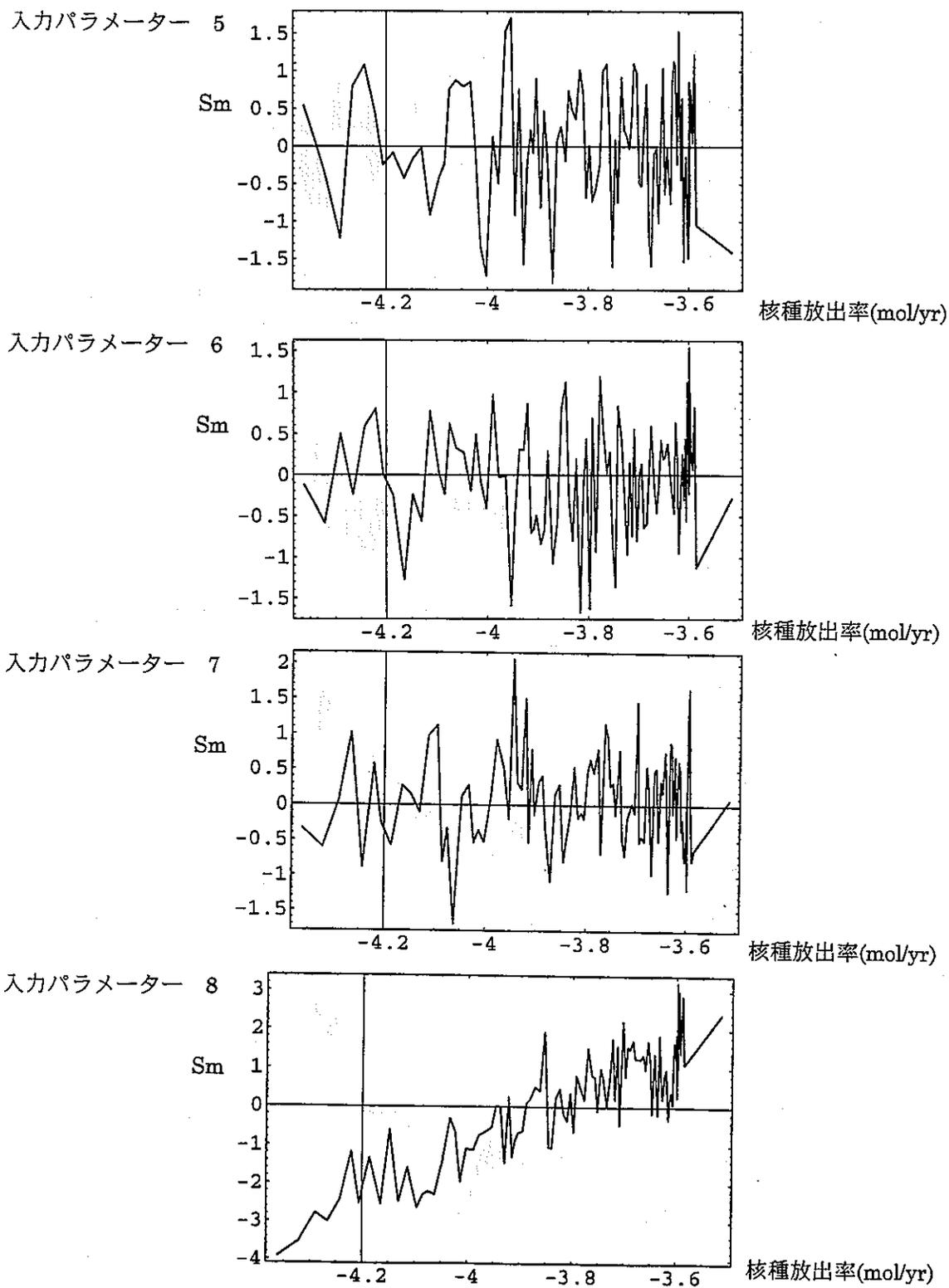


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種 (2) )

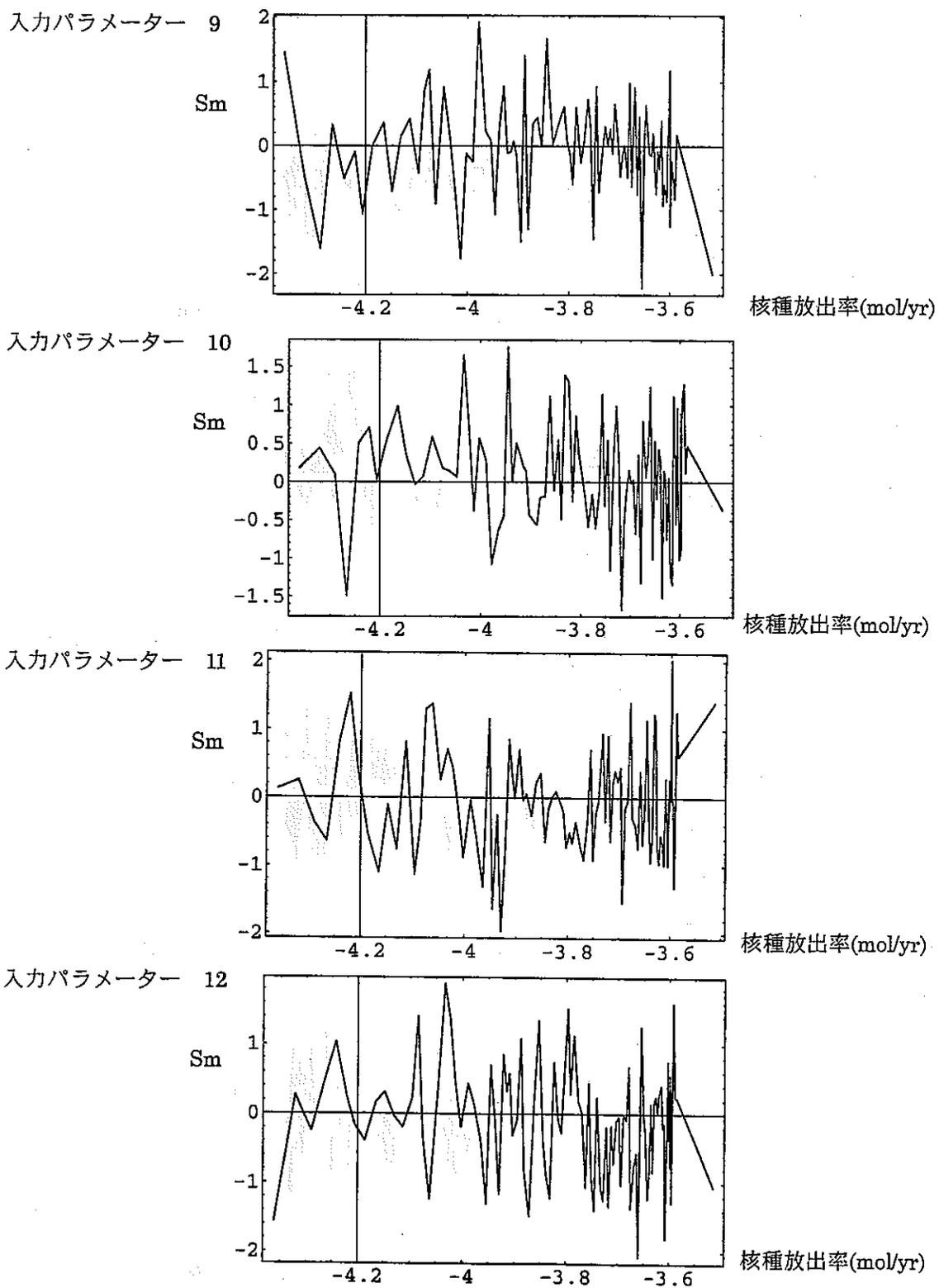


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229)  
 についての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (3) )

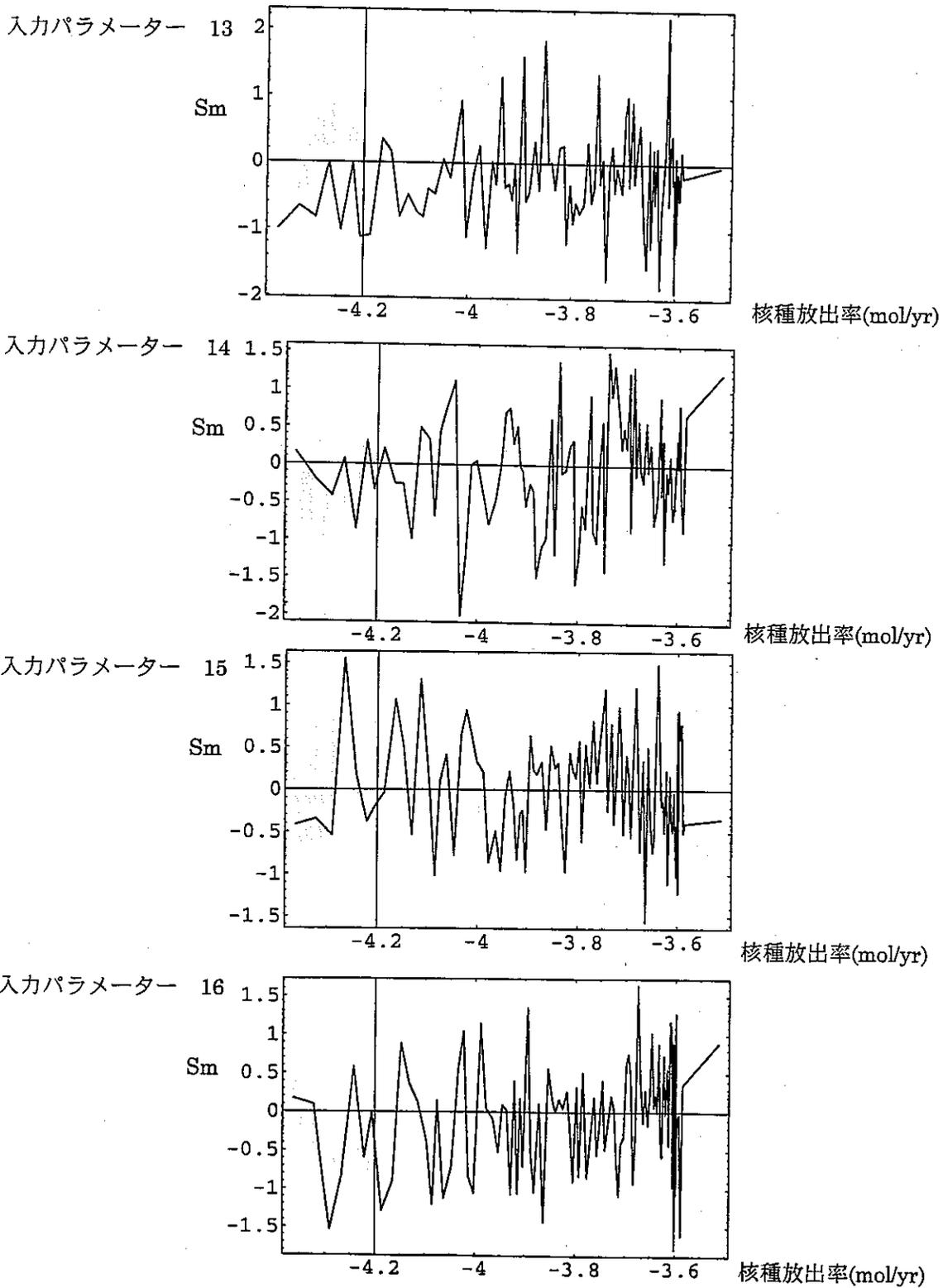
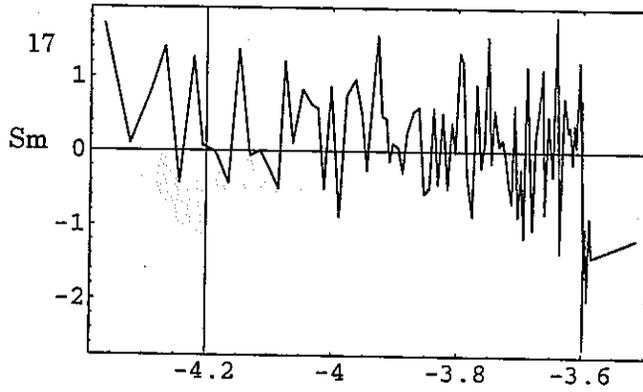


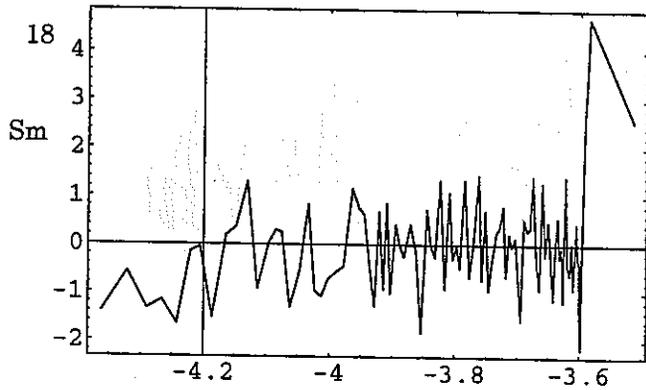
図 4.7.4 リファレンススペース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229)  
 についての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (4) )

入力パラメーター 17



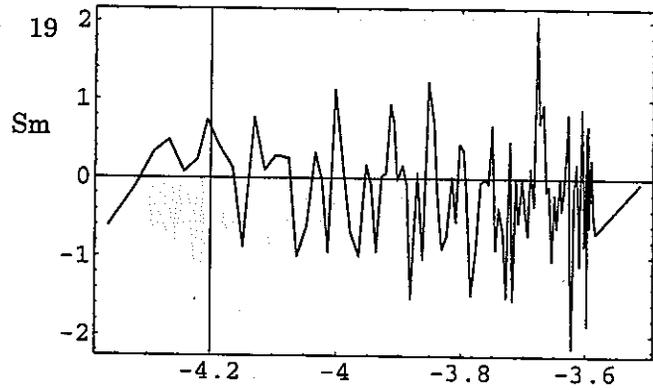
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 18



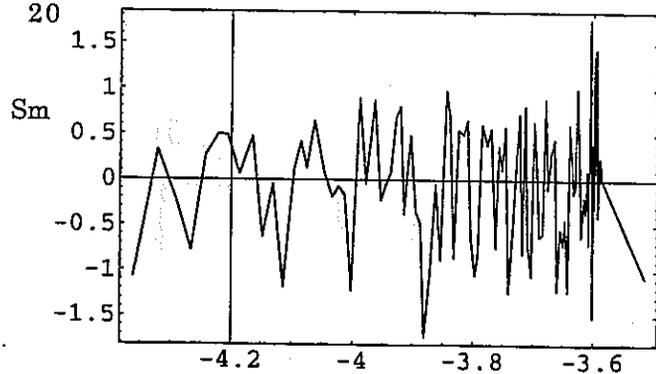
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 19



核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 20



核種放出率(mol/yr)

図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237,Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種 (5) )

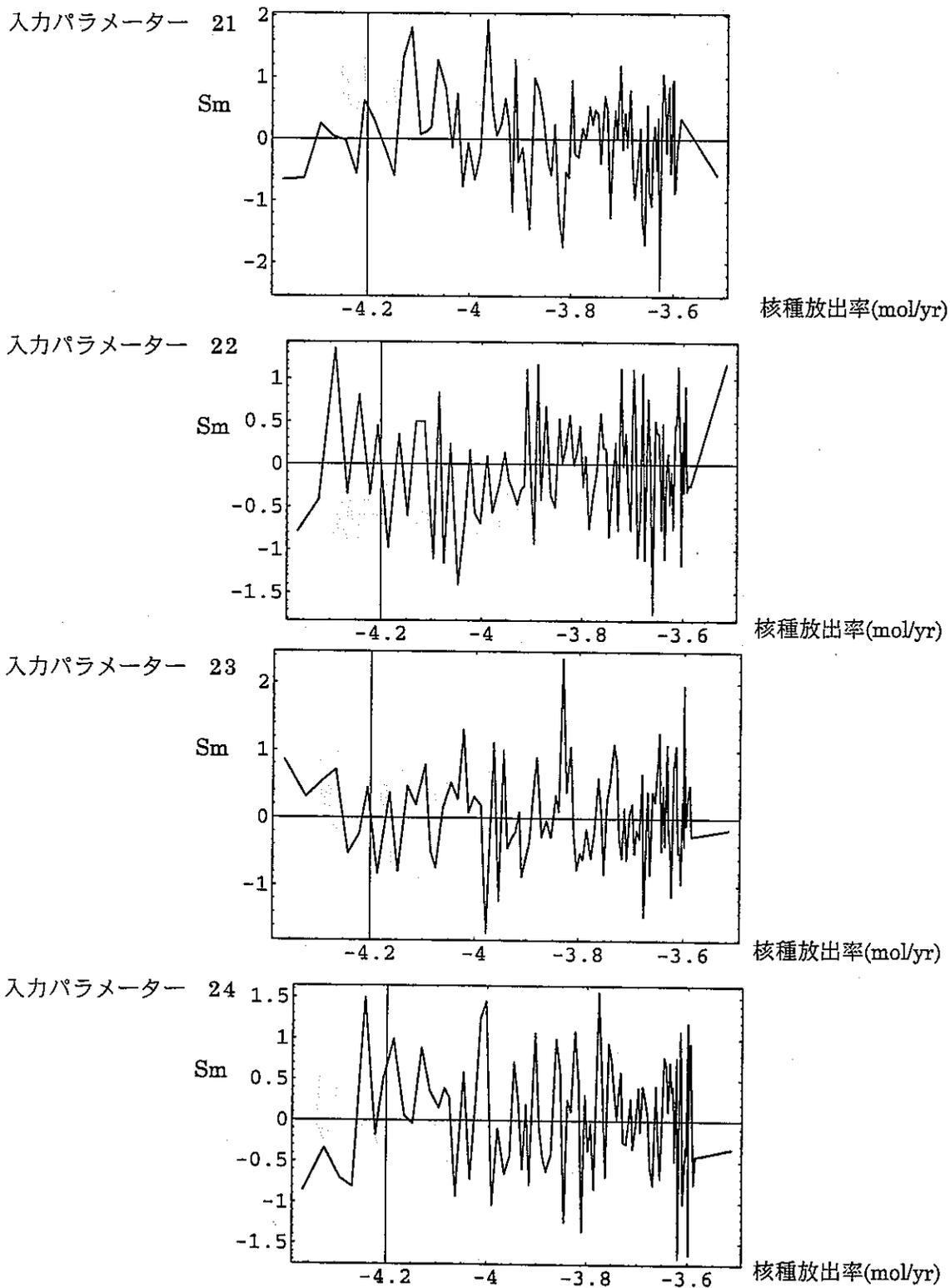


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237,Th-229)  
 についての Moving Band 解析の結果  
 (親核種 (6) )

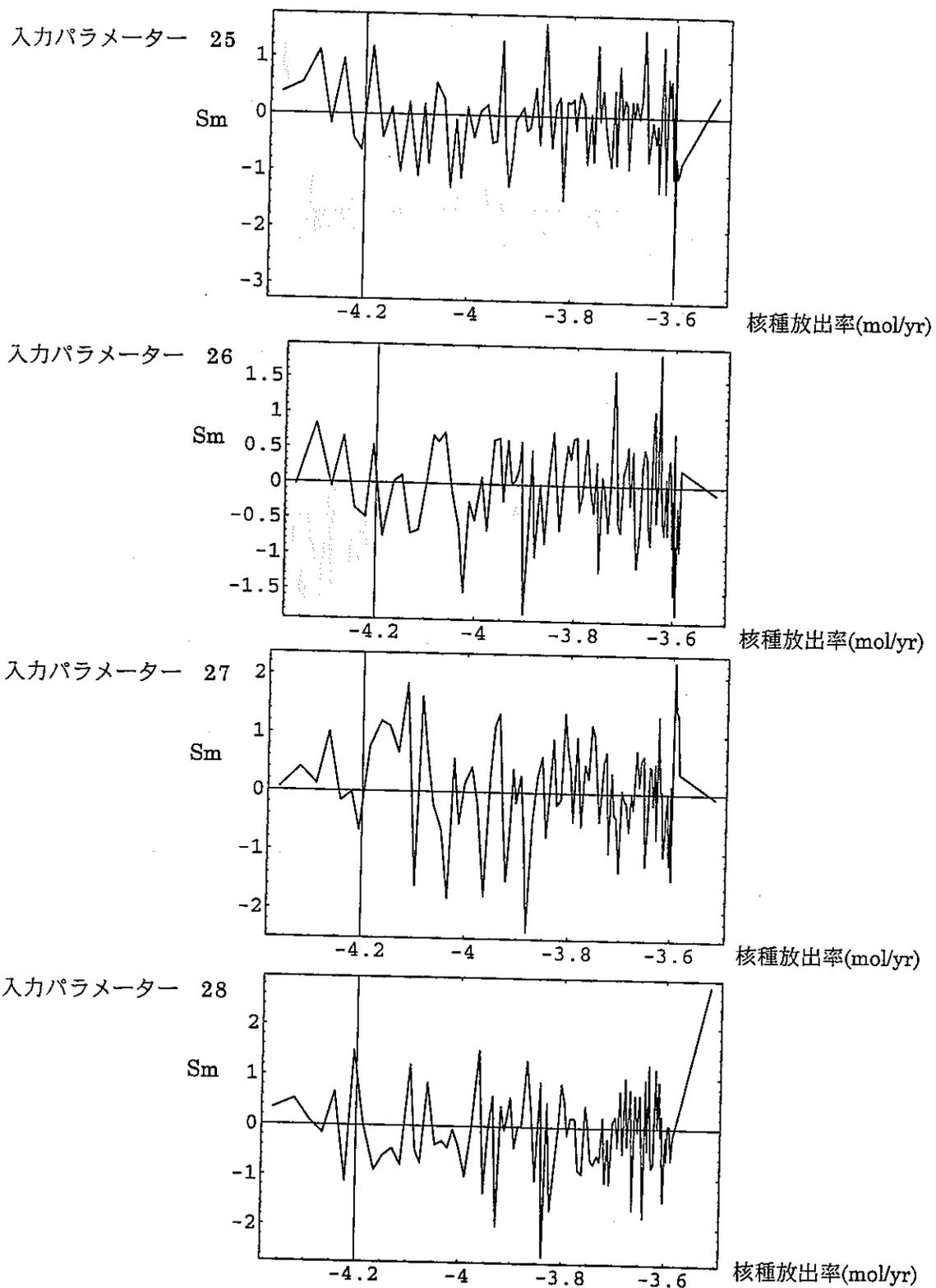


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種 (7) )

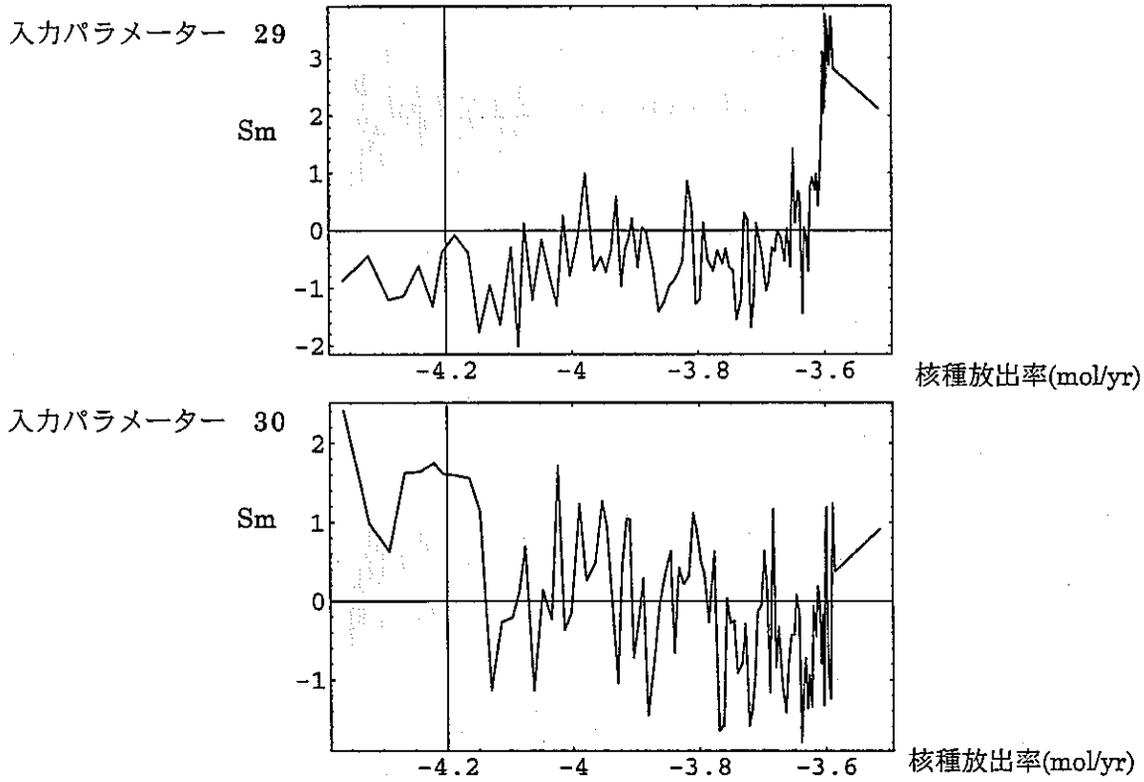


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237,Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (親核種 (8) )

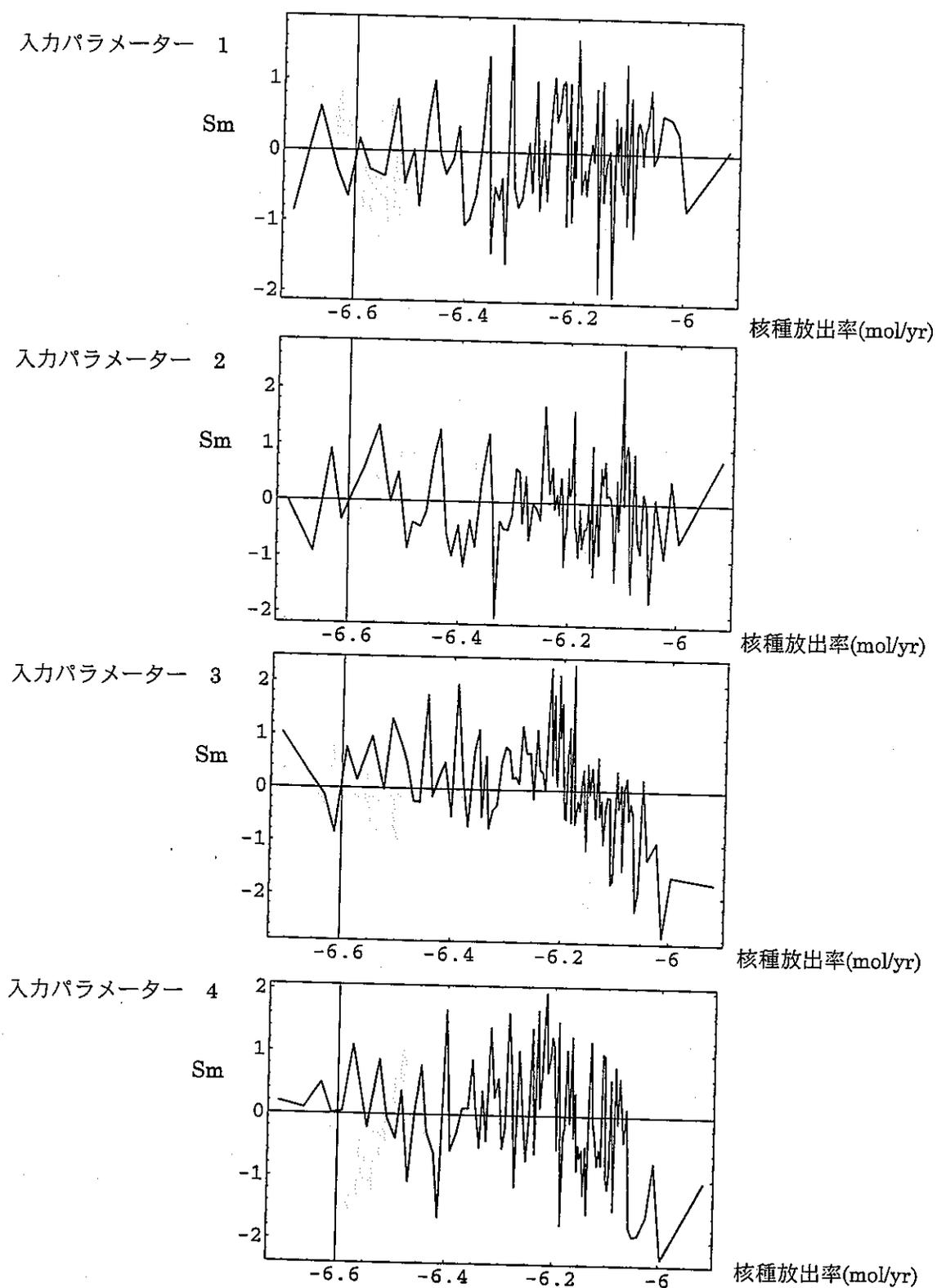


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (1))

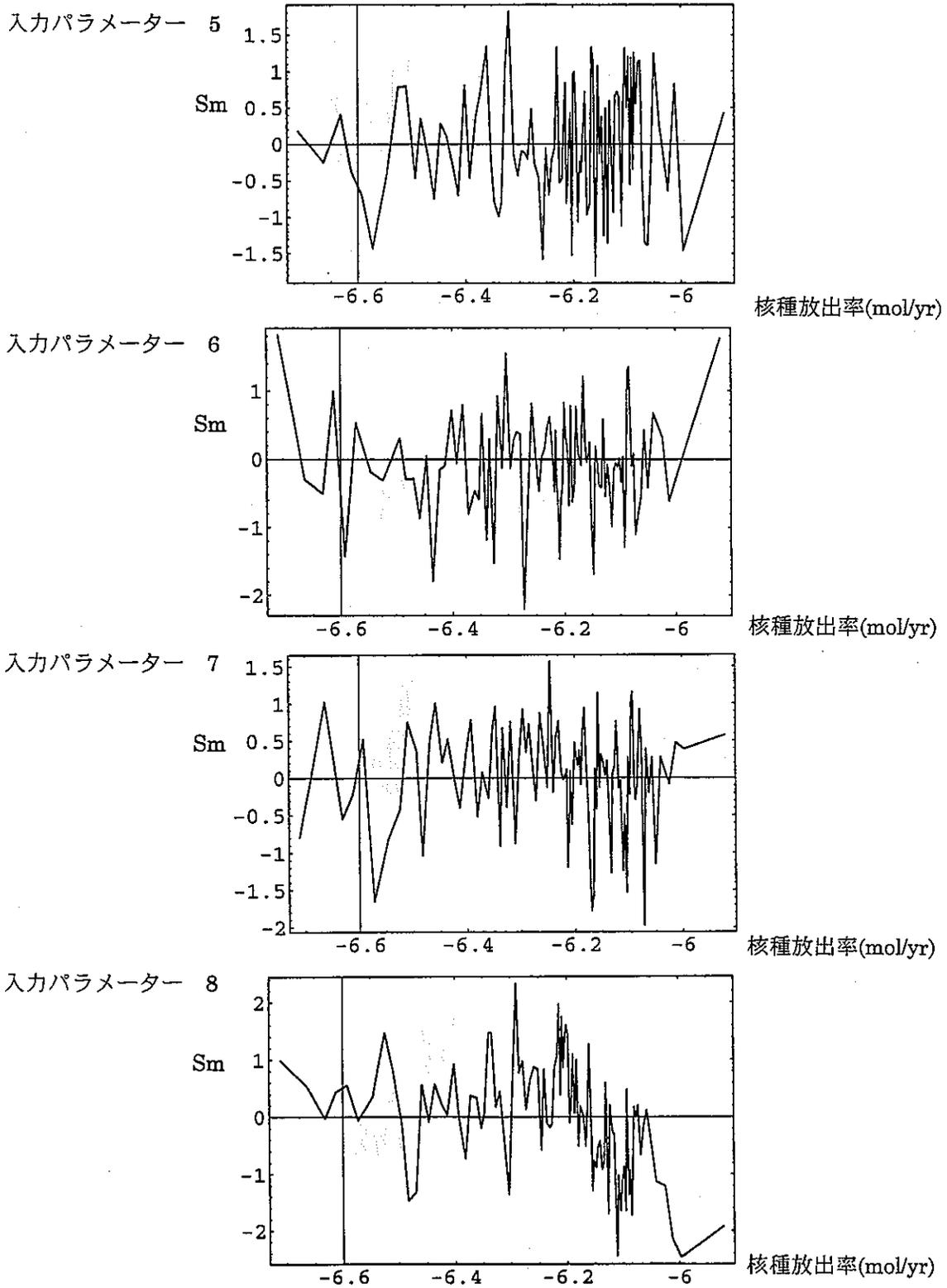
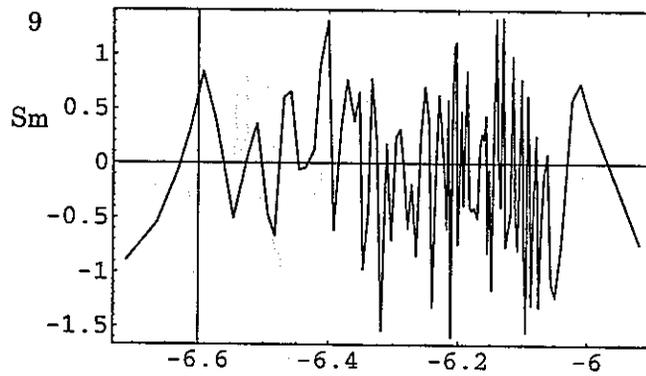


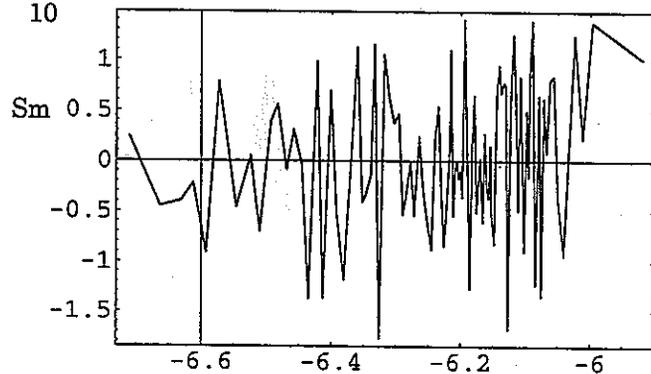
図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (2) )

入力パラメーター 9



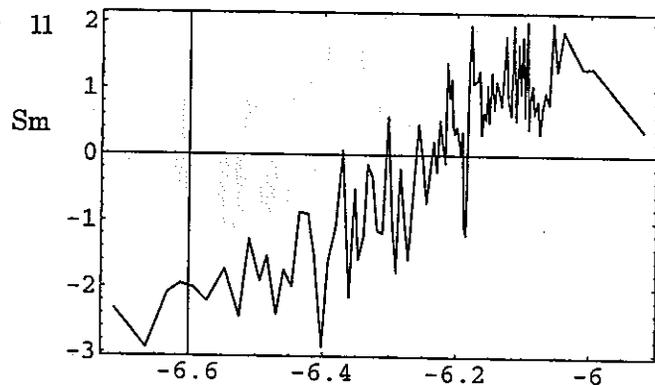
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 10



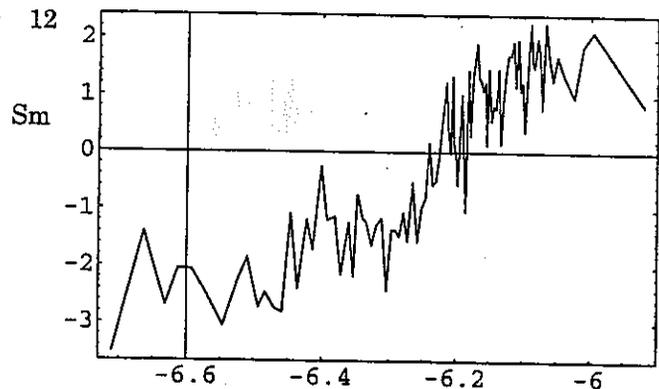
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 11



核種放出率(mol/yr)

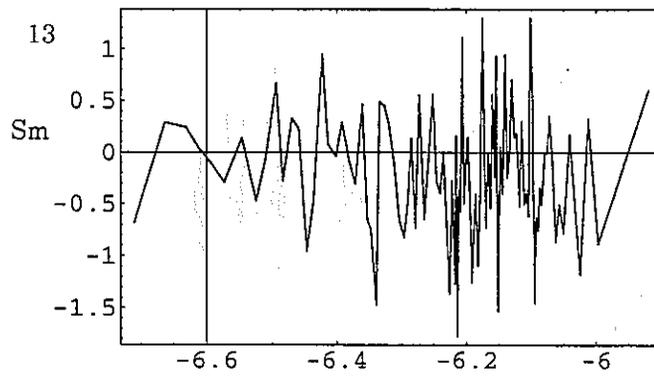
入力パラメーター 12



核種放出率(mol/yr)

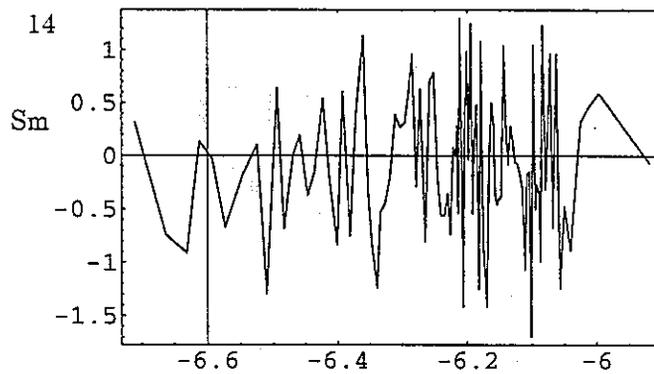
図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237,Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (3) )

入力パラメーター 13



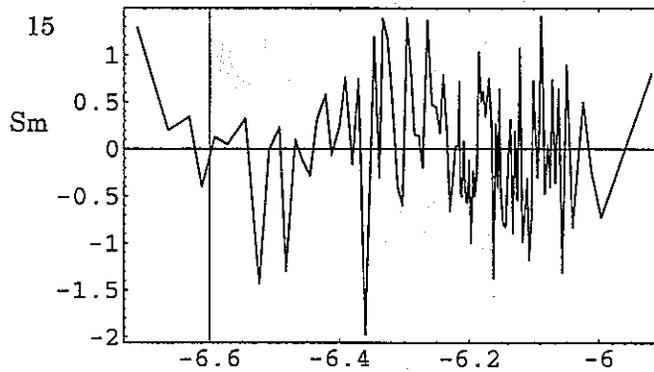
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 14



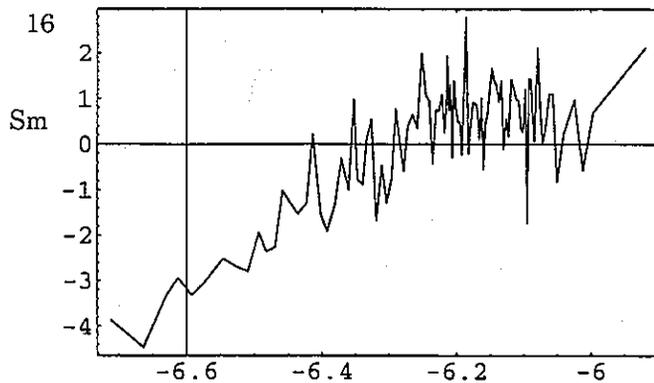
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 15



核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 16



核種放出率(mol/yr)

図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (4))

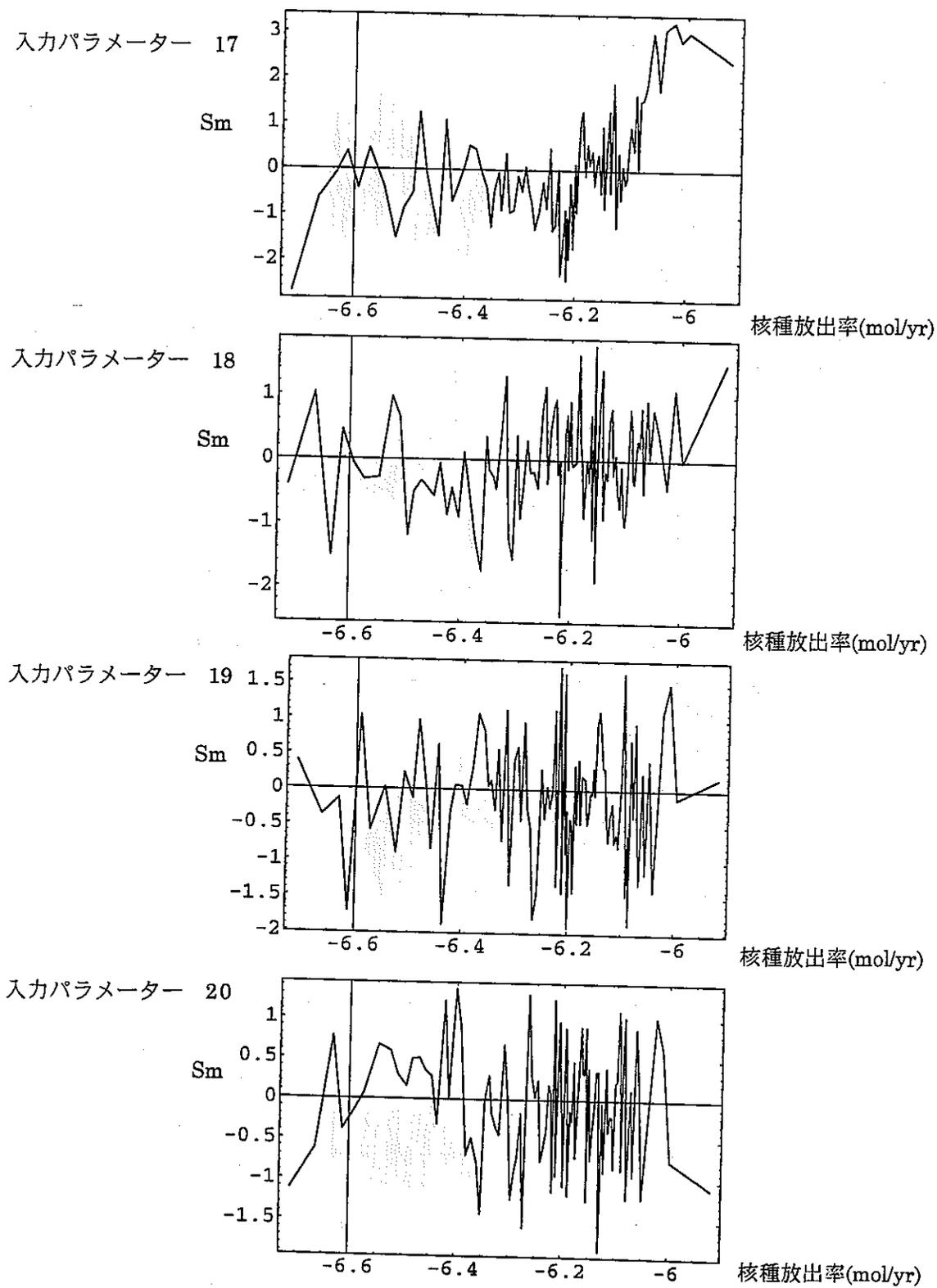
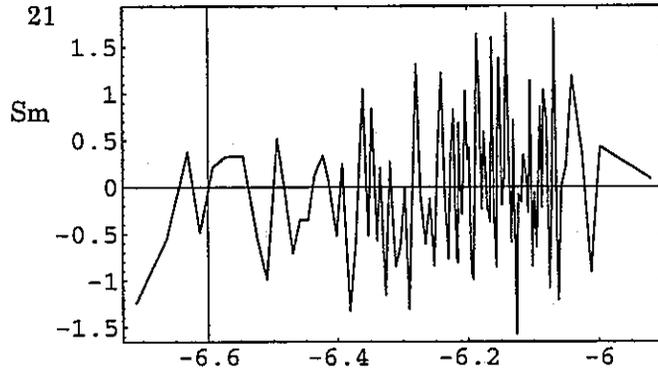


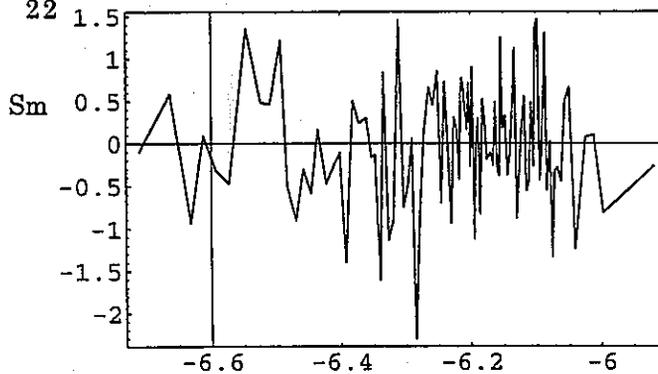
図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (5))

入力パラメーター 21



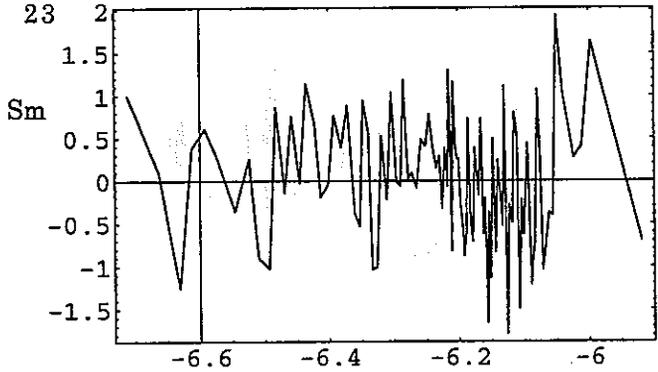
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 22



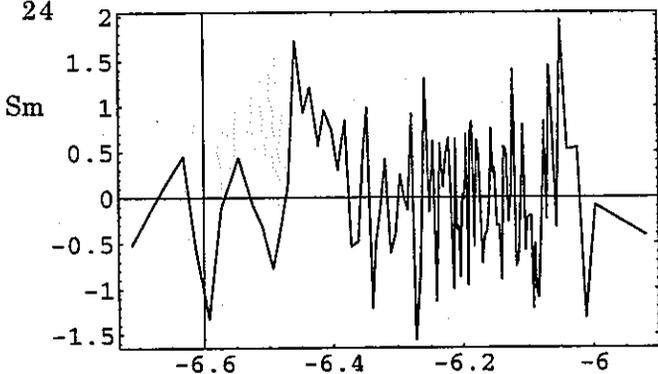
核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 23



核種放出率(mol/yr)

入力パラメーター 24



核種放出率(mol/yr)

図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237,Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (6) )

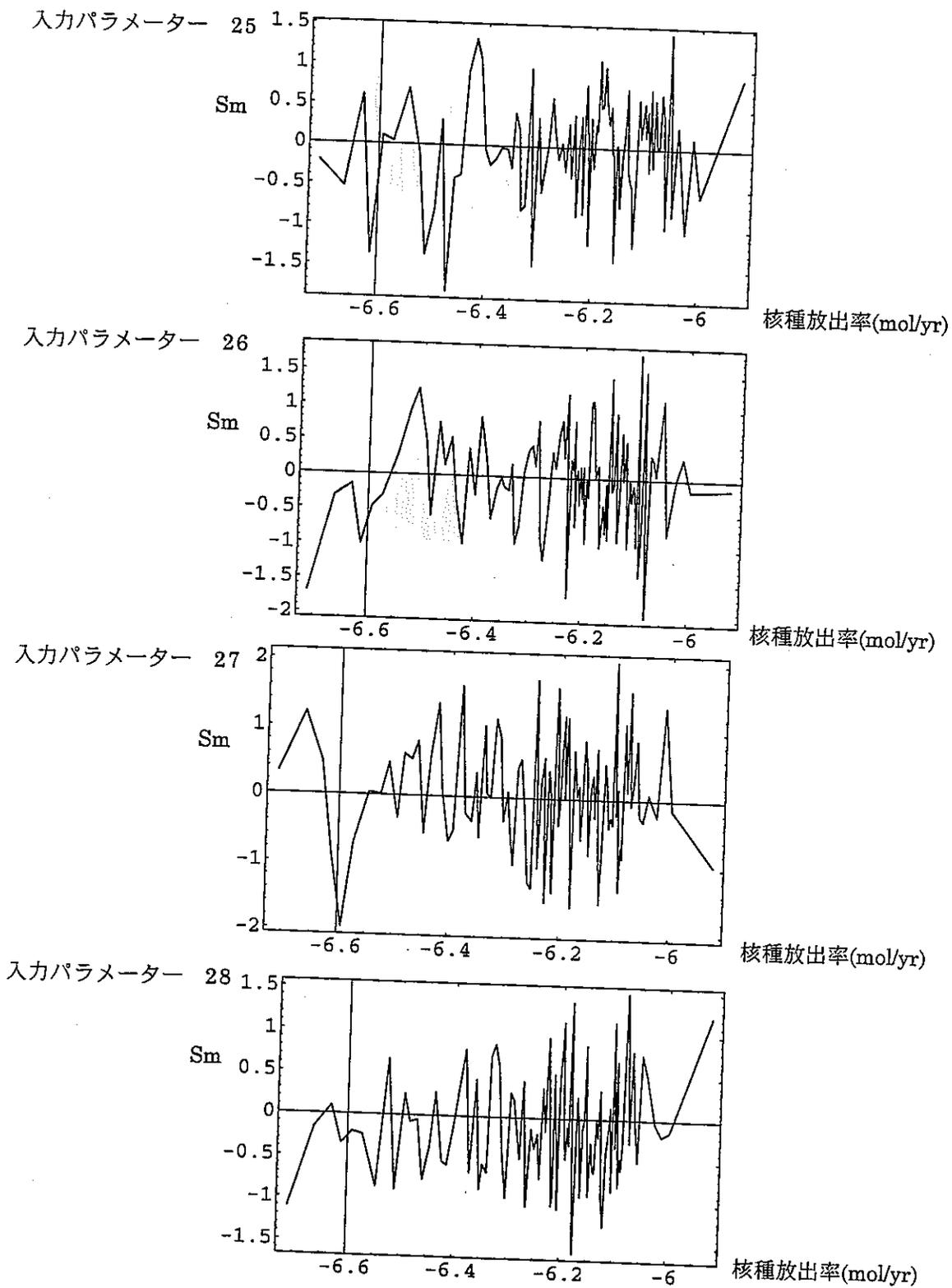


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237, Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (7) )

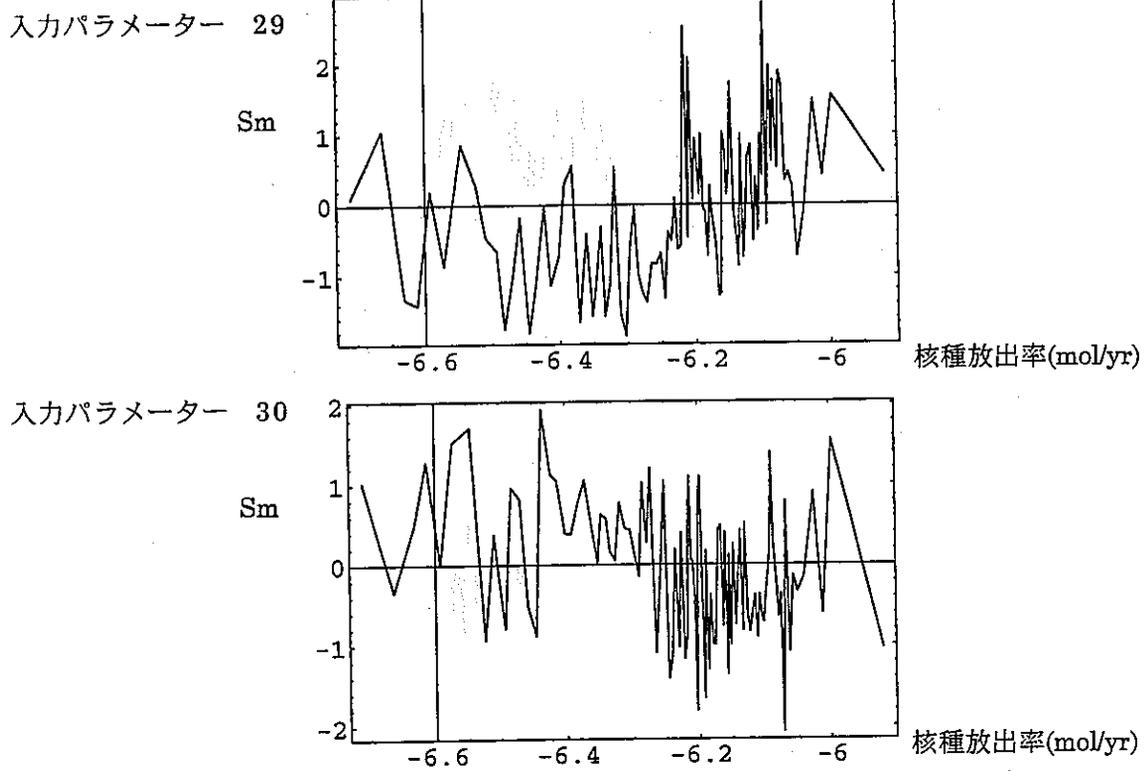


図 4.7.4 リファレンスケース近傍の第三次サンプリング (Np-237,Th-229) についての Moving Band 解析の結果 (娘核種 (8) )

表 4.7.3 に挙げた入力パラメータのうち最初の 6 個は、溶解度限界による放出率制限、及び地球化学的な条件の変動がこれに及ぼす影響の重要性を示すものである。また、オーバーパック腐食時間の娘核種放出率についての感度が正の傾向にあることは、長期の閉じこめによる Th-229 のインベントリの正味の増加に対応するものである。

図 4.7.5 は、各クラスタにおけるそれぞれの入力パラメータの感度 (Jacobian 行列) をプロットしたものである。表 4.7.3 に挙げた各入力パラメータは、高い側の放出率に対応しかつ十分なケース数を含むクラスタ 1~4 の感度をほとんど支配していることが明らかである。

第三次サンプリングの結果として上記にも増して重要な事実は、第二次サンプリングにおいて見られたリファレンスケースと同程度の比較的低い親核種の放出率を示すケースがほとんど見られなくなっていることである。第三次サンプリングにおいて固定した入力パラメータ値のうち、第二次サンプリング時点に比して核種の移行を助長する方向の設定は、速度論的な不動態化を削除したことのみである。他方、第三次サンプリングにおいて固定されずに残されている入力パラメータの内 14 個は化学的、水理学的あるいは力学的な条件変動に関するものであり、各解析ケースにおいてこれらの効果は何らかの影響を及ぼしているものと考えられる。以上のことから考えれば、上記の変化の説明として最も蓋然性の高いものは以下の通りである。

「化学的、水理学的あるいは力学的な条件変動が程度の差こそあれ常に存在する状況では、速度論的な不動態化 (非可逆吸着、安定相としての沈澱、あるいは結晶化等) による系の急激な変動の緩衝作用が、多重バリアシステムの頑健性に重要な役割を果たし得る。」

通常のリファレンスケースその他の環境条件の時間変化を無視した性能評価計算においては、一定の条件に対応した最大放出率が一過的に達成されるものであるために、一般に、速度論的な不動態化あるいは何らかの不可逆な固定化の果たす役割は常に過小な評価を受けてきた。しかしながら、ある程度の条件変動があることを前提とした場合、溶解・沈澱あるいは吸着に関する瞬時平衡の仮定は実際には考えにくい様な過敏な系の応答をもたらす可能性があるものと考えられる。換言すれば、一旦固定化された核種の再動態化における速度論的な制限を取り入れないとすると、現在のリファレンスケースが代表し得る核

種移行挙動の範囲は、化学的、水理学的、あるいは力学的な摂動が全く無い様なある意味で理想化されたクラスのものに限られてしまう危険性がある。

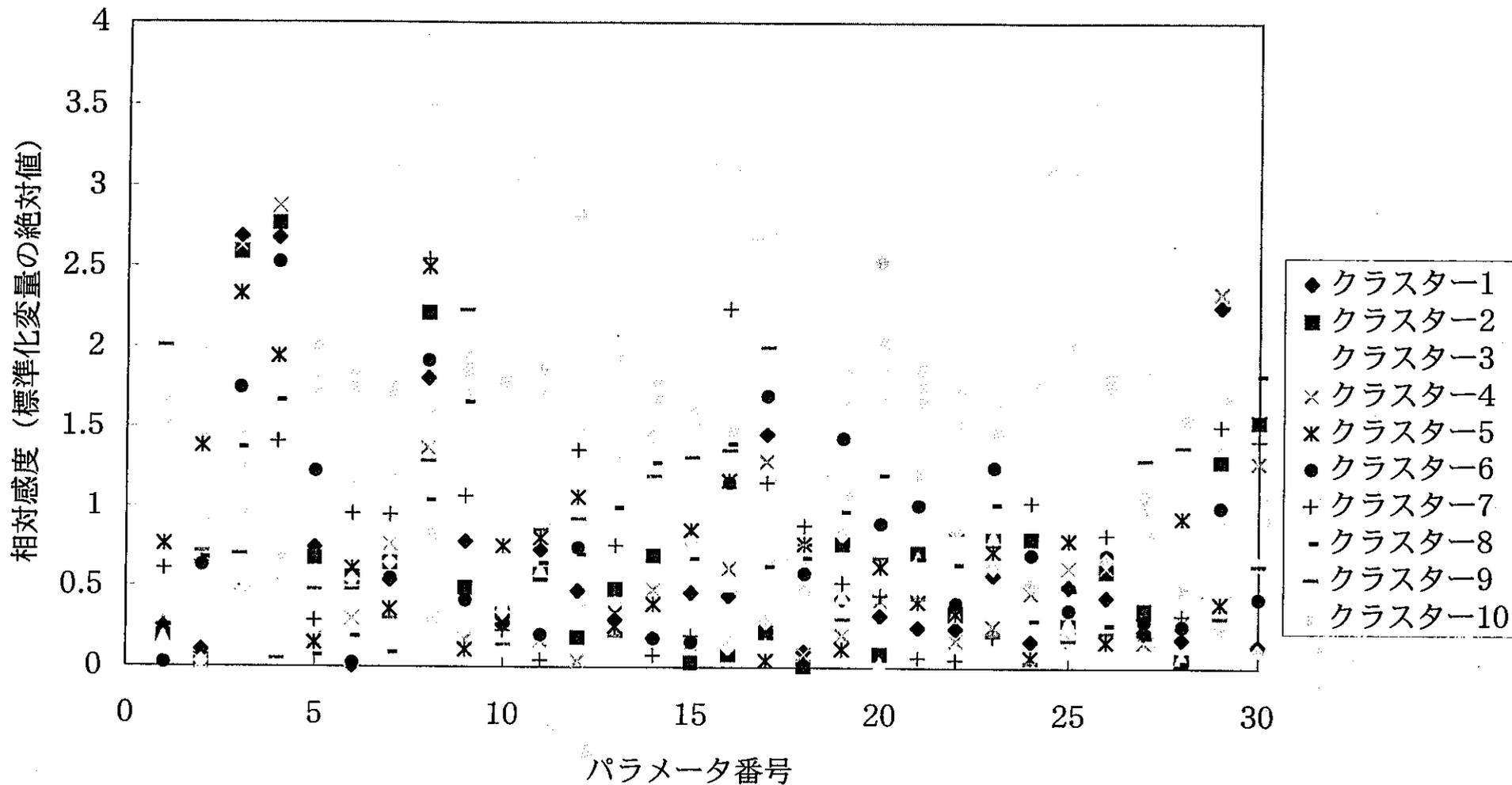


図4.7.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(リファレンスケース近傍の第三次サブリング : Np237)

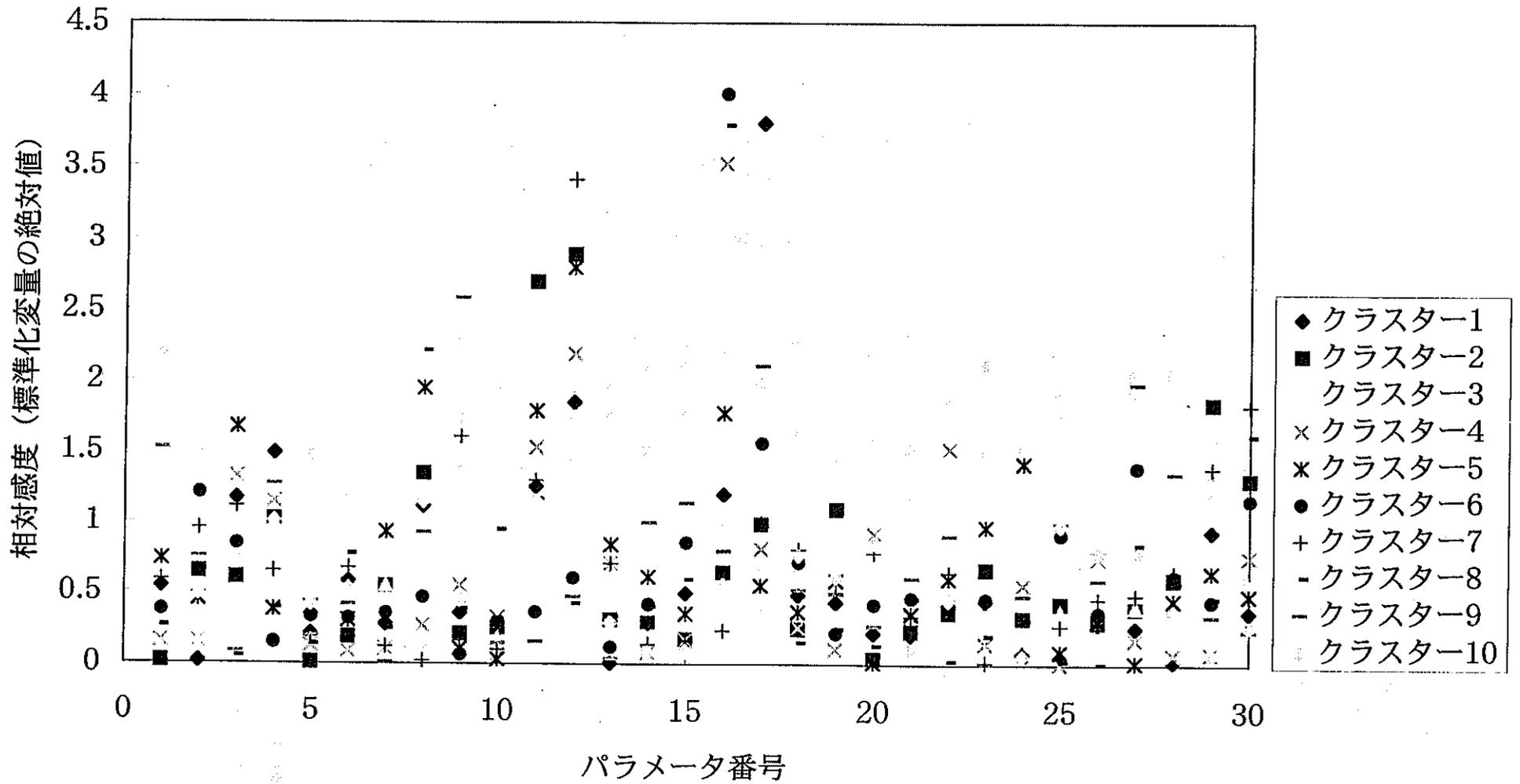


図4.7.5 各クラスターにおける入力パラメータの感度  
(リファレンスケース近傍の第三次サプリング : Th229)

## 4.8 感度解析結果のまとめ及び今後の性能評価研究への成果の反映

### 4.8.1 感度解析結果のまとめ

既に述べた様に、統計的解析結果に対する感度分析は、感度が単純な、換言すれば他のパラメータ値に依存しない入力パラメータ群から順に抽出するという傾向がある。従って、三回に及ぶ統計的解析の結果順次抽出された重要パラメータ群の抽出順序は、必ずしも性能評価において行う種々の解析における重要性に一对一で対応しているものではない。言い換えれば、ここでの重要パラメータ群の抽出順序は、「感度構造の簡単さ」に従うものであり、ある解析では、後から抽出された複雑な感度（例えば、複数のパラメータ全体の設定として表現される溶解度限界等の平均移行特性）の方が既に抽出されているより簡単な感度構造（例えば、各核種の初期インベントリ）よりも重要となることもあり得る。ここで重要な点は、パラメータの「重要性」が、それぞれの解析における評価コンテキスト（特に、どのパラメータの範囲までを前提条件として固定し、他のどのパラメータについて感度を調べようとしているのか）に依存しているということである。この意味からは、むしろ、上記の抽出順序は、地層処分概念の成立性についてのフィージビリティスタディといった予備的な検討のレベルから設計や許認可に対応したより詳細なレベルまで、性能評価の各段階に対応して解析条件を逐次設定していく際の検討のあるべき順序（何を与条件として、何を検討するか）に対応するものと見ることの方が適当である。

第一次の全域的なサンプリングによって抽出された重要なパラメータ群は以下のものである（表 4.5.2 参照）。

- (1) 親核種半減期
- (2) 娘核種半減期
- (3) 親核種初期インベントリ
- (4) 娘核種初期インベントリ
- (5) 親核種遅延係数
- (6) 娘核種遅延係数
- (7) ガラス浸出期間
- (8) ゆるみ域透水係数
- (9) 母岩透水係数

これらの入力パラメータは、いずれも本章前半で述べた種々の現象に対応するというよりは、地層処分というシステムの条件設定に係るものである。例えば、(1)～(6)は、「どのような放射線学的あるいは化学的特徴を有する放射性核種が当該廃棄物に含まれるか」によって規定されるものであり、(7)は、この廃棄物をどの様に固化するかという選択に依存している。また、(8)及び(9)は、この廃棄物固化体をどこに定置するのかによってほぼ定まる。つまり、換言すれば、評価の対象が高レベル放射性廃棄物ガラス固化体の地層処分であることを指定すれば、(勿論、複数の核種が対象となるが)上記の9個のパラメータ値はある範囲に限定されることとなる。逆に、これらの基本的なシステム仕様とも呼ぶべき諸元の範囲を特定することが性能評価の第一のステップであることは言うまでもない。

次に、Np-237 及び Th-229 についてのリファレンスケース近傍の第二次サンプリングにおいて抽出された重要な入力パラメータは以下の通りである(表 4.6.6 参照)。

- (10) 親核種第二区間勾配 (拡散)
- (11) 親核種の不動態化速度
- (12) 親核種の安定相溶解速度
- (13) 娘核種第二区間勾配 (拡散)
- (14) 娘核種の不動態化速度
- (15) 娘核種の安定相溶解速度
- (16) 動水勾配最小値
- (17) 動水勾配最大値
- (18) 強い流れの継続期間
- (19) 内側地球化学異常継続期間

また、特に、親核種について大きな放出率に対応した領域では以下のパラメータが付加的に重要となっている。

- ・ 親核種の第一節点濃度
- ・ 親核種の第二節点濃度
- ・ 地球化学異常での節点のシフト

これらのパラメータの感度は強い非線形性を有することが特徴であり、ガラ

ス固化体浸出率律速に対応する放出率の境界をはさんで、境界よりも下の放出率領域にあるケース群では、上記の各パラメータは単調な感度を有している。既に述べた様に、この放出率領域は核種の再濃縮（固定化）とそのフロントの伝播を伴わない核種移行機構に対応しており、この領域での放出率は上記の各パラメータに単調に依存しているものと思われる。他方、上記の境界を上回る放出率領域では再濃縮（固定化）フロントが緩衝材外側にまで達し、そこで比較的強い地下水流によって洗い流されるという代替的な移行機構が生じている。この領域では、放出率値は各パラメータ値に単調に依存するのではなく、むしろ、上記の複数のパラメータ値が特定の組み合わせを示した場合に極端に大きな出力をもたらすことに対応している。この組み合わせ、及びその発端となり得る事象群との対応については昨年度の報告書にも述べた通りであり、この内容を図4.8.1にまとめる。

第二次サンプリングにおいて重要性が認識された諸パラメータ値（上記(10)～(19))をリファレンスケースに対応して固定すると、核種の移行形態は完全に通常の瞬時平衡溶解度限界・線形吸着モデルに還元される。従って、第三次サンプリングは、この瞬時平衡溶解度限界・線形吸着モデルに対して種々の化学、水理学及び力学的な摂動を統計的に与えた場合の応答を定量化したものである。この結果抽出された重要なパラメータは以下の通りである。

- (20) 親核種第一節点濃度（溶解度）
- (21) 地球化学異常での親核種の節点のシフト  
（地球化学異常内での溶解度）
- (22) 娘核種第一節点濃度（溶解度）
- (23) 地球化学異常での娘核種の節点のシフト  
（地球化学異常内での溶解度）
- (24) オーバーバック腐食時間
- (25) 内側地球化学異常開始時期

また、第二次サンプリングとの比較から明らかなことは、既に述べた通り、第三次サンプリングにおいてはリファレンスケースに相当する低放出率側のケース群が失われていることである。このことは、第三次サンプリングにあたって消去した速度論的な固定化及び再溶解が、種々の環境条件変動に対して系の安定性を与える働きを有していたことを示唆している。更に言えば、これらの速度論的な効果への取り組みの有無によって、今後の第二次とりまとめ作業の

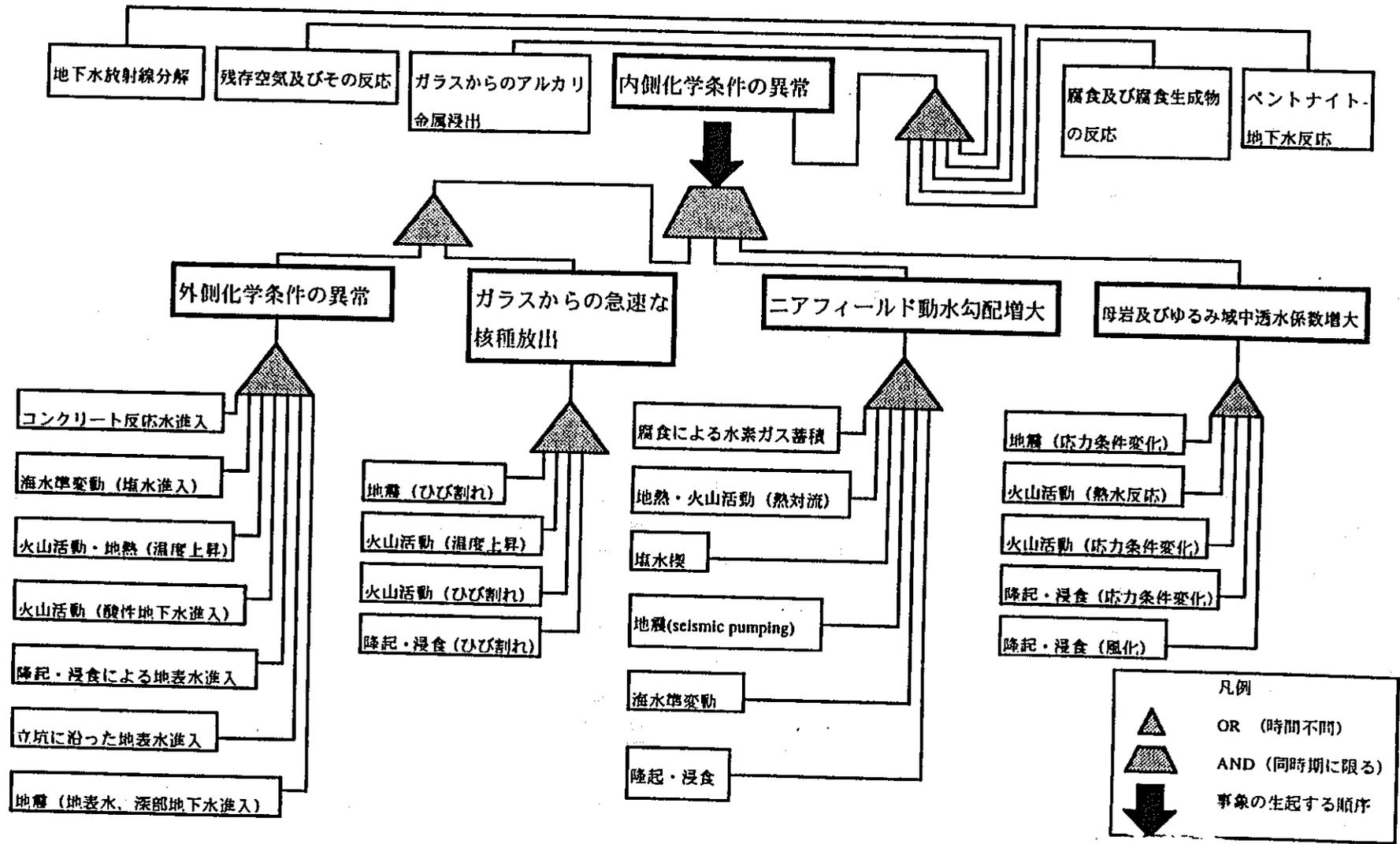


図 4.8.1 ガラス浸出率律速を上回る放出率をもたらし得る事象の組み合わせ

結果が、

a. リファレンスケースは、将来の環境変動が全くないという理想的な条件に対応するものであり、性能評価における解析作業の起点ではあるが、現実的な将来の環境変動を見込んだ諸シナリオに対応する評価結果を定量的に代表するものではない。

b. リファレンスケースは、解析作業の起点であると同時に、将来の環境変動が生じたとしても、変動が相対的に緩やかであるかあるいは核種の数値論的な固定化機構が働くことにより系が過度に鋭敏に反応しないようなある程度広い範囲のシナリオにおける評価結果をも定量的に代表し得るものである。

というリファレンスケースの大きく異なる二つの位置づけの中で、a.にとどまるか、それとも b. までを示すことができるかを左右する可能性がある。

#### 4.8.2 統計的解析及び感度解析結果の性能評価への反映

近年、各国の研究開発プロジェクトにおいて広く認識されている様に、性能評価は、その行為の全体として反復的に行われるべきものである。この意味からは、前節までに述べた統計的解析及び感度解析の結果は、本研究の一つの到達点であると同時に、次の段階の性能評価のための起点と方向性を定めるものでもある。これは、より具体的には、

- 1) 上記の結果として明らかになった感度構造を踏まえて、各入力パラメータに対応する現象群の重要度分類を行う。
- 2) 重要な入力パラメータ値あるいはその組み合わせを生ずる様な現実的な状況が実際に起こり得るか否かを専門家に問う。

ということによってなされる。

本節では、リファレンスケース近傍の第二次あるいは第三次統計的解析の結果、ガラス固化体浸出率律速に対応した核種放出率を境界として、定性的に異なる二つの感度構造が特定されたことに着目し、以下、

a) リファレンスケースを含む連続的かつ単調な感度構造に含まれる現象群

b) リファレンスケースとは定性的に異なる感度構造に対応する現象群

に大別して、それぞれ 4.8 に述べた結果を整理し直すとともに、これらに基づき専門家への質問を設定することとする。

(1) リファレンスケースを含む連続かつ単調な感度構造に含まれる現象群

リファレンスケースを含む、ガラス浸出率律速以下の放出率の領域に限定して三次にわたる統計的解析及び感度分析の結果を見た場合、この領域にある最高放出率は次表に挙げる入力パラメータによって支配されていることがわかる。

表 4.8.1 リファレンスケースを含む連続的かつ単調な感度構造において重要となる入力パラメータ及び対応する現象群

入力パラメータ	傾向	FEP
遅延係数	逆	線形吸着 イオン交換 表面錯体形成 表面拡散 陰イオン排斥 コロイド濾過
ガラス浸出期間	逆	ガラス溶解（一次反応及び残存反応） 表面層形成及び表面層中の拡散 調和溶解 選択的浸出 ガラスひび割れ ガラス内初期ポイド ガラスの結晶化 ケイ素の鉄との共沈あるいは吸着によるガラス溶解の加速
ゆるみ域及び母岩 透水係数	正	地下水流動 不均質な透水性分布 選択的流路（亀裂、チャンネル）の存在 坑道掘削及び閉鎖に伴う母岩透水性変化 地球化学的プロセス（二次鉱物沈澱、風化、等）による透水性変化 応力条件の変化による透水性変化 緩衝材等による亀裂充填

表 4.8.1 (続き)

入力パラメータ	傾向	FEP
平均拡散係数における第二区間勾配	正	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ pH, Eh 勾配</li> <li>・ 真性コロイド生成・移動</li> <li>・ 疑似コロイド生成・移動</li> <li>・ 非線形吸着</li> <li>・ コロイド濾過</li> </ul>
動水勾配標準値 (最小値)	正	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 広域地下水流動</li> <li>・ 降雨及び蒸発散</li> <li>・ 地形</li> <li>・ 水理地質構造</li> <li>・ 処分場レイアウト</li> <li>・ 止水工</li> <li>・ 地熱勾配</li> <li>・ 塩水等の密度勾配</li> </ul>
人工バリア中での核種溶解度 (平均拡散係数における第一接点濃度)	正	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 地下水の化学的特性 (Eh, pH, 主要 ligand 濃度)</li> <li>・ 溶質の分種化</li> <li>・ 酸化還元反応</li> <li>・ 溶解・沈澱</li> <li>・ 溶解度制限固相</li> <li>・ 錯体生成</li> <li>・ 真性コロイド生成</li> </ul>
オーバーパック腐食時間	逆	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 酸素消費型腐食</li> <li>・ 水素発生型腐食</li> <li>・ 全面腐食</li> <li>・ 孔食</li> <li>・ 隙間腐食</li> <li>・ ガルバニック腐食</li> <li>・ 応力腐食割れ</li> <li>・ 溶接部の腐食進展</li> <li>・ 人工バリア内応力分布</li> <li>・ せん断</li> <li>・ 座屈</li> <li>・ 品質管理</li> </ul>

また、これらの入力パラメータの感度は、この領域の範囲内では連続的であり、かつ、正逆いずれかの傾向にそれぞれ単調である。従って、各パラメータの変動に対する保守側・非保守側の識別は容易である。

以上のパラメータは、いずれもリファレンスケースの条件設定に於ける中心的な課題として既に定量的な検討が行われ、この検討に基づきそれぞれ合理的な範囲で保守的な数値の設定が行われつつある。今後の研究に於いては、上表に掲げた各 FEP の影響をそれぞれ吟味した上で、現在のリファレンスケースがこれらの影響によるパラメータ値の変動を保守的に代表し得るものであるか否かを明確にし、リファレンスケースの保守性が必ずしも明確ではないものについては変動ケースとして取り上げていくことが必要である。

他方、既に述べた様に、今回の統計的解析においては、人工バリア中に地下水流れが存在せず、ニアフィールド内の水理及び地球化学条件は将来にわたって不変であるというリファレンスケースの前提条件が覆される様なケース群が必然的に含まれているにも拘わらず、ガラス浸出率律速以下の放出率に対応した連続的かつ単調な感度構造の内では、次表に示す対応する入力パラメータの感度は有意なものではないということが明らかになった点も、上記と同様に重要な成果であると考えられる。このことは、これらのパラメータに対応する現象の影響が、それぞれの程度あるいは現象間の時間・空間的な組み合わせが次項において述べる様な核種の再濃縮フロントの生成とその伝播を生じない様な範囲（詳しくは次項参照）では、重要ではないことを示している。

表 4.8.2 リファレンスケースを含む連続的かつ単調な感度構造においては重要とはならない入力パラメータ及び対応する現象群

入力パラメータ	FEP
<ul style="list-style-type: none"> <li>・人工バリア内 ギャップ透水係数</li> <li>・人工バリア内 ギャップ空隙率</li> <li>・移流領域の人工バ リア内進入距離</li> <li>・最大進入距離</li> <li>・ギャップ存在期間</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・人工バリアギャップ中の地下水流れ</li> <li>・緩衝材施工不良</li> <li>・緩衝材熱変質による自己シール性喪失</li> <li>・緩衝材の化学的劣化による自己シール性喪失</li> <li>・緩衝材のセメンテーションによる自己シール性喪失</li> <li>・ガス透過に伴う毛管形成</li> <li>・トンネル崩落に伴う緩衝材ひび割れ</li> <li>・母岩クリープに伴う緩衝材変形あるいはせん断</li> <li>・断層活動に伴う緩衝材変形あるいはせん断</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>・動水勾配最大値</li> <li>・強い流れの 開始時期</li> <li>・強い流れの 継続期間</li> <li>・バイパス流の割合</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ガス蓄積による動水勾配変化</li> <li>・火成活動に伴う熱水対流による動水勾配変化</li> <li>・塩水の密度流による動水勾配変化</li> <li>・地震時の seismic pumping による動水勾配変化</li> <li>・海水準変動に伴う塩短境界移動による動水勾配変化</li> <li>・隆起/浸食に伴う動水勾配変化</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>・外側地球化学異常 開始時期</li> <li>・外側地球化学異常 継続期間</li> <li>・外側地球化学異常 進入距離</li> <li>・内側地球化学異常 開始時期</li> <li>・内側地球化学異常 継続期間</li> <li>・内側地球化学異常 進入距離</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・地下水放射線分解による酸化還元フロント</li> <li>・残存空気及びその反応</li> <li>・ガラスからのアルカリ金属浸出による pH 変化</li> <li>・腐食及び腐食生成物の地下水化学への影響</li> <li>・ベントナイト地下水反応による地下水化学への影響</li> <li>・コンクリート空隙水による地下水化学への影響</li> <li>・塩水による地下水化学への影響</li> <li>・火成活動、地熱等の温度上昇による地下水化学への影響</li> <li>・ seismic pumping に起因する地表水あるいは深部地下水の進入による地下水化学への影響</li> <li>・隆起/浸食に起因する地表水の進入による地下水化学への影響</li> <li>・立孔に沿った地表水の進入による地下水化学への影響</li> <li>・火成活動時の酸性地下水進入による地下水化学への影響</li> </ul>

## (2) リファレンスケースとは定性的に異なる感度構造に対応する現象群

核種放出率がガラス固化体浸出率律速に対応したレベルを上回る様な領域では、(1)とは定性的に異なる感度構造が同定されている。この様な感度構造が生じ、核種放出率がリファレンスケースから顕著に増加するためには、以下の諸条件が満たされることが必要である。

### A. 地球化学異常についての条件

- A-1) 核種の再濃縮（沈澱、吸着、コロイド濾過、等）を生じさせる様な地球化学的なフロントが、人工バリア中に有意な核種が残存している期間中に内側から形成され、
- A-2) 核種の再濃縮が十分に生じ、かつこれが随行できる程度にフロントがゆっくりと動き、
- A-3) ついには、ゆるみ域に至る。

そしてさらに、

- A-4) 上記の内側地球化学異常あるいはその後の外側地球化学異常により、移流支配の場の地球化学条件が短期間のうちに切り替わり、
- A-5) ここに存在する濃縮された核種が速やかに再溶解する。

また、以下の条件が満足される場合、核種放出率は更に上昇することとなる。

### B. 水理学的変動についての条件

- B-1) ゆるみ域の水理条件（動水勾配、及び透水係数）の変化が A-4) 及び A-5) に示した変化と同時期に生じ、
- B-2) この水理条件変化によってゆるみ域を通過する地下水流量が有意に上昇する。

従って、今後の性能評価における新しくそして重要な課題は、以上の7つの条件がそれぞれ満足される様な状況が実際に生じ得るか否かを専門家に問うとともに、現在の知見のみでは答えられない部分について新たな研究開発を開始することである。各条件に関連する現象群及び対応する専門家への問いを次表にまとめる。

表 4.8.3 核種再濃縮フロントの伝播を伴う代替的な移行機構の生起に係る現象群及び専門家への質問

条件	関連する FEP	専門家への質問
A-1	<ul style="list-style-type: none"> <li>・地下水放射線分解による酸化還元フロント</li> <li>・残存空気及びその反応</li> <li>・ガラスのアルカリ金属浸出による pH 変化</li> <li>・腐食及び腐食生成物の地下水化学への影響</li> <li>・ベントナイト反応による地下水化学への影響</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・左記のそれぞれの現象によって変化した化学条件で、主要核種の移行特性（溶解度、吸着特性、等）がリファレンスケースと有意に異なるか？</li> <li>・変化は所定の時間内<sup>1)</sup>に生じるか？</li> </ul>
A-2	<ul style="list-style-type: none"> <li>・地下水放射線分解による酸化還元フロント</li> <li>・残存空気及びその反応</li> <li>・ガラスのアルカリ金属浸出による pH 変化</li> <li>・腐食及び腐食生成物の地下水化学への影響</li> <li>・ベントナイト反応による地下水化学への影響</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・左記の現象によって生ずる地球化学的フロントは、人工バリア中の拡散による核種移行と同等以下の速度で緩やかに進展するか？</li> </ul>
A-3	<ul style="list-style-type: none"> <li>・地下水放射線分解による酸化還元フロント</li> <li>・残存空気及びその反応</li> <li>・ガラスのアルカリ金属浸出による pH 変化</li> <li>・腐食及び腐食生成物の地下水化学への影響</li> <li>・ベントナイト反応による地下水化学への影響</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・左記の現象によって生ずる地球化学的フロントは、緩衝材を横断してゆるみ域にまで達するか？</li> </ul>
A-4	<ul style="list-style-type: none"> <li>・地下水放射線分解による酸化還元フロント</li> <li>・残存空気及びその反応</li> <li>・ガラスのアルカリ金属浸出による pH 変化</li> <li>・腐食及び腐食生成物の地下水化学への影響</li> <li>・ベントナイト反応による地下水化学への影響</li> <li>・コンクリート反応による地下水化学への影響</li> <li>・塩水による地下水化学への影響</li> <li>・火成活動、地熱等の温度上昇による地下水化学への影響</li> <li>・seismic pumping に起因する地表水あるいは深部地下水の進入による地下水化学への影響</li> <li>・隆起/浸食に起因する地表水の進入による地下水化学への影響</li> <li>・立孔に沿った地表水の進入による地下水化学への影響</li> <li>・火成活動時の酸性地下水による地下水化学への影響</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・左記の現象によって、ゆるみ域全体の地球化学条件が十分に速やかに<sup>2)</sup>変化するか？</li> </ul>

表 4.8.3 続き

条件	FEP	専門家への質問
A-5	<ul style="list-style-type: none"> <li>・沈澱（準安定相）の再溶解</li> <li>・沈澱（安定相）の再溶解</li> <li>・結晶化した沈澱の再溶解</li> <li>・真性コロイド解離</li> <li>・疑似コロイド解離</li> <li>・脱着</li> <li>・鉱物化した吸着種の溶出</li> </ul>	A-4 の化学条件変化がゆるみ域内で生じた場合に、濃縮した核種は十分に速やかに <sup>235</sup> 可動となるか？
B-1	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ガス蓄積による動水勾配変化</li> <li>・火成活動に伴う熱水対流による動水勾配変化</li> <li>・塩水の密度流による動水勾配変化</li> <li>・地震時の seismic pumping による動水勾配変化</li> <li>・海水準変動に伴う塩短境界移動による動水勾配変化</li> <li>・隆起/浸食に伴う動水勾配変化</li> </ul>	左記の現象による水理条件の変化が、A-4 の地球化学的変化と同時期に生じるか？
B-2	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ガス蓄積による動水勾配変化</li> <li>・火成活動に伴う熱水対流による動水勾配変化</li> <li>・塩水の密度流による動水勾配変化</li> <li>・地震時の seismic pumping による動水勾配変化</li> <li>・海水準変動に伴う塩短境界移動による動水勾配変化</li> <li>・隆起/浸食に伴う動水勾配変化</li> </ul>	左記の現象は、ゆるみ域内地下水流量を、リファレンスケースよりも有意に増大させるか？

\* 1

有意な量の放射性核種が人工バリア中に残存する期間であり、長寿命の核種を含めて考えれば1千万年のオーダーになるものと考えられる。

\* 2

感度構造が質的に変化する際の境界が、ガラス固化体浸出率律速に対応していることから、比較の意味で、リファレンスケースにおけるガラス浸出期間である約1万年を目安にするべきと考えられる。

表 4.8.3 に整理した各質問のうちのいくつかは、これまでの研究開発においても何人かの専門家によって認識されていたものであるが、定量的な感度解析結果に基づき性能評価研究の全体像の中で体系的に位置づけられたのは今回が初めてである。特に、

- ・ 地球化学条件変動における過渡期のタイムスケールの重要性 (A-4)
- ・ 核種が再動態化する際のタイムスケールの重要性 (A-5)
- ・ 水理条件変動と地球化学条件の時間的相関の重要性 (B-1)

を考慮した問題設定はほとんど今までに実施されて居らず、本研究の重要な成果の一つであると考えられる。

#### 4. 参考文献

- [1] Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation, "Research and Development on Geological Disposal of High-Level Radioactive Waste: First Progress Report", PNC TN1410 93 059, September 1992
- [2] UK Nirex, "Post-closure performance assessment, NIREX95: A Preliminary Analysis of the Groundwater Pathway for a Deep Repository at Sellafield", Science Report S/95/012, July 1995
- [3] Nagra, "Project Gewähr 1985, Nuclear Waste Management in Switzerland: Feasibility Studies and Safety Analyses", Project Report NGB 85-09, June 1985
- [4] G.K.Batchelor, An Introduction to Fluid Dynamics, Cambridge University Press, Cambridge, 1983
- [5] G. de Marsily, Quantitative Hydrogeology, Academic Press, London, 1986
- [6] M.J. Williams and J.A.Woods, Technical description of SPADE solver for differential and algebraic equations, QuantiSci Report IM3246-5 Version 1, April 1994
- [7] P.Grindrod, M.D.Impey, S.N.Saddique and H.Takase, Saturation and gas migration within clay buffers, Conference proceedings "High Level Radioactive Waste Management" Las Vegas 1994
- [8] H.I. Essaid, Multilayered Sharp Interface Model of Coupled Freshwater and Saltwater Flow in Coastal Systems: Model Development and application, Water Resources and Reserach, Vol.26, No.7, pp1431-1454
- [9] K.J.Clark, R.C.Brown, M.D.Impey and H.Takase, Numerical Simulation of the MACRO-II Experiment on the effects of Heterogeneous Flow and Mineralogy on Sorptive Solute Transport; Analysis of Batch and Column Experiments, ID5013B-1 Version 2, 1996
- [10] Grindrod P., andTakase H., Reactive chemical transport within

engineered barriers, J. Hydrology, 21, 1996

[10] SKI/SKB Scenario Development Project, SKI Technical Report 89:14, SKB Technical Report 89-35, 1989

[11] Goodwin B W et al., Scenario analysis for the post-closure assessment of the Canadian concept for nuclear fuel waste disposal, AECL-10717, COG-93-7, 1991

[12] 動燃事業団、動燃事業団における FEP データベースの現状、第一回「地層処分性能評価シナリオに関連する FEP の検討会」資料、平成 8 年 7 月

[13] Nagra, Kristallin-I: Safety Assessment Report, Nagra Technical Report NTB 93-22, 1994

[14] W. M. Miller and N. A. Chapman, Identification of relevant processes, System Concept Group Report, UK DoE/HMIP Technical Report TR-ZI-11

[15] R.Muirwood and G.King, Hydrological Signatures of Earthquake Strain, Journal of Geophysical Research, 98, B12, 22, 035-22, 068

[16] P.Grindrod, R.C.Brown, M.S.Edwards and N.D.Gealy, Colloid Migration and Dispersal within Saturated Media: A Modelling Perspective, DOE/HMIP/RR/95/021, 1994

## 5. 人工バリア中核種移行に関する決定論的解析

### 5.1 人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いた決定論的解析

本報告書の冒頭にも述べた様に、今年度の課題の一つは、シャドウモデルを具体的な（物理的）現象に基づき定義することにより、人工バリア中核種移行シャドウモデルを決定論モードで使用することである。より具体的には、第二次性能評価報告書に於けるリファレンスケースに対する種々の摂動を考慮することとする。

#### 5.1.1 リファレンスケース[1]

##### 5.1.1.1 基本的な仮定

簡単の為、リファレンスケースでは以下の事が仮定されている。

A1 オーバーパック破損以前に、人工バリアシステムが地下水で完全に再飽和されている。又、飽和過程での熱的、化学的、物理的変化はバリアに非可逆な影響を与えない。

A2 処分場閉鎖後1000年以内は全てのオーバーパックがその閉じ込め性能を維持する。

A3 オーバーパックが閉じ込め性能を失い、ガラス固化体が溶解し始めて以降、以下の条件が無期限に満たされる。

A3-1 緩衝材内の地下水流速がとても小さい為、人工バリアシステム内の移行は分子拡散が支配的である。

A3-2 人工バリアシステム内の温度は周囲と同じ（約60℃）である。

A3-3 緩衝材内の空隙水は還元性であり、pHはやや酸性からややアルカリ性の範囲内にある。

A4 貯蔵中の熱応力に起因するひび割れのため、ガラスの総表面積は外側表面積より大きい。

- A5 溶存ケイ素濃度に対して、ガラスの溶解は一次反応速度式に従う。
- A6 ガラスの溶解に従い、廃棄物中の放射性核種は放出され、分子拡散によって移行する。
- A7 核種は、溶存イオン、沈殿物又はベントナイトへの吸着種などの形態で存在する。溶解・沈殿反応は瞬時平衡反応であり、吸着過程は線形・瞬時平衡反応である。
- A8 腐食したオーバーパック（残存する鉄及び腐食生成物）は核種移行を、一切、制限あるいは遅延しない。
- A9 母岩内のゆるみ域に入った核種はそこで瞬時かつ完全に混合され、また岩体へは吸着しない。

#### 5.1.1.2 人工バリアシステムの形状

ニアフィールドは以下の要素から成る：

- ・ ガラス固化体、
- ・ 鋼製オーバーパック、
- ・ 緩衝材（70%クニゲル-V1 + 30%硅砂）、
- ・ 母岩中のゆるみ域

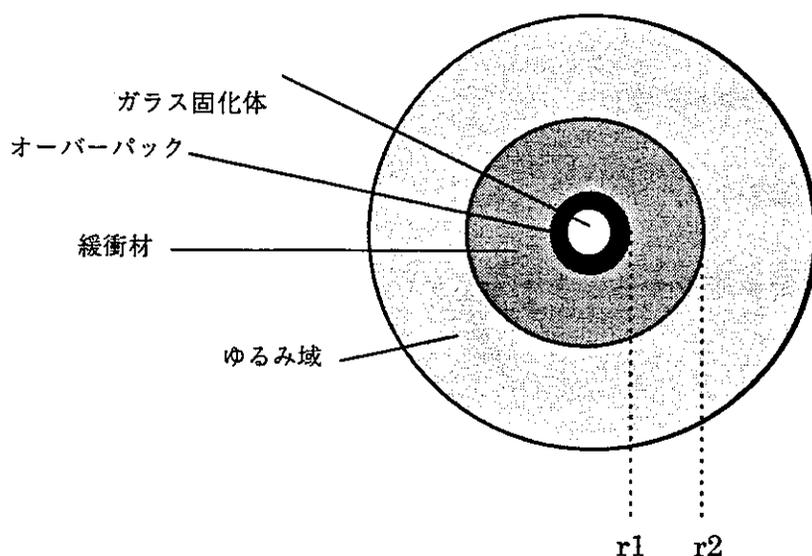


図 5.1.1.1 第二次報告書に於ける人工バリアシステム構造の模式

また、表 5.1.1.1 にリファレンスケースに於いて仮定されている人工バリアシステムの形状及び物理的性質をまとめる。

表 5.1.1.1 リファレンスケースに於ける形状及び物理的性質

緩衝材の内径, r1 [m]	0.43	ガラスの密度 [kg/m <sup>3</sup> ]	2105
緩衝材の外径, r2 [m]	1.10	緩衝材高さ[m]	2.38
緩衝材の空隙率	0.41	ガラスの体積[m <sup>3</sup> ]	0.196
緩衝材 の密度[kg/m <sup>3</sup> ]	2700	ガラスの表面積 [m <sup>2</sup> ]	21.0

#### 備考

ガラスのボイド体積としては  $1e-3 \text{ m}^3$  を採っている。

#### 5.1.1.3 核種インベントリー及び半減期

リファレンスケースの計算に必要な核種のインベントリー及び半減期を表 5.1.1.2 にまとめる。

人工バリア中核種移行シャドウモデルを利用した決定論的解析では、太文字で強調されている

**Am-243 -> Pu-239 -> U-235**

**U-238**

**Am-241 -> Np-237**

の崩壊連鎖について解析を実施することとする。

表 5.1.1.2 核種インベントリー及び半減期

	半減期 [年]	インベントリー [モル/廃棄物]
Se-79	6.50e4	8.01e-2
Zr-93	1.53e6	9.13
Tc-99	2.13e5	8.18
Pd-107	6.50e6	2.09
Sn-126	1.00e5	2.23e-1
Cs-135	2.30e6	2.99
Ac-227	2.18e1	1.20e-9
Pa-231	3.28e4	1.81e-6
Th-230	7.71e4	4.19e-5
Th-232	1.41e10	6.97e-6
U-233	1.59e5	9.48e-4
U-234	2.45e5	1.14e-2
<b>U-235</b>	<b>7.04e8</b>	<b>1.87e-1</b>
U-236	2.34e7	1.24e-1
<b>U-238</b>	<b>4.47e9</b>	<b>1.68e1</b>
<b>Np-237</b>	<b>2.14e6</b>	<b>3.17</b>
<b>Pu-239</b>	<b>2.41e4</b>	<b>1.55e-1</b>
Pu-240	6.54e3	1.57e-1
<b>Am-241</b>	<b>4.33e2</b>	<b>2.11e-1</b>
<b>Am-243</b>	<b>7.39e3</b>	<b>3.93e-1</b>
Cm-247	1.56e7	8.26e-6

#### 5.1.1.4 移行パラメーター

ガラスの溶解速度は、水中のケイ素濃度に対して以下の一次反応速度式で表される。

$$(5.1) \quad R = H(V(t))Ak_+ \left( 1 - \frac{C_{Si}}{C_{Si}^*} \right),$$

但し、

$R$  : ガラス溶解速度

$H(\cdot)$  : ヘビサイド関数

$V(t)$  :  $t$  に於いて残存しているガラスの量

$A$  : ガラスの総表面積

$k_+$  : 前進反応速度定数

$C_{Si}$ 、 $C_{Si}^*$  : それぞれ水中のケイ素濃度、及びその溶解度限界

(5.1) 式中のパラメーターの値は表 5.1.1.3 にまとめる通りである。

表 5.1.1.3 ガラス溶解のパラメーター

前進反応率 [kg/m <sup>2</sup> /年]	0.183
ケイ素の溶解度限界 [mol/ m <sup>3</sup> ]	3.5

ゆるみ域は、混合セルであると仮定し、この領域に至った核種は 0.05 m<sup>3</sup>/yr の地下水流によって完全に混合されるものとする。

他の移行パラメーターを表 5.1.1.4、5.1.1.5、及び 5.1.1.6 にまとめる。

表 5.1.1.4 核種移行パラメーター(1): 核種に依らないパラメーター

ゆるみ域内地下水量 [m <sup>3</sup> /年]	5.0e-2
空隙水中の拡散係数(Dp) [m <sup>2</sup> /年]	4.78e-2

表 5.1.1.5 核種移行パラメーター (2):放射性元素溶解度 [mol/ m<sup>3</sup>]

	地下水 タイプ: FRHP
Se	3.7e-4
Zr	1.0e-3
Tc	3.3e-5
Pd	6.1e-6
Sn	2.5e-4
Cs	1.0e10
Ac	2.4e-5
Th	3.3e-4
Pa	1.0e-5
U	1.0e-5
Np	5.5e-6
Pu	1.1e-7
Am	5.6e-6
Cm	2.0e-7

表 5.1.1.6 核種移行パラメーター (3): (分配係数  $m^3/kg$ ) x (密度  $kg/m^3$ ) [-]

	地下水 タイプ: <b>FRHP</b>
Se	0.0
Zr	2.7e4
Tc	2.7e2
Pd	2.7
Sn	1.35e3
Cs	2.7e1
Ac	2.7e3
Th	2.7e2
Pa	2.7e2
U	1.35e3
Np	2.7e2
Pu	2.7e2
Am	2.7e3
Cm	2.7e3

\*地下水 タイプ

**FRHP**; 淡水、還元性 及び 高 pH

なお、以下の解析に於いては全て FRHP 地下水に対応した溶解度及び吸着特性を仮定する。

### 5.1.2 リファレンスケースに対する摂動

人工バリア中核種移行シャドウモデルによってモデル化するリファレンスケースに対する摂動のそれぞれについて、考慮する現象の内容及び対応する概念

モデルを以下にまとめる。

### 5.1.2.1 人工バリアシステム形状の変化

#### オーバーパック腐食生成物による膨張

鋼製オーバーパックの嫌気性腐食は第一鉄の酸化物、水酸化物、及びオキシ  
ハイドロオキシドなど腐食生成物の層を生み出し、これらの密度は一般的に  
鉄より低い。従って腐食によりオーバーパック域（残存する鉄と腐食生成物の  
混合）の体積は全体として増え、周囲の緩衝材へ圧力をかける。その結果、

- (1) 空隙率の（恐らくは）位置に依存した変化
- (2) ベントナイトの亀裂への侵入
- (3) 緩衝材の厚みの減少

が生ずることとなる。

人工バリアシステム内の核種移行に（1）が及ぼす影響は、空隙率を時間及  
び空間の関数で表すことにより比較的容易に取り扱うことができる。しかし、  
人工バリア中核種移行シャドウモデルは時間に依存した形状の変化を考慮する  
ことができないため、（2）及び（3）については以下の方法によって取り  
扱うこととする。

- 1) 人工バリアシステム内の有限差分グリッドを各バリアの移動とは関係なく  
固定する。
- 2) ある数値グリッドにおける物性を2種、又はそれ以上の種類のバリアの混合  
比に従って時間の関数として定義する。
- 3) バリア材自体の移動によって生ずる核種移行フラックスを新たな移流項と  
して扱う。

### 5.1.2.2 人工バリアシステム内及び周辺の流れ

#### ゆるみ域における不完全な混合の影響

人工バリアシステム内と異なり、ゆるみ域での物質移行は移流によるものが

支配的となるため円筒座標形での対称性は適用できない。また、ゆるみ域の「下流」側に流入してくる地下水はあらかじめある程度の濃度の核種を含み、このため、人工バリアシステムから放出される核種フラックスは小さくなる。人工バリアシステムとゆるみ域を二分し（上流及び下流、これは、現在の人工バリア中核種移行シャドウモデルと同じである）、それぞれの側からの放出率を比べることにより核種移行への影響を把握することができる。

### ガス圧による緩衝材空隙水の移動

鉄の嫌気性腐食は溶存水素の拡散フラックスを上回る速度で水素を生成するため、オーバパック腐食生成物層周辺に気体の水素が生じる。そして、空隙水圧と毛管力の和よりガス圧の方が大きくなると、粘土の微視的空隙を押し上げながら、気液界面が外側へ向かって動き出す。この様にして生じる通気経路の外側への伝播を、Capillary Bundle モデルに基づき、それぞれ異なる直径を持った毛管の放射状に拡がる束として表現する。気液界面の移行に伴い、この毛管束を通じた外側に向かう移流が生じ、さらに溶解した核種を人工バリアシステム外へと運び出す。亀裂及びより大きな空隙が存在するゆるみ域に気液界面が達すると、ガスは破過し、ガス圧が下がり空隙が水によって再飽和されるまでの間ガスの移流が続くこととなる。この現象は繰り返して生じる可能性があるため、パルス状の核種移流フラックスが生じると予想される。但し、毎回放出される汚染水量は低下することも考えられる。

#### 5.1.2.3 核種移行特性

### 速度論的な溶解・沈殿反応の影響

リファレンスケースに於ける計算では、放射性物質の溶解・沈殿反応は常に瞬時平衡を保つと仮定されているが、この仮定の有効性は直ちに明らかではない。そこで、（現行の人工バリア中核種移行シャドウモデルの様に）支配方程式に速度論的溶解・沈殿反応の項を含めることにより瞬時平衡の仮定が有効な反応速度の範囲を定量化することが可能である。

### 元素に依存した拡散係数の影響

リファレンスケースに於いて全ての元素の拡散性は同じであると仮定されて

いるが、分子のサイズや電荷などにより、実際には、それぞれの元素の拡散性は異なる。そこで、元素毎にそれぞれ異なる拡散係数を与えて計算を行い、その結果をリファレンスケースにおける解析結果と比べることにより、核種移行への影響を調べることができる。

#### 腐食生成物層への吸着による影響

既に述べたオーバーパック腐食生成物層は核種を吸着し、従って核種移行の遅延に寄与するものと考えられる。腐食生成物層の $k_d$ 値を0以外にすることによりその影響を調べることとする。

#### 5.1.2.4 地球化学的条件の変遷

##### 空隙水の放射線分解により発生する酸化剤の影響

Am-241 や Am-243 など比較的短寿命の $\alpha$ 崩壊核種による地下水の放射線分解の結果として、等量の酸化剤及び還元剤が作られる。しかしながら、水素などの還元剤の方が $H_2O_2$ や他の酸化物より高い拡散性を有するため、オーバーパック内は酸化環境に成る。鉄及び鉄の溶解物などが大きな還元性を有するため、酸化性プルームはオーバーパック内に留まると考えられるが、放射線分解及び鉄と鉄の溶解物の速度論的反応との速度のバランスにより、酸化プルームがいつしかオーバーパック域から漏れ出し、緩衝材内の黄鉄鉱などの還元剤を消費しながら伝播する可能性がある。Np など酸化還元条件に敏感な元素の溶解度は還元域より酸化プルーム内の方が高いため、この様な酸化還元フロントが実際に生ずる場合、これらの元素の沈殿フロントが形成され、酸化還元フロントを追って伝播する可能性がある。

注：沈殿フロント及びその伝播の影響は、昨年度の解析と同様、変動する地球化学条件に対応する核種溶解度を $(r, t)$ 座標上で楕円として表現するシャドウ関数を用いて取り扱うことができる。現在の人工バリア中核種移行シャドウモデルと異なり、放射線分解の影響を解析するためには内側の楕円のみが必要である。

#### 5.1.3 決定論的解析のためのシャドウモデルの特定

人工バリア中核種移行シャドウモデルは、種々の核種移行挙動及びこれらに対する多岐にわたる環境条件変化の影響を柔軟に表現することが可能な汎用性の高いものであり、5.2に述べた全ての摂動を、モデルの基本的な枠組みを変えずにことごとく取り扱うことが可能である。このためには、シャドウモデルの一般的な設定を、それぞれの現象に呼応して絞り込んだ実行形態を作成することが必要であるが、各摂動に対応する現象にはかなりの共通点があるため、全てのケースについて個別な実行形態を作成する必要は必ずしもない。そこで、以下の検討においては、

#### 1) 単一空隙可変形モード

人工バリアシステムの変形を含む「オーバーパックの腐食生成物の影響」と、これと深く関連した「腐食生成物への吸着による影響」とを取り扱うもの。

#### 2) 二重空隙固定形状モード

他の全ての摂動を扱うもの。

という二種類の実行形態を作成することとする。

### 5.1.3.1 単一空隙可変形モード

人工バリアシステムの変形及びこれに伴う各バリア特性の空間分布の時間的な変化を具体的に記述するのは、今回解析の対象とする種々の摂動の定式化のうちで最も煩雑なものとなることが予想される。そこで、

- ・ オーバーパックの腐食生成物の影響
- ・ 腐食生成物への吸着による影響

という二つの現象を他から分離して取り扱うこととする。この場合、特にガス圧による緩衝材空隙水の移動を考慮する必要がないため、全てのバリア材は、単一の空隙を有する媒体として表現することが可能である。但し、5.1.2に述べた様に、緩衝材自体の変形に伴う核種移行をダミーの移流項として表現する必要があるために、この単一空隙はギャップを選択する必要がある。また、同様に、ゆるみ域における不完全な混合の影響を考慮する必要がないため、各バリア領域を上下二つの部分領域に分割する必要もない。

以上のことから、この実行形態におけるニアフィールド形状は次の様なものとなる。また、ここで、局所座標系を導入するのは（緩衝材）領域のみ（円筒座標系一次元）であり、他の二つのボックスは単一セルとして取り扱われる。

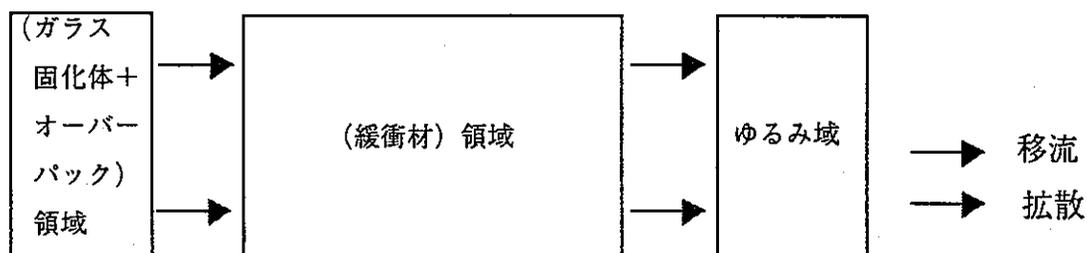


図 5.1.3.1 単一空隙可変形モードにおけるニアフィールド形状

既に述べた様に、本解析では

- (1) 空隙率の（恐らくは）位置に依存した変化
- (2) ベントナイトの亀裂への侵入
- (3) 緩衝材の厚みの減少

を定式化し、これらが核種移行に及ぼす影響について定量的な評価を行うこととなる。

人工バリアシステム内の核種移行に（1）が及ぼす影響は、空隙率を時間及び空間の関数で表すことにより比較的容易に取り扱うことができる。しかし、現在の人工バリア中核種移行シャドウモデルは時間に依存した形状の変化を直接的には考慮することができないため、（2）及び（3）については以下の方法によって取り扱うこととする。

- 1) 人工バリアシステム内の有限差分グリッドを各バリアの移動とは関係なく固定する。
- 2) ある数値グリッドにおける物性を2種、又はそれ以上の種類のバリアの混合比に従って時間の関数として定義する。
- 3) バリア材自体の移動によって生ずる核種移行フラックスを新たな移流項として扱う。

図 5.1.3.1 において、各領域の名称が括弧書きとなっているのは、固定グリッドを用い上記の 2) の方法によってバリアの変形を取り扱うために、一つの空間的な領域に複数のバリア材が共存し得ることに対応している（例えば、(緩衝材) 領域には、緩衝材以外にも膨張した腐食生成物が存在し得る）。

### (1) 支配方程式

既に述べた様に、緩衝材の変形に伴う核種移行を半径方向の移流項として取り扱うために、各ボックスは（便宜的に）ギャップのみから成る単一媒体と仮定する必要がある。この場合、 $k$  番目の空間メッシュにおける、核種  $i$  の  $j$  番目の瞬時平衡グループの総質量に関する支配方程式は次の様に書かれる。

$$(5.2) \quad \frac{\partial m_{ijk}}{\partial t} = T_{ijk}(t) + \lambda_{i-1} m_{i-1jk} - \lambda_i m_{ijk} + J_{ijk}$$

但し、ここで  $T_{ijk}(t)$  は物質移動テンソルであり、本モデルの対称性から 4.2 に記された一般的な表現のうち周方向の成分を無視して、次の様に単純化される。

$$(5.3) \quad T_{ijk}(t) = A_k^- F_{ijk}^- - A_k^+ F_{ijk}^+$$

但し、 $A_k^-, F_{ijk}^-$  はそれぞれ  $k-1$  番目と  $k$  番目のメッシュの間の境界の面積及び対応する半径方向の物質移動フラックスを表し、 $A_k^+, F_{ijk}^+$  は  $k$  番目と  $k+1$  番目のメッシュの間に定義される同様の量を表す。更に、4.2 と同様、物質移動フラックスは次の様になる。

$$(5.4) \quad F_{ijk}^- = \begin{cases} -D \frac{\alpha_{ijk}(c_{ijk})c_{ijk} - \alpha_{ij(k-1)}(c_{ij(k-1)})c_{ij(k-1)}}{d_{k-1,k}} + \beta_{ij(k-1)}(c_{ij(k-1)})v_k^-, & v_k^- \geq 0 \\ -D \frac{\alpha_{ijk}(c_{ijk})c_{ijk} - \alpha_{ij(k-1)}(c_{ij(k-1)})c_{ij(k-1)}}{d_{k-1,k}} + \beta_{ijk}(c_{ijk})v_k^-, & v_k^- < 0 \end{cases}$$

$$(5.5) \quad F_{ijk}^+ = \begin{cases} -D \frac{\alpha_{ij(k+1)}(c_{ij(k+1)})c_{ij(k+1)} - \alpha_{ijk}(c_{ijk})c_{ijk}}{d_{k,k+1}} + \beta_{ijk}(c_{ijk})v_k^+, & v_k^+ \geq 0 \\ -D \frac{\alpha_{ij(k+1)}(c_{ij(k+1)})c_{ij(k+1)} - \alpha_{ijk}(c_{ijk})c_{ijk}}{d_{k,k+1}} + \beta_{ij(k+1)}(c_{ij(k+1)})v_k^+, & v_k^+ < 0 \end{cases}$$

但し、 $\alpha$ 、及び  $\beta$  はそれぞれ平均拡散係数及び平均移流速度であり、 $d$  はメッシュ中心間の距離、 $v_k^-$ 、 $v_k^+$  はそれぞれ上流及び下流側の媒体流速を表す。また、核種濃度と質量との間には以下の関係式が成立する。

$$(5.6) \quad c_{ijk} = \frac{m_{ijk}}{\theta_k(t)V_k(t)}$$

但し、 $\theta_k(t)$  空隙率、 $V_k(t)$  メッシュの容積

また、 $\lambda_{i-1}m_{i-1,jk} - \lambda_i m_{ijk}$  は通常の崩壊項であり、 $J_{ijk}^+$  は当該メッシュがガラス固化体内にある場合にはソースターム  $J_{ijk}^+$  となり、ゆるみ域内にある場合にはシンクターム  $J_{ijk}^-$  となり（これら以外の場合には、定義されない）、それぞれ次の様に定義される。

$$(5.7) \quad J_{ijk}^+ = \eta_j \omega_i \kappa(t)$$

$$(5.8) \quad J_{ijk}^- = \beta_{ijk} (c_{ijk}) m_{ijk} q_k^f(t)$$

但し、

$\eta_j$  ; 固化体中の  $j$  番目の瞬時平衡グループが溶存イオンを含む場合 1 その他の場合は 0

$\omega_i$  ; 核種  $i$  のガラス固化体中モル濃度

$\kappa(t)$  ; ガラス固化体の溶解速度

$q_k^f(t)$  ; ゆるみ域から流出する地下水の流量

なお、本モデルでは速度論的な反応を考慮する必要がないため、上の添字  $j$  は事実上無視し得る。また、このことと、単一空隙のみを考えることから、4.2 の一般的な表現の中に現れる物質交換テンソルは無視できる。

## (2) 人工バリア形状変化が核種移行に及ぼす影響の表現

前出の支配方程式のうち、空間メッシュの形状に係るもの（断面積、容積、中心間の距離）は固定されており、また、ガラス溶解速度及びゆるみ域内の地下水流量はリファレンスケースと同様であるものとする。

以上の前提の下に、人工バリア形状変化が核種移行に及ぼし得る影響を、この結果生じるであろう平均拡散係数、平均移流速度、媒体流速、及び空隙率の時間あるいは空間的な変化として定量的に表現することとする。ここで重要な点は、上記の各パラメータ値が時間・空間的に変化する際の関数形は各媒体自体の移動とこれに伴う単一セル内の複数バリア材の共存に基づいて決定されるという点である。

### 平均拡散係数

ここでは、平均拡散係数の表現に、ある程度の柔軟性を保つために次の化学形態を考えることとする。

- ・ 溶存イオン（単位空隙水中の濃度 =  $c_{ijk}^0$ ）
- ・ 吸着種（単位バリア材  $l$  中の濃度 =  $c_{ijk}^l$ ）
- ・ 沈澱（単位総体積中の濃度 =  $c_{ijk}^2$ ）
- ・ 疑似コロイド（単位懸濁物中の濃度 =  $c_{ijk}^3$ ）

また、既に述べた様に、これらの濃度の間には瞬時平衡が常に成立しているものとする。この場合、複数の媒体が共存することを考慮したセル内の核種の質量配分は次の式で与えられることとなる。

(5.9)

$$c_{ijk}^l = \rho_{lk}(t)kd_{ilk}c_{ijk}^0$$

$$c_{ijk}^2 = \max \left\{ C_{ijk} - \left[ \sum_l \theta_{lk} p_{lk} + \sum_l (1 - \theta_{lk}) p_{lk} \rho_{lk}(t)kd_{ilk} + \theta_{lk} p_{lk} s_k(t) \rho_k^*(t)kd_{ik}^* \right] c_{ijk}^*, 0 \right\}$$

$$c_{ijk}^3 = \rho_k^*(t)kd_{ik}^* c_{ijk}^0$$

但し、

$\theta_{lk}$  ; セル  $k$  における媒体  $l$  の空隙率

$p_{lk}$  ; セル  $k$  における媒体  $l$  の（空隙を含んだ）巨視的な体積割合

$\rho_{lk}$  ; セル  $k$  における媒体  $l$  の密度

$kd_{ilk}$  ; セル  $k$  における核種  $i$  の媒体  $l$  への分配係数

$s_k$  ; セル  $k$  における懸濁物濃度

$\rho_k^*$  ; セル  $k$  における懸濁物密度

$kd_{ik}^*$  ; セル  $k$  における核種  $i$  の懸濁物への分配係数

(5.9)式と、

$$(5.10) \quad C_{ijk} = \sum_l [\theta_{lk} p_{lk} c_{ijk}^0 + (1 - \theta_{lk}) p_{lk} c_{ijk}^1 + \theta_{lk} p_{lk} s_k c_{ijk}^3] + c_{ijk}^2$$

とを連立して解くことにより、各化学形態毎の濃度は、

$$(5.11) \quad c_{ijk}^n = c_{ijk}^n(C_{ijk}), \quad n = 0, 1, 2, 3$$

となり、5.9式中の各パラメータ値が与えられれば（後述）、全濃度の関数として一意的に表現されることとなる。

さて、以上の仮定の下に、人工バリア形状変化による複数媒体の共存を考慮した平均拡散係数は次の様に表現される。

$$(5.12) \quad \alpha_{ijk} = \frac{\sum_l [\theta_{lk} p_{lk} c_{ijk}^0(C_{ijk}) + \delta_\alpha^3 \theta_{lk} p_{lk} s_k c_{ijk}^3(C_{ijk})]}{C_{ijk}}$$

但し、 $\delta_\alpha^3$  は疑似コロイドの（溶存イオンに対して）規格化された拡散係数である。

#### 人工バリアの変形に対応した媒体の移動速度及び平均移流速度

最も内側の（ガラス固化体+オーバーパック）領域に対応するメッシュにおける  $l$  番目の媒体（水あるいはバリア材）の体積割合、密度、及び空隙率を、それぞれ  $p_{l0}(t)$ 、 $\rho_{l0}(t)$  及び  $\theta_{l0}(t)$  とする。この時、変形に伴う  $l$  の（質量）移動速度 ( $\text{kg}/\text{m}^2/\text{yr}$ ) は、次式で与えられる。

$$(5.13) \quad v_{l0}^+ = \frac{\frac{d(p_{l0}(t)\rho_{l0}(t)(1-\theta_{l0}(t)))}{dt} V_0 + S_{l0}(t)}{A_0^+}$$

但し、 $S_{l0}(t)$  は、当該バリアあるいは水が生成・消滅する場合のソースあるいはシンクである。

各バリア材の物質収支から、 $v_{i0}^+ = v_{i1}^-$ が成立し、つまり (5.13)は自動的にこれと隣接したメッシュ、つまり (緩衝材) 領域の最も内側のメッシュの内側境界における  $l$  の移動速度を与えることとなる。また、このメッシュでの外側境界での  $l$  の移動速度は、次の式で与えられる。

$$(5.14) \quad v_{i1}^+ = \frac{d(p_{i1}(t)\rho_{i1}(t)(1-\theta_{i1}(t)))}{dt} \frac{V_1 - v_{i0}^+ A_{i0}^+ - S_{i1}}{A_{i1}^+}$$

この操作を繰り返すことにより、 $l$  の各境界での移動速度は内側から帰納的に決定されることとなる。しかしながら、(5.4) 及び(5.5)式では、全ての媒体を何らかの形で統合し、唯一の移動速度 $v_k^\pm$ を定義することが求められている。そこで、様々な化学形態としての核種移行の総体が正確に表現される様に、以下の式により実効的な (体積) 移流速度 $v_k^\pm$ を定義する。

$$(5.15) \quad v_k^\pm = \frac{\sum_l \sum_{n=0}^3 \frac{v_{lk}^\pm}{\rho_{lk}} \delta_{ln}^\beta c_{ijk}^n(C_{ijk})}{\beta_{ijk}(C_{ijk}) C_{ijk}}$$

但し、

$$(5.16) \quad \beta_{ijk}(C_{ijk}) = \frac{\sum_l \sum_{n=0}^3 \delta_{ln}^\beta c_{ijk}^n(C_{ijk})}{C_{ijk}}$$

であり、 $\delta_{ln}^\beta$ は媒体  $l$  の移動に伴う化学形態  $i$  の規格化移流速度である。

### 各媒体の体積割合、密度及び空隙率

(5.12)、及び(5.13)～(5.16)に従い、平均拡散係数、平均移流速度、及び媒体全体としての移流速度は、いずれも、各媒体の巨視的な体積割合、密度及び空隙率によって規定されることとなる。そこで、最後に、以下に示す通りこれらのパラメータの振る舞いを具体的に記述することとする。

まず、5.1.2 に述べた概念モデルに従い、ニアフィールドを構成する各ボックス毎に存在し得る媒体の種類をまとめたものが表 5.1.3.1 である。

表 5.1.3.1 各ボックスに存在し得る媒体の種類

ボックス	媒体
I (ガラス固化体+オーバーパック) 領域	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ ガラス</li> <li>・ 炭素鋼</li> <li>・ 腐食生成物</li> <li>・ 水</li> </ul>
II (緩衝材) 領域	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ ベントナイト</li> <li>・ 腐食生成物</li> <li>・ 水</li> </ul>
III ゆるみ域	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 母岩</li> <li>・ ベントナイト</li> <li>・ 水</li> </ul>

更に、以下の仮定を設ける。

- A1; ガラス、及び周辺母岩の巨視的体積割合は時間的に一定である。
- A2; 媒体のソースは、領域 I における腐食生成物（オーバーパックの腐食）及び領域 III における水（外部からの地下水流入）についてのみ存在する。
- A3; 媒体のシンクは、領域 I における炭素鋼、領域 III における水（外部への地下水流出）及び領域 III におけるベントナイト（浸食）についてのみ存在する。
- A4; 水の密度は常に 1 である。

以上の条件の下に、各ボックスの体積、及び各媒体質量の収支から、以下の関係式群が導かれる。

$$(5.17) \quad \text{領域 I の体積収支} \quad p_G^i(\text{constant}) + p_O^i + p_{CP}^i + p_B^i = 1, \quad 0 \leq r < r_I$$

$$(5.18) \quad \text{領域 II の体積収支} \quad p_{CP}^{II} + p_B^{II} = 1, \quad r_I \leq r < r_{II}$$

(5.19) 炭素鋼及び腐食生成物の物質収支

$$\int_I 2\pi r \left[ p_O^I (1 - \theta_O^I) \rho_O^I - \int_0^t S_O^I dt \right] dr = M_O (\text{constant}),$$

$$\int_I 2\pi r \left[ p_{CP}^I (1 - \theta_{CP}^I) \rho_{CP}^I - \int_0^t S_{CP}^I dt \right] dr + \int_{II} 2\pi r p_{CP}^{II} (1 - \theta_{CP}^{II}) \rho_{CP}^{II} dr = 0,$$

$$S_{CP}^I = \xi S_O^I$$

(5.20) ベントナイトの物質収支

$$\int_I 2\pi r p_B^I (1 - \theta_B^I) \rho_B^I dr + \int_{II} 2\pi r p_B^{II} (1 - \theta_B^{II}) \rho_B^{II} dr +$$

$$\int_{III} 2\pi r \left[ p_B^{III} (1 - \theta_B^{III}) \rho_B^{III} - \int_0^t S_B^{III} dt \right] dr = M_B (\text{constant})$$

(5.21) 水収支

$$\int_I 2\pi r \left[ p_G^I \theta_G^I + p_O^I \theta_O^I + p_{CP}^I \theta_{CP}^I + p_B^I \theta_B^I \right] dr + \int_{II} 2\pi r \left[ p_{CP}^{II} \theta_{CP}^{II} + p_B^{II} \theta_B^{II} \right] dr$$

$$+ \int_{III} 2\pi r \left[ p_B^{III} \theta_B^{III} + (1 - p_B^{III}) - S_W^{III} \right] dr = M_W (\text{constant})$$

但し、

$M_O, M_B, M_W$  ; 炭素鋼、ベントナイト及び水の初期質量

$S_O^I, S_{CP}^I, S_B^{III}, S_W^{III}$  ; 炭素鋼、腐食生成物、ベントナイト、及び水のソース・シンクターム (生成側を正とする)

$\xi$  ; 腐食によって消失する炭素鋼と生成する腐食生成物との間の質量の比

解析にあたっては、(5.17)～(5.21)を満足する様な任意の関数形が各媒体の体積割合、密度及び空隙率の候補となるが、以下に、本年度の解析で使用する関数形を具体例として紹介する。

1) ガラス固化体

体積割合、密度及び空隙率ともに定数。

2) オーバーパック

密度、及び空隙率 (= 0) ともに定数。体積割合は、下図に示す様なステッ

は、一定の腐食速度に従って左に伝播するものとし、フロントの右側ではオーバーパックの体積割合は常に0であるとする。このことは、物理的には、腐食が全面腐食として一定の速度で進展し続けることを意味する。また、こうして定義される体積割合と、(5.19)の第一式から、炭素鋼についてのシンクタームが算出される。さらに、このシンクタームから、(5.19)の第三式に基づき腐食生成物についてのソースタームが決定される。

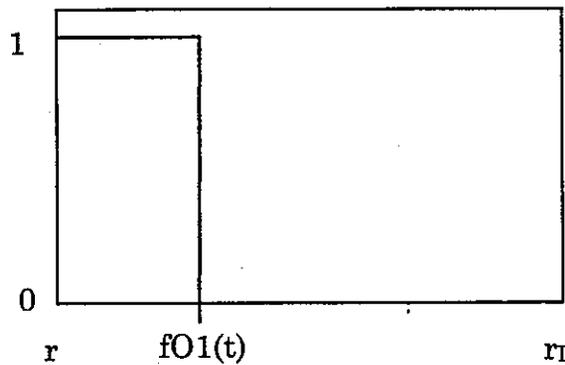


図 5.1.3.2 炭素鋼体積割合の表現 (模式図)

但し、上記の腐食挙動はあくまでもバルクとしての鉄の消費挙動を想定したものであり、オーバーパックの閉じこめ期間としては孔食等の他の腐食機構の可能性も考慮して、リファレンスケースと同じ1000年とする。

### 3) 腐食生成物

密度、及び空隙率はともに定数。領域 I における体積割合は、ガラス固化体、炭素鋼、及び後述するベントナイトの体積割合と(5.17)式に基づき決定される。また、領域 II における体積割合の全体は、腐食生成物のソースタームと領域 I における体積割合を(5.19)の第二式に適用することにより定まる。更に、図 5.1.3.3 に示すステップ関数モデルによって空間的分布を表現することとする。ここで、フロント  $f_{CP1}(t)$  は一定の速度で右側に移動することとなる。これは、物理的には、腐食生成物層がベントナイトと混ざり合うことなく明瞭な境界を保ちながら外側に移動していく状況に対応している。

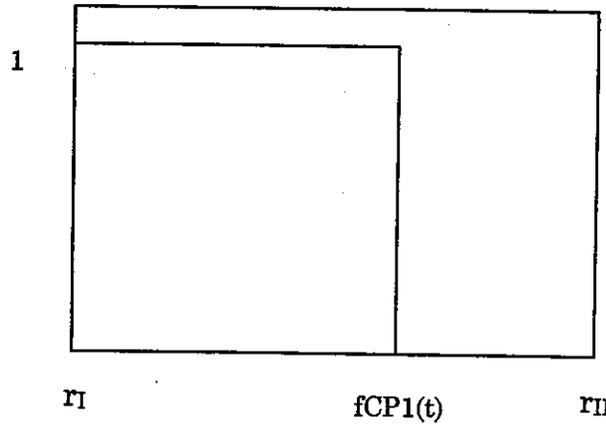


図 5.1.3.3 領域 II における腐食生成物の体積割合

4) ベントナイト

(真) 密度は定数。空隙率は、領域 I 及び III 内では定数とし、領域 II 中では下図に示す様な区分的に線形なモデルを用いる。また、図中の二つのフロントの伝播速度はそれぞれ時間的に一定であるとする。ここで、左側の空隙率がより小さい場合には、オーバーパック近傍で腐食生成物の膨張による圧縮が生じているか、あるいは亀裂への緩衝材の流出によって外側のベントナイト密度が低下している状態に対応している。また、ベントナイトの可塑性が十分に大きく、腐食や緩衝材流出に比して十分に速やかに応力的な平衡が回復される場合には、ベントナイトの空隙率や密度分布は空間的に均一になると考えられる。

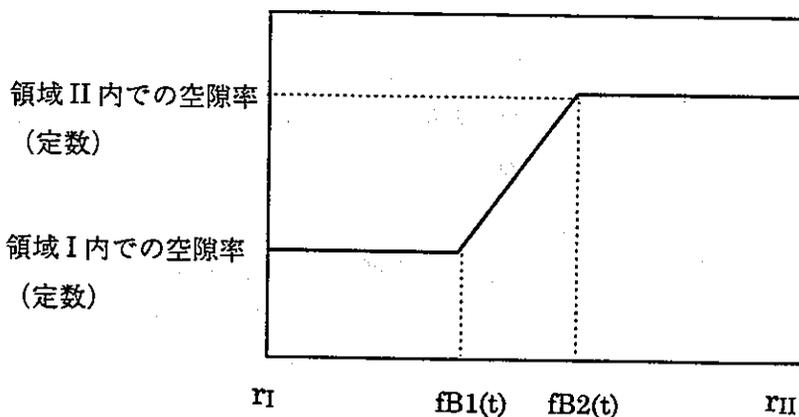


図 5.1.3.4 領域 II におけるベントナイト空隙率の変化

また、領域 III 及び II 中のベントナイトの体積割合は、以下の図に示す通りである。ここで、フロント  $fB4(t)$  は右に一定の速度で移動する。なお、領域 I

中のベントナイト体積割合は0である。

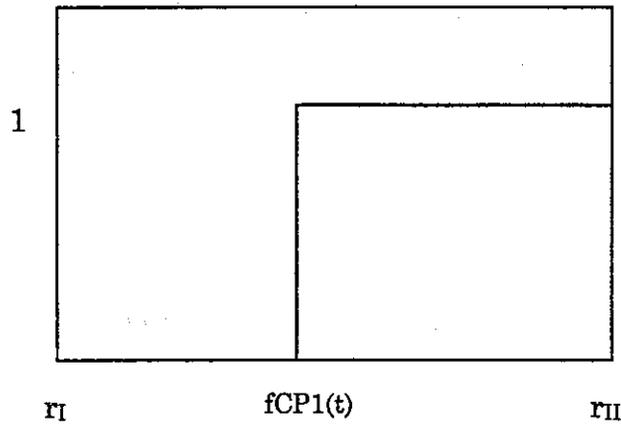


図 5.1.3.5 領域 II におけるベントナイト体積割合の変化

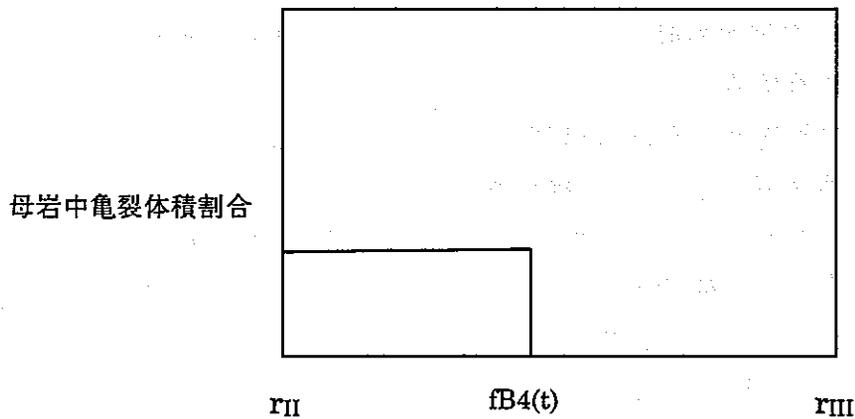


図 5.1.3.6 領域 III におけるベントナイト体積割合の変化

なお、領域 III においては、[2] を踏襲して以下の式により亀裂内のベントナイトのフロント移動を表現する。

$$(5.22) \quad fB4(t) = r_H + Af_A^2 \log_{10}(t+1)$$

但し、 $A=5 \times 10^4$ 。また、ベントナイト先端のゲル化した箇所への浸食を考慮する場合には、実際のフロント位置は、上式によって計算される値から累積の浸食量を差し引いたものとなる。

### 5.1.3.2 二重空隙固定形状モード

この実行形態におけるニアフィールド形状のボックスモデル、及び一般化された拡散・移流方程式のテンソル表現は、本年度の統計的解析に用いたものと全くおなじである（4.2 参照）。以下に、サブモデルレベルでの前提条件をまとめる。

#### 形状因子

- ・ ガラス固化体の浸出率は、いずれのケースにおいても時間的に一定であるものとする。
- ・ ガス圧による空隙水の移動以外のいずれのケースにおいても緩衝材中のギャップ空隙率は無視小である。
- ・ ガス圧による空隙水移動のケースにおいては、緩衝材内側境界から緩衝材を横断して外側境界に至るキャピラリーの束がギャップとして存在するものとし、その配置及び形状は時間的に不変であるものとする（但し、ギャップ内地下水流速は後述する様にある限られた時間帯内にのみ非零となる）。また、キャピラリーの単位断面積当たりの本数（従ってギャップ空隙率）は空間的に一様であるものとする。このことは、円筒座標系において  $r$  の増大に伴い断面積が増すと、枝分かれによってキャピラリーの本数がこれと比例的に増えることを意味する。
- ・ マトリクスブロック中心とギャップとの距離、及びマトリクスの比表面積は上で仮定するキャピラリーの頻度及びサイズと整合的に設定される。

#### 地下水流速

- ・ ガス圧による空隙水の移動以外のいずれのケースにおいても、人工バリアギャップ内の地下水流速は0である。
- ・ ガス圧による空隙水の移動以外のいずれのケースにおいても、ゆるみ域内には時間的に不変な流れが存在するものとする。この流れは、まず上部ゆるみ域に流入し、その全てがバイパスすることなく下部のゆるみ域に流入

し最終的にはこのボックスから流出するものと仮定する。特に、ゆるみ域における不完全な混合の影響についての解析では、この仮定に従い、下部ゆるみ域に流入する地下水は既に非零の核種濃度を有するために、人工バリアからの核種放出率は上下非対称となる。

- ・ ガス圧による空隙水の移動についてのケースでは、以下の Capillary Bundle モデル[3] によって各空隙中の気液界面の移動及びこれに伴う移流を表現する。

$$(5.23) \quad \frac{dR}{dt} = -\lambda \frac{\Delta P}{R},$$

$$\Delta P = p_g - p_w - P_s$$

但し、

$R(t)$ : 気液界面と緩衝材外端との距離

$\lambda$ : 定数

$p_g, p_w, P_s$ : ガス圧、静水圧、毛管圧。

ここで、MX-80 について英国地質調査所で行われた実験[4] においてガス圧と静水圧との差が 10 - 15MPa の条件において 4.9cm のサンプル中を 0.024 年でガスの破過が生じていることに基づき、

$$\lambda \Delta P = 0.05 \quad [m^2 / yr]$$

が成立するものと仮定する。また、周方向の流れは常に 0 であるとする。

#### 平均拡散係数、平均移流速度及び速度論的反応

- ・ 元素  $i$  の同位体  $j$  について、ギャップ及びマトリクスともに、以下の二つの瞬時平衡グループが存在するものとする。

#### グループ I

- ・ 溶存イオン (単位空隙水中の濃度 =  $c_{ij}^{I1}$ )、
- ・ 緩衝材への吸着種 (単位緩衝材中の濃度 =  $c_{ij}^{I2}$ )
- ・ 準安定相の沈澱 (単位総体積中の濃度 =  $c_{ij}^{I3}$ )

グループ II

- ・ 安定相の沈澱（単位総体積中の濃度 =  $C_{ij}''$ ）
- ・ 瞬時平衡グループ I の各化学形態の濃度間には、以下の関係が成立するものとする。

$$(5.24) \quad \begin{aligned} c_{ij}^{I2} &= kd_i \rho_B c_{ij}^{I1}, \\ c_{ij}^{I3} &= \max\left[0, C_{ij}^I - (\theta_B + (1 - \theta_B) kd_i \rho_B) c_{ij}^{I*}\right], \\ C_{ij}^I &= \theta_B c_{ij}^{I1} + (1 - \theta_B) c_{ij}^{I2} + c_{ij}^{I3} \end{aligned}$$

但し、 $c_{ij}^{I*}$  は準安定相に対応した元素  $i$  の溶解度（のうち同位体  $j$  への割り当て分）である。

(5.24) 式を解くことにより、各化学形態の濃度は、グループ I の全濃度の関数として一義的に定まることとなる。

また、二つの瞬時平衡グループ間の速度論的反応は、次式で与えられる。

$$(5.25) \quad R(I, II) = \mu \left( 1 - \frac{c_{ij}^{I1}}{c_{ij}^{I*}} \right) \left\{ H \left[ 1 - \frac{c_{ij}^{I1}}{c_{ij}^{I*}} \right] H \left[ C_{ij}^{II} \right] + \left( 1 - H \left[ 1 - \frac{c_{ij}^{I1}}{c_{ij}^{I*}} \right] \right) \right\}$$

但し、

$m$  ; 沈澱・溶解反応速度定数 (1/yr)

$c_{ij}^{I*}$  ; 元素  $i$  の安定相についての溶解度（のうち同位体  $j$  への割り当て分）  
(mol/m<sup>3</sup>)

また、 $\mu$  は速度論的な溶解・沈澱反応の影響に着目したケースにおいてのみ非零とし、逆にここでは準安定相の溶解度を十分に大きく設定することにより、速度論的な沈澱のみに着目する。換言すれば、他の全てのケースでは、瞬時平衡グループ II は存在しないこととなる。

- ・ 瞬時平衡グループ I の規格化平均拡散係数及び規格化平均移流速度は、いずれも次式で与えられる。

$$(5.26) \quad \alpha_{ij} = \beta_{ij} = \frac{c_{ij}^{II}(C_{ij}^I)}{C_{ij}^I}$$

また、平均拡散係数は  $D_i \alpha_{ij}$  で与えられ、分子拡散係数  $D_i$  を元素毎に変化させた解析を行ってその影響を検討することとする。

## 地球化学

- ・ 瞬時平衡グループの平均拡散係数及び平均移流速度の定義に含まれる諸パラメータのうち、準安定相の溶解度及び緩衝材への核種の分配係数は酸化還元条件に依存するものとし、還元性領域での値と酸化性領域での値をそれぞれ設定するものとする。
- ・ 空隙水の放射線分解により発生する酸化剤の影響に関するケースでは、4.2 に述べた  $(r, t)$  座標上の楕円形テンプレートの内側のものを用いて酸化性領域の生成、進展、及び消滅を表現する。そして、この酸化性及び還元性領域の区分に従って上記の溶解度及び分配係数の数値を変更する。
- ・ 他の全てのケースにおいては、人工バリア内は全て還元性領域にあるものと仮定する。

### 5.1.4 解析結果

#### 5.1.4.1 リファレンスケース

5.1.1 に示したリファレンスケースの条件に対応して、人工バリア中核種移行シャドウモデルを用いた解析を行った。解析対象とした核種は 5.1 において述べた通りである。これらの核種の人工バリアからの放出率の経年変化を図 5.1.4.1 にまとめる。また、リファレンスケースと同一条件での解析を、人工バリア及びゆるみ域を二分し、上流側及び下流側のそれぞれのゆるみ域半領域での混合を仮定した解析を併せて行い、ゆるみ域における不完全な混合の影響の定量化を行った。これら二種類の解析における、各核種についての最大放出率を表 5.1.4.1 にまとめる。

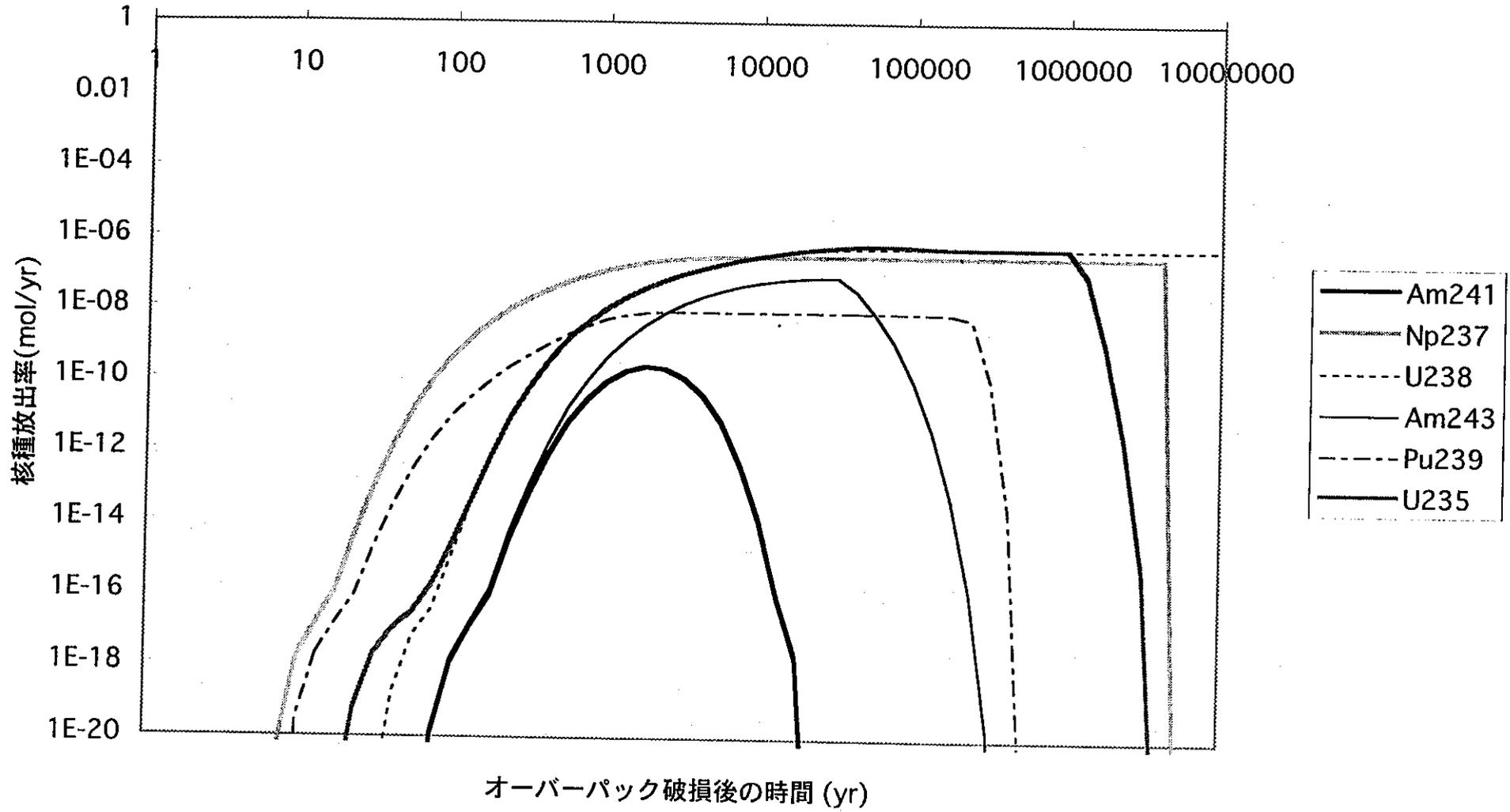


図 5.1.4.1 人工バリア中核種移行シャドウモデルによるリファレンスケースの解析結果

表 5.1.4.1 リファレンスケースに於ける最大核種放出率 (mol/yr/waste)

	リファレンスケース	ゆるみ域における不完全混合の影響を考慮したケース
Am-241	2.38 E-10	2.15 E-10
Np-237	3.00 E-7	2.67 E-7
U-238	5.47 E-7	4.86 E-7
Am-243	7.99 E-8	7.20 E-8
Pu-239	8.16 E-9	6.49 E-9
U-235	6.46 E-7	5.49 E-7

なお、別途実施された人工バリア中核種移行解析コード MESHNOTE による解析結果との比較を図 5.1.4.2 に示す。Np-237、U-238、Am-243、及び Pu-239 の 4 核種については二つの解析結果の差は数パーセント以内にあるのに対して、Am-241 及び U-235 についてはシャドウモデルによる解析の方が結果を過大評価していることがわかる。これは、シャドウモデルによる解析が同一元素の複数同位体間での溶解度シェアを考慮していないことに起因するものである。つまり、相対的に（それぞれ Am-243 及び U-238 に対して）劣性の同位体である Am-241 及び U-235 に配分される溶解度のシェアが MESHNOTE において同位対比を反映した小さいものとなることが上記の差の原因である。しかしながら、この誤差については、解析的に計算される当該同位体比の経年変化をシャドウモデルの出力に乗じることによって容易に解消することが可能である。

#### 5.1.4.2 二重空隙固定形状モード

##### (1) ガス圧による緩衝材空隙水の移動 (ケース 1)

(5.23)式によって記述される気液界面の移動は、0.67m の緩衝材中を約 5 年間で破過する。この時間は、解析全体の時間スケール (1000 万年) と大きく異なるために、数値解法上は多くの場合解の特異点として取り扱われてしまう。そこで、以下の解析に於いては、各核種の最大放出が生じている状態の人工バリア濃度分布においてソーパーをリスタートすることにより 10 年間の解析を行った。なお、前出の実験結果[4] に基づきガスの通路となる空隙の頻度は  $3 \text{ E}4 / \text{m}^2$  であるとし、空隙半径については観察結果と整合的に 0.1 - 1mm と仮定した。

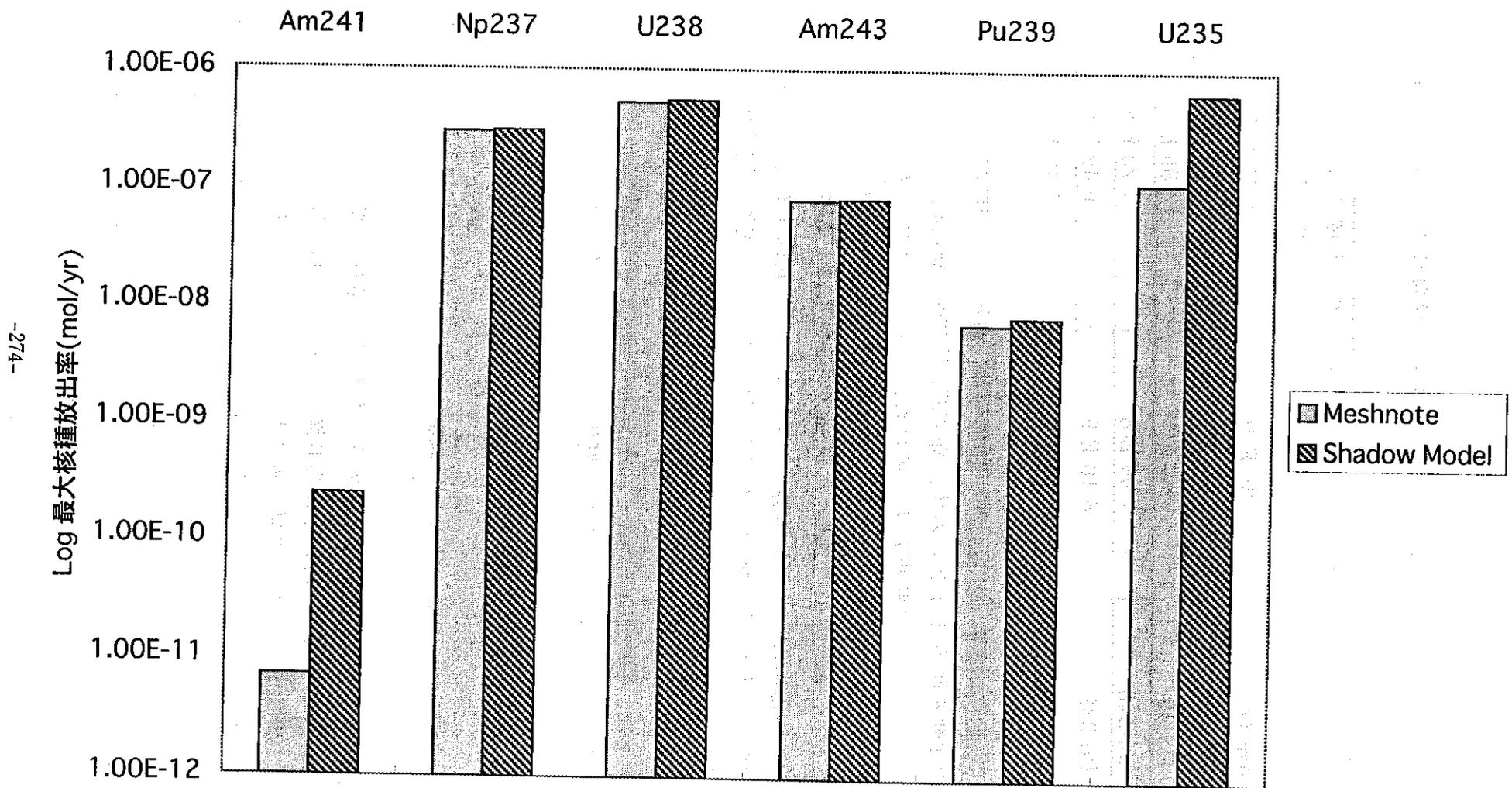


図 5.1.4.2 MESHNOTE及び人工バリア中核種移行シャドウモデルによるリファレンスケース解析結果の比較

空隙半径を 0.1mm としたケース (ケース 1a) 及び 1mm としたケース (ケース 1b) についての解析結果を図 5.1.4.3 及び 5.1.4.4 にそれぞれまとめる。これらの図において、ガス昇圧後 4 年程度で生じている核種放出率のピークは、5.23 式に従い破過前に徐々に加速する気液界面の移動に伴う移流によるものである。ガス圧による移流が生じている期間 (約 5 年間) における平均核種放出率の増分をリファレンスケースでの最大放出率によって規格化した結果を表 5.1.4.2 にまとめる。

表 5.1.4.2 ガスによる移流が生じている期間の平均放出率増分  
(リファレンスケースにおける最大値で規格化)

	ケース 1a	ケース 1b
Am-241	0.83	83
Np-237	0.038	3.8
U-238	0.020	2.0
Am-243	0.0043	4.3
Pu-239	0.019	1.8
U-235	0.017	1.7

## (2) 速度論的な溶解・沈澱反応の影響

溶解度制限固相として想定されている水酸化物等の沈澱は数週間から長くとも数年程度の実験において観察されているものであることから、ここでは保守的に (つまり沈澱速度を過小評価する様に) 一次反応速度定数  $\mu=0.1-1.0$ /年と設定する。 $\mu=0.1$ /年としたケース (ケース 2a) 及び  $1.0$ /年としたケース (ケース 2b) についての解析結果を図 5.1.4.4 にまとめる。図から明らかなおり、いずれの場合においてもリファレンスケースとの間に有意な差異は見られなかった。なお、この解析結果と [5] における結果 ( $\mu=0.1$ /年の場合、U 等の最大放出率が数桁上昇する) との差は、[5] においては平成 3 年度報告書で仮定されていた大きなガラス溶解速度と小さな溶解度 (酸化物等に対応) が仮定されていたのに対して、今回の解析では第二次とりまとめで用いるより現実的な数値に置き換えられているためと考えられる。

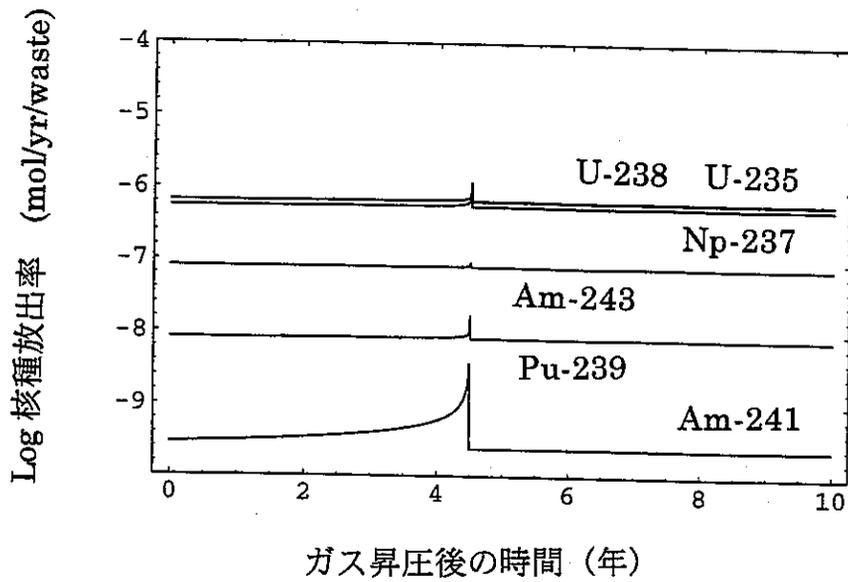


図 5.1.4.3 ガス圧による移流の影響についての解析結果  
(ケース 1a: 毛管半径 0.1mm)

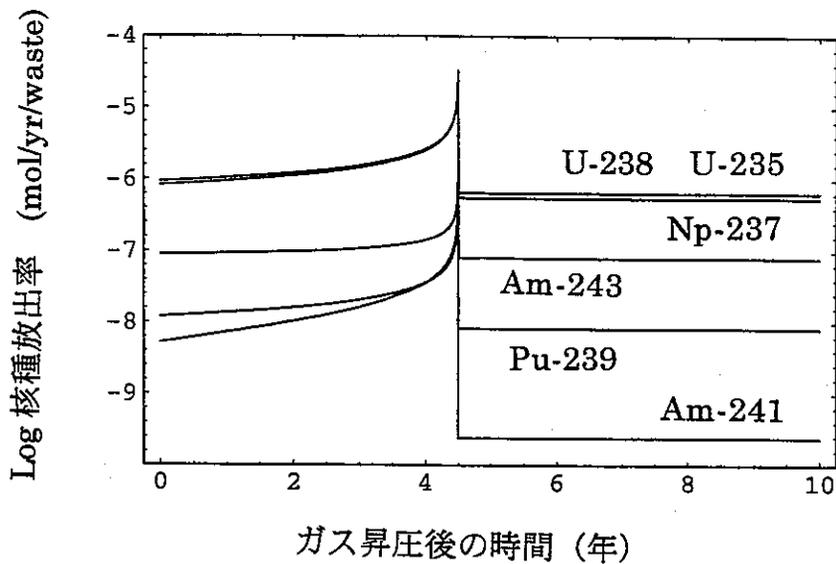


図 5.1.4.3 ガス圧による移流の影響についての解析結果  
(ケース 1b: 毛管半径 1.0mm)

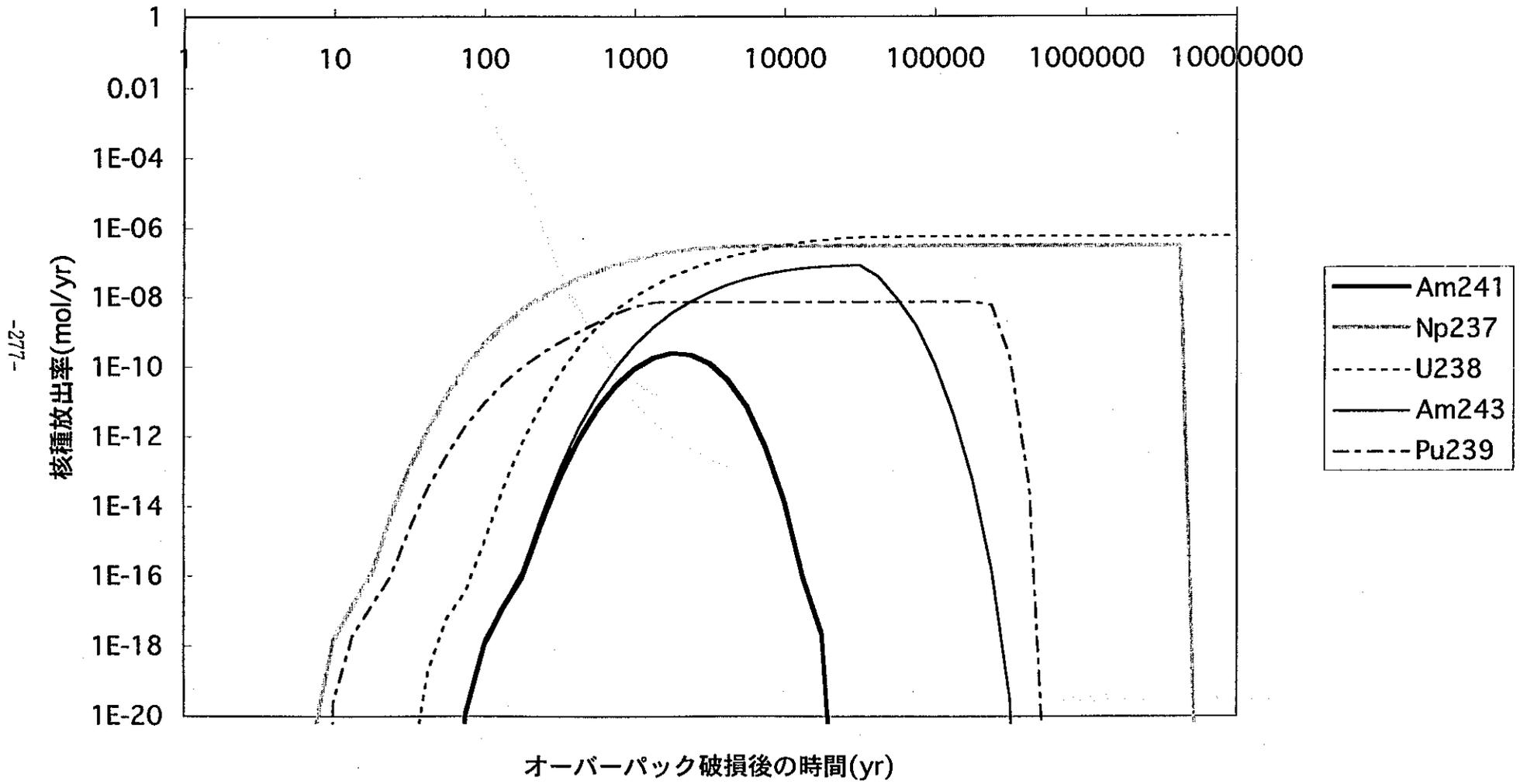


図 5.1.4.4 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる速度論的溶解・沈澱 (ケース2a) についての解析結果

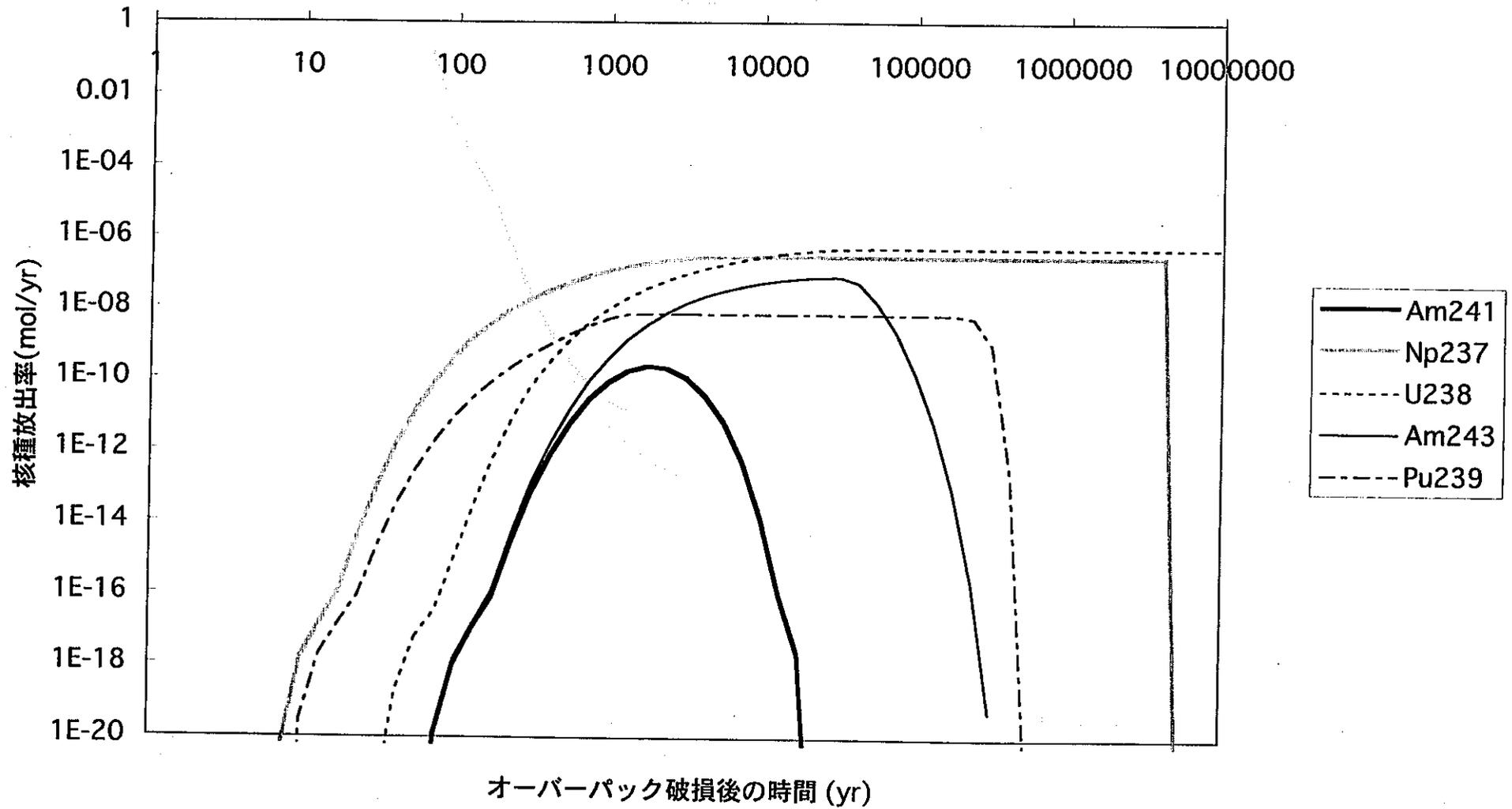


図 5.1.4.4 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる速度論的溶解・沈澱の影響 (ケース2b) についての解析結果

### (3) 元素に依存した拡散係数の影響

リファレンスケースにおける設定に代わって、以下の表にまとめる空隙水中拡散係数を用いた解析を行った。結果を図 5.1.4.5 にまとめる。

表 5.1.4.3 元素依存の拡散係数値

	空隙水中拡散係数 (m <sup>2</sup> /yr)
Am	1.89 E-3
Pu	1.89 E-3
U	1.42 E-2
Np	1.42 E-2

いずれの核種についても、放出率はリファレンスケースよりも減少しているが、特に短半減期の核種においては、拡散係数の低下が移行挙動の遅延につながっているために現象の程度が著しくなっているものと考えられる。

### (4) 空隙水の放射線分解により生ずる酸化剤の影響

放射線分解により生ずる酸化剤が全てオーバーパック開口部を通じて緩衝材に放出されるものとし、酸化剤がベントナイト中の黄鉄鉱と瞬時のうちに反応すると仮定した計算[6]によれば、酸化還元フロントは 1000 万年間で 11.2cm 前進するという結果が得られている。この条件と整合的に、前出の楕円形の地球化学異常が 1000 万年間で 12cm 前進するとした解析（ケース 4a）を行った。結果を図 5.1.4.6 にまとめる。図から明らかなおおりに、リファレンスケースに比して放出率の有意な上昇は見られない。なお、酸化性雰囲気中での各元素の溶解度としては[6]に従い、表 5.1.4.4 に示す数値を仮定した。

表 5.1.4.4 酸化雰囲気における溶解度

	溶解度 (mol/m <sup>3</sup> )
Am	2 E-5
Pu	3 E-6
U	3
Np	1

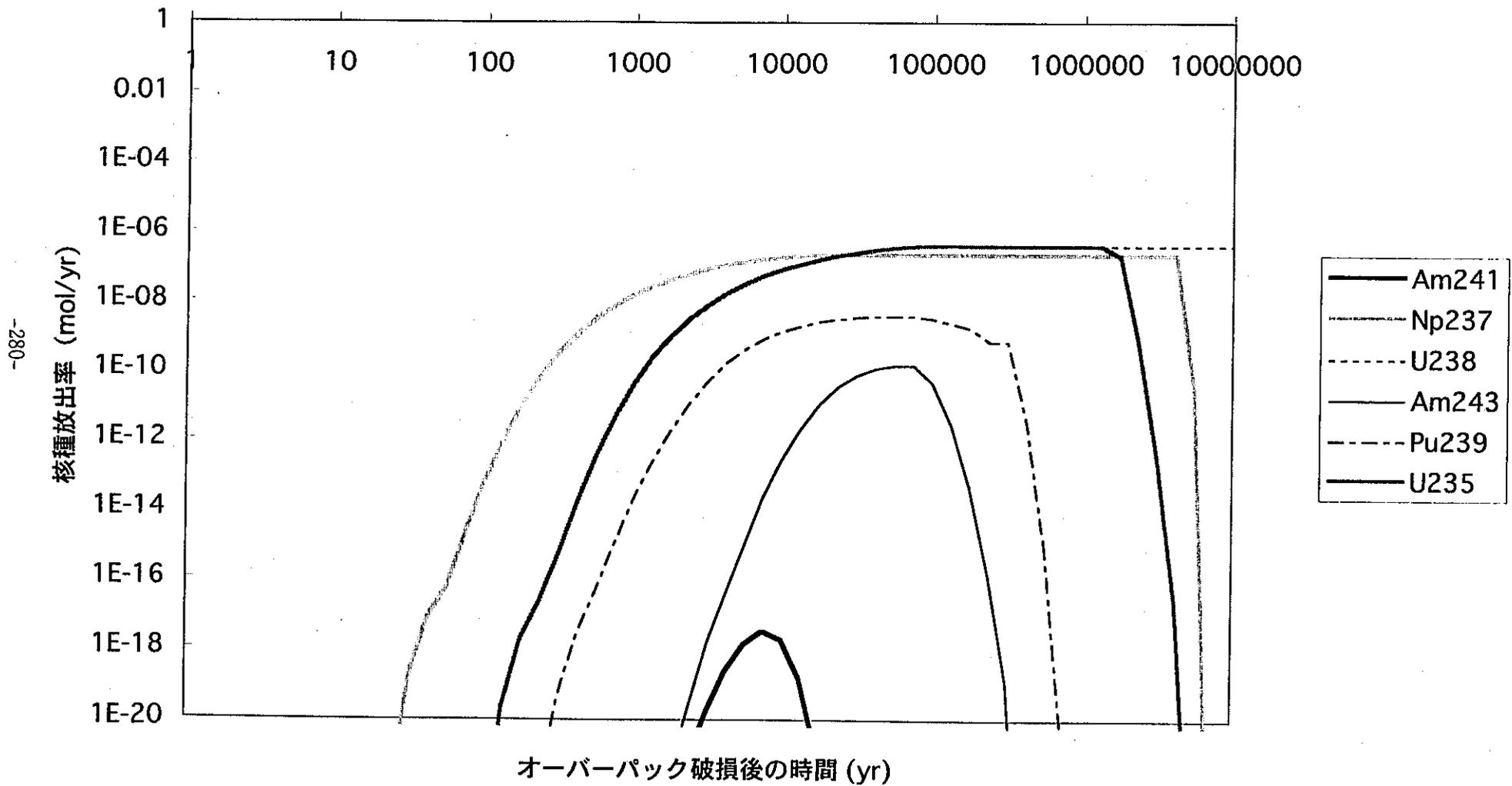


図 5.1.4.5 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる元素依存の拡散係数の影響 (ケース3) についての解析結果

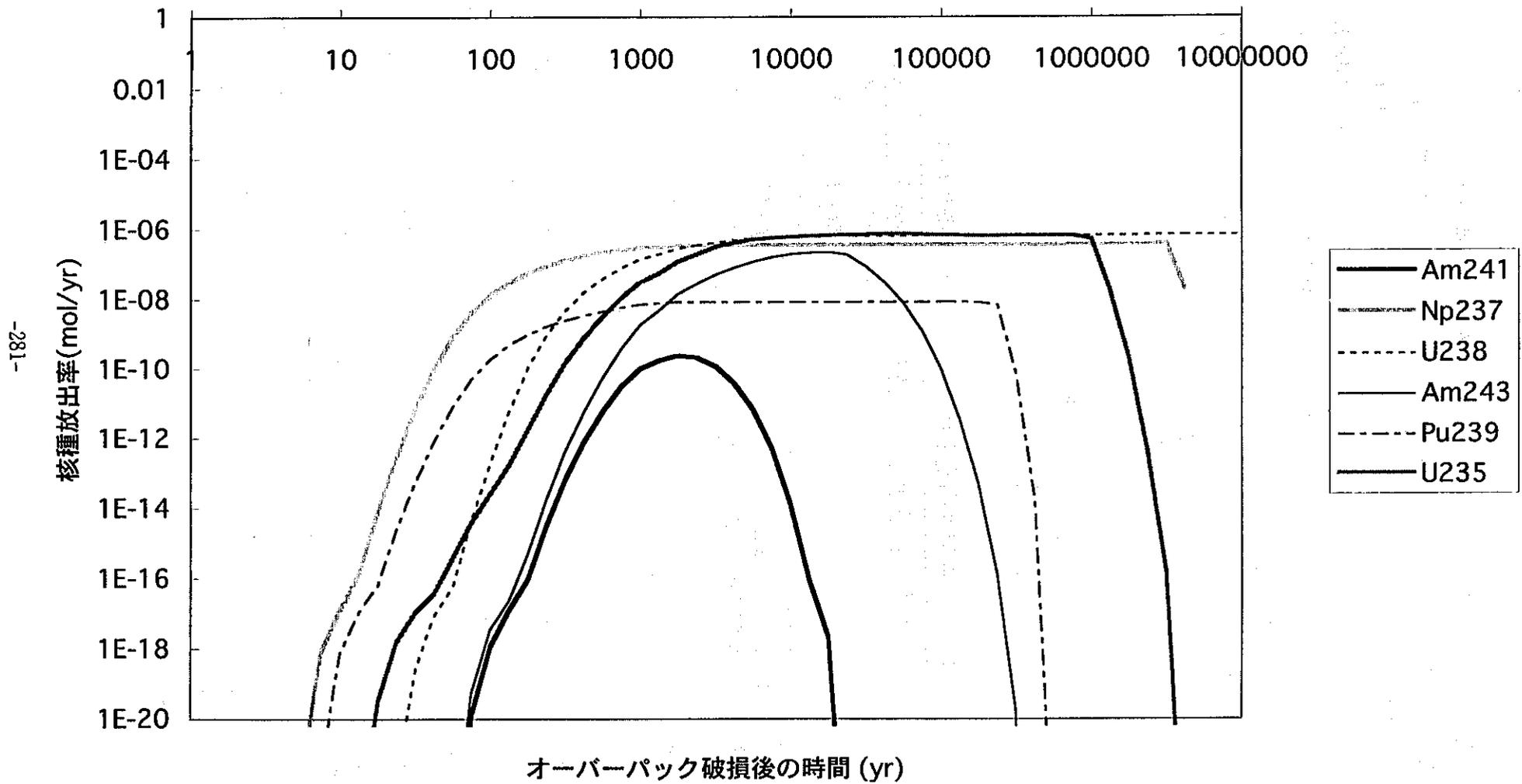


図 5.1.4.6 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる放射線分解に伴う酸化剤生成の影響 (ケース4a) についての解析結果

上記の仮定のうち、酸化剤が黄鉄鉱により瞬時に消費されるという仮定は非保守側のものである。そこで、比較のために、1000 万年間で酸化還元フロントが緩衝材の外側にまで達するという想定の下に解析（ケース 4b）を行った。結果を図 5.1.4.7 にまとめる。Am 以外の各核種について、最大放出率の顕著な上昇が見られる。このケースで仮定されている様に酸化還元フロントが緩衝材外側にまで至る状況は現実的には考えにくいだが、その可能性を明確に否定することもまた困難である。このことは、オーバーパック・腐食生成物及び緩衝材中の黄鉄鉱と酸化剤との反応を、速度論的に取り扱った詳細な解析を行うことの重要性を示唆するものと考えられることができる。

以上、二重空隙固定形状モードでの各解析ケースの条件を表 5.1.4.5 に、また、対応する最大放出率を図 5.1.4.8 にまとめる。

表 5.1.4.5 二重空隙固定形状モードでの解析条件のまとめ

	Case 0	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4
名称	リファレンス	ガス圧による 移流	速度論的 溶解・沈澱	元素依存の 拡散係数	放射線分解による 酸化剤生成
拡散係数	4.78 E-2	4.78 E-2	4.78 E-2	Am,Pu 1.89e-3 U,Np 1.42e-2	4.78 E-2
分配係数	表 5.1.1.6	表 5.1.1.6	表 5.1.1.6	表 5.1.1.6	表 5.1.1.6
溶解度 (瞬時平衡)	表 5.1.1.5	表 5.1.1.5	N/A	表 5.1.1.5	表 5.1.1.5
溶解度 (速度論)	N/A	N/A	表 5.1.1.5	N/A	N/A
溶解・沈澱 反応速度定数	N/A	N/A	0.1 (Case2a) 1.0 (2b)	N/A	N/A
人工バリア中 地下水流速	0	式(5.23)	0	0	0
酸化還元フロント 最大到達距離	N/A	N/A	N/A	N/A	0.55 (Case4a) 1.1(Case4b)
酸化還元フロント 存在期間	N/A	N/A	N/A	N/A	1.0 E7 yrs
酸化性雰囲気中の 溶解度	N/A	N/A	N/A	N/A	U 3mol/m3 Np 1 Pu 3 E-6 Am 2 E-5
酸化性雰囲気中の 分配係数	N/A	N/A	N/A	N/A	表 5.1.1.6

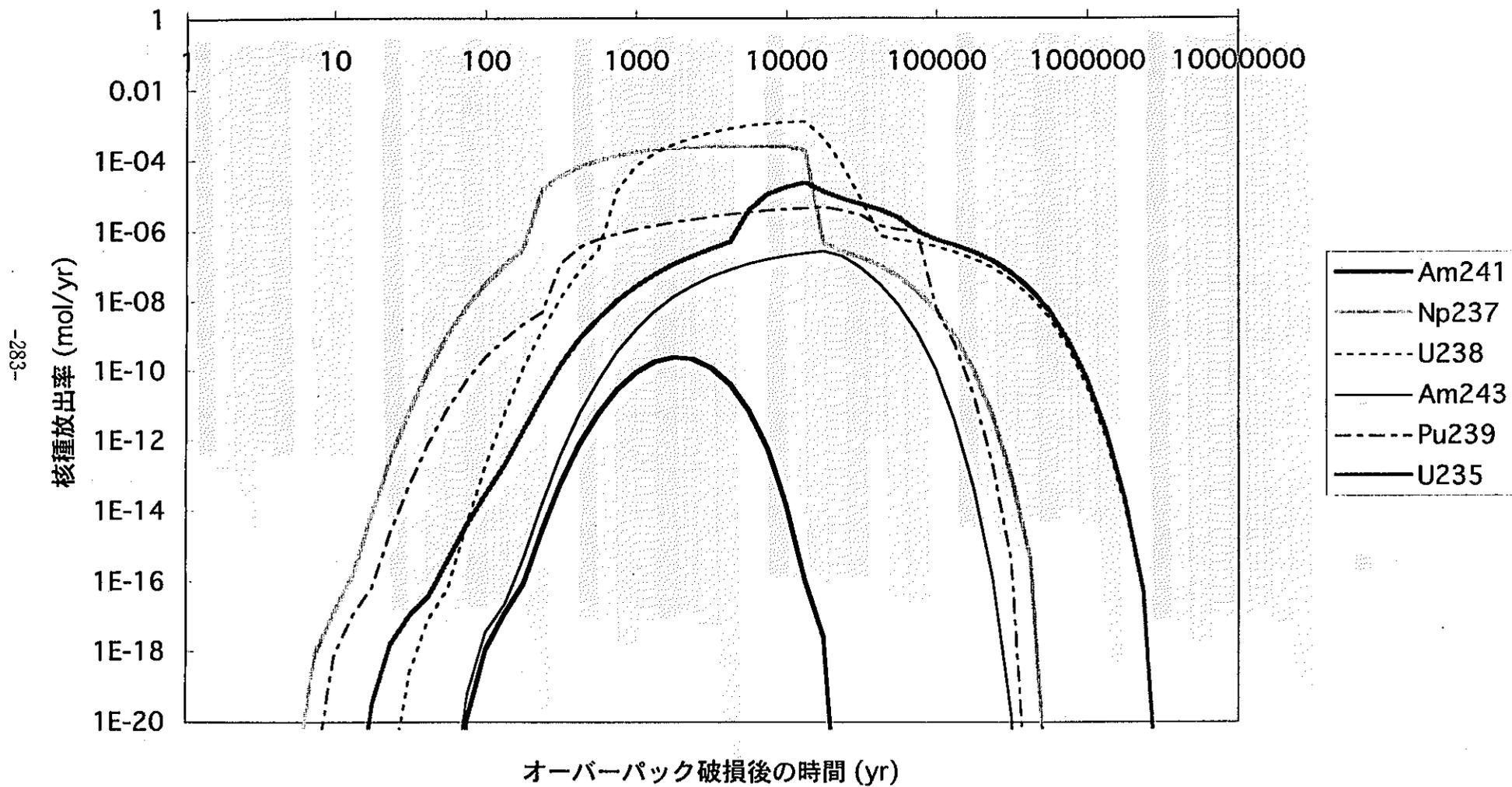


図 5.1.4.7 人工バリア中核種移行シャドウモデルによる放射線分解に伴う酸化剤生成の影響 (ケース4b) についての解析結果

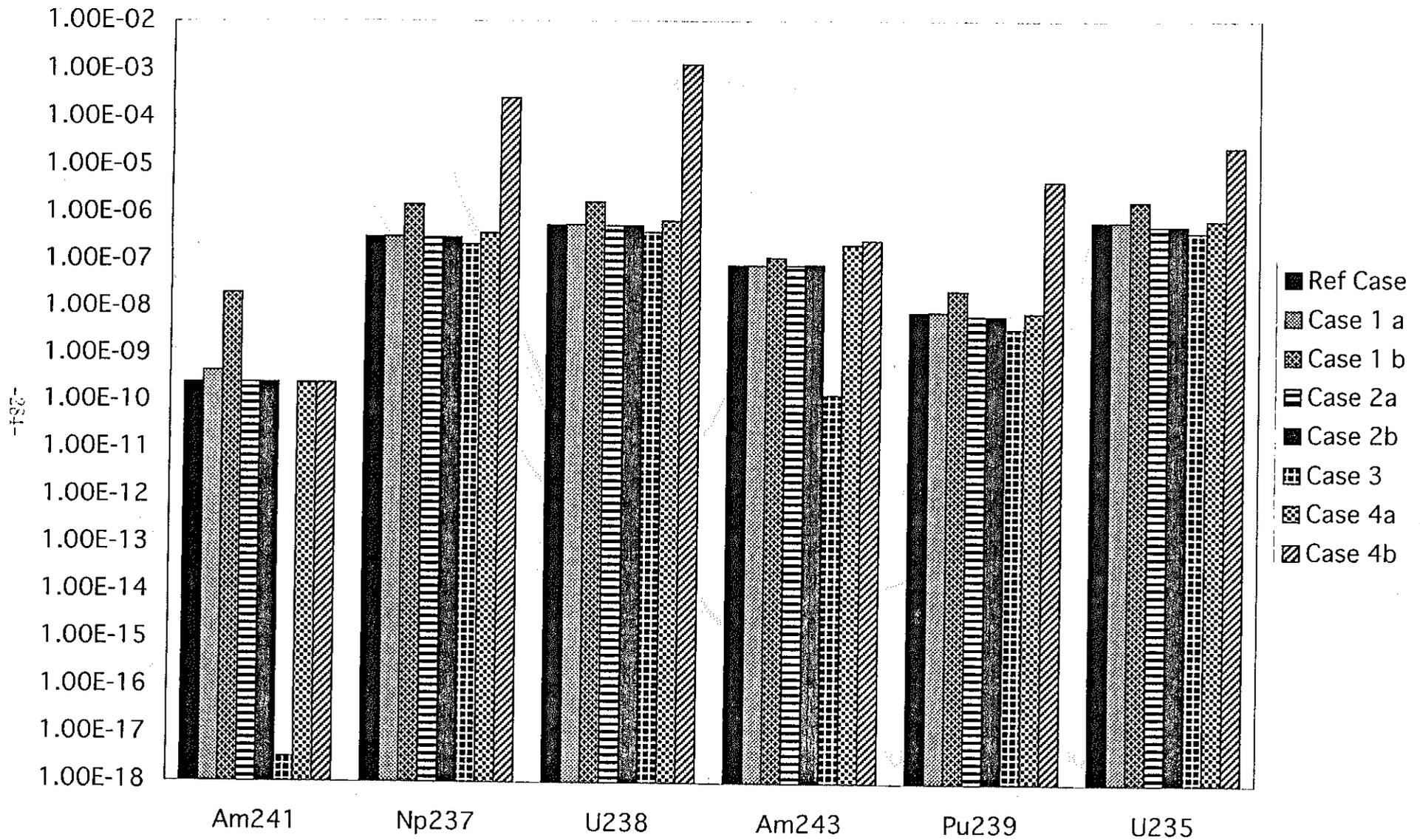


図 5.1.4.8 二重空隙固定形状モードでの解析結果のまとめ

### 5.1.4.3 単一空隙可変形モード

5.1.3.1 に述べた単一空隙可変形モードのシャドウモデルを用い、以下の条件でオーバーパック腐食生成物の膨張に伴い変形する人工バリア中での核種移行を Am-241 → Np-237 について解析した。なお、同表に記載のないパラメータの設定値はリファレンスケースと同一である。

表 5.1.4.6 単一空隙可変形モードでの解析条件

	ケース I	ケース II
オーバーパック全面腐食速度	5 E-6 m/yr	5 E-6 m/yr
腐食生成物対炭素鋼体積比	3.0	3.0
腐食生成物空隙率	0.1	0.1
腐食生成物への核種分配係数	表 5.1.1.6 の 2 倍相当	表 5.1.1.6 の 2 倍相当
緩衝材の亀裂内進入速度	式 (5.22)	式 (5.22)
亀裂開口幅	0.15 mm	0.15 mm
亀裂内ベントナイト密度	1300 kg/m <sup>3</sup>	1300 kg/m <sup>3</sup>
緩衝材空隙率空間分布	均一	線形*

#### \*注

ケース II における緩衝材中空隙率の分布は、図 5.1.4.9 に示す通りである。なお、ケース I 及び II ともに緩衝材全体の平均空隙率は、腐食生成物の膨張とベントナイトの亀裂中への進入の効果により時間に依存したものとなる。詳細については 5.1.3.1 を参照のこと。

ケース I 及び II の解析結果を図 5.1.4.10 及び 5.1.4.11 にそれぞれまとめる。いずれの解析結果も、極く低い数値を示す初期の期間を除けば、ほとんどリファレンスケースと同等の核種放出率を示している（初期の差は、計算時間短縮のために、これらの計算においてリファレンスケースよりも大きな差分メッシュが用いられていることに対応している）。このことから、表 5.1.4.6 に示す条件では、腐食生成物の膨張に伴う人工バリア材変形の影響は小さいとすることができる。また、ケース I 及び II の解析結果間の差異は小さく、緩衝材空隙率空間分布の詳細が結果に影響を及ぼすものではない。

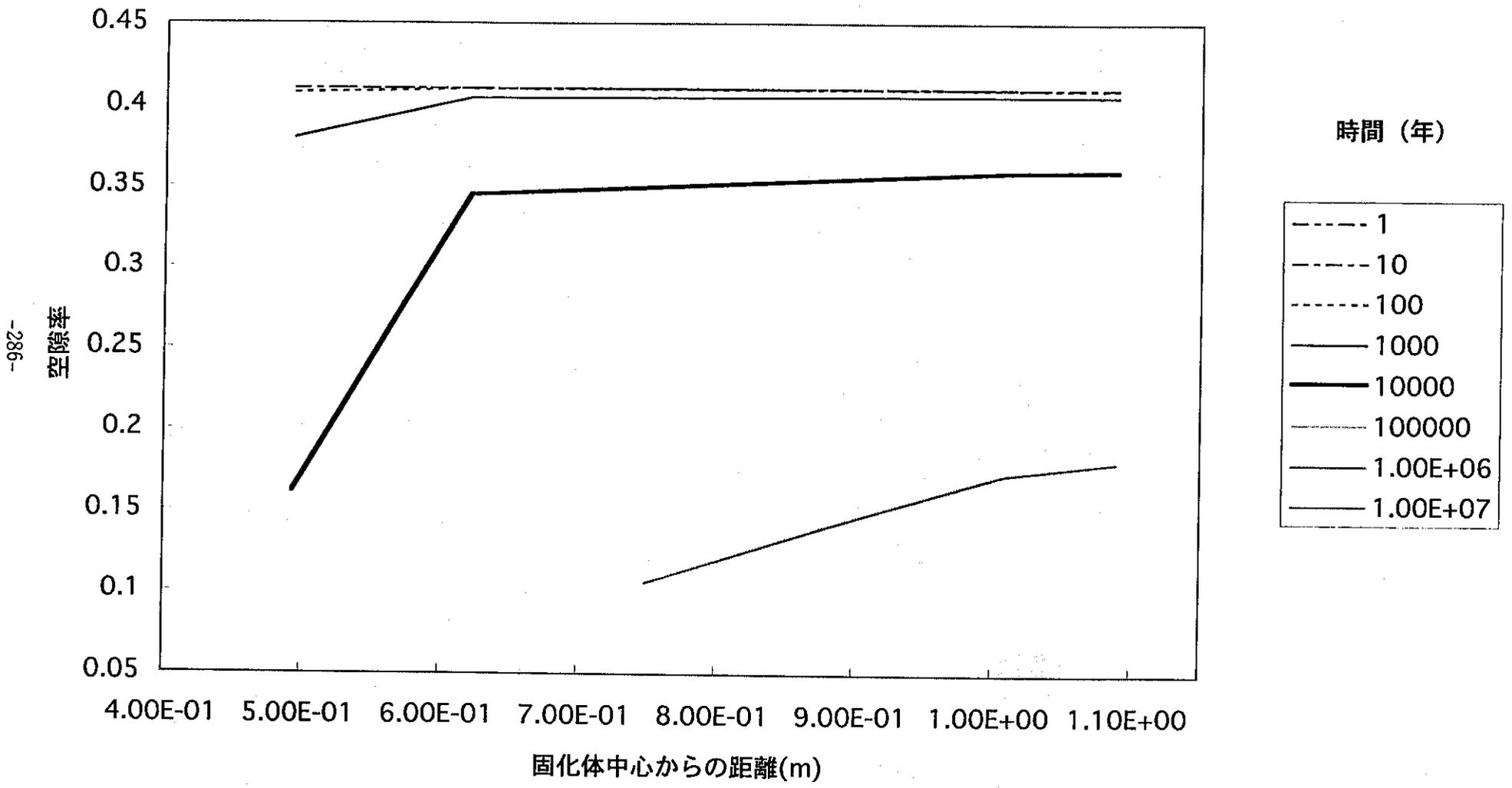


図 5.1.4.9 単一空隙可変形モード (ケースII)における緩衝材中空隙率分布の経時変化

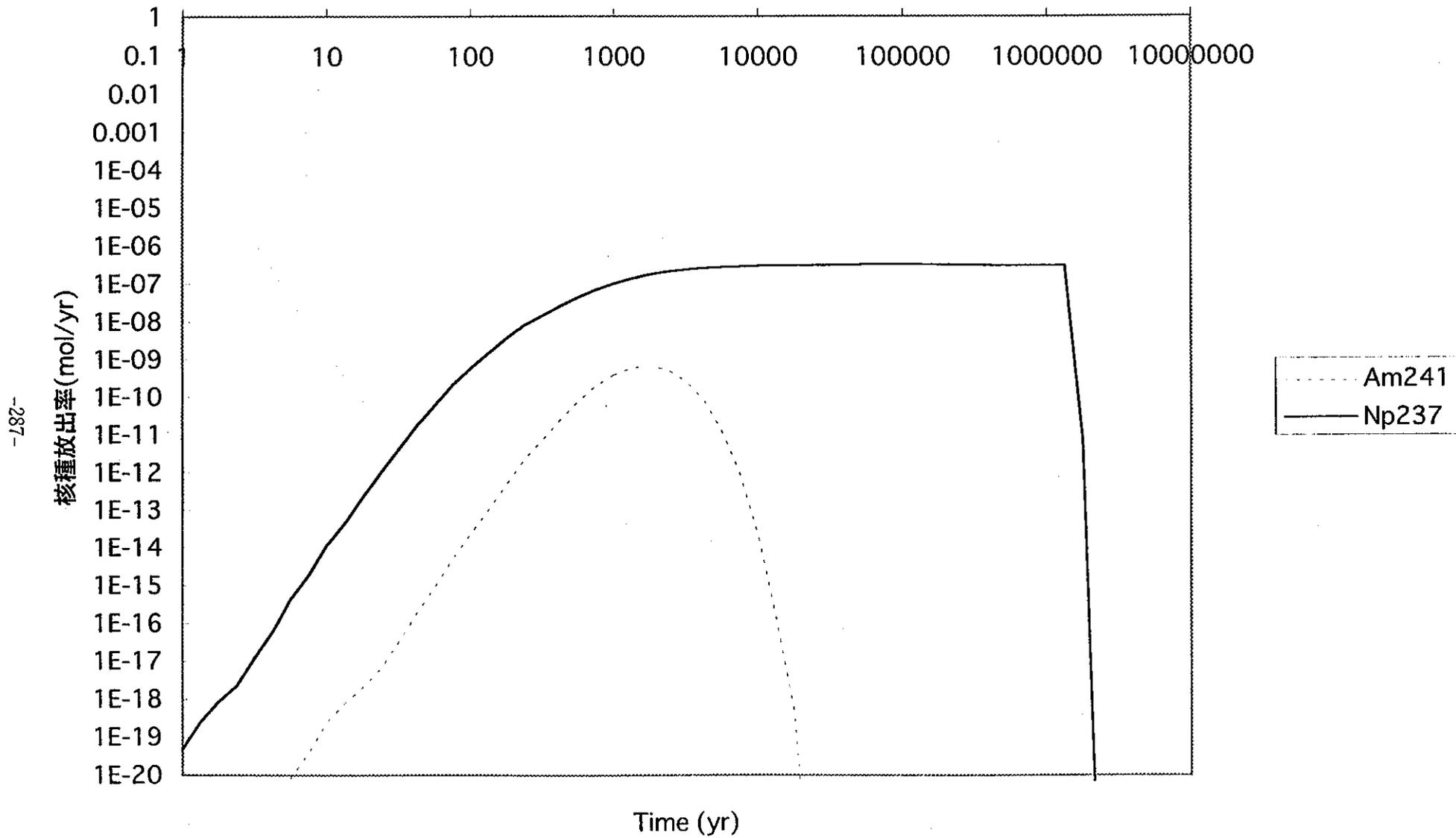


図 5.1.4.10 単一空隙可変形モデルによる解析結果 (ケースI)

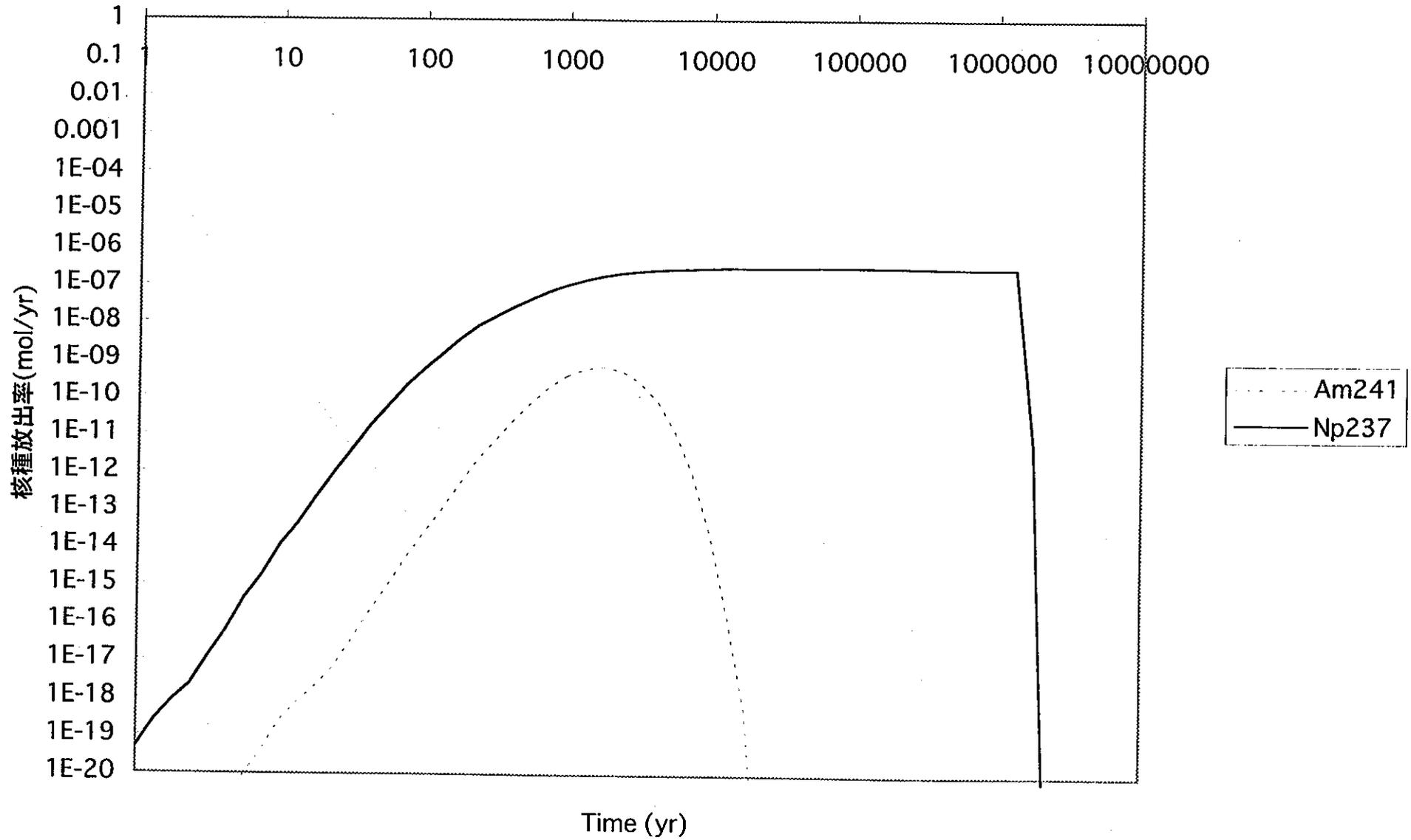


図 5.1.4.11 単一空隙可変形モデルによる解析結果 (ケースII)

## 5.2 MESHNOTE を用いた決定論的人工バリア中核種移行解析

動燃事業団殿が利用している人工バリア中核種移行解析に関する既存コード MESHNOTE を用いたリファレンスケースについての解析の支援を目的として、MESHNOTE による解析結果とシャドウモデルを用いた解析結果との比較を実施した。また、リファレンスケース近傍の解析ケースを設定して、それらの解析を実施した。

### 5.2.1 シャドウモデルを用いた解析結果との比較

MESHNOTE による解析結果とシャドウモデルを用いた解析結果との比較を目的として、前節に記載したシャドウモデルの場合と同一の解析条件・パラメータセットによる解析を実施した。

解析ケースとしては、動燃殿が定めたリファレンスケース、リファレンスケースの条件に放射線分解に伴う酸化剤生成の影響を考慮したケースおよびオーバーバックの腐食膨張に伴う影響を考慮したケースの3ケースについて解析を実施した。

#### 5.2.1.1 リファレンスケース

解析結果比較の基礎となるリファレンスケースに関する MESHNOTE による解析結果を図 5.2.1.1 に示す。シャドウモデルとの解析結果比較については、5.1.4.1 項で述べられたように、Am-241 および U-235 を除く各核種のピーク放出率の差は、数パーセント以内にある。Am-241 および U-235 については、シャドウモデルによる解析の方が高いピーク値を示している。これは、シャドウモデルでは同一元素の溶解度について同位体分配の効果を考慮していないが、MESHNOTE では、それを解析上考慮していることによる。また、同じ理由によりシャドウモデルよりも MESHNOTE の方が、U-235 の核種放出のテイルが 100 万年以上に延びている。

#### 5.2.1.2 酸化剤生成の影響を考慮したケース

廃棄体中からの  $\alpha$  線や  $\gamma$  線等の放射線照射により、地下水が放射線分解を起こし、その結果として酸化性の領域が廃棄体中および近傍に形成される可能性がある。ここでは、5.1.2.4 に記載した現象を考慮して、別途実施した酸化剤生

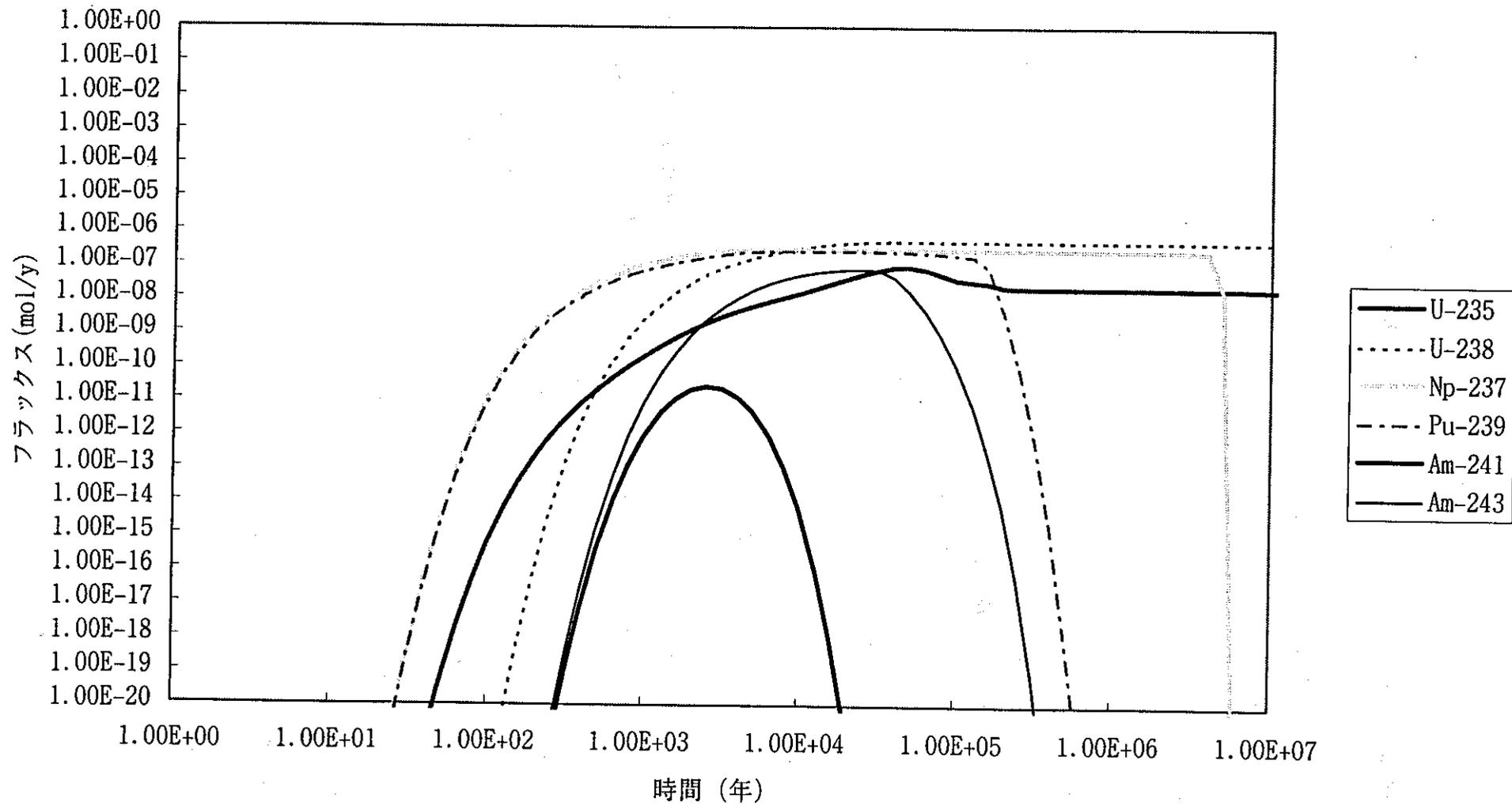


図5.2.1.1 MESHNOTEによるリファレンスケースの解析結果

成の解析結果を反映した緩衝材中の酸化還元フロントの進展を考慮したケースについて解析結果を比較した。MESHNOTE ではシャドウモデルと異なり、時間的に連続な酸化還元フロントの進展が反映できないため、その進展をステップ状に、2千年まで、1万年まで、10万年まで、100万年まで、1000万年まで、1000万年以降の、6段階に区分して近似的に解析を実施した。今回の解析条件では、1000万年以降の段階に於いても酸化還元フロントの緩衝材内側からの進展は11cm程度であり、その外側には健全な緩衝材層が残っている。

MESHNOTE による解析結果を図 5.2.1.2 に示す。図 5.1.4.6 のシャドウモデルによる酸化剤生成の影響解析結果と比較して、核種放出率の立ち上がりやや遅くなっているが、最大放出率等のそれ以外の結果はほぼ同じである。図 5.2.1.3 にシャドウモデルと MESHNOTE による各核種の最大放出率を示す。これらの図から明らかのように、Am-243 を除き、同一元素の溶解度について同位体分配の効果を考慮すれば、両者の結果はほぼ同じである。従って、本解析条件程度の緩衝材中酸化還元フロントの移動であれば、MESHNOTE により、時間的に連続的なフロントの移動を近似的に解析可能であると考えられる。

#### 5.2.1.3 オーバーパックの腐食膨張に伴う影響を考慮したケース

オーバーパックの腐食膨張に伴う影響として、オーバーパック腐食生成物層および緩衝材での核種吸着および拡散の効果を考慮し、かつオーバーパック腐食生成物層の成長によるベントナイト厚みの減少を考慮したケースについて解析を実施した。

MESHNOTE ではシャドウモデルと異なり、時間的に連続なオーバーパック腐食生成物層の成長とベントナイト厚みの減少が反映できないため、その変化をステップ状に、2千年まで、1万年まで、2万年まで、3万年まで、4万年まで、4万年以降の、6段階に区分して近似的に解析を実施した。

MESHNOTE による解析結果を図 5.2.1.4 に示す。図 5.1.4.10 のシャドウモデルによる Am-241 および Np-237 の解析結果と比較して核種放出率の立ち上がりやや遅くなっているが、最大放出率等のそれ以外の結果はほぼ同じである。図 5.2.1.5 にシャドウモデルと MESHNOTE による各核種の最大放出率を示す。オーバーパックの腐食膨張に伴う核種移行への影響は軽微であり、MESHNOTE により、時間的に連続的なフロントの移動を近似的に解析可能であると考えられる。

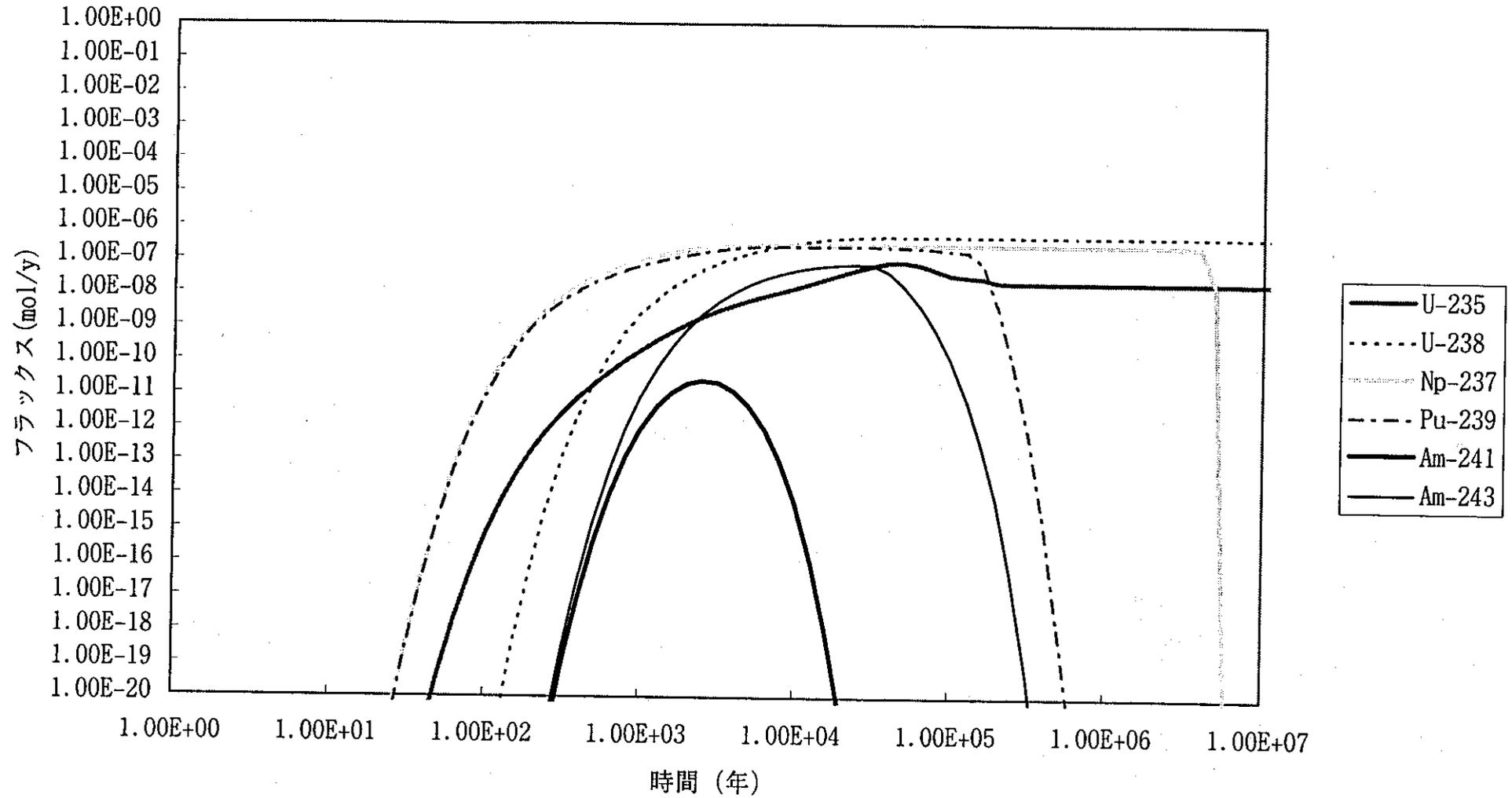


図5.2.1.2 酸化フロント進展の核種移行への影響に関するMESHNOTEによる解析結果

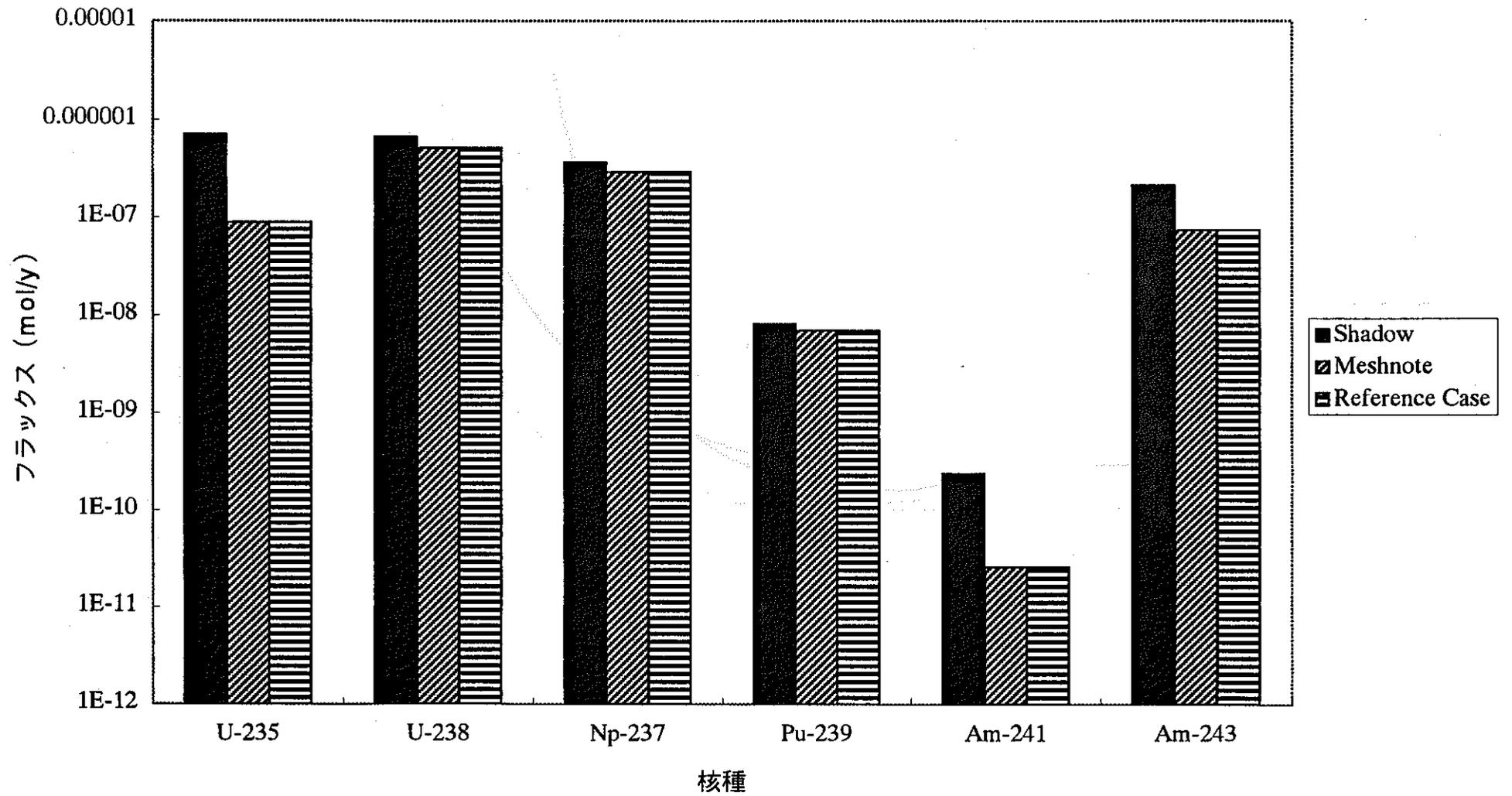


図5.2.1.3 酸化性領域生成を考慮した場合の最大放出率の比較

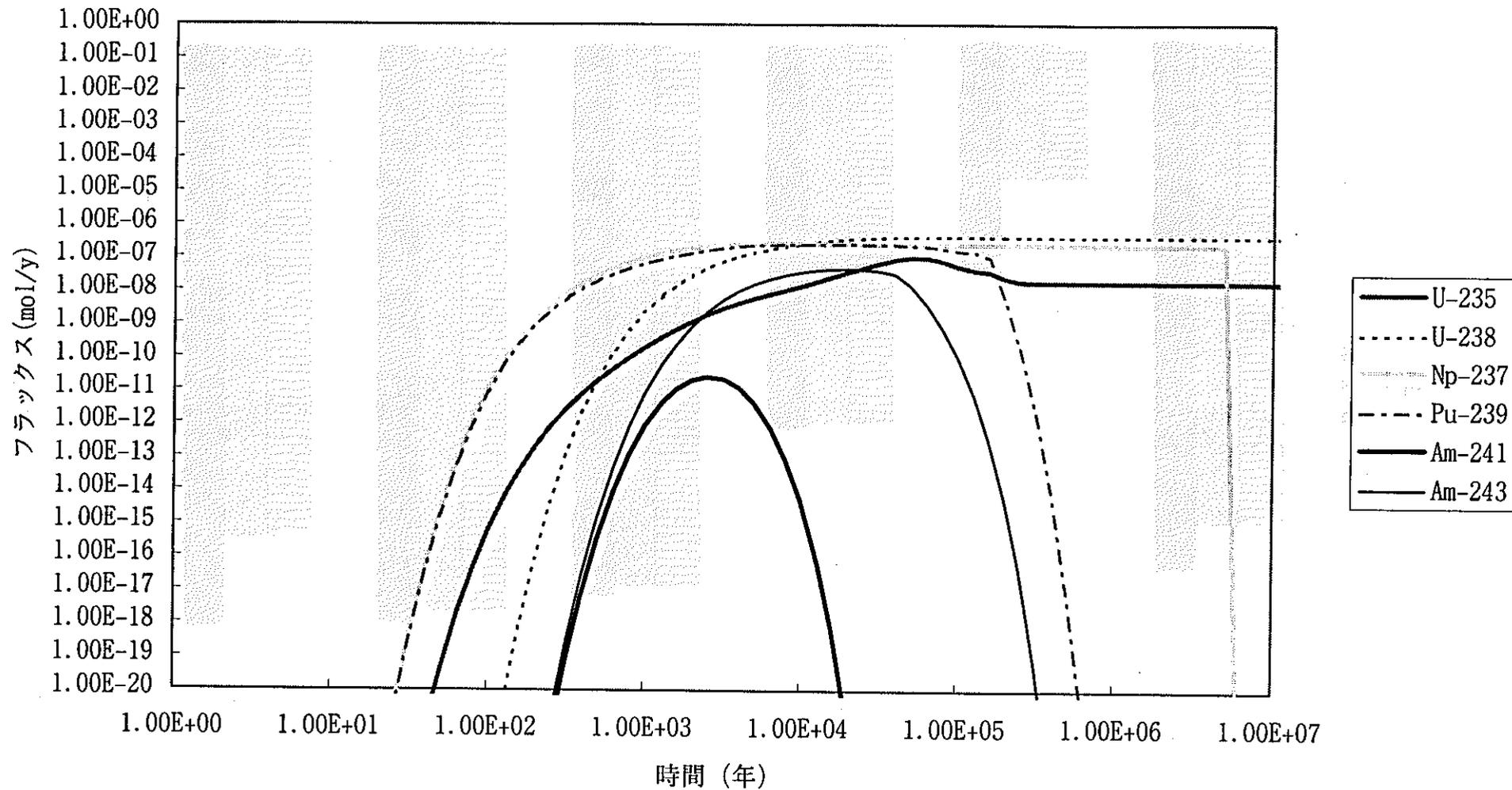


図5.2.1.4 腐食によるオーバーパック内拡散係数の低下影響解析結果

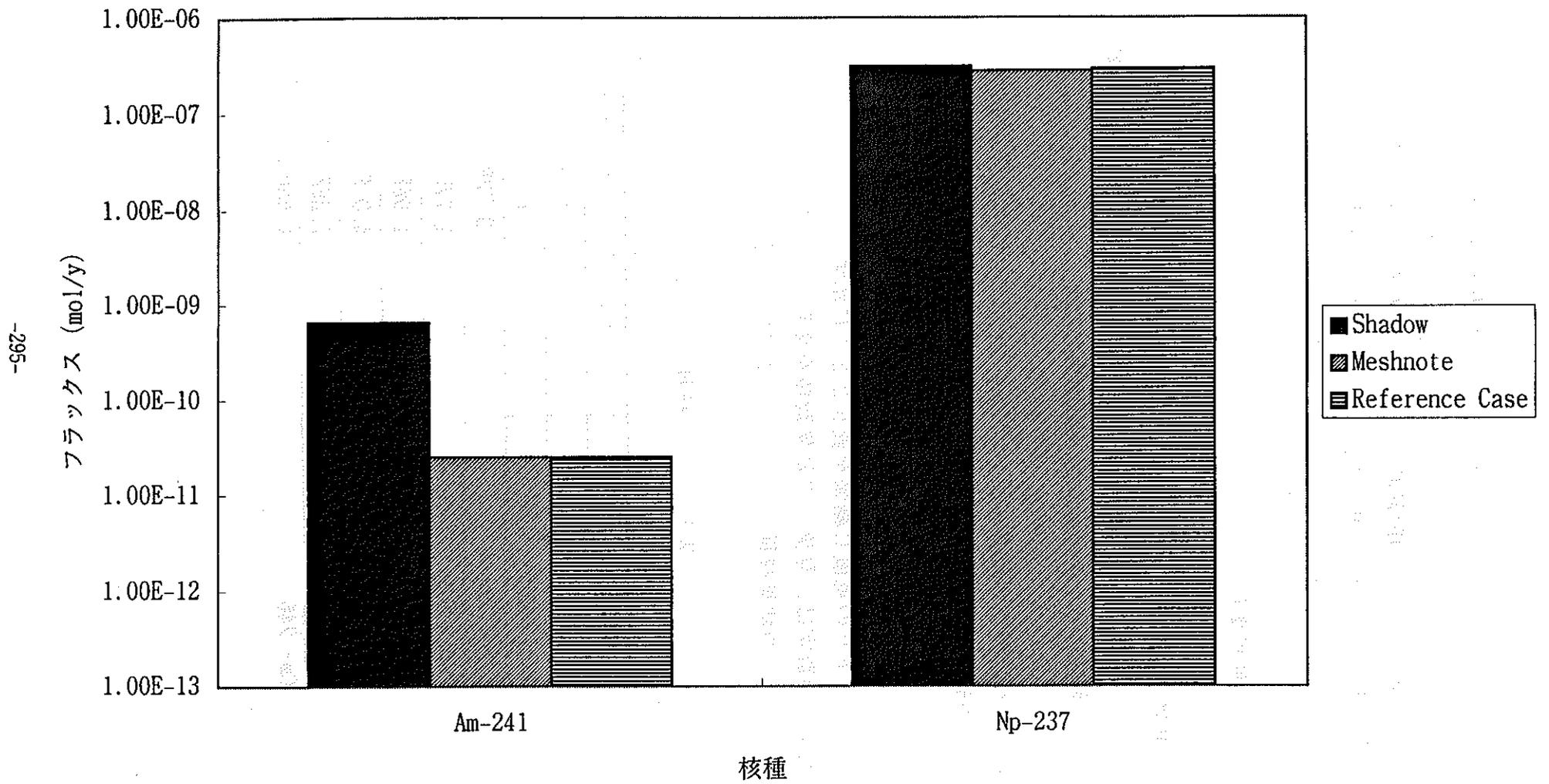


図5.2.1.5 オーバーパックの腐食膨張影響を考慮した場合の最大核種放出率の比較

## 5.2.2 リファレンスケース近傍の人工バリア中核種移行解析

前記 5.2.1 項において、MESHNOTE とシャドウモデルの解析結果に大きな相違がないことを確認した上で、MESHNOTE により解析可能な種々のリファレンスケース近傍の解析ケースを設定して、それらの解析を実施した。

### 5.2.2.1 共通解析条件

解析の基礎となるリファレンスケースの解析条件は、原則として 5.1.1 節のシャドウモデルを利用した解析条件と合わせる。ただし、解析条件を見直し、以下に示す一部のパラメータについては変更した。

#### (1) ゆるみ域内地下水流量

ゆるみ域内地下水流量（ミキシングセル流量）は、 $0.05[\text{m}^3/\text{y}]$ とする。

#### (2) 核種インベントリ

核種インベントリの見直し結果を表 5.2.2.1 に示す。

表中の太文字の数字は、見直しの結果数値を変更したものを示す。また、太文字の核種は見直しの結果核種インベントリに追加したものを示す。

表 5.2.2.1 核種インベントリ

核種名	インベントリ [mol/廃棄物]
U-235	1.86E-1
U-238	1.68E+1
Np-237	<b>3.72E0</b>
Pu-239	1.72E-1
Am-241	1.96E-1
Am-243	4.01E-1
<b>Cm-245</b>	7.26E-3
<b>Cm-246</b>	8.30E-4

### (3) 核種の緩衝材中での分配パラメータ

MESHNOTE では、媒体中での核種の分配に関するパラメータとして、分配係数と吸着媒体密度の積を採用している。この分配パラメータの見直し結果を表 5.2.2.2 に示す。

表 5.2.2.2 核種分配パラメータ

核種名	分配パラメータ (分配係数×媒体密度)
U	2700
Np	2700
Pu	27000
Am	27000
C m	27000

### (4) 核種溶解度

核種溶解度の見直し結果を、表 5.2.2.3 に示す。表中の太文字の数字は、見直しの結果数値を変更したものを示す。

表 5.2.2.3 核種溶解度

核種名	溶解度 [mol/m <sup>3</sup> ]
U	1.00E-5
Np	5.50E-6
Pu	<b>4.00E-6</b>
Am	5.60E-6
C m	2.00E-7

#### 5.2.2.2 各解析ケースの前提条件及びパラメータ設定の考え方

解析ケースとしては、リファレンスケースからの摂動として、以下の4種のケースを考慮した。

- (1) オーバーパック腐食膨張の核種移行への影響
- (2) オーバーパック腐食生成物の核種吸着効果
- (3) 放射線分解による酸化フロント進展の影響
- (4) 緩衝材周りでの地下水の回り込みの影響

以下に、各影響を考慮した前提条件及びパラメータ設定の考え方を示す。

(1) オーバーパック腐食膨張の核種移行への影響 (ケース1群)

ケース1では、オーバーパック腐食膨張及びベントナイト圧縮による拡散係数及び吸着の変化をみている。(原則として、OP腐食生成物領域における吸着はないものとして評価している。)

(1.1) オーバーパック腐食膨張によるベントナイト層の厚み減少および拡散係数の低下

ジオメトリはオーバーパック腐食膨張が終了した状態を想定し、解析上のバッファ (MESHNOTE 解析系でのソースとミキシングセルに挟まれた部分) 内側位置は、固化体中心から 56cm とした。解析上のバッファ領域 (MESHNOTE 解析系でのソースとミキシングセルに挟まれた領域) はベントナイトのみを考慮している。ベントナイトの拡散係数は最も圧縮された状態における値として  $3.32E-2[m^2/y]$  とした。

(1.2) オーバーパック腐食膨張によるオーバーパック内拡散係数の設定

オーバーパック腐食が完全に進行した場合、圧密された腐食生成物層が出現する。腐食生成物中の空隙率は、文献を参考として、0.1[8] とした。オーバーパック腐食生成物の間隙水中の拡散係数に関するデータがないため、ベントナイトおよびオーバーパック腐食生成物間隙水中の核種の拡散係数を同一 ( $0.0478m^2/y$ ) と仮定して、両者の空隙率の相違を考慮し、腐食生成物間隙水中の拡散係数を  $0.012(m^2/y)$  とした。また、全面腐食速度を  $5e-6(m/y)$  と設定して、腐食膨張の経時変化にあわせて、経時的な緩衝材の厚み減少を考慮した[8]。

健全なオーバーパックにはバッファ性能を持たせず、オーバーパック腐食生成物およびベントナイトを MESHNOTE 解析系のバッファ領域としてモデル化した。なお、腐食生成物はオーバーパックとベントナイトの境界に発生し、内側および外側へ広がって行くが、MESHNOTE はジオメトリの変化を扱うことができないので、内側へ拡大する腐食生成物は考慮しない。これは MESHNOTE 解析系のバッファ領域が実際より小さくなることを意味するので、保守側の評価になる。

以上の前提から、表 5.2.2.4 のように拡散係数を設定する。

表5.2.2.4 ケース(1.2)の解析条件

期間	0/P腐食生成物領域 m	0/P腐食生成物中拡散係数 (m <sup>2</sup> /y)	ベントナイト領域 m	ベントナイト中拡散係数 (m <sup>2</sup> /y)
0 ~ 2千年	なし	設定しない	0.43~1.1	0.0478
2千~1万年	0.43~0.47	0.012	0.47~1.1	0.0478
1万~2万年	0.43~0.49	0.012	0.49~1.1	0.0478
2万~3万年	0.43~0.52	0.012	0.52~1.1	0.0478
3万~4万年	0.43~0.54	0.012	0.54~1.1	0.0478
4万年~	0.43~0.56	0.012	0.56~1.1	0.0478

以上をまとめるとケース(1.2)の解析条件は以下のようになる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域はオーバーパック腐食生成物およびベントナイトの2領域。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域およびベントナイトの拡散係数は、各々一定とする。

### (1.3) ベントナイト圧縮による拡散係数の低下

オーバーパック腐食膨張によりベントナイトが圧縮されベントナイト空隙率が下がり、それに伴い実効拡散係数が低下するというケースであり、ケース(1.2)に対してベントナイトの拡散係数を経時変化させたものである。ケース(1.1)同様オーバーパックにはバリア性能を持たせず、腐食生成物およびベントナイトを MESHNOTE 解析系のバッファ領域とする。圧縮される過程はケース(1.2)と同様の考え方によりオーバーパック外側位置が分かり、それから初期ベントナイト体積に対する当該期間のベントナイト体積比、空隙率および拡散係数の経時変化は表 5.2.2.5 のようになる。ただし、MESHNOTE では空隙率の時間変化は扱うことができないので0.41のままとする。また、MESHNOTE 解析系のバッファの内側領域および外側領域の取り方はケース(1.2)に同じである。

表5.2.2.5 ケース(1.3)の解析条件

期間	O/P腐食生成物外側位置 m	ベントナイト体積比	空隙率	ベントナイト空隙水中拡散係数 (m <sup>2</sup> /y)
0 ~ 2千年	0.43	1	0.41	0.0478
2千~1万年	0.47	0.9649	(0.41)	0.0437
1万~2万年	0.49	0.9462	(0.41)	0.0415
2万~3万年	0.52	0.9166	(0.41)	0.0381
3万~4万年	0.54	0.8960	(0.41)	0.0357
4万年~	0.56	0.8745	(0.41)	0.0332

以上をまとめるとケース(1.3)の解析条件は以下のようになる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域はオーバーパック腐食生成物およびベントナイトの2領域とする。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域では拡散係数は一定。ベントナイトでは経時的に低下する。

#### (1.4) ベントナイト層の厚み減少、拡散係数の低下及び吸着効果の考慮

本ケースは、ケース(1.1)の条件に、ベントナイト層における吸着効果を考慮したものである。従って、想定した状態及び条件は以下の通りである。

ジオメトリはオーバーパック腐食生成物が終了した状態を想定し、解析上の MESHNOTE 解析系のバッファ領域はベントナイトのみを考慮している。ベントナイトの空隙水中の拡散係数は最も圧縮された状態における値として  $3.32E-2$  [m<sup>2</sup>/y]とした。

#### (1.5) ベントナイト圧縮による遅延効果

ケース(1.2)に対してベントナイト層の空隙率の変化を考慮したものである。このため、MESHNOTE 解析上では、ベントナイト層の圧密により、分配係数に吸着媒体密度をかけた入力パラメータ  $\alpha$  ( $\alpha = \rho Kd$ ) が経時的に大きくなる。オーバーパック腐食領域における吸着は考慮していない。

MESHNOTE では吸着パラメータとしてラングミュラーの等温式の  $\alpha$  および  $\beta$  を用いるが今回の解析では線形吸着を仮定し  $\beta = 0$  としている。そして  $\alpha =$  分配係数  $\times$  密度 ( $\rho Kd$ ) の定義から、ベントナイト密度の変化に伴い腐食終了時の  $\alpha$

は表5.2.2.6のように変化する。なお、腐食OPでは $\alpha = 0$ とする(1.1、1.2も同様)。

表5.2.2.6 ケース(1.5)の解析条件

期間	OP外側位置(m)	ベントナイト密度(kg/m <sup>3</sup> )	核種	Kd	$\alpha$
0 ~ 2千年	0.43	2700	U	0.5	1350
			Np	0.1	270
			Pu	0.1	270
			Am	1	2700
			Cm	1	2700
2千~1万年	0.47	2798.2	U	0.5	1399.1
			Np	0.1	279.82
			Pu	0.1	279.82
			Am	1	2798.2
			Cm	1	2798.2
1万~2万年	0.49	2853.5	U	0.5	1426.75
			Np	0.1	285.35
			Pu	0.1	285.35
			Am	1	2853.5
			Cm	1	2853.5
2万~3万年	0.52	2945.7	U	0.5	1472.85
			Np	0.1	294.57
			Pu	0.1	294.57
			Am	1	2945.7
			Cm	1	2945.7
3万~4万年	0.54	3013.4	U	0.5	1506.7
			Np	0.1	301.34
			Pu	0.1	301.34
			Am	1	3013.4
			Cm	1	3013.4
4万年~	0.56	3087.5	U	0.5	1543.75
			Np	0.1	308.75
			Pu	0.1	308.75
			Am	1	3087.5
			Cm	1	3087.5

### (1.6) ベントナイト圧縮による拡散係数低下、吸着係数向上

ケース(1.3)に対して、ベントナイト層の空隙率の変化を考慮したものである。このため、MESHNOTE 解析上では、ベントナイト層の圧密により、分配係数に吸着媒体密度をかけた入力パラメータ  $\alpha$  ( $\alpha = \rho \cdot Kd$ ) が経時的に大きくなる。オーバーパック腐食領域における吸着は考慮していない。ケース(1.3)の条件にケース(1.5)と同様のベントナイト中の分配パラメータ  $\alpha$  の経時変化を与える。

すなわち、前提及び解析条件は以下のようにまとめられる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は腐食生成物およびベントナイトの2領域である。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域では拡散係数は一定。ベントナイトでは経時的に小さくなる。
- ・ ベントナイトでは圧縮により吸着性能に関するパラメータ  $\alpha$  が経時的に大きくなる。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域における吸着は考慮していない。

### (2) オーバーパック腐食生成物の核種吸着効果 (ケース2群)

ケース(2)ではケース(1)と同様に、オーバーパック腐食生成物およびベントナイト圧縮による拡散係数および吸着の変化を対象とするが、その際、オーバーパック腐食生成物領域における吸着効果を考慮する。

#### (2.1) オーバーパック腐食生成物領域における吸着効果の考慮

ケース(1.3)と同様の解析条件に、オーバーパック腐食生成物領域における吸着効果の考慮を加える。ただし、3価の鉄に対する分配係数は  $N_p$  の文献値[9]をもとに、そのアナロジーから他の元素の分配係数も設定する。同論文によると pH=8 における  $N_p$  の吸着率は 17% であり、分配係数は約 0.2[m<sup>3</sup>/kg]となる。

従って、ケース(1.3)のパラメータに加え、オーバーパック腐食生成物領域 (MESHNOTE 解析系のバッファ内側領域) の分配パラメータ  $\alpha$  を次のようにする。

表5.2.2.7 ケース(2.1)の解析条件

核種名	分配パラメータ $\alpha$ (分配係数×媒体密度)	
	腐食生成物	緩衝材
U	2700	1350
Np	540	270
Pu	540	270
Am	5400	2700
Cm	5400	2700

また、オーバーパック腐食生成物領域の拡散係数は考慮されず、瞬時の移行を考慮して、仮想的に大きな係数として、 $4.78E7[m^2/y]$ と設定する。

従って、解析条件は以下のようになる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は腐食生成物およびベントナイトの2領域。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡散係数は無限大に近い大きな値を設定する。ベントナイト層の拡散係数は経時的に低下する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域における分配係数はリファレンスケースでのバッファ（緩衝材）の分配係数の2倍とする。

#### (2.2) オーバーパック腐食生成物領域内拡散係数および遅延効果の設定

ケース(1.2)の設定に、さらにオーバーパック腐食生成物による吸着効果を追加したものである。腐食生成物を MESHNOTE 解析系のバッファ内側、ベントナイトを MESHNOTE 解析系のバッファ外側として、異なる分配係数を与える。

従って、解析条件は以下のようになる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は腐食生成物およびベントナイトの2領域。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域およびベントナイトの拡散係数は各々一定とする。

- ・ オーバーパック腐食生成物領域における吸着はリファレンスケースでの緩衝材の分配係数の2倍とする。

### (2.3) オーバーパック腐食によるベントナイト層拡散係数低下

ケース(1.3)の解析条件にさらに、オーバーパック腐食生成物の成長とベントナイト層の圧密によるベントナイト層拡散係数低下の効果を考慮したケースである。ベントナイト層拡散係数は、ケース(1.3)の場合と同様、経時的に低下する。

従って解析条件は以下のようにまとめられる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は腐食生成物およびベントナイトの2領域。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・
- ・ オーバーパック生成物腐食領域の拡散係数は一定。ベントナイトでは経時的に小さくなる。
- ・ オーバーパック生成物腐食領域における吸着はリファレンスケースでの緩衝材の分配係数の2倍とする。

### (2.4) ベントナイト圧縮による拡散係数の低下および腐食による遅延効果

ケース(2.1)の設定条件に、さらに、ケース(1.6)と同様のベントナイト層圧縮による見かけの吸着係数上昇の効果を考慮したものである。腐食生成物領域の拡散係数は考慮されず、瞬時の移行を考慮して、仮想的に大きな係数として、 $4.78E7[m^2/y]$ と設定する。

従って解析条件は以下のようにまとめられる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は腐食生成物およびベントナイトの2領域。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡散係数は、ベントナイトでは経時的に低下する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域における吸着はリファレンスケースでの緩衝材の分配係数の2倍とする。
- ・ ベントナイトでは圧縮により、吸着性能に関するパラメータ  $\alpha$  が経時的に大きくなる。

## (2.5) ベントナイト圧縮による遅延効果

オーバーパック腐食生成物領域における吸着はリファレンスケースでの緩衝材の分配係数の2倍とするとの、ケース(2.2)の設定条件に、さらに、ケース(1.6)と同様のベントナイト層圧縮による吸着パラメータ $\alpha$ の増大効果を考慮したものである。

従って解析条件は以下のようにまとめられる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は腐食生成物およびベントナイトの2領域。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡大に伴い、領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域およびベントナイトの拡散係数は一定。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域における吸着は腐食生成物領域における吸着はリファレンスケースでの緩衝材の分配係数の2倍とする。
- ・ ベントナイトでは圧縮により、吸着性能に関するパラメータ $\alpha$ が経時的に大きくなる。

## (2.6) ベントナイト圧縮による拡散係数低下、吸着係数向上

ケース(2.3)に対してベントナイト層圧縮による吸着パラメータ $\alpha$ の増大効果を考慮したものである。ケース2.3の条件にケース(2.5)と同様のベントナイト中の $\alpha$ の経時変化を与える。

すなわち、前提及び解析条件は以下のようにまとめられる。

- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は腐食生成物およびベントナイトの2領域。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の広がりに合わせて領域境界も外側へ移動する。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域の拡散係数は一定。ベントナイトでは経時的に小さくなる。
- ・ オーバーパック腐食生成物領域における吸着は腐食生成物領域における吸着はリファレンスケースでの緩衝材の分配係数の2倍とする。
- ・ ベントナイトでは圧縮により、吸着性能に関するパラメータ $\alpha$ が経時的に大きくなる。

ケース1およびケース2の解析条件の概要を、表5.2.2.8に示す。

ケース	バッファ	バッファ長	境界移動	OP拡散	ペントナイト拡散	OP吸着	ペントナイト吸着	概念図
1.1	ペントナイトのみ	0.54(m)	なし	考慮せず	圧縮により低下した状態	考慮せず	RCと同じ	
1.2	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定 (文献値)	RCと同じ	吸着しない	RCと同じ	
1.3	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定 (文献値)	圧縮により経時的に低下	吸着しない	RCと同じ	
1.4	ペントナイトのみ	0.54(m)	なし	考慮せず	圧縮により低下した状態	考慮せず	圧縮による密度増大のため、吸着係数と密度をかけた $\alpha$ が増大した状態	
1.5	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定 (文献値)	RCと同じ	吸着しない	圧縮による密度増大のため、吸着係数と密度をかけた $\alpha$ が経時的に増大する	
1.6	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定 (文献値)	圧縮により経時的に低下	吸着しない	圧縮による密度増大のため、吸着係数と密度をかけた $\alpha$ が経時的に増大する	

表中略号および用語の説明：OP；オーバーパック RC；リファレンスケース バッファ；MESHNOTE解析系でのソースとミキシングセルに挟まれた領域

表5.2.2.8 (その1) ケース1群の解析条件の概要

ケース	バッファ	バッファ長	境界移動	OP拡散	ペントナイト拡散	OP吸着	ペントナイト吸着	概念図
2.1	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	OP内では濃度分布が一様になるよう、仮想的に非常に大きな大きな拡散係数を与える	圧縮により経時的に低下	RCのペントナイトの2倍	RCと同じ	
2.2	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定（文献値）	RCと同じ	RCのペントナイトの2倍	RCと同じ	
2.3	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定（文献値）	圧縮により経時的に低下	RCのペントナイトの2倍	RCと同じ	
2.4	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	OP内では濃度分布が一様になるよう、仮想的に非常に大きな大きな拡散係数を与える	圧縮により経時的に低下	RCのペントナイトの2倍	圧縮による密度増大のため、吸着係数と密度をかけた $\alpha$ が経時的に増大する	
2.5	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定（文献値）	RCと同じ	RCのペントナイトの2倍	圧縮による密度増大のため、吸着係数と密度をかけた $\alpha$ が経時的に増大する	
2.6	腐食OPおよびペントナイト	0.67(m)	あり	一定（文献値）	圧縮により経時的に低下	RCのペントナイトの2倍	圧縮による密度増大のため、吸着係数と密度をかけた $\alpha$ が経時的に増大する	

表中略号および用語の説明：OP；オーバーパック RC；リファレンスケース バッファ；MESHNOTE解析系でのソースとミキシングセルに挟まれた領域

表5.2.2.8（その2） ケース2群の解析条件の概要

(3) 放射線分解による酸化フロント進展の核種移行への影響

オーバーパックの局部腐食および／または割れを原因とするオーバーパック部分の貫通を想定し、ガラス固化体中の酸化剤がベントナイト中へ拡散し、ベントナイト中の還元剤である黄鉄鉱 ( $\text{FeS}_2$ ) と反応する場合を考慮する。酸化フロント進展の前提としては、廃棄体で発生した酸化剤の全量がオーバーパックの局部腐食貫通部もしくは亀裂等を通り、ベントナイトへ浸出し、ベントナイト中の黄鉄鉄と反応すると考える。オーバーパック貫通時に、ガラス固化体近傍の酸化性の水が瞬時に、オーバーパック外側とベントナイト内側の境界へ移動するものとする。従ってフロントの移動距離はベントナイト内側を起点とする。既往の研究成果[6], [14]を参考として、放射線分解影響の解析を実施し、その結果に対応する溶解度[7]を反映させる。ベントナイト中の  $\text{FeS}_2$  を還元剤とし、その分子量を 120、ベントナイトの比重及び空隙率を各々2.7、0.41 とする。ベントナイト内側境界から外側へ向かってのフロントの移動距離は、表 5.2.2.9 に示すように酸化剤発生量と  $\text{FeS}_2$  消費量が等量となるベントナイト内側の同心円体積を計算し、その厚みから求められる。

表5.2.2.9 水の放射線分解による酸化還元フロントの進展

期間	酸化剤発生量 (mol)	消費 $\text{FeS}_2$ (kg)	消費ベントナイト (m <sup>3</sup> )	フロント移動距離 (m)
2千年まで	1.1678	0.14	8.6e-5	0.0000134
2千年～1万年	40.159	4.82	2.98e-3	0.000463
1万年～10万年	139.456	16.73	0.01	0.00155
10万年～100万年	1127.756	135.33	0.0835	0.0128
100万年～1千万年	11002.25	1320.27	8.13	0.112

フロントの内側を酸化性領域 (Eh の高い領域) として、表 5.2.2.10 に示すように、文献値の溶解度(7)を使用し、フロントの外側は還元性領域 (Eh の低い領域) としてリファレンスケースの値を使用する。

表 5.2.2.10 酸化性領域における核種溶解度

核種名称	溶解度[mol/m <sup>3</sup> ]
U	3
Np	1
Pu	3E-6
Am	2E-5
Cm	2E-5(注1)

(注1) Cmの溶解度は同レポートには掲載されていないためAmと同じ数値とした。

ケース(3)の解析条件は以下のようにまとめられる。

- ・ 放射線分解による地下水化学性状の変化を最初に解析する。
- ・ MESHNOTE 解析系のバッファ領域は酸化剤侵出域と未到達域の2領域とする。
- ・ 酸化剤の経時的な侵出に合わせて、2領域の境界も経時的に外側へ移動する。
- ・ 酸化剤侵出域の核種溶解度は文献を参照して高溶解度を設定する。
- ・ 酸化剤未侵出域はリファレンスケースと同じ溶解度とする。

#### (4) 緩衝材周りでの地下水の回り込みの影響

緩衝材周りでの地下水の回り込み現象を考慮した場合、拡散により上流側地下水にも核種が入り込むため、下流側ではバッファと地下水の間の核種濃度差が小さくなり、核種のフラックスも小さくなる。本現象は、2次元以上の計算が必要になるため、1次元モデルである MESHNOTE では、厳密には解析できない。

ここでは、核種溶解度およびミキシングセル流量（ゆるみ域地下水流量）を次のように低くすれば同じ効果が期待できると考えた。

最初にリファレンスケースの計算を行い、ミキシングセルにおける濃度の経時変化を得る。次にリファレンスケースの溶解度から、ミキシングセルにおける濃度を引いた濃度を溶解度として計算を行う。

ミキシングセル流量を小さくするとミキシングセル中の核種濃度が上がるため同様の効果が期待できるが、具体的な流量を特定することは困難であるためリファレンスケースの半分、1割などパラメータスタディ的に流量をふることが考えられる。

上記の考え方をふまえて、以下のような解析ケースを設定した。

- (4.1) ミキシングセル流量をリファレンスケースの1/2とする。
- (4.2) ミキシングセル流量をリファレンスケースの1/10とする。
- (4.3) バッファの溶解度を経時的に下げる。
- (4.4) ミキシングセル流量をリファレンスケースの1/2とし、かつバッファの溶度を下げる。
- (4.5) ミキシングセル流量をリファレンスケースの1/10とし、かつバッファの溶解度を下げる。

### 5.2.2.3 解析結果

ここでは、前節に述べた条件に基づき、解析結果をまとめる。なお、各解析ケースの比較の基本となるリファレンスケースの解析結果を図5.2.2.1に示す。

#### (1) オーバーパック腐食膨張の核種移行への影響 (ケース1群)

オーバーパック腐食膨張による、ベントナイト緩衝材の拡散係数、吸着能力へ及ぼす影響をみるための解析ケース1.1から1.6に関する各々の解析結果を図5.2.2.2から5.2.2.7に示す。リファレンスケース及びケース1群の核種毎の最大放出率の比較結果を図5.2.2.8に示す。図5.2.2.8から明らかなように、今回のように、オーバーパック膨張によるベントナイト緩衝材への影響が、圧密による緩衝材厚みの減少にとどまる限りにおいては、緩衝材の拡散場維持機能が健全であるため、核種放出率はそれほど変化しない。

#### (2) オーバーパック腐食生成物の核種吸着効果 (ケース2群)

オーバーパック腐食生成物層による核種吸着能力および拡散バリアとしての性能が従来の人工バリア性能に及ぼす影響をみるための解析ケース2.1から2.6に関する各々の解析結果を図5.2.2.9から5.2.2.14に示す。リファレンスケース及びケース2群の核種毎の最大放出率の比較結果を図5.2.2.15に示す。図5.2.2.15から明らかなように、オーバーパック腐食生成物の核種吸着効果を考慮しても放出率の低減は、それほど顕著ではない。

#### (3) 放射線分解による酸化フロント進展の影響 (ケース3)

地下水の放射線分解による酸化フロント進展の影響に関する解析結果を図5.2.2.16に示す。また、本ケースとリファレンスケースにおける各核種の最大放出率比較結果を図5.2.2.17に示す。今回の解析条件では、緩衝材中の酸化フ

ロントの進展が 1000 万年で 11cm 程度であり、その外側に健全な止水バリアとしての緩衝材層が約 50cm 程度残存していることから、核種放出率の変動はほとんど見られなかった。

#### (4) 緩衝材周りでの地下水の回り込みの影響

緩衝材周りでの地下水の回り込みの影響を近似的に評価するための、核種溶解度の低下およびミキシングセル流量（ゆるみ域地下水流量）の感度解析的な評価結果を示す。

ミキシングセル流量をリファレンスケースの 1/2 および 1/10 にした場合の解析結果を、図 5.2.2.18 および 19 に示す。

また、緩衝材中での核種溶解度の低下量を割り当てた場合の解析結果を図 5.2.2.20 に示す。

さらに、緩衝材中の核種溶解度を下げ、かつミキシングセル流量をリファレンスケースの 1/2 もしくは 1/10 とした場合の解析結果を図 5.2.2.21 および 22 に示す。

これらの解析結果の核種最大放出率をまとめたものを図 5.2.2.23 に示す。経時的な溶解度低下の効果は、核種放出率の低下にあまり寄与しなかった。

本ケースで設定した溶解度は、リファレンスケースの溶解度よりも小さくはなっているが、計算に影響を及ぼすほどまでには小さくはなっておらず、実際に計算した結果を見ると、バッファ中の各核種の濃度がその小さくなった溶解度にまで達することがほとんどなく沈殿が生じていない。そのためフラックスを比べてみてもリファレンスケースと差がほとんど生じなかった。

流量低下の解析結果によれば、流量を低下させることに対して、ほぼ比例して核種放出率が低下している。これは、ミキシングセル流量の低下によりバッファとミキシングセル間の濃度勾配が小さくなり、緩衝材外側への核種移行フラックスが低減したためと考えられる。

今回のリファレンスケース近傍のすべての解析ケースにおいては、ベントナイト緩衝材の止水バリアとしての健全性が評価期間全体にわたって維持されており、核種放出率の大幅な上昇は見られなかった。今後は、シナリオ解析の検討に基づき網羅性に配慮した解析ケースを選定を行い、各解析ケースの F E P の連続性と、その結果としてのパラメータの選定をさらに充実させた解析を継続して実施していくべきと考えられる。

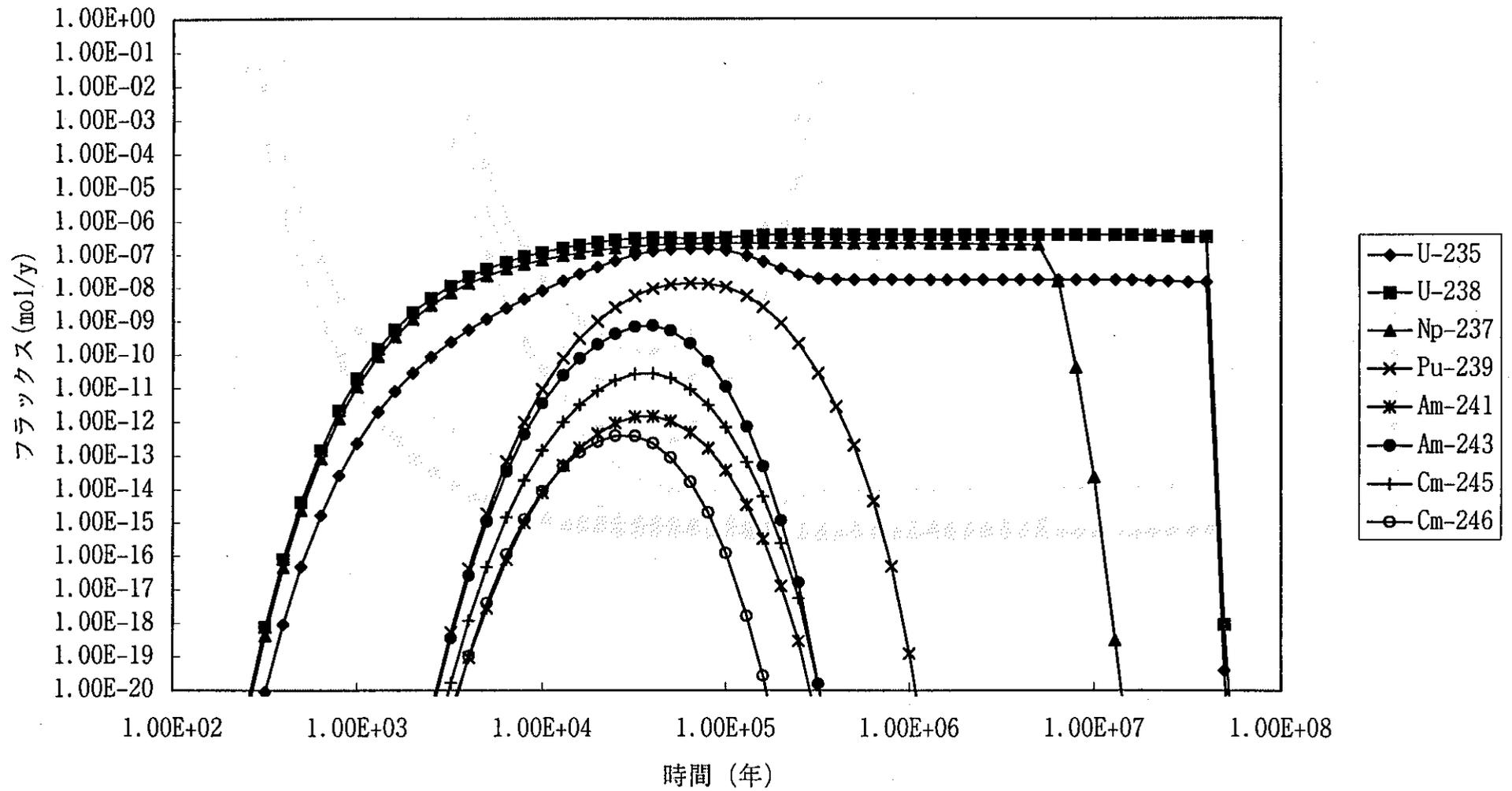


図5.2.2.1 リファレンスケース解析結果

1-1 圧縮による緩衝材拡散係数の低下

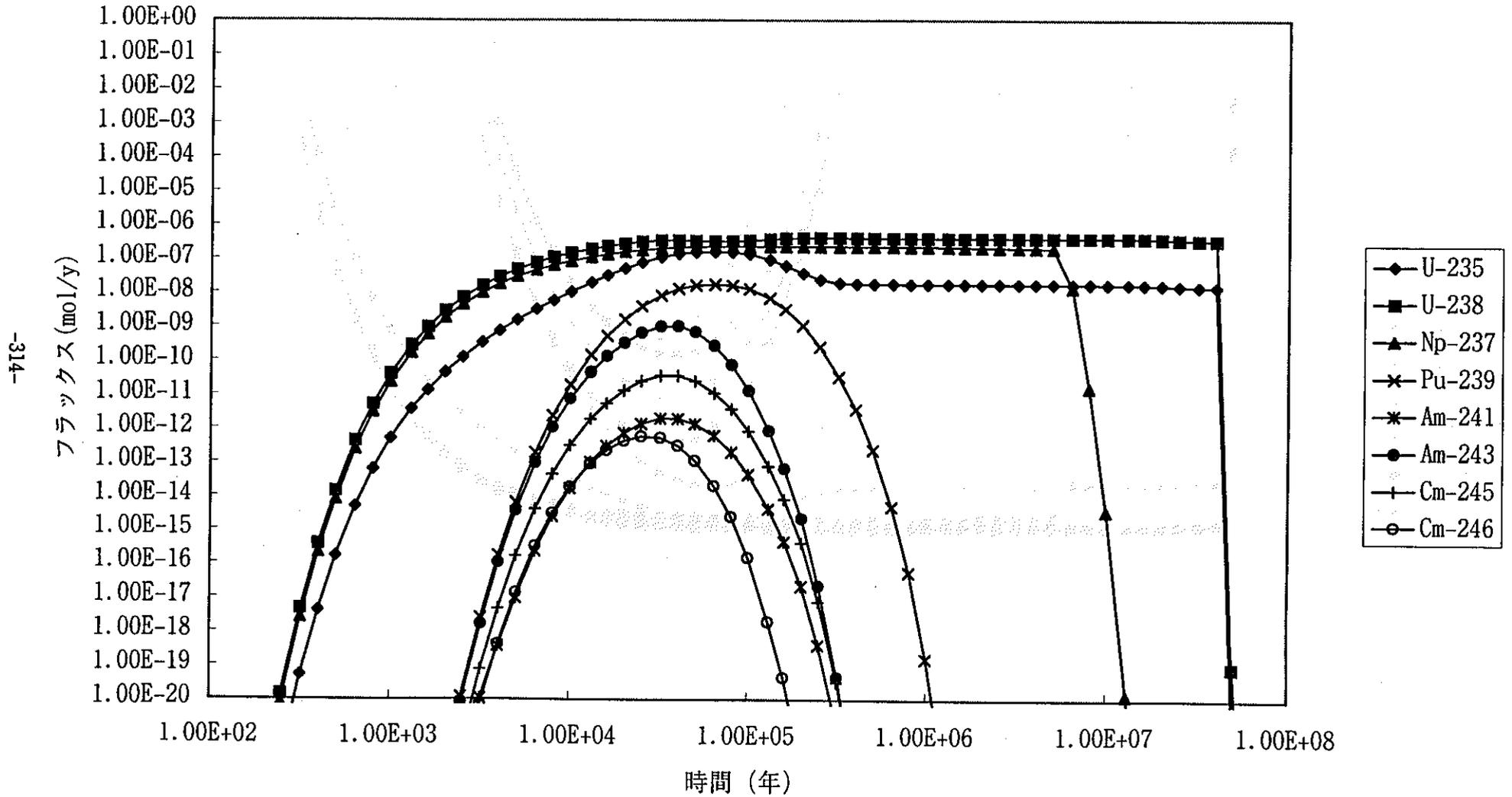


図5.2.2.2 ケース1.1解析結果

1-2 腐食によるOP内拡散係数の低下

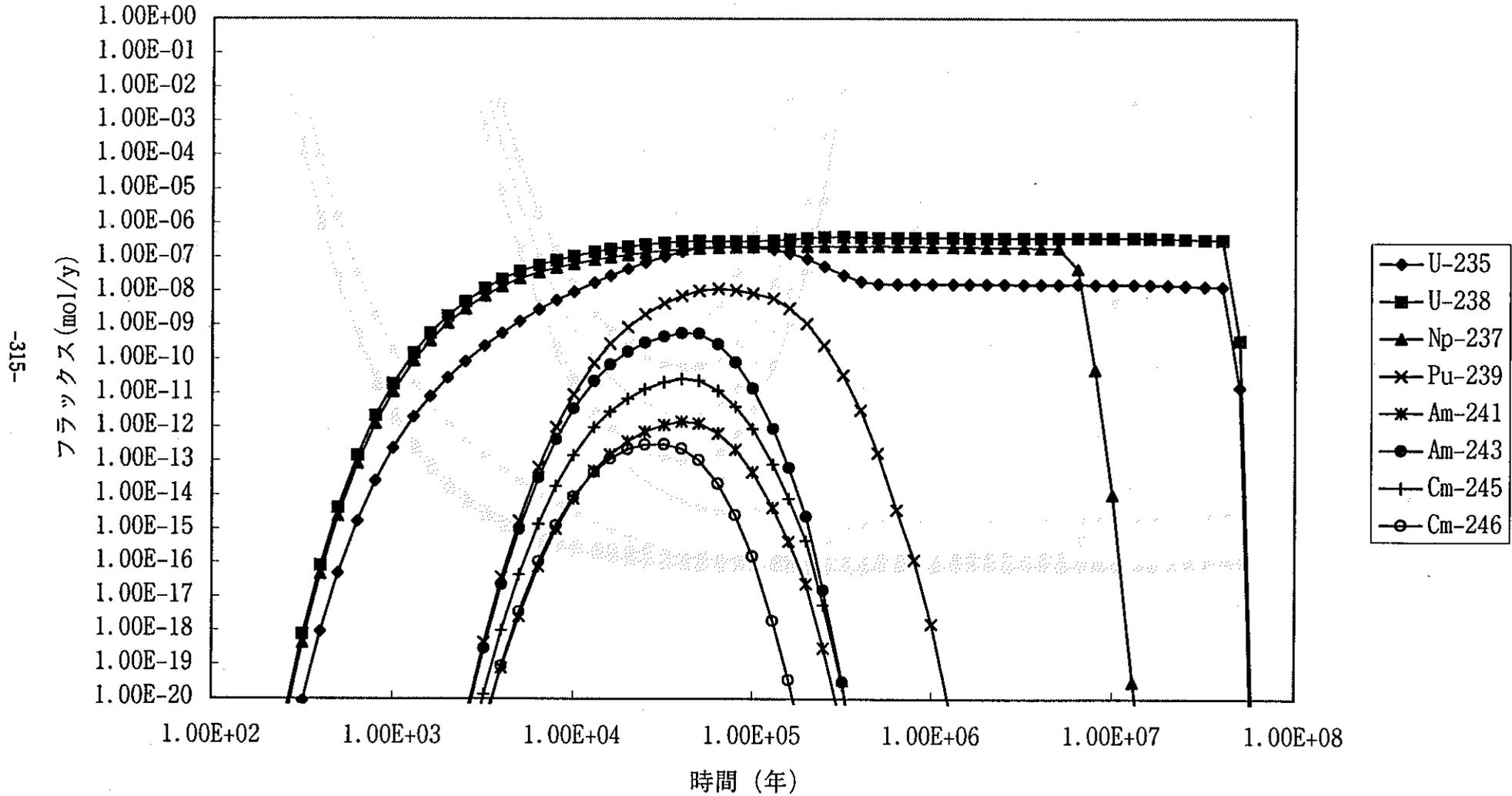


図5.2.2.3 ケース1.2解析結果

1-3 圧縮による緩衝材拡散係数の低下および腐食によるOP内拡散係数の低下

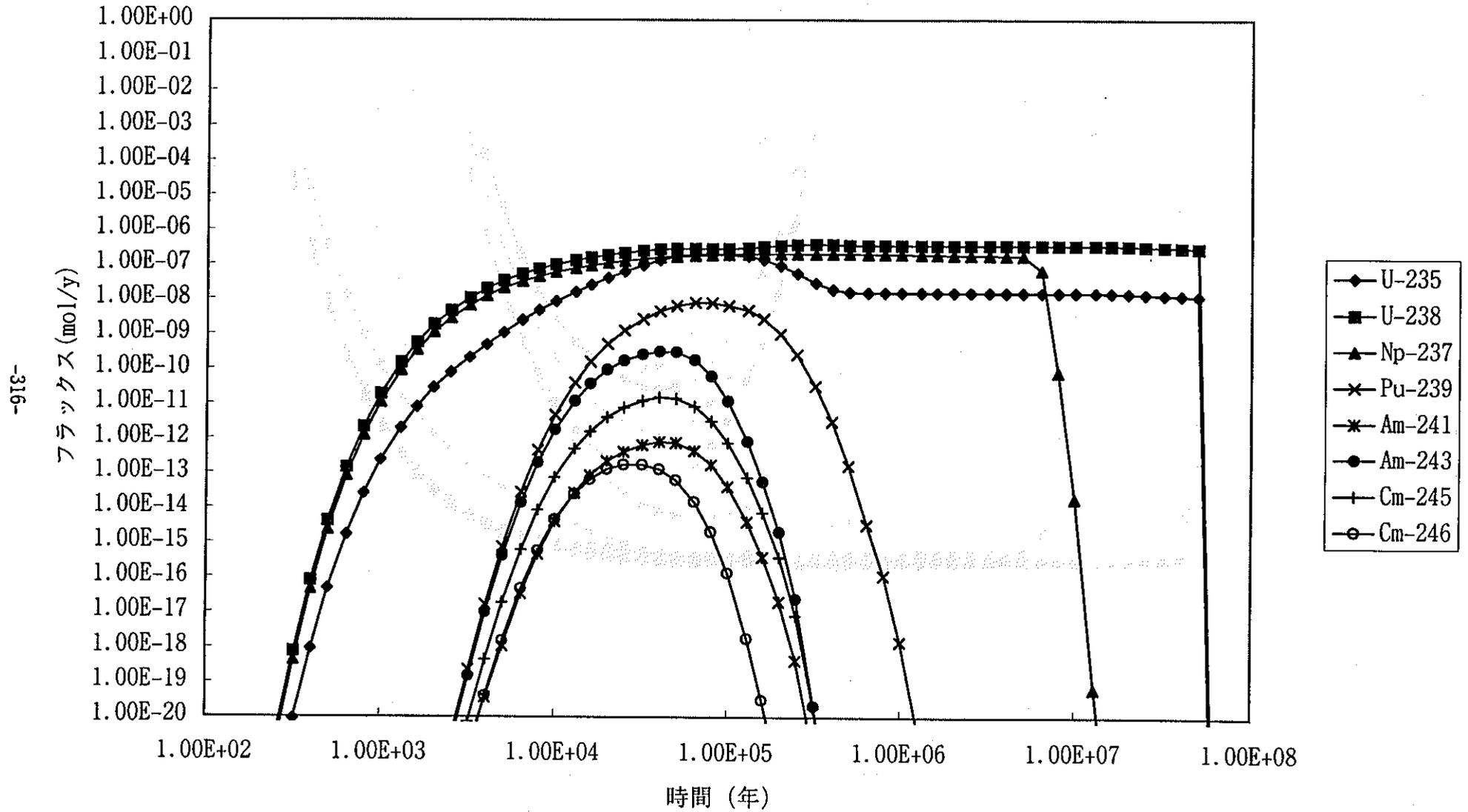


図5.2.2.4 ケース1.3解析結果

1-4 圧縮による緩衝材拡散係数の低下および遅延効果

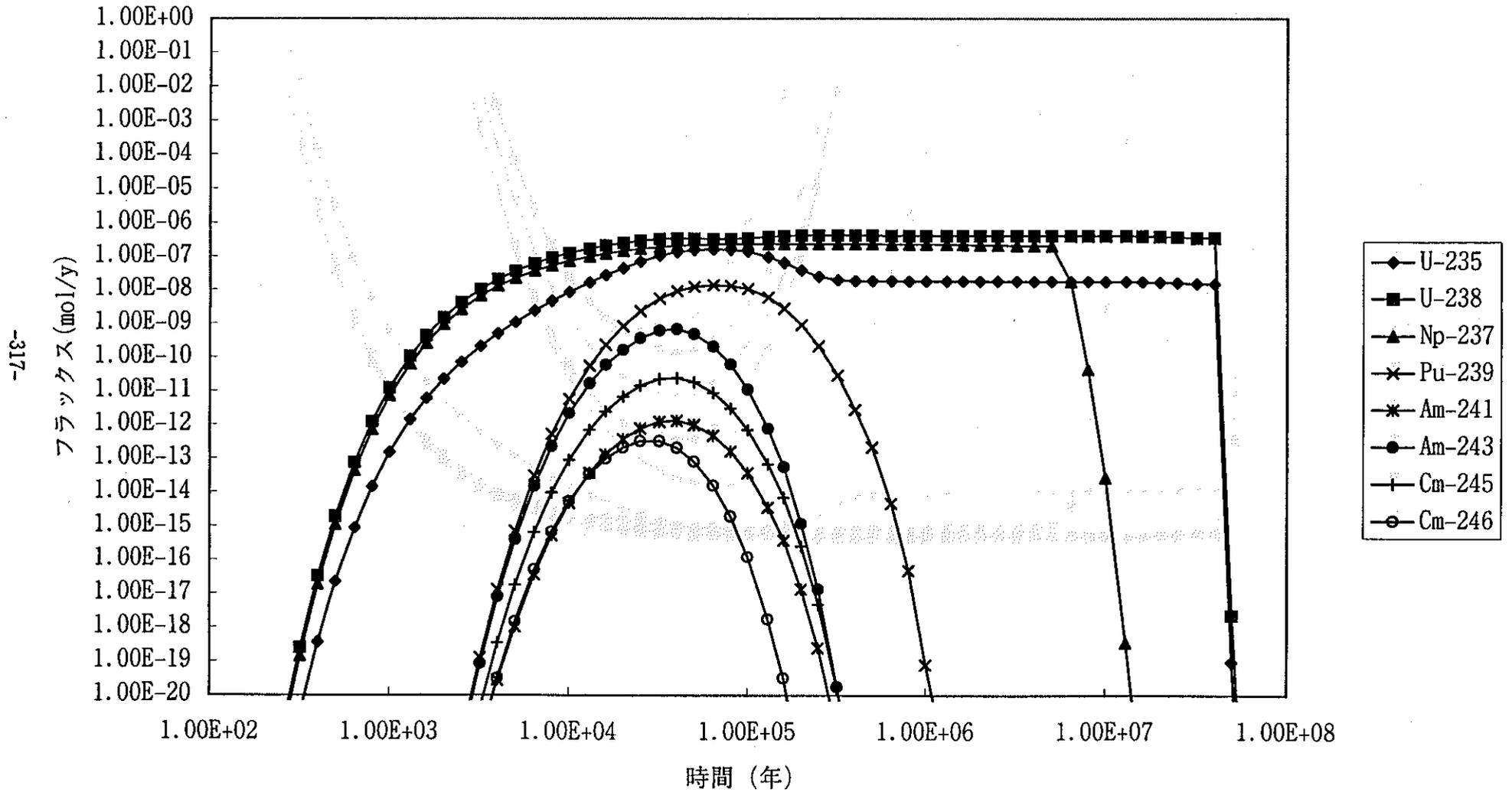


図5.2.25 ケース1.4解析結果

1-5 圧縮による緩衝材遅延効果および腐食によるOP内拡散係数の低下

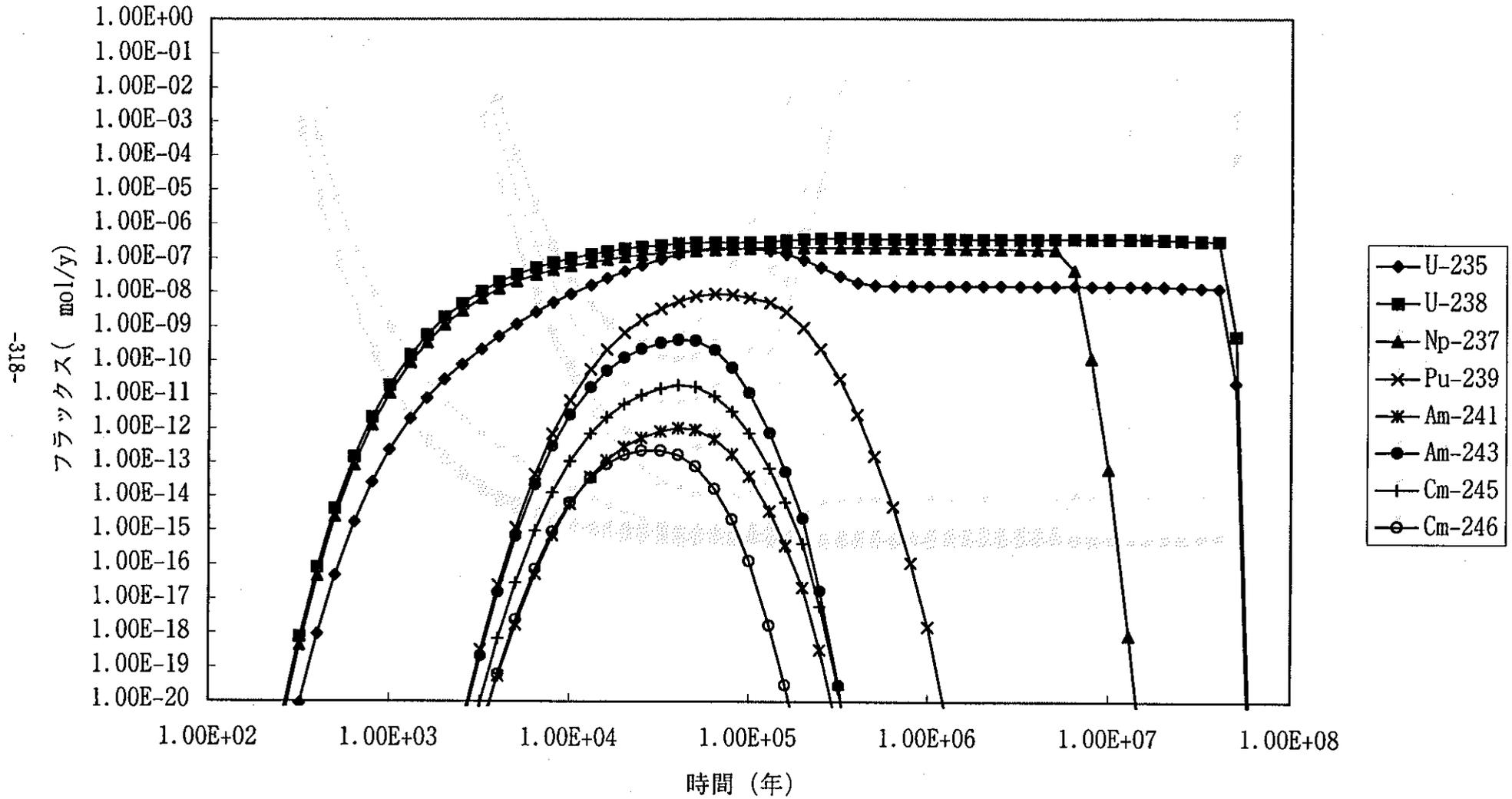


図5.2.2.6 ケース1.5解析結果

1-6 圧縮による緩衝材拡散係数の低下、遅延効果および腐食によるOP内拡散係数の低下

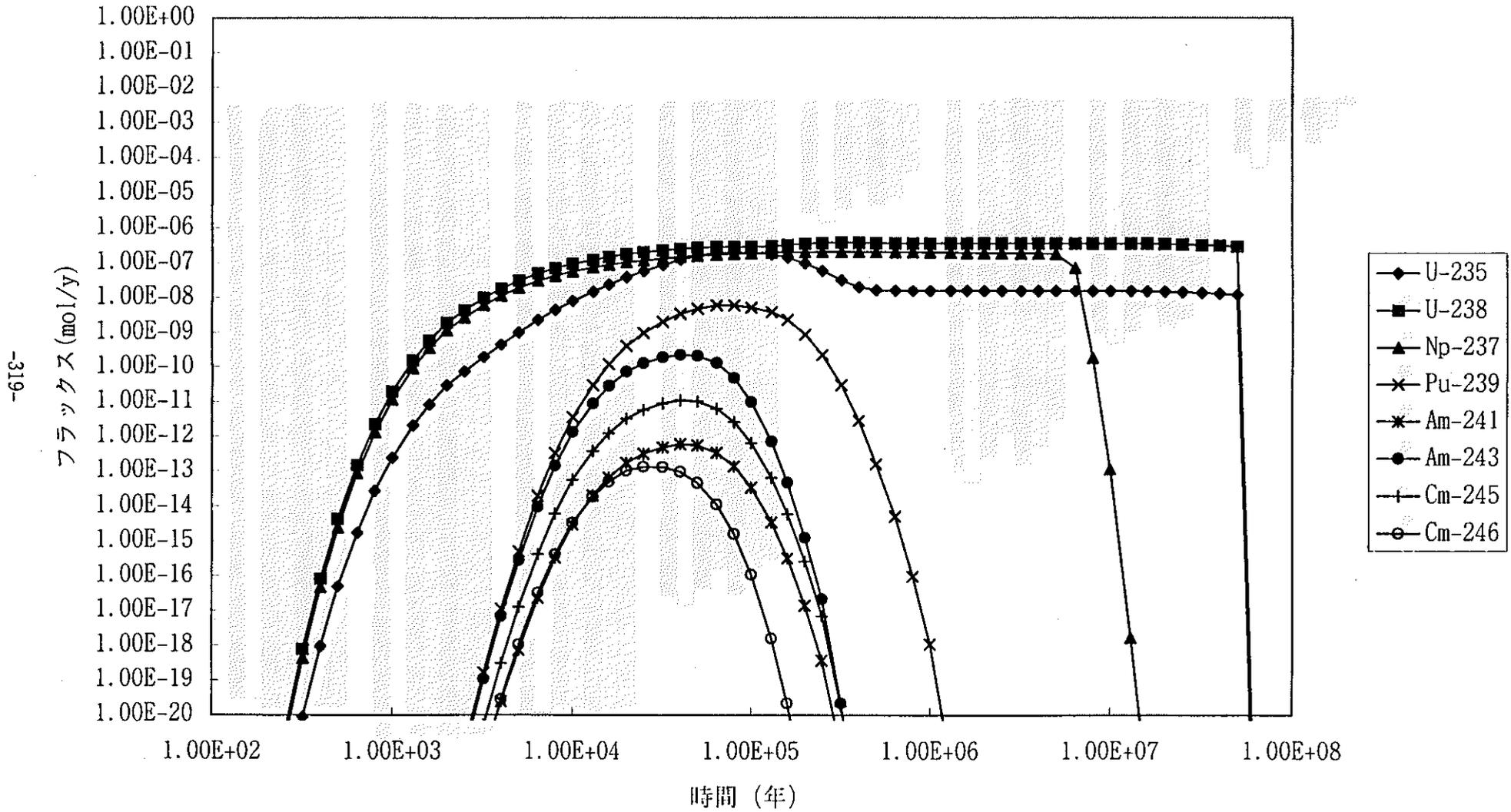


図5.2.2.7 ケース1.6解析結果

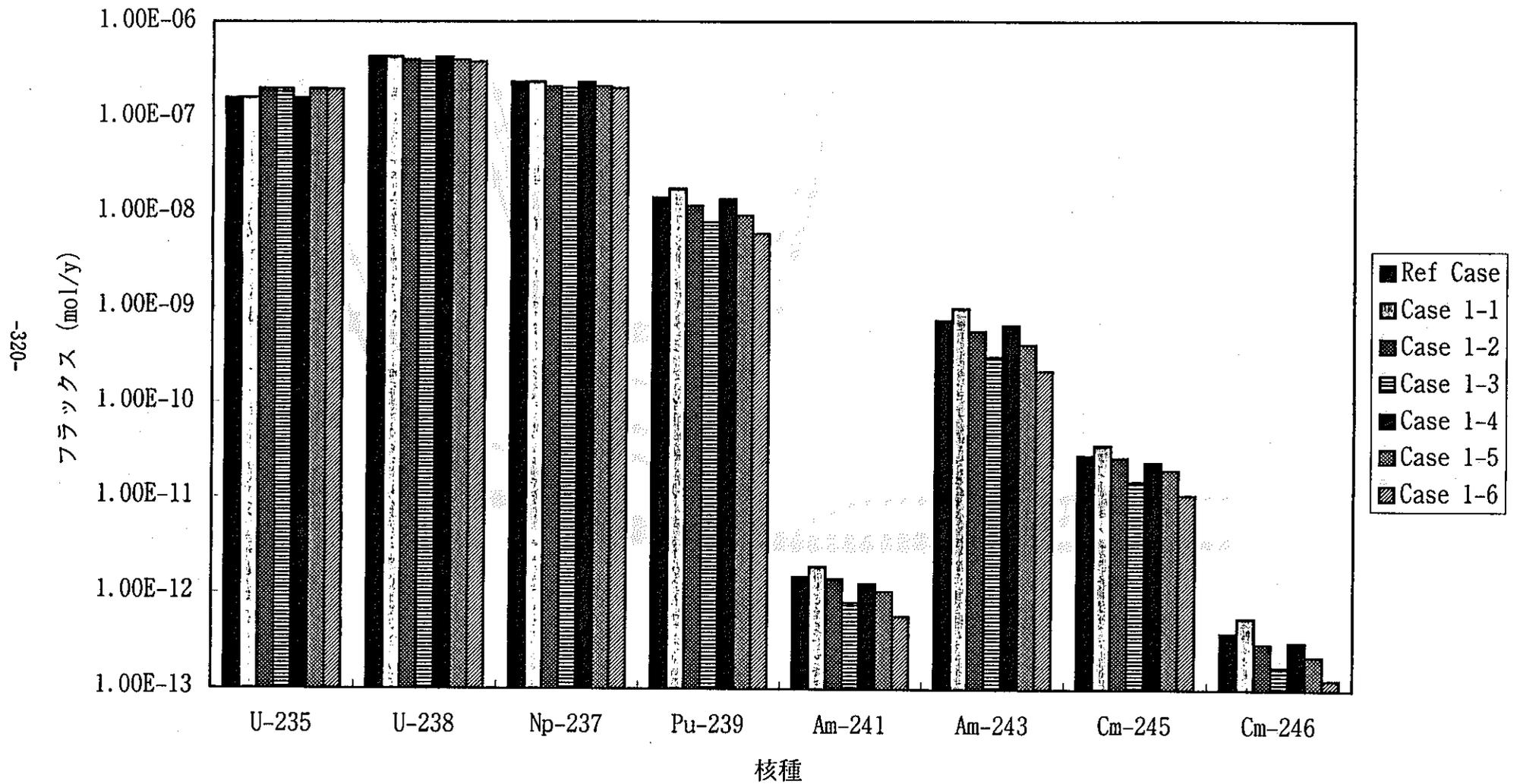


図5.2.2.8 リファレンスケース及びケース1の解析結果比較

2-1 圧縮による緩衝材拡散係数の低下  
(OP腐食領域における吸着を考慮)

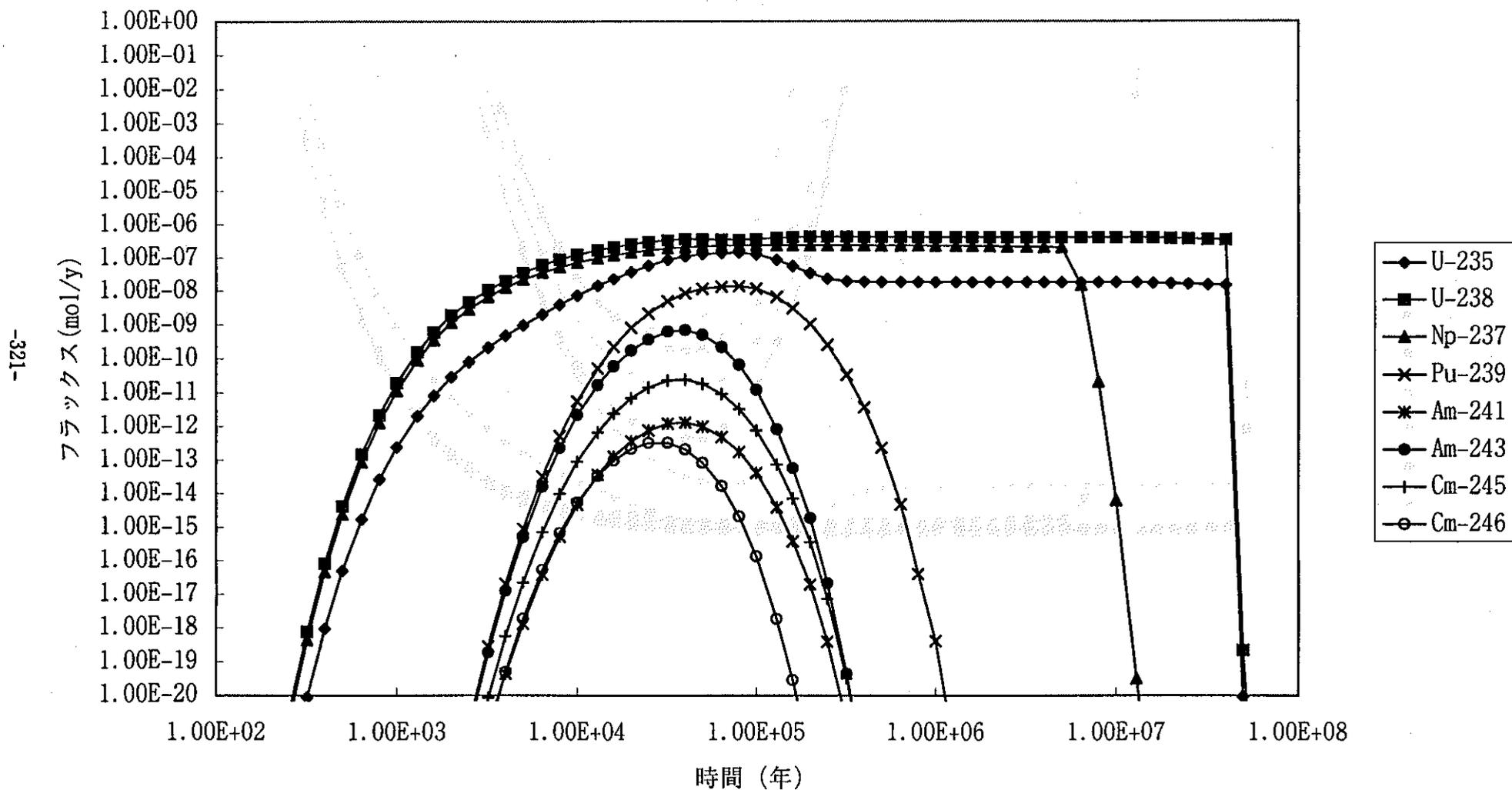


図5.2.2.9 ケース2.1解析結果

2-2 腐食によるOP内拡散係数の低下  
(OP腐食領域における吸着を考慮)

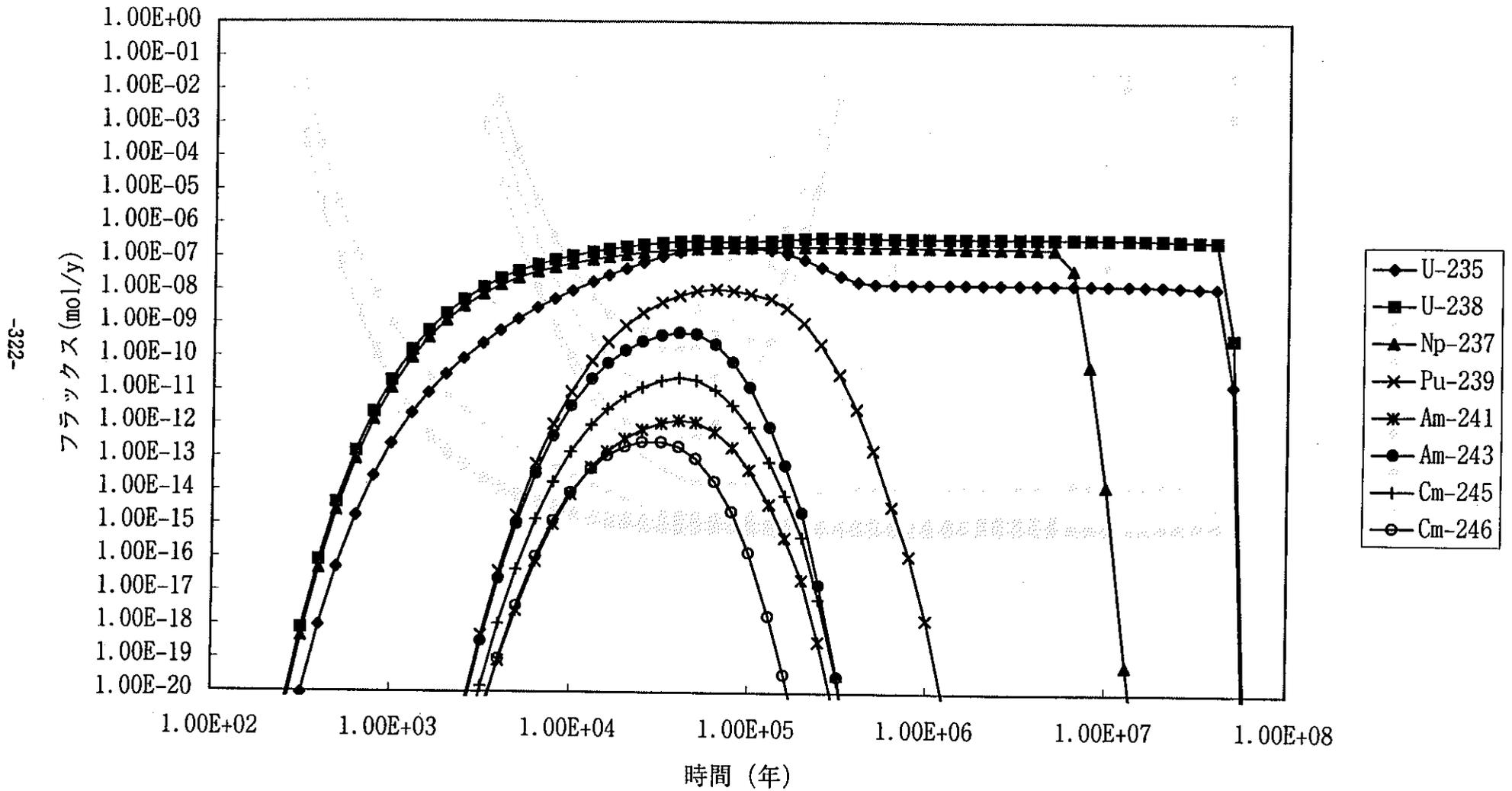


図5.2.2.10 ケース2.2解析結果

2-3 圧縮による緩衝材拡散係数の低下および腐食によるOP内拡散係数の低下  
(OP腐食領域における吸着を考慮)

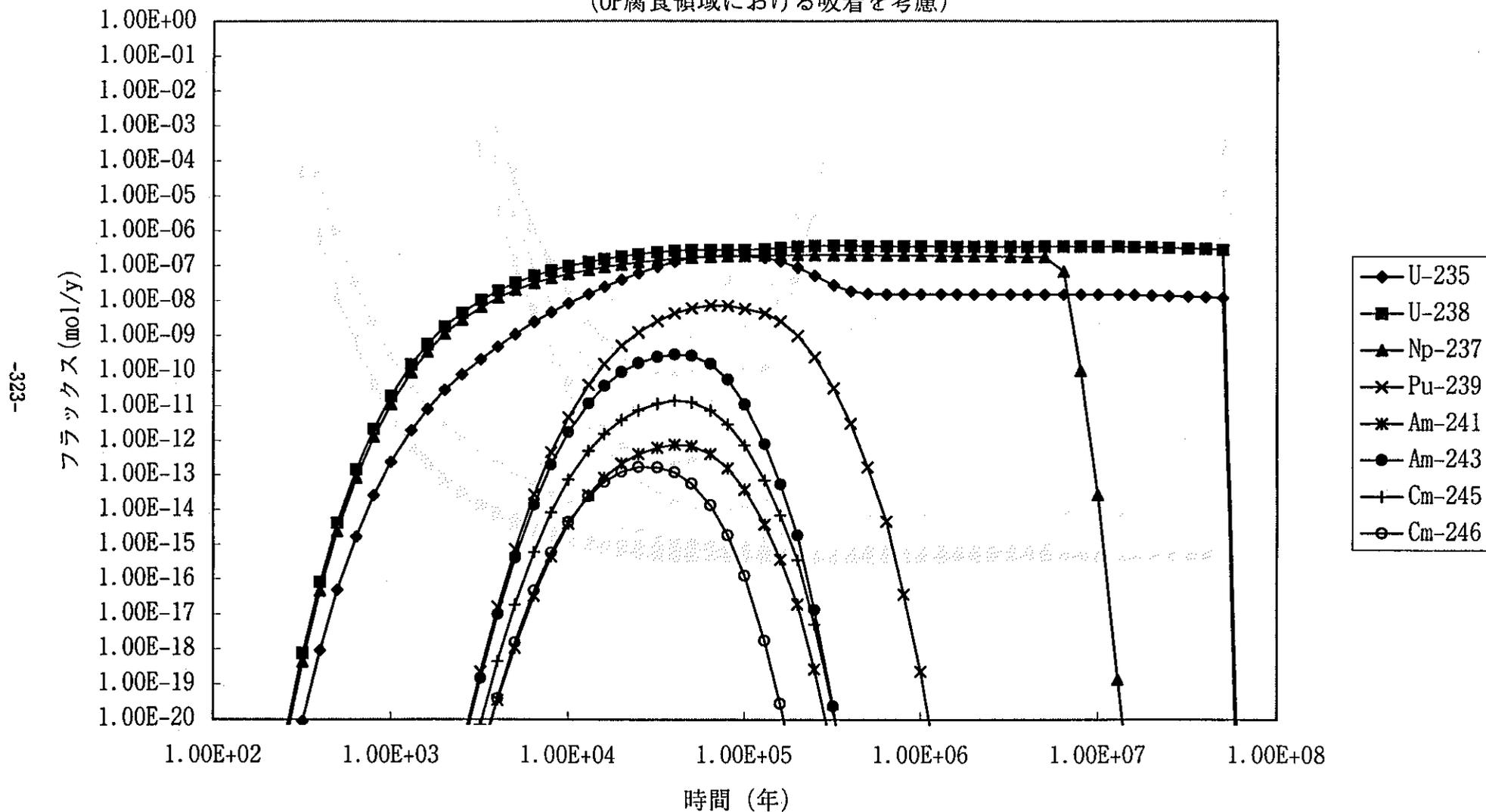


図5.2.2.11 ケース2.3解析結果

2-4 圧縮による緩衝材拡散係数の低下および遅延効果  
(OP腐食領域における吸着を考慮)

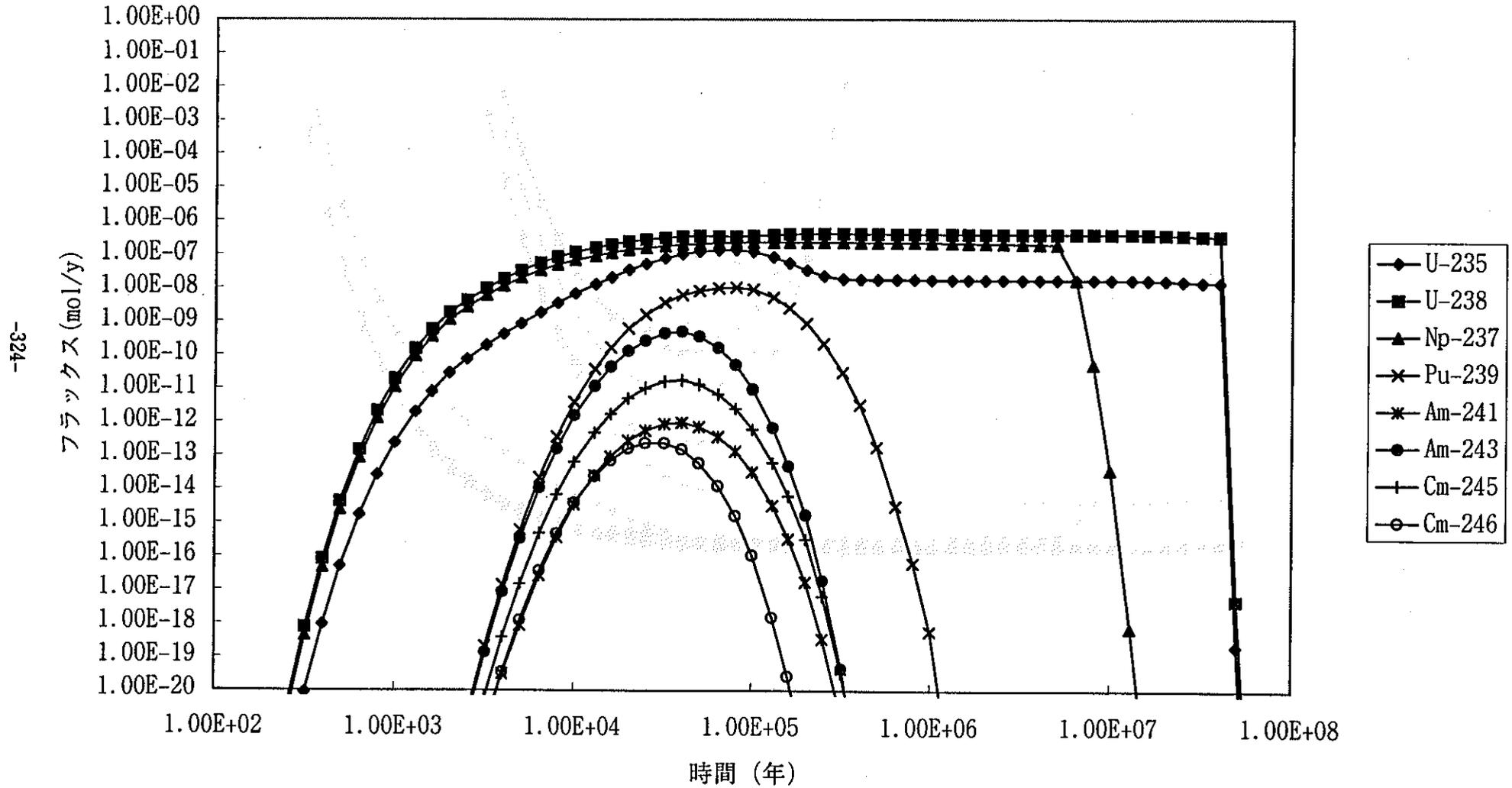


図5.2.2.12 ケース2.4解析結果

2-5 圧縮による緩衝材遅延効果および腐食によるOP内拡散係数の低下  
(OP腐食領域における吸着を考慮)

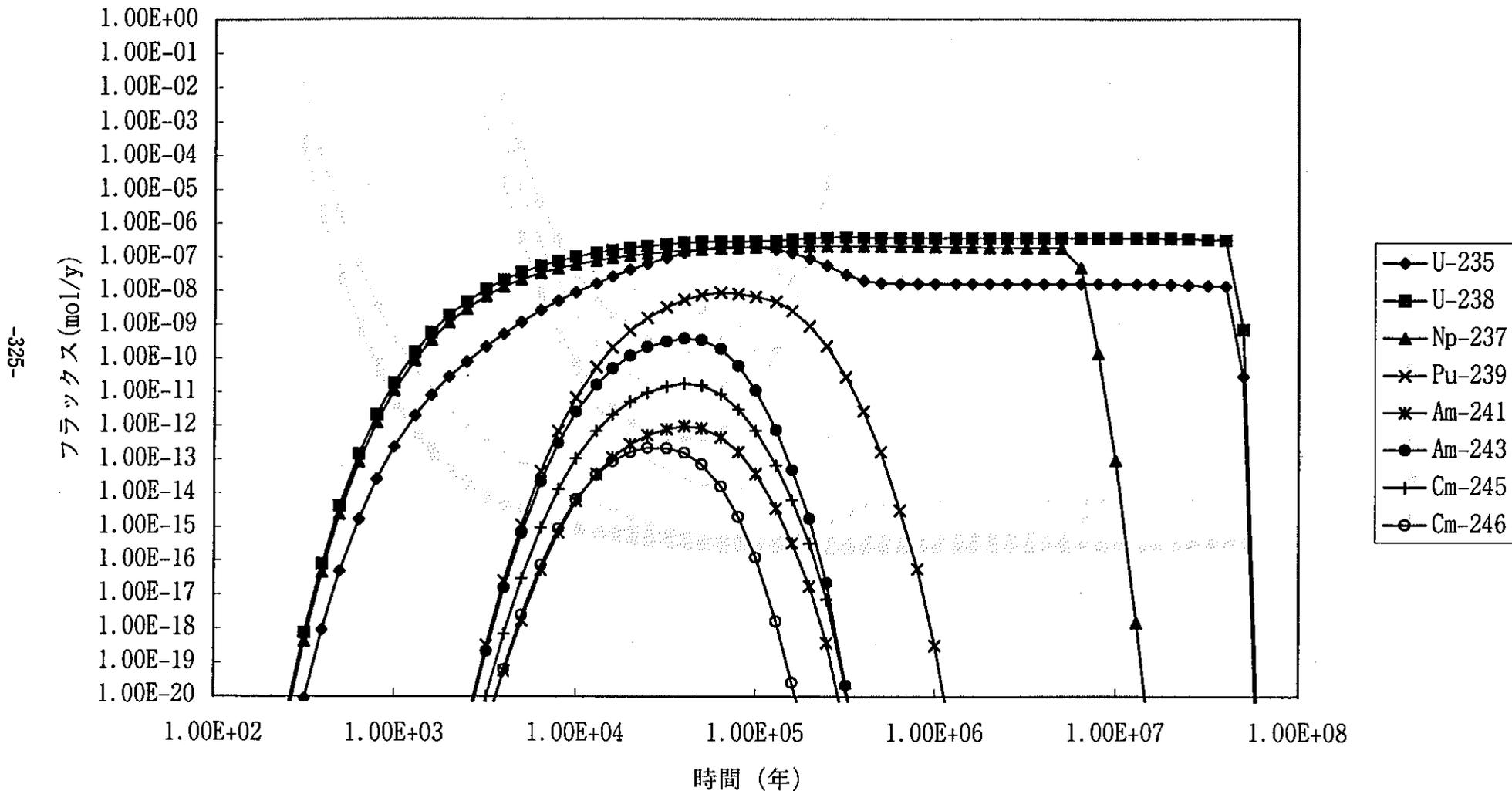


図5.2.2.13 ケース2.5解析結果

2-6 圧縮による緩衝材拡散係数の低下、遅延効果および腐食によるOP内拡散係数の低下  
(OP腐食領域における吸着を考慮)

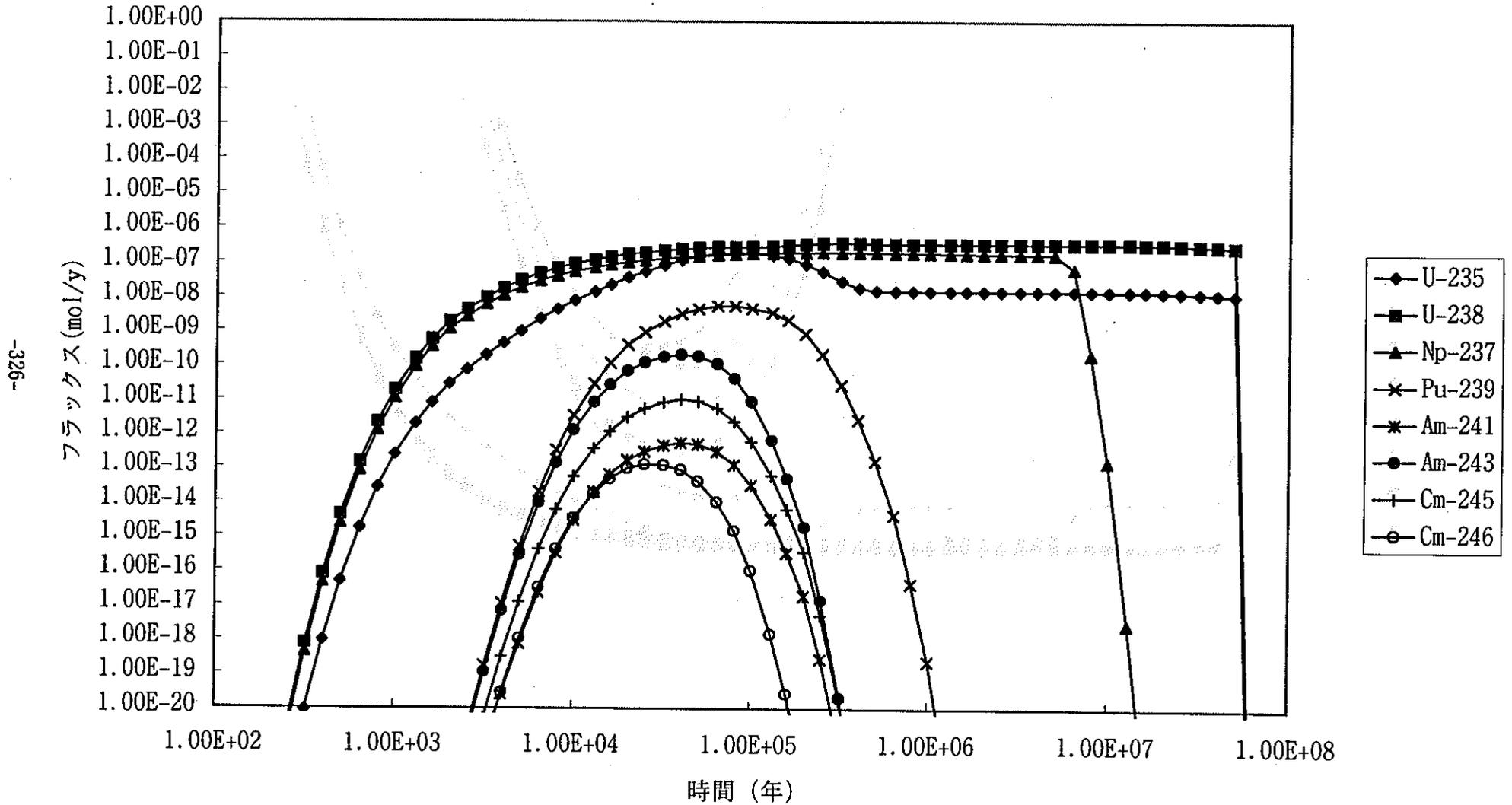


図5.2.2.14 ケース2.6解析結果

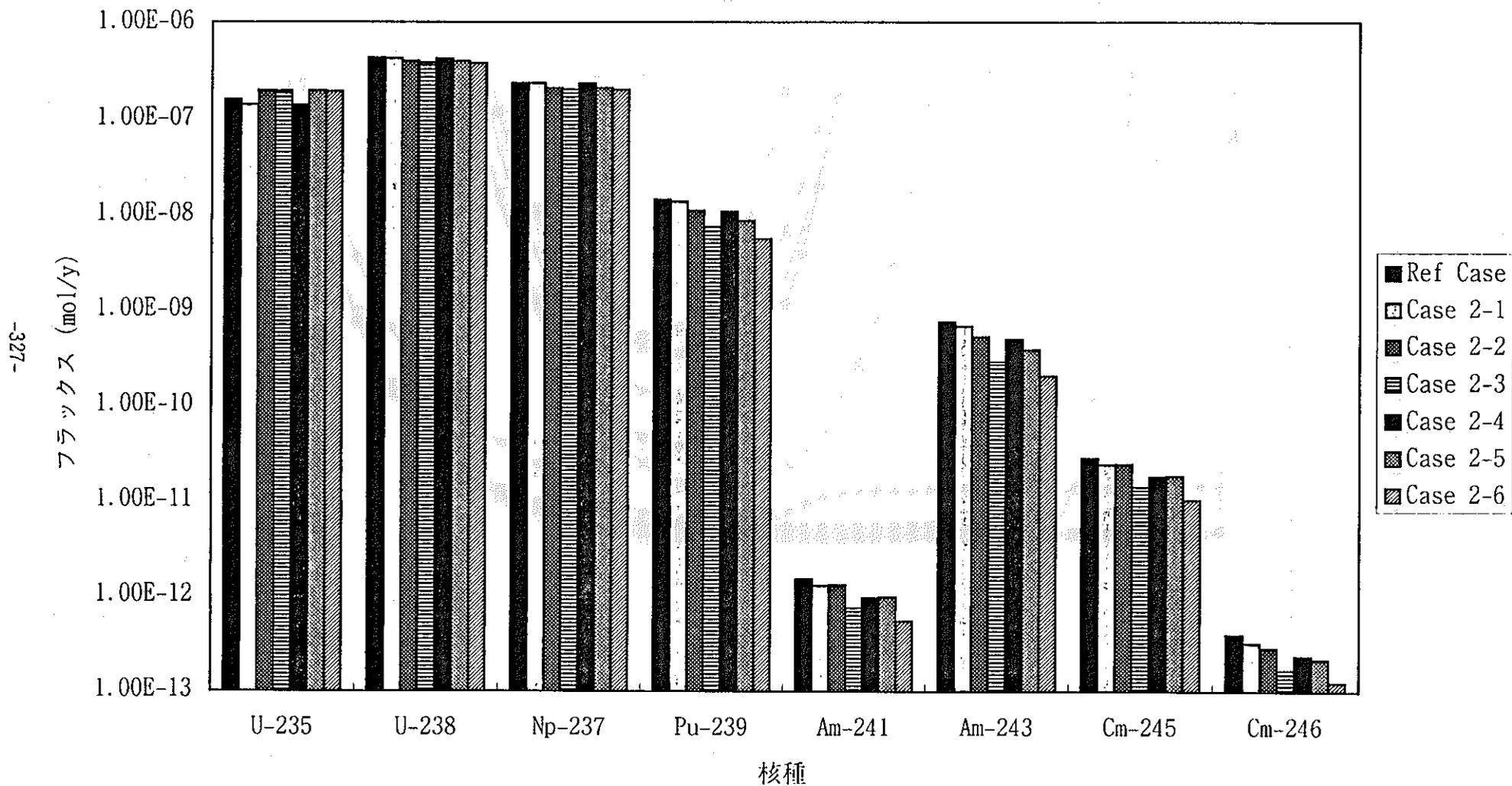


図5.2.2.15 リファレンスケース及びケース2の解析結果比較

### 3 酸化フロントの進展の核種移行への影響

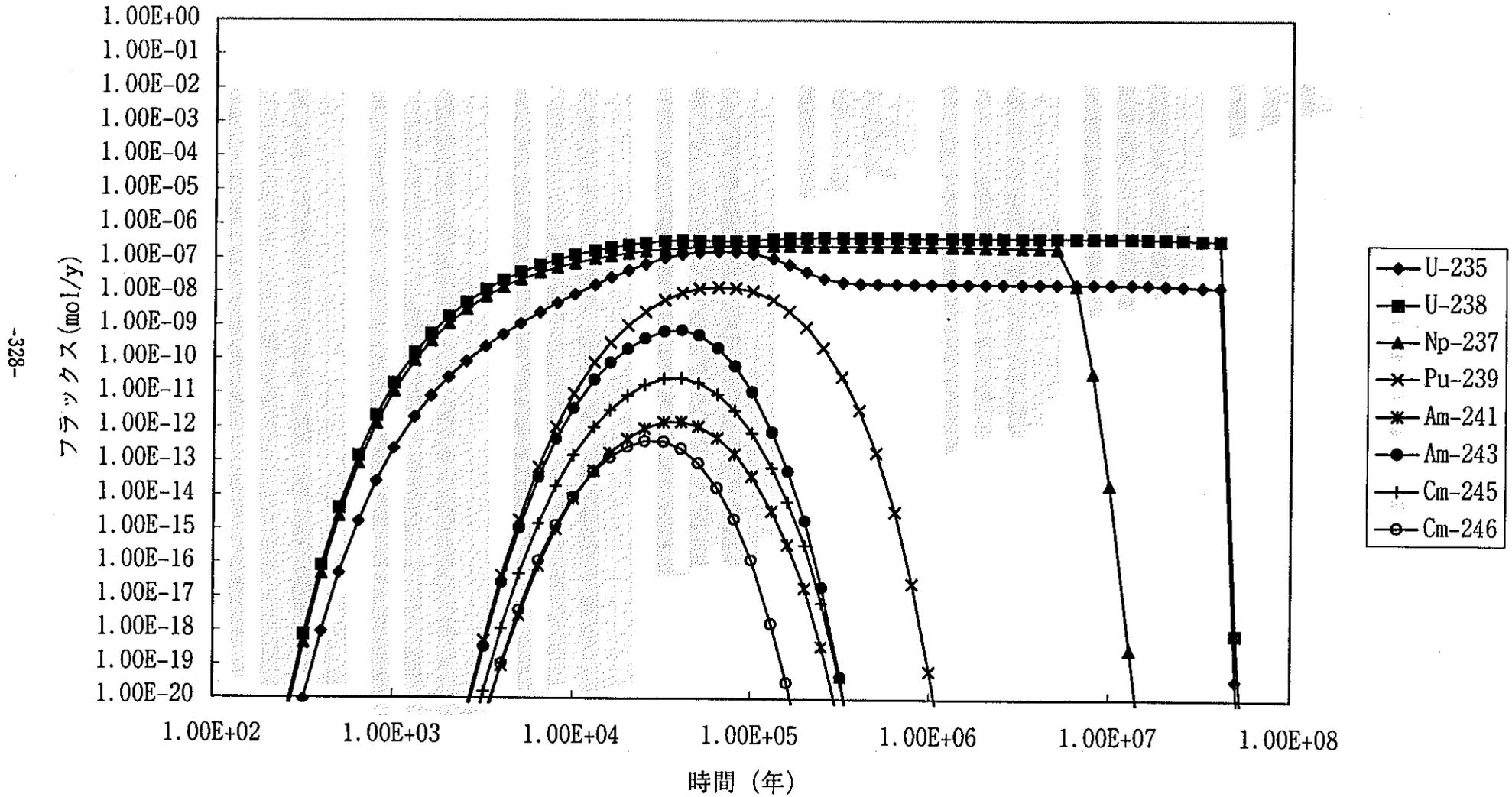


図5.2.2.16 ケース3解析結果

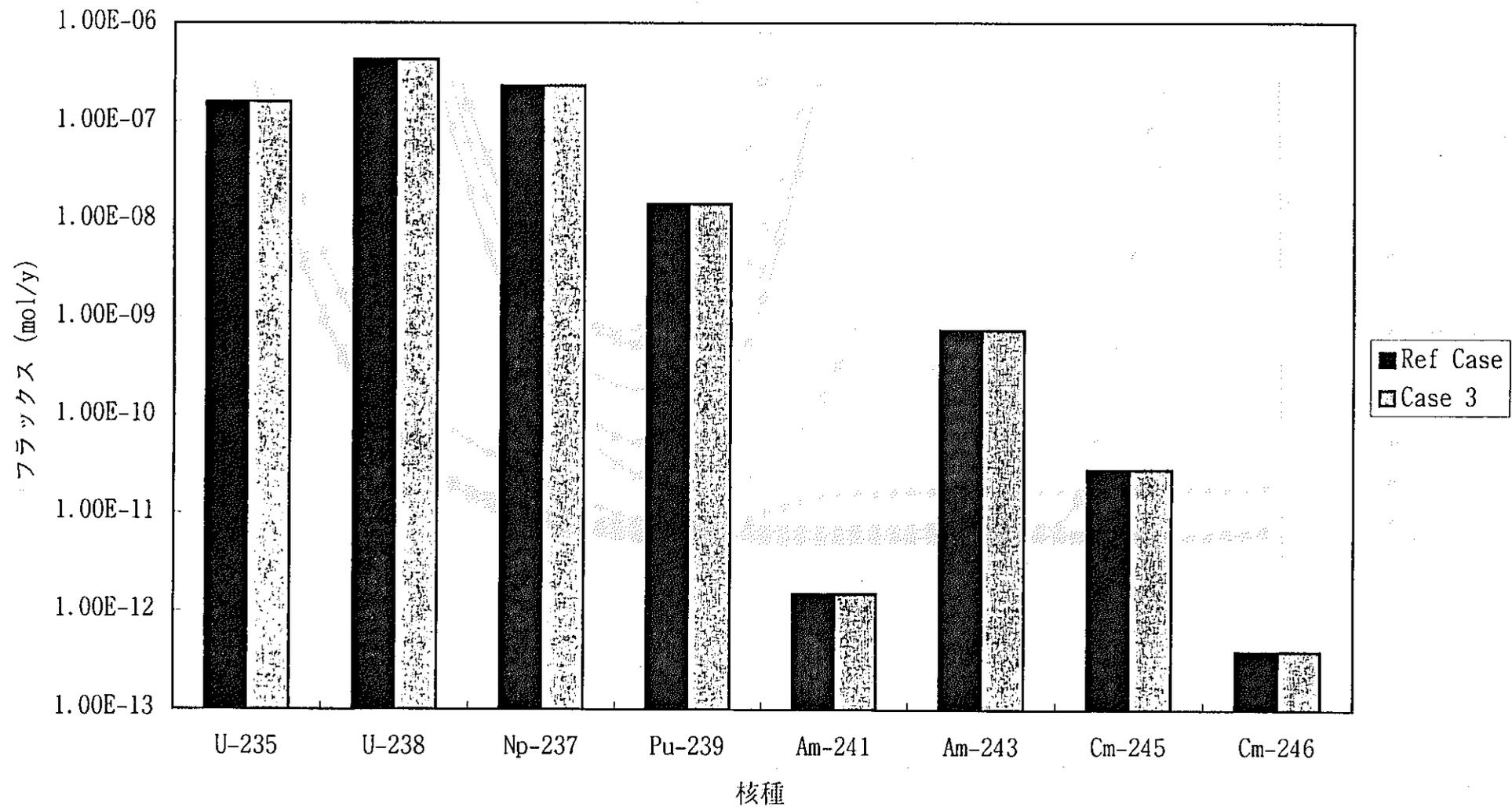


図5.2.2.17 リファレンスケース及びケース3の解析結果比較

4-1 緩衝材周りでの核種の上流側から下流側への回り込みの影響  
(流量2分の1)

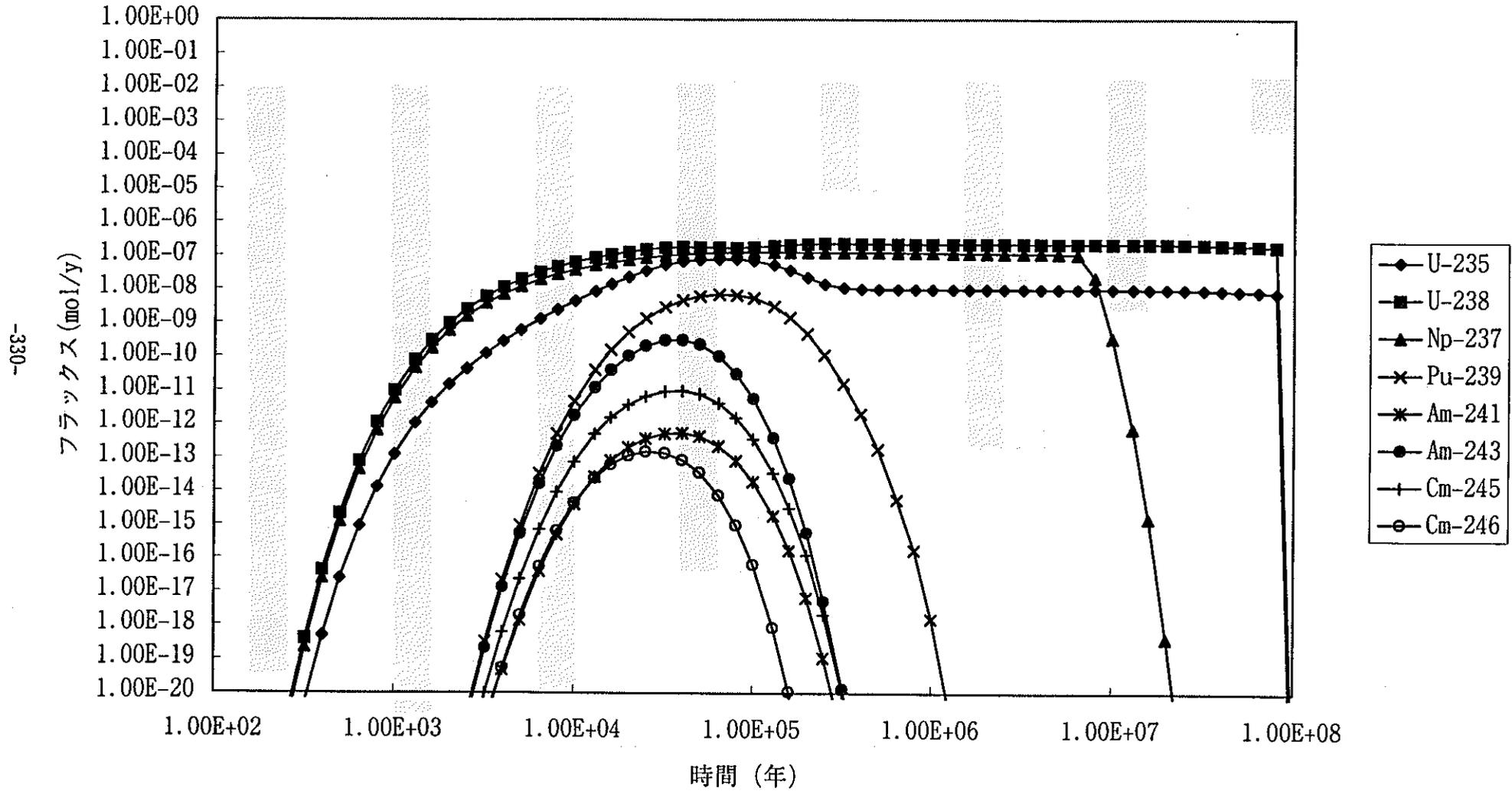


図5.2.2.18 ケース4.1解析結果

4-2 緩衝材周りでの核種の上流側から下流側への回り込みの影響  
(流量10分の1)

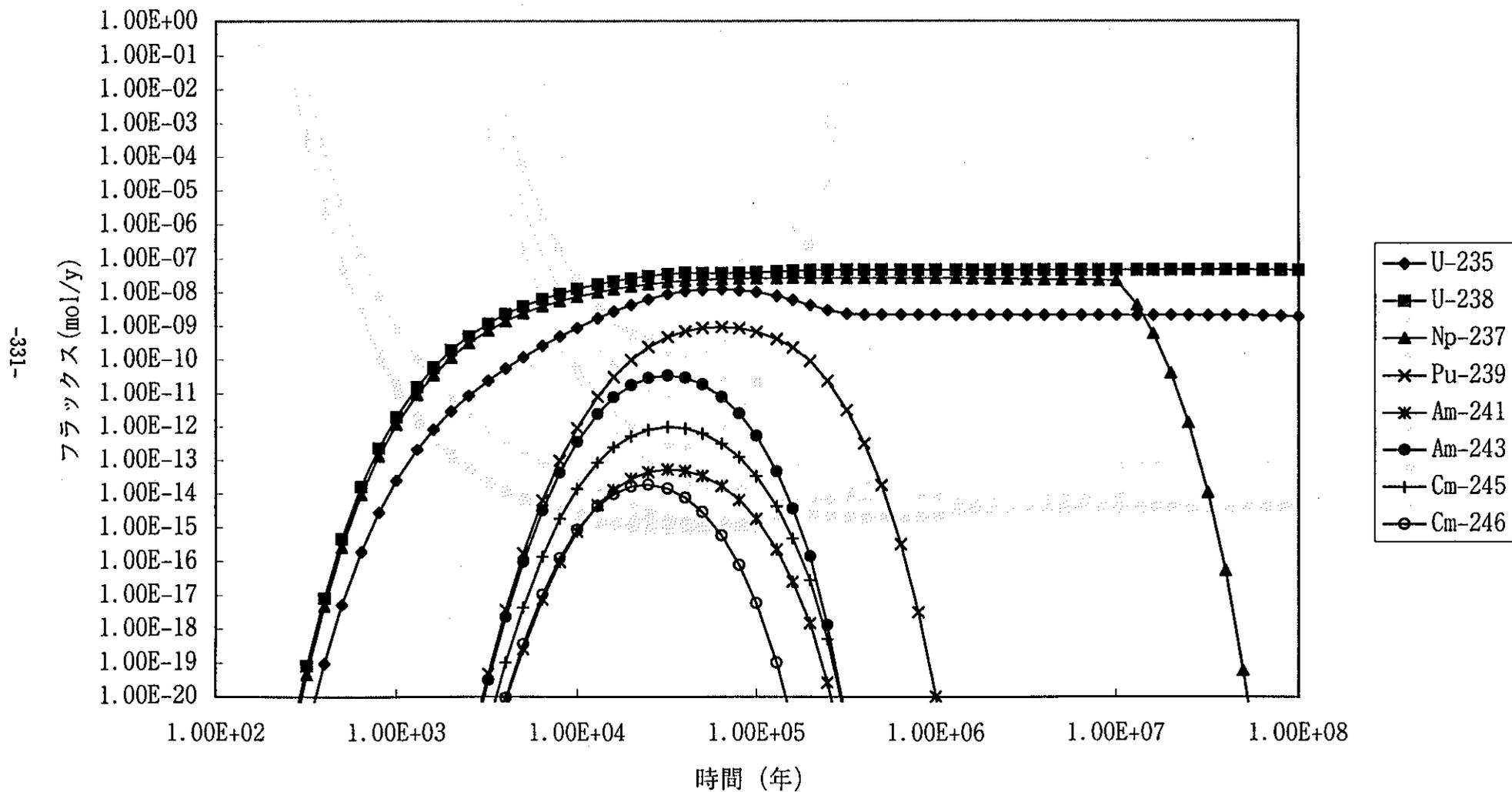


図5.2.2.19 ケース4.2解析結果

4-3 緩衝材周りでの核種の上流側から下流側への回り込みの影響  
(溶解度低下)

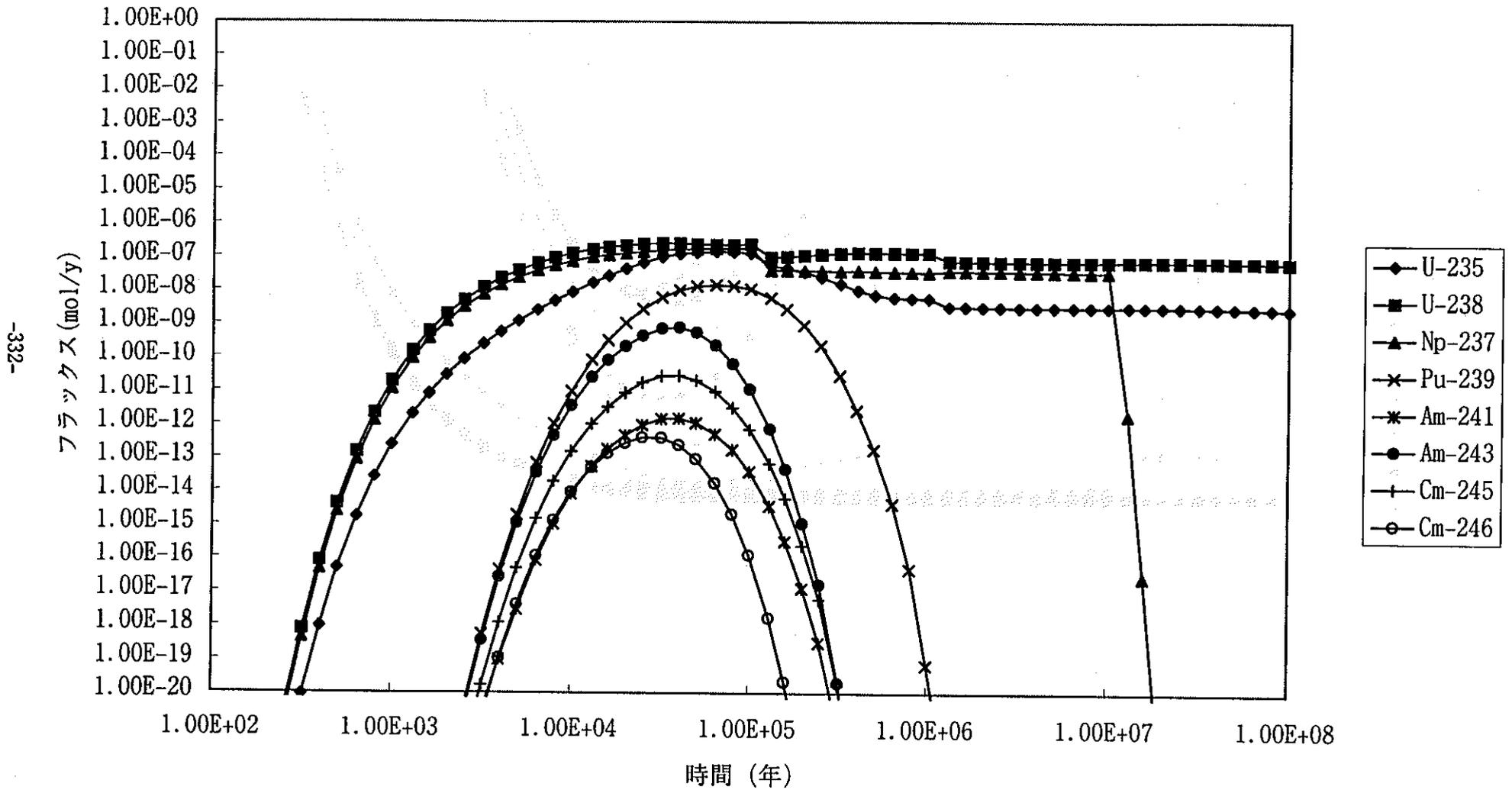


図5.2.2.20 ケース4.3解析結果

4-4 緩衝材周りでの核種の上流側から下流側への回り込みの影響  
(流量2分の1および溶解度低下)

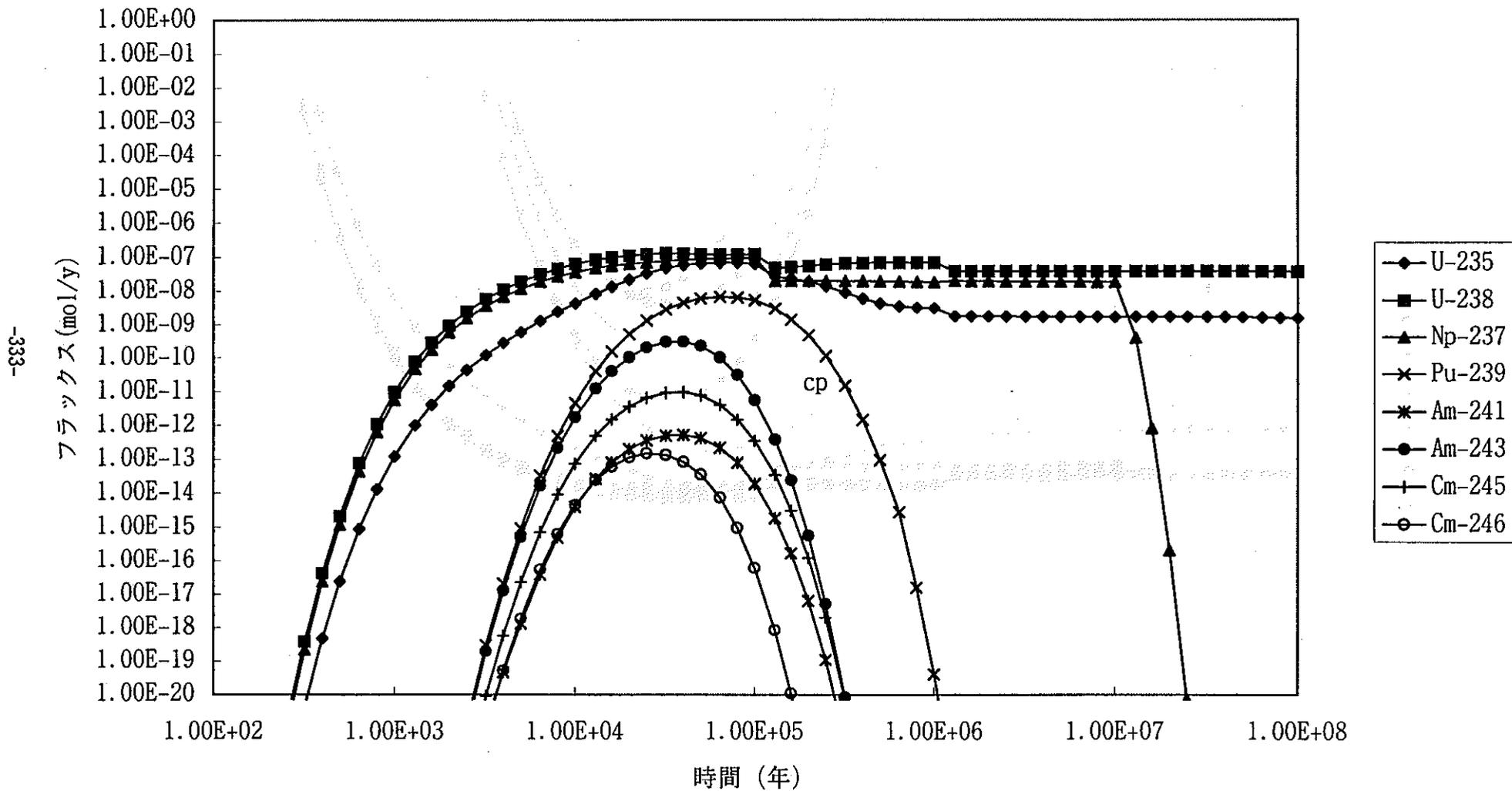


図5.2.2.21 ケース4.4解析結果

4-5 緩衝材周りでの核種の上流側から下流側への回り込みの影響  
(流量10分の1および溶解度低下)

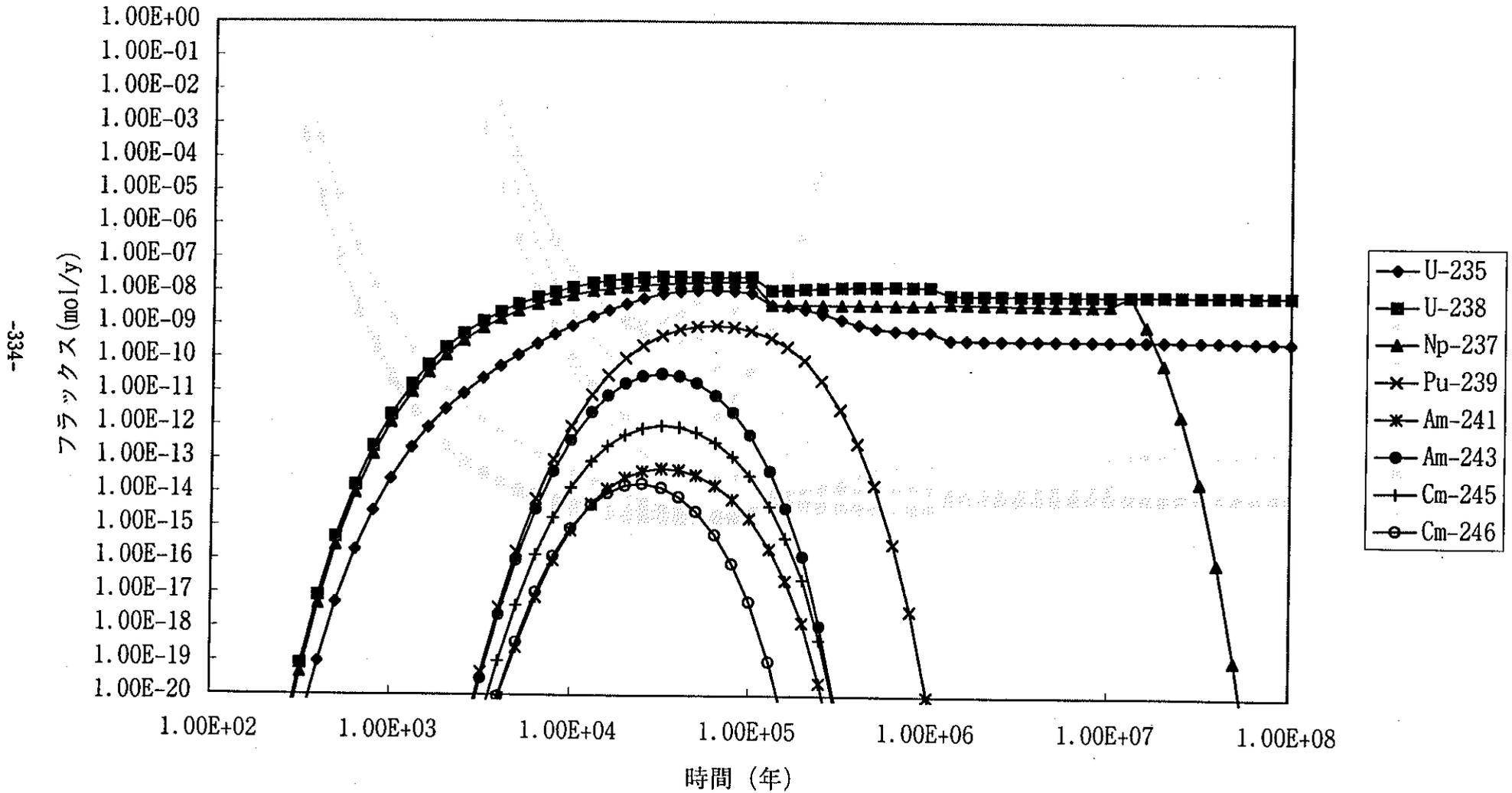


図5.2.2.22 ケース4.5解析結果

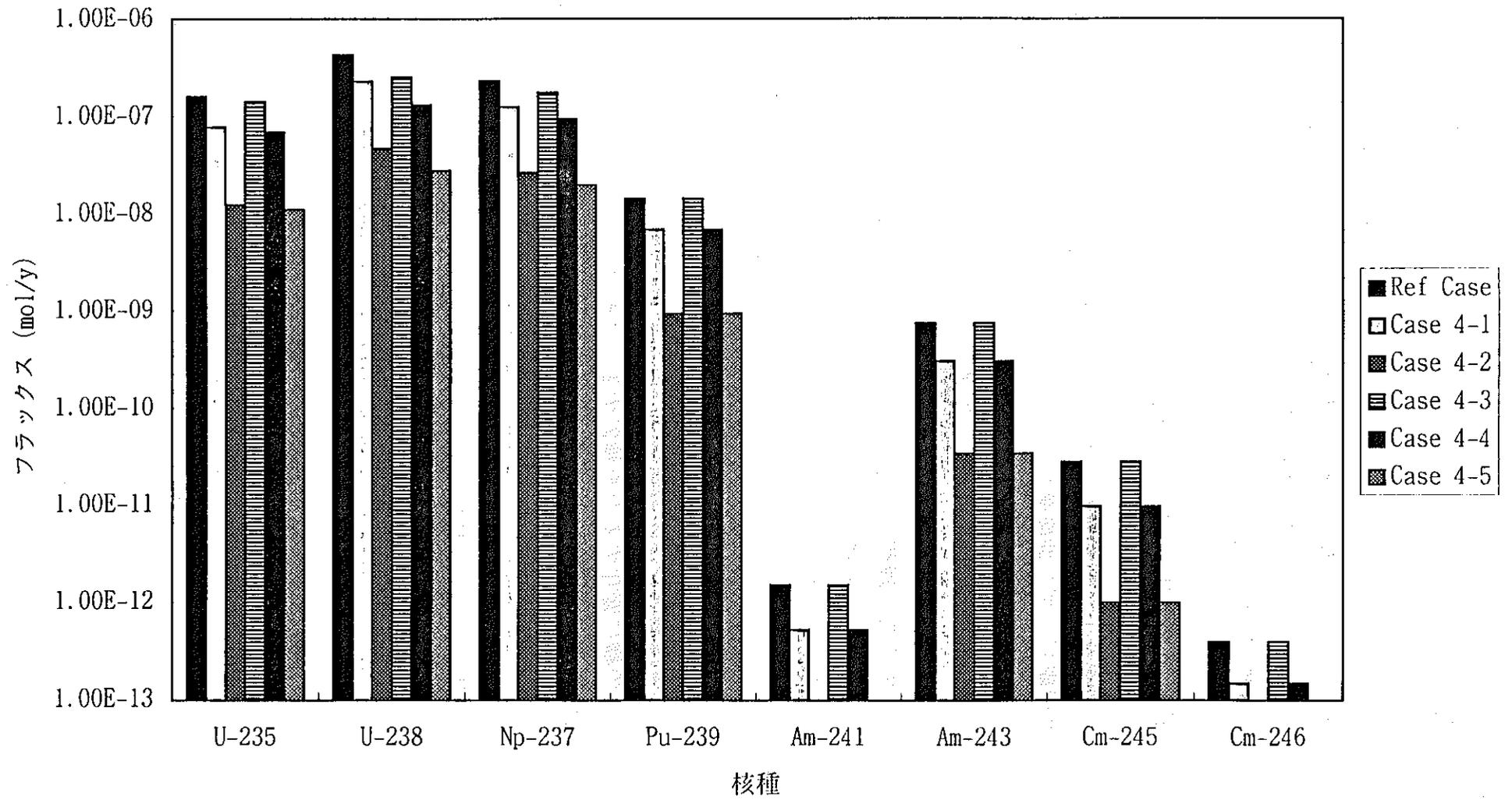


図5.2.2.23 リファレンスケース及びケース4の解析結果比較

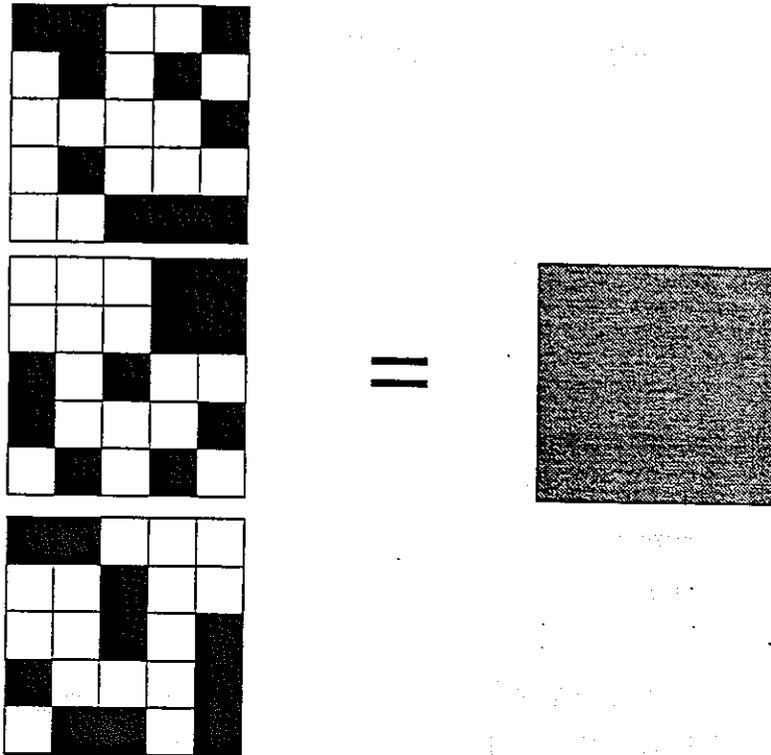
### 5.3 吸着に関する場の不均質性に関する検討

本節では、リファレンスケースの設定・評価の妥当性を示すために必要となる解析ケースとして、吸着に関する場の不均質性の影響に関する検討を行う。このため不均質多孔質岩体トレーサ試験設備 (MACRO-II) における試験条件 (吸着性ビーズの混合条件が試験にもたらす影響) について検討する。

#### 5.3.1 不均質多孔質岩体トレーサ試験設備における吸着係数の設定

不均質多孔質岩体トレーサ試験設備では、試験槽 (多孔質媒体槽) 内に吸着性のイオン交換樹脂ビーズと非吸着性ビーズを用いて不均質な吸着場を作成し、吸着の不均質性が物質移行に及ぼす影響を把握するための試験を行うこととなっている。具体的には、試験槽内に充填する吸着性のビーズと非吸着性のビーズの混合率をブロックごとに変化させることにより、吸着特性に関する不均質場を多孔質媒体槽内に作成する。理想的には、ブロック内の吸着性ビーズと非吸着性ビーズが均一に混合することが望ましいが、実際には2つの種類のビーズの密度の相違等により、吸着性ビーズと非吸着性ビーズとが完全には混合せず、一つのブロックの内部に、さらにミクロなレベルの不均質性が存在することが避けられないと考えられている。

そこで本節では、多孔質媒体槽内に充填されるビーズのうち一つのブロックに着目し、ブロック内部でビーズが不均一に混合することで、ブロック全体としての吸着特性がどの様に変化するかを検討する。これにより、不均質多孔質岩体トレーサ試験設備における、ブロック内ビーズの均一混合の仮定についてその妥当性を検討するとともに、この様なビーズの混合における均一性の問題が、特に吸着性ビーズの比率の小さい場合に問題となると考えられることから、吸着性ビーズの混合率の下限についても検討することとする。



40%の吸着性ビーズと  
60%の非吸着性ビーズの混合体

均一な40%の吸着性ブロック

図 5.3.1.1 吸着性ビーズと非吸着性ビーズとの混合ブロックに関する概念図

### 5.3.2 支配方程式

吸着を伴う場における分散移流方程式は次式で与えられる。

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \underline{D} \nabla C - \underline{u} C) - (1 - \theta) \frac{\partial S}{\partial t} \quad (5.3.2.1)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = R(C, S) \quad (5.3.2.2)$$

- $C$ : 液相中濃度
- $D$ : 拡散係数
- $R$ : 吸脱着に関する項
- $S$ : 固相中濃度
- $u$ : ダルシー流速
- $\theta$ : 空隙率
- $t$ : 時間

ここで、ソースターム及び崩壊は考慮されていない。また、空隙率は時間に対して一定である。吸脱着に関する項  $R$  については、線形吸着 (Langmuir 型吸着) を仮定することにより、次式により表現される。

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k_f' C(Q - S) - k_b' S \quad (5.3.2.3)$$

ここで、

- $k_f'$ : 吸着速度係数
- $k_b'$ : 脱着係数
- $Q$ : 吸着容量パラメータ

である。

また、吸着平衡は次式で表現される。

$$S_{eq} = \frac{aC_{eq}}{1+bC_{eq}} \quad (5.3.2.4)$$

ここで

$S_{eq}$  : 平衡吸着濃度

$C_{eq}$  : 平衡溶液濃度

$b = k_f' / k_b'$ ,  $a = bQ$  : Langmuir 等温パラメータ

である。

なお、流動条件については、ダルシー則により表現する。

$$\underline{u} = - \left( \frac{\rho_f g}{\mu} \right) k \nabla h \quad (5.3.2.5)$$

$g$  : 重力加速度

$h$  : 水頭

$k$  : 透水係数

$\mu$  : 動粘性係数

$\rho_f$  : 流体密度

### 5.3.3 評価手法

不均質多孔質岩体トレーサ試験設備においては、縦 5cm×横 5cm×奥行き 10cm の大きさのブロックを一つの単位として、吸着性ビーズ、非吸着性ビーズ及びそれらの混合物が多孔質媒体槽内に充填される。ビーズの直径はおおむねミリメートルのオーダーであることから、一つのブロック内には、非常に多数のビーズが存在することとなる。

本検討の目的は、一つのブロック内における吸着性ビーズの非吸着性ビーズの混合の度合いに関するものであることから、ここでは、一つのブロックをさらに小さな領域（セル）に分割し、そのセルの一つ一つに吸着性あるいは非吸着性のビーズを代表させることとする。簡単化のため、評価は2次元で行うものとし、基本的に  $20 \times 20 = 400$  個の領域に分割し評価を行うこととする。したがって吸着性ビーズの混合率が例えば 40% の場合には、全体の 40% に相当する 160 個のセル

を一定のアルゴリズムにより抽出し、吸着性ビーズとして取り扱うこととなる。

吸着性ビーズを代表するセルの抽出においては、完全に均一に混合した状態から、混合が不完全で、ある領域に吸着性ビーズがクラスター状に密集している状態まで、混合の状態を変化させて場の設定を行う必要がある。そこでこのためのアルゴリズムとして、0から1の間で与えられる混合度 (Degree of Mixing : DM) に対して次の手順により吸着性のセルを配置 (抽出) することとした。また、このアルゴリズムでは、吸着性ビーズを非吸着性ビーズの混合率 (Mixing Ratio : MR) についても0から1の間で可変とした。

### (1) シードの設定

全てのセルの中から、吸着性セルの配置の基準となるセル ( $x_{seed}$ ,  $y_{seed}$ ) を設定する。本研究では、基本的に2つの基準点を設けた。混合度が低い場合には、結果として、ここで設定した基準セルの周囲に密集して吸着性のセルが配置されることとなる。

### (2) 吸着セルの配置

上記にて設定された基準セルに対して、与えられた混合率 (MR) となるまで以下の手順により吸着セルを配置する。

#### (a) 角度の設定

まず、基準セルからの角度を設定する ( $0 \leq \theta < \pi$ )。

#### (b) 距離の設定

基準セルからの距離  $R$  を設定する。 $R$  は次式で与える。

$$R = Lx\sqrt{DM}$$

ここで、 $L$  はブロックの大きさの半分であり、 $x$  は  $[0,1]$  の範囲で発生させた乱数である。したがって吸着性のセルの位置は次の様に設定される。

$$x = x_{seed} + R \sin \theta, \quad y = y_{seed} + R \cos \theta$$

#### (c) 重複の確認

この様にして設定されたセルが、吸着性のセルとして設定されていた場合

には、隣接するセルを吸着性のセルとして設定する。さらにこのセルも既に設定されていた場合には、さらにその隣接するセルを円上に移動しながら吸着性のセルとして設定できるセルを探索する。結果として、小さな DM に対しては、吸着性のセルが基準となるセルの周囲に密集した配置を得ることができる。

図 5.3.3.1 及び 2 にこのアルゴリズムにより吸着性のセルを配置した例を示す。図中の灰色のセルが吸着性セル配置の際に基準として用いたセルである。図 5.3.3.1 は、混合率を 0.3 (30%) とした場合であり、混合度 (DM) によって、吸着性のセルがほぼ均一に配置されている場合と、基準に用いたセルの周囲に密集して配置されている様子が確認できる。図 5.3.3.2 は混合率 (MR) を 0.5 (50%) とした場合であるが、同様に DM の違いにより吸着性セルの配置に関する均一性の違いが確認できる。

なお、吸着性ビーズの混合率 (MR) が高い領域では、混合度を高くした場合にも非吸着性のセルが密集してしまうことが懸念される。実際、図 5.3.3.3 に混合率を 0.9 (90%) とした場合の吸着セルの配置例であるが、混合度 (DM) の設定に係わらず比吸着性のセルが幾つかの場所に偏って配置されている様子が確認できる。ただし、ビーズの配置 (混合度) の問題が、特に吸着性ビーズの混合率の低い領域で問題となることから、本研究においては、吸着性セルの配置に関するこの様な現象の影響はあまり大きくないものと判断できる。したがって本件研究では、上述のアルゴリズムにより吸着に関する不均質性を表現することとする。

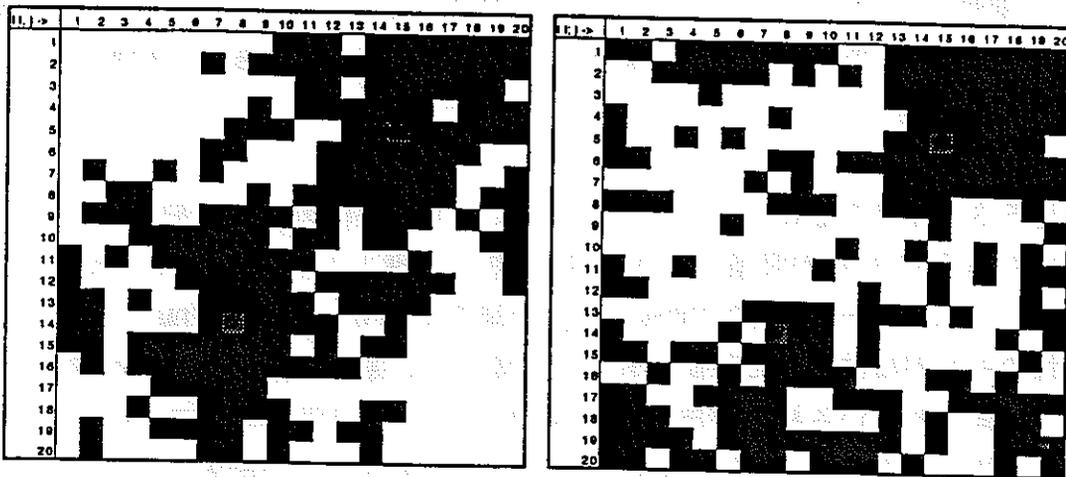


図 5.3.3.1 混合率 (MR) 0.3 における吸着性のセルを配置した例  
 混合度 : DM=0.2 (左)、DM=0.8 (右)

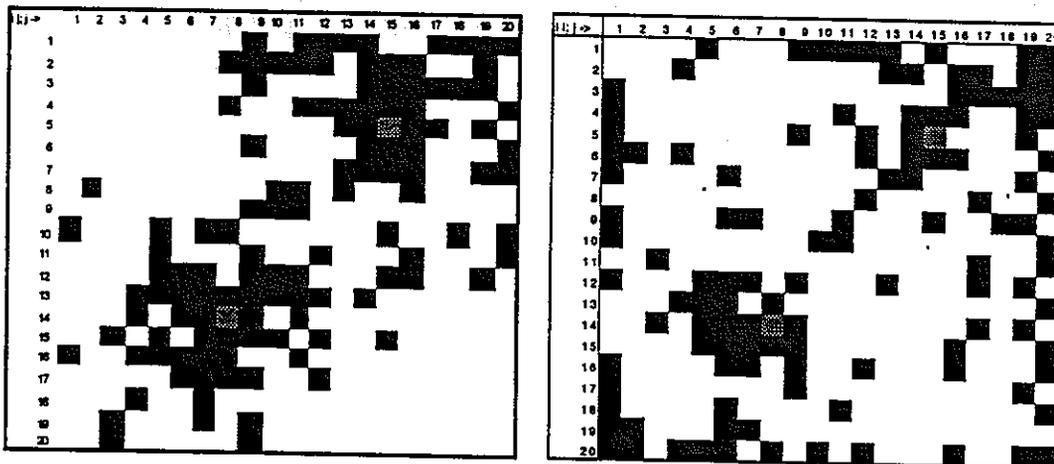


図 5.3.3.2 混合率 (MR) 0.5 における吸着性のセルを配置した例  
 混合度 : DM=0.2 (左)、DM=0.8 (右)

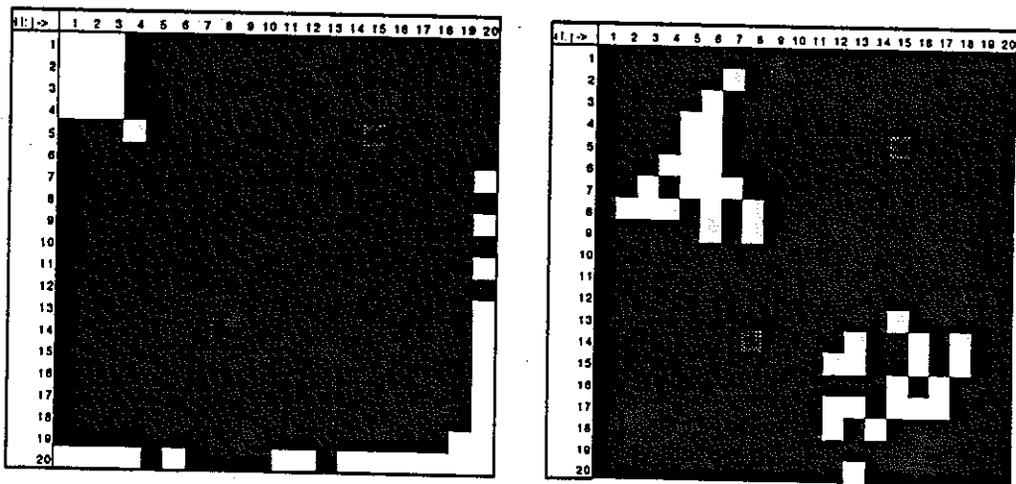


図 5.3.3.3 混合率 (MR) 0.9 における吸着性のセルを配置した例  
 混合度 : DM=0.2 (左) 、 DM=0.8 (右)

#### 5.3.4 評価ケース

評価ケースとして、ビーズ混合度の変化がもたらす影響を検討するため、吸着性ビーズの混合率（MR）を一定に保ったまま混合度（DM）を変化させた場合を設定するとともに、吸着性ビーズの混合率の下限に関する検討として、一定の混合度を保ったまま吸着性ビーズの混合率を変化させた場合を検討することとした。

また、理想的な状態として完全に吸着性ビーズと非吸着性ビーズが完全に混合した場合を想定し、ブロック内の全てのセルの吸着容量をビーズの混合率に応じて均一に設定した場合についても評価することとした。この場合、例えばビーズの混合率を50%とした場合、ブロック内の全ての吸着容量を吸着性ビーズ100%の場合の半分に設定し、その他の吸着に関する設定（後述）は、吸着性ビーズ100%の場合と同一とする。これにより、評価上は吸着性ビーズと非吸着性ビーズが、50%ずつ完全に混合した場合を想定することができる。評価ではこの結果をリファレンスとして使用することにより、混合度の変化や混合率の低下がもたらす影響を評価することとした。表5.3.4.1及び2に、それぞれブロック内で均一に混合した場合の評価ケース（リファレンス）と、混合率及び混合度を変化させた場合の評価ケースをまとめる。

表 5.3.4.1 ブロック内で均一に混合したと想定した場合の評価ケース

ケース名	混合比 (%)
av5	5
av10	10
av15	15
av20	20
av30	30
av50	50

表 5.3.4.2 混合率及び混合度を変化させた場合の評価ケース

ケース名	混合比 (%)	混合度
r5m80	5	80
r10m80	10	80
r15m80	15	80
r20m80	20	80
r30m80	30	80
r50m10	50	10
r50m30	50	30
r50m50	50	50
r50m90	50	90

なお、評価にあたっては、昨年度実施した吸着に関する予備実験の結果を参考に、以下の値にパラメータを設定した。

表 5.3.4.3 各パラメータの設定値

パラメータ	設定値
透水量係数	$1.3 \times 10^{-4} \text{ms}^{-1}$
吸着速度係数 ( $k_f$ )	$3.274 \times 10^{-3} \text{m}^3 \text{kg}^{-1} \text{s}^{-1}$
脱着速度係数 ( $k_b$ )	$1.868 \times 10^{-5} \text{m}^3 \text{kg}^{-1} \text{s}^{-1}$

また、評価体系の上限及び下限は不透水境界とし、右側境界（入口境界）の水頭を 0.05m を、左側境界（出口境界）の水頭を 0.00m で固定した。また被吸着物質については、初期条件として濃度 0 を与え、その後は左側より  $0.5 \text{kgm}^{-3}$  の濃度にて評価体系へ流入させた。

### 5.3.5 評価結果

評価結果の一例として、図 5.3.5.1 に「r50m30 ケース」における液相と固相のコンター図を示す。上に示したものが液相中のトレーサ濃度であり、下に示したものが固相中のトレーサ濃度である。図は、ともに赤い部分がトレーサ濃度の高い部分を青から紫の部分がトレーサ濃度の低い部分を示している。評価に用いた体系は、図 5.3.3.1 等と同じ位置にシードを設けて発生させたものであり、混合度が 0.3 に設定されていることを考えるとこの周囲に吸着性のビーズが密集して配置されているものと想定される。固相のコンター図からは吸着性のビーズが密集していると想定される位置（右上及び左下の部分）で、トレーサを良く吸着している様子が明瞭に現れており、一方液相に関する濃度コンター図からは、この部分で液相中のトレーサ濃度が低下していることが確認できる。

図 5.3.5.2 は、出口境界における液相中トレーサ濃度のプロファイルである。図の横軸は出口境界（右側境界）上における、下側境界からの距離を示しており、0 の位置が下側境界との交点を、0.1 が上側境界との交点に対応する。図中に「av」で示したものは、「av50 ケース」であり、「r50m30 ケース」に対して完全混合を仮定した場合のリファレンスと見なせる結果である。したがってこの両者の差が吸着性ビーズと非吸着性ビーズが完全に混合していないことの影響と見ることができ、両者を比較すると、コンター図の傾向が定量的に確認できる。すなわち、吸着性ビーズが密集していると想定される中央から上部にかけては、液相中トレーサ濃度が、完全な混合を仮定した場合よりも低くなっており、下部では逆に高くなっている。

図 5.3.5.3 は、「r50m50 ケース」と同ケースの完全混合を仮定した場合の「av50 ケース」における、出口（右側境界）での液相中トレーサ濃度の時間変化である。「rm1」と「av1」、「rm2」と「av2」、「rm3」と「av3」、「rm4」と「av4」がそれぞれ同時刻におけるプロファイルを示している。時間の経過とともに、不均一な混合のケースと完全混合を仮定したケースの両者とも出口のトレーサ濃度が上昇していることがわかるが、全体としてのトレーサ濃度の上昇のタイミングは良く一致していることがわかる。細かなプロファイルの違いは、やはり出口付近では上部に吸着性のビーズが密集していることに対応しており、トレーサが破過するまでは両者は全域で濃度 0 を示し、破過後は、一旦両者のプロファイルに違いが生じるが、最終的には全ての吸着が平衡状態に達することにより両者の差は解消していることがわかる。

混合の程度に対応して、全体として完全混合を仮定した場合との差を、各計測点における両者の差を二乗し、平均した後に平方根を求めたものが表 5.3.5.1 で

ある。表に示した値は、各ケースにおける差がもっとも大きくなった時点のものである。表から混合度が低下するにつれてこの値が大きくなり、傾向として両者の乖離が大きくなることが確認できる。ただしその差は最大でも5%であった。また破過の時間についても大きな差は見られなかった。

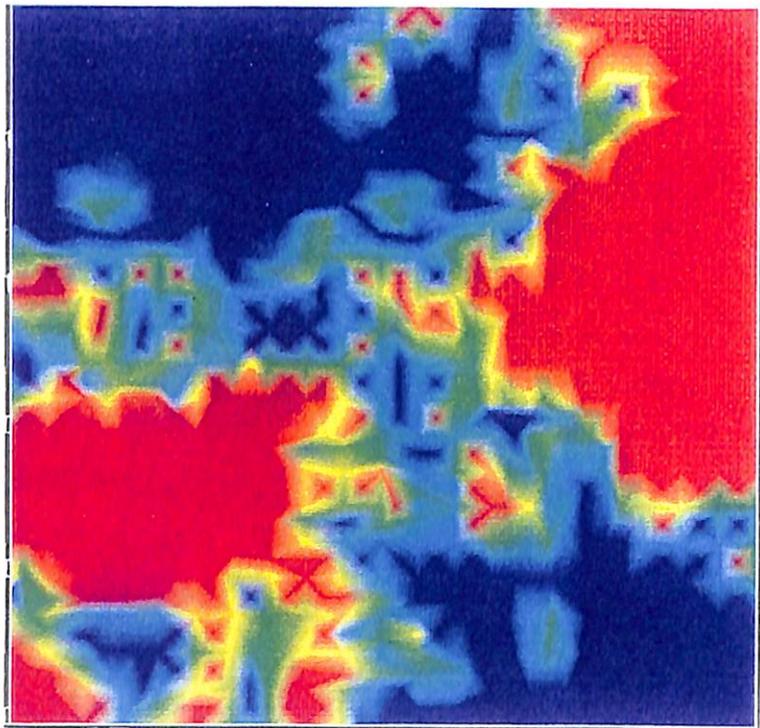
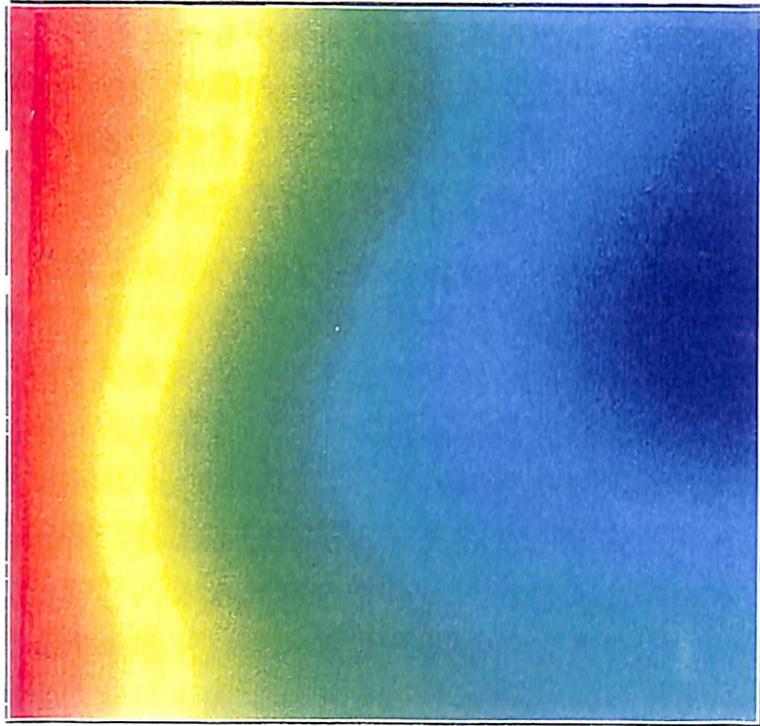


図 5.3.5.1 「r50m30 ケース」における液相と固相のコンター図

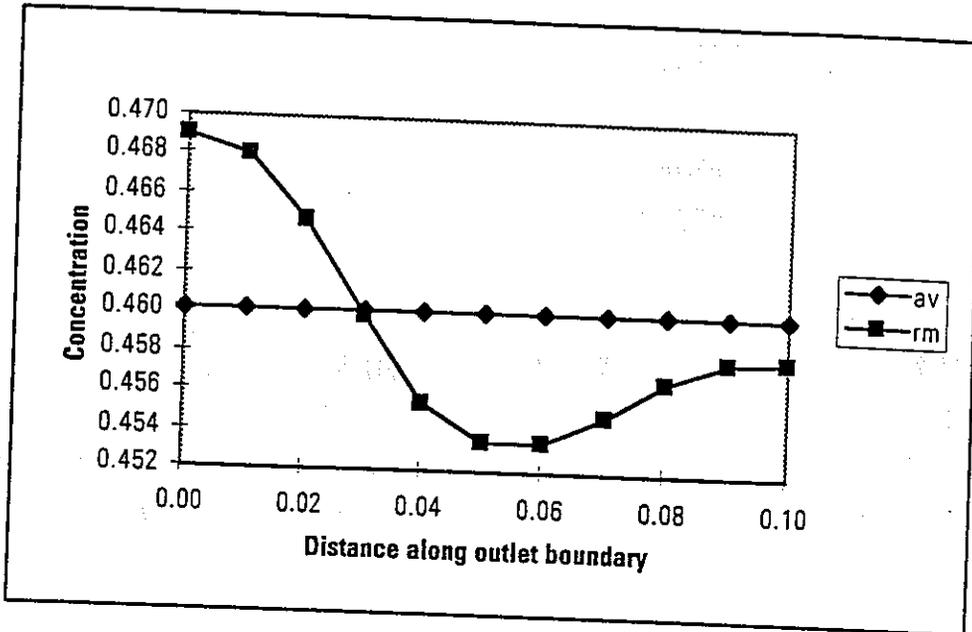


図 5.3.5.2 出口境界における液相中トレーサ濃度プロファイル

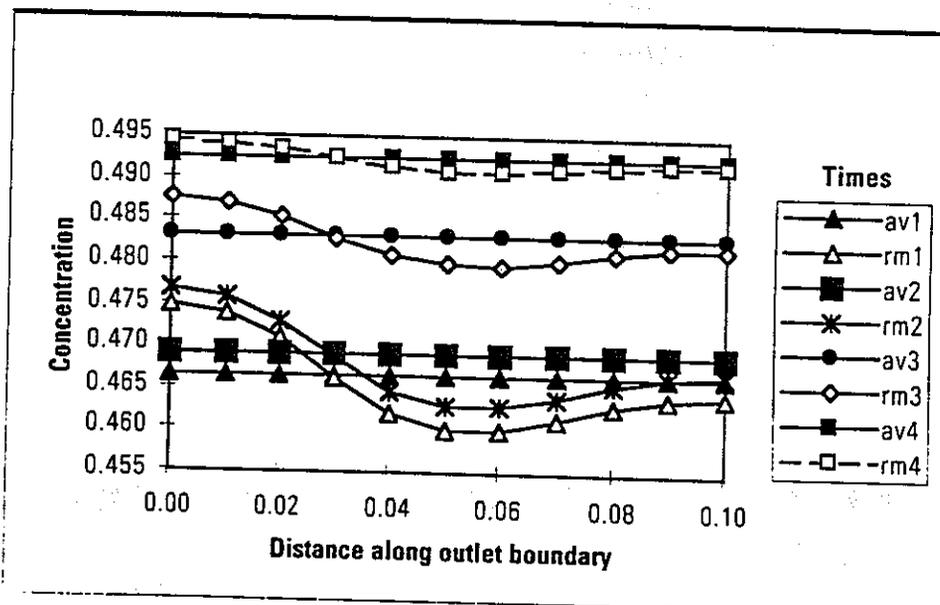


図 5.3.5.3 出口（右側境界）での液相中トレーサ濃度の時間変化

表 5.3.5.1 混合度を変化させた場合の影響

ケース名	差の最大値 (%)
r50m10	4.8
r50m30	3.9
r50m50	3.0
r50m90	1.5

一方、吸着ビーズの混合率の下限に関する評価結果については表 5.3.5.2 に示した。記述の内容は、表 5.3.5.1 と同じである。吸着性ビーズの混合率を 5% から 80% まで変化させたものの、混合度を 0.8 と設定した場合には、吸着性ビーズの混合率が低い場合にも、各混合率において完全混合を仮定した場合との差は十分に小さいものとなった。

表 5.3.5.2 混合率を変化させた場合の影響

ケース名	差の最大 (%)
r5m80	0.5
r10m80	0.6
r15m80	1.1
r20m80	1.0
r30m80	1.3
r50m80	1.5

### 5.3.6 吸着に関する場の不均質性に関するまとめ

本節では、吸着に関する場の不均質性に関する検討として、不均質多孔質岩体トレーサ試験設備 (MACRO-II) におけるブロック内の吸着性ビーズと非吸着性ビーズの混合条件が試験結果に与える影響を解析により評価した。その結果、吸着性ビーズと非吸着性ビーズの混合の度合いが向上するにつれて、完全な混合を仮定した場合との差が減少することが確認された。ただしその差は、非吸着性ビーズと吸着性ビーズの混合率を 50% に設定した場合には、混合の度合いが低い状態

においても 5%程度と、あまり大きなものではなく、実験誤差の範囲内に収まると想定されることが明らかとなった。

一方、吸着性ビーズの混合率の下限に関する評価としては、混合率を 5%まで低下させて評価を行ったが、混合の度合いを高くした場合には両者の差は十分に小さいことが明らかとなった。したがって試験においては、確実に吸着性ビーズと非吸着性ビーズを混合することにより、広い混合率にわたって十分な精度で試験が実施できるものと考えられる。

なお、以上の検討は、昨年度実施された吸着の予備試験のデータに基づき実施したものであり、実際の試験にあたっては、使用するビーズの特性や吸着性ビーズと非吸着性ビーズの混合性等を再度確認し、本検討と同様の評価を行うことが肝要であると考えられる。

#### 5.4 まとめ

リファレンスケースについてシャドウモデルおよび MESHNOTE による解析を実施した。両者の解析結果の比較によれば、Am-241 および U-235 を除く各核種のピーク放出率の差は、数パーセント以内であり、結果はほぼ一致している。Am-241 および U-235 については、シャドウモデルによる解析の方が高いピーク値を示している。これは、シャドウモデルでは同一元素の溶解度について同位体分配の効果を考慮していないが、MESHNOTE では、それを解析上考慮していることによる。

シャドウモデルおよび MESHNOTE の各々の解析コードを使用して、リファレンスケース近傍の解析ケースとリファレンスケースの解析結果を比較した。

シャドウモデルでは、リファレンスケース近傍の解析ケースとして、ガス圧による移流の発生、速度論的溶解・沈殿反応の適用、元素依存の拡散係数の適用、放射線分解による酸化剤生成の影響、オーバーパック腐食生成物の核種吸着物質としての効果を考慮した各ケースについて解析を実施した。

解析結果によれば、放射線分解による酸化剤生成の影響により、酸化還元フロントがベントナイト系緩衝材外側に到達した場合を除き、各核種のピーク放出率はリファレンスケースの解析結果とほぼ同じであった。

また、MESHNOTE では、オーバーパック腐食膨張による腐食生成物およびベントナイトの拡散係数の変化、オーバーパック腐食膨張による腐食生成物およびベントナイトの拡散係数の変化ならびに核種吸着物質としての効果、放射線分解による酸化剤生成の影響、緩衝材周りでの地下水の回り込みの影響を考慮した各ケースについて解析を実施した。

解析結果によれば、緩衝材周りでの地下水の回り込みの影響を考慮して、解析上ベントナイト緩衝材外側の地下水流量を低下させた場合を除き、各核種のピーク放出率はリファレンスケースの解析結果との顕著な相違は見られなかった。

吸着場の不均質性が物質移行に与える影響について、試験装置の場の設定の観点から検討した。その結果、吸着場を生成するために吸着性ビーズと非吸着性ビーズを混合して使用する場合、両者を十分に混合することにより試験上は完全混合を仮定できることを確認した。

## 5 章 参考文献

- [1] JGC, Private Communication, 1998
- [2] M.Tsukamoto, T.Fujita and T.Ohe, The Effect of Degradation of Buffer on Radionuclide Release from Engineered Barrier System for High-Level Waste Disposal, Proceedings of the Fifth International Conference on Radioactive Waste Management and Environmental Remediation, 1995
- [3] M.D.Impey, H.Takase and B.M.Watkins, Technical Evaluation of Gas Effects for the Rokkasho Phase II Shallow Land Burial Facility, QuantiSci Report IE5011A-2, 1997
- [4] S.T.Horseman, J.F.Harrington and P.Sellin, Gas Migration In MX80 Buffer Bentonite, Scientific Basis for Nuclear Waste Management XX, p1003 -1010, 1996
- [5] H.Takase and P.Grindrod, Precipitation Kinetics of Radioactive Elements and Their Effect upon Redox Conditions of the Nearfield, Proceedings of the Fourth International Conference on Radioactive Waste Management and Environmental Remediation, 1994
- [6] H. Christensen, E .Bjergbakke, Radiolysis of ground water form spent fuel, SKB TECHNICAL REPORT 82-18
- [7] EDITED BY SKB, "SKB91 (SKB TECHNICAL REPORT92-20)", 1992
- [8] 塚本政樹, 大江俊昭, 藤田智成, 電力中央研究所報告書, T92075, 1992
- [9] S.Nakayama, Y.Sakamoto, "Sorption of Neptunium on Naturally-Occurring Iron-Containing Minerals", 1990
- [10] 動力炉・核燃料開発事業団 「緩衝材間隙水中の放射線分解の評価に係わるデータセット」、コンピュータソフト開発株式会社、1997年8月入手資料

## 6. ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルの開発

今年度の研究の最後の課題は、シャドウモデルの概念と手法とを発展させることにより、ニアフィールド母岩中核種移行シャドウモデルを開発する事である。ここでは、以下にその内容を、概念モデル、数学的定式化、シャドウサブモデルの関数形テンプレート、より具体的な例題の設定という順番で記述し、最後に試解析結果をまとめることとする。

### 6.1 概念モデル

#### 6.1.1 チャンネルネットワーク

人工バリアシステムから放出される周辺母岩中の核種移行をモデル化することとし、また、母岩は以下の2つの構成物から成るものと仮定する。

- (a) 地下水による移流が主な移動メカニズムである様なチャンネルのネットワーク（例えば、亀裂、砂又は礫岩層のチャンネル）
- (b) 物質移動が分子拡散によって支配されている様な岩体マトリクス

更に分子拡散は移流チャンネルと垂直な方向でのみ生じると仮定する。つまり、この事は、母岩をチャンネルネットワークとして扱い、それぞれのレグは“二重空隙”媒体として表現されることを意味している。[2]

シャドウモデルを十分に柔軟なものとするため、以下の最小限の制約のみを設けた、極力一般的なネットワークを扱うこととする。

- ・ ネットワークはそれぞれ両端のあるレグから成り、各端は必ず source/sink 又は他のレグの端に接続されている。
- ・ レグの両端を同一の点に接続することはできない。
- ・ source からは常に核種が放出され、反対に、sink には常に核種が流入する。
- ・ ネットワーク内にループは無い。

ネットワーク内の核種の質量バランスは保証されていると仮定するが、地下水については必ずしもこれは当てはまらない。

### 6.1.2 瞬時平衡あるいは速度論的反応による核種の質量配分

移行中の核種について様々な化学形態を考えることとし、更に、相互に速い反応で結ばれている、つまり瞬時平衡が常に成立している様な化学形態のグループを「瞬時平衡グループ」として定義する。また、これに加えて、複数の瞬時平衡グループ間の遅い（速度論的）反応も考慮に入れることとする。

### 6.1.3 時間・空間依存性のニアフィールド環境

次項で紹介する数式中のパラメーターの大半は、時間及び場所の関数として表現されており、従って多岐にわたる外部事象及びそれによって引き起こされるニアフィールド内の核種移行への影響を、抽象的に表現することができる。

主なニアフィールド環境変化は、以下の様なカテゴリーに分けることができる。

- (a) 形状変化 = チャンネル及びマトリクス的大小及び形状の変化
- (b) 水理学的変化 = それぞれのチャンネル内の地下水流速の変化
- (c) 地球化学的变化 = 瞬時平衡グループ内における質量配分及び一つの瞬時平衡グループから他の瞬時平衡グループへの速度論的反応速度の変化

シャドウモデルの汎用性を保つため、時間及び空間依存性を記述する具体的な関数の形は任意とする。但し、ここで、以下の仮定を設ける。

チャンネルネットワークの構造、つまり、レグの本数、長さ及びレグ間の接続形式は一つの計算を通じて一定である。

ここで、異なる時間帯に生起するレグの全体を予め考慮しておき、チャンネル内の流れの有無及び方向を経時的に変化させることにより、チャンネルの出現及び消滅を表現可能であることに注意を要する。つまり上記の仮定は、実際上それ程強い制約とはならない。

## 6.2 数学的定式化

### 6.2.1 チャンネルネットワークの表現

はじめに、「疑似順序」という概念を導入する。

ある集合  $S$  に属する各点がそれぞれただ一つのランクに所属し、かつ、全てのランクから成る集合に全順序が定義される場合、 $S$  は「疑似順序」を有すると言う。

\*ある集合が全順序を有するとき、全ての点の組についてある順序が定義されている[3]。また、容易に確かめられる通り、 $S$  が疑似順序を有する場合には、2つの点が同一のランクを有する時以外は順序を定義することができる。

既に述べた条件を満たすネットワークを、以下の手法で作成することとする。

(1)  $n$  個の点から成るある集合について、最大2つまでの点在同一のランクに属す様な疑似順序を、 $\prec$  と定義し、さらに、 $m$  個の単調な数列を以下の様に定義する。各数列はいくつかの点の配列から成り、それぞれの列の長さ（含まれている点の数）は  $l_i$ 、 $i=1, 2, \dots, m$  で、 $l_i \leq n$  を満たし、各点は最大で一回まで一つの数列に含まれ、数列に含まれる点のランクは単調に非上昇である、つまり、 $p_k, p_{k-1}$  が数列の  $k$  番目及び  $k-1$  番目の点であるとすると、 $p_k \succ p_{k-1}$  は成り立たない。また各数列の最初の点を source と、最後の点を sink とつなぐ。

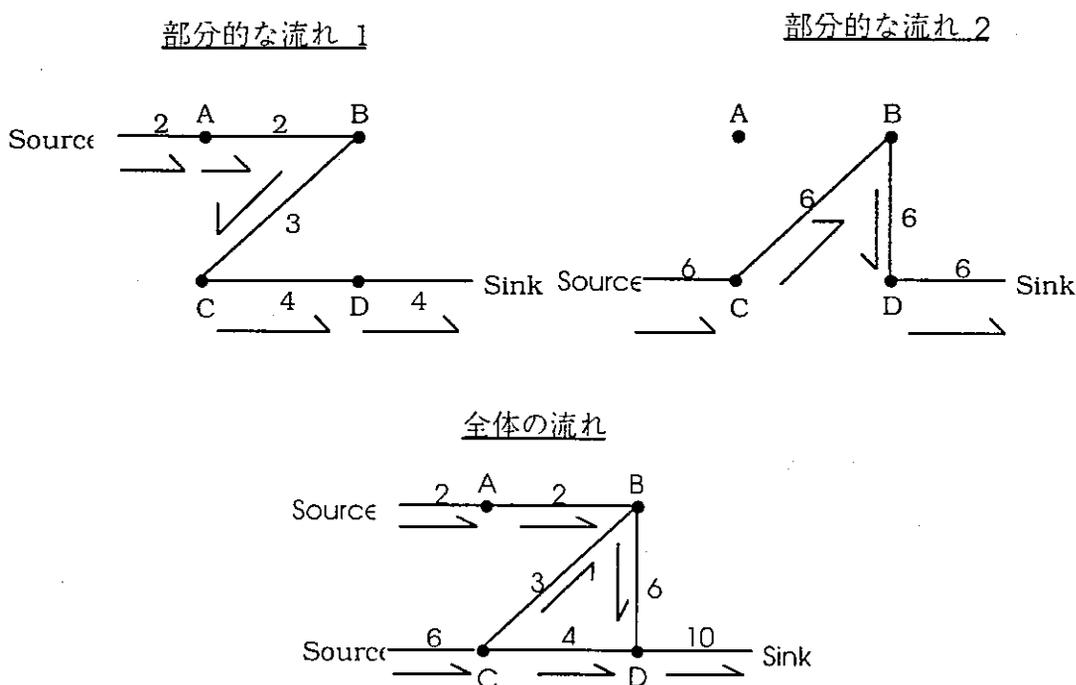
(2) 各数列について、単調に非減少の流速の数列を割り当て、流向が (source から sink へ向けて) 一定の部分的な (marginal) 流れを定義する。従って、上流のレグにおける流速は下流より大きくはない。

注：数列内の全てのレグにおける流速が同じである場合、水の収支が保たれることとなる。

(3) ネットワーク全体における流れ分布を定義する為に、各々の数列に対応する部分的な流れを足し合わせる。容易にチェックできる様に、もし  $a \succ b$  が成り立つならば流れは常に  $a$  から  $b$  へと流れる。特に地下水は常に source から流出

して sink へ流入する。しかし、もし a、b 間に疑似順序が存在しない場合（言い換えれば、a と b が同じランクに属する場合）、流れは部分的な流れの相対的な大きさによってどちらの方向にも向かう可能性がある。更にこのケースにおいて、時間依存性の部分的な流れの導入により、流れの方向を計算途中で変える事ができる。しかしながら、各ランクは最高で2点までしか含まないため、どの時点においてもループは存在しないことが保証される。また、もし全ての部分的な流れにおいて水の収支を保った場合、全体の流況も水の収支を保つ。

この手順で作成したネットワークの例を図1に表す。この例では以下の疑似順序を有する4つの点[A,B,C,D]が考慮されており、さらに、2つの部分的な流れが図1の様に定義されている。



ランク 1	A
ランク 2	B,C
ランク 3	D

図 6.2.1 チャンネルネットワーク及び流れの分布の定義

図中にある様に、レグ(B,C)における全体の流れの向きは C→B である。しかしながらもし“部分的な流れ1”を増やしレグ (B,C) に対応する部分を6以上にした場合、流れの方向は逆になり、B からCへと流れることになる。この例は、他の全ての点の組において疑似順序が定義されているため、(B,C) 以外のレグでは、流れの方向の変更は起こりえない。更に、B, と C が属するランクにDは属さないので、点 B, C, Dは接続しているが3点間にループは存在しない。言い替えれば、流れは常にB又はCからDへと流れる。

### 6.2.2 単一のレグに対する一般化された移流・分散・マトリクス拡散方程式

以下に、単一レグにおける核種 i の瞬時平衡グループ j の一般化された移流・分散・マトリクス拡散系の支配方程式を表す。

#### (6.1) チャンネル内移行方程式

$$(A_c C_c^{ij})_t = D_c \left[ A_c (\beta_c^{ij} C_c^{ij}) \right]_x - [q_c \beta_c^{ij} C_c^{ij}]_x - \sum_{j \neq k} A_c R^i(C_c^{ij}, C_c^{ik}) - \lambda^i A_c C_c^{ij} + \lambda^{i-1} A_c C_c^{i-1j} - \delta_c A_c F^{ij},$$

$x$  : チャンネル内の座標

$A_c$  : チャンネルの断面積 [ $m^2$ ]

$C_c^{ij}(x,t)$  : チャンネル内における核種 i の瞬時平衡グループ j の全体濃度  
[ $mols/m^3$ ]

$D_c$  : チャンネル内の分散係数 [ $m^2/year$ ]

$q_c$  : チャンネル内の地下水流速 [ $m^3/year$ ]

$\beta_c^{ij}$  : 核種 i の瞬時平衡グループ j の平均移流速度 [-]

$R^i$  : 瞬時平衡グループ j から k への速度論的反応速度 [ $mols/m^3/year$ ]

$\lambda^i, \lambda^{i-1}$  : 核種 i 及びその親核種の崩壊定数 [ $1/year$ ]

$\delta_c$  : 単位体積の水流あたりの表面積 [ $m^2/m^3$ ]

$F^{ij}$  : チャンネルからマトリクスへの核種移行率 [ $mols/m^2/year$ ]

#### (6.2) マトリクス内移行方程式

(6.1) と同様に、単位体積 (媒体及び空隙水の全体として) 中の核種の物質収支に関して以下の式を得る

$$(\theta_m C_m^{ij})_t = \frac{1}{\xi_m(y)} \left[ \theta_m D_m^i \xi_m(y) (\alpha_m^{ij} C_m^{ij})_y \right] - \sum_{j \neq k} \theta_m R^i (C_m^{ij}, C_m^{ik}) - \lambda^i \theta_m C_m^i + \lambda^{i-1} \theta_m C_m^{i-1},$$

$y$  : マトリクス内の座標

$\theta_m$  : マトリクスの空隙率[-]

$C_m^i(x, y, t)$  : マトリクス内の核種  $i$  の瞬時平衡グループ  $j$  の全体濃度  
[mols/m<sup>3</sup>]

$D_m^i$  : マトリクス内の溶存形の核種  $i$  の実効拡散係数[m<sup>2</sup>/year]

$\xi_m$  : 座標係数 例えば、1次元の Cartesian は  $\xi_m = 1$ ,

1次元の Cylindrical は  $\xi_m = y$

上式において、マトリクス空隙率が時間的に一定であり、かつ空間的にも均一である場合には各微分表現の外に括り出されるため、両辺で相殺されることとなる。

式 (6.1) 及び (6.2) は以下の (可動な形態の) 濃度及びフラックスの連続性条件を介して連立される。

$$(6.3) \quad \alpha_m^{ij} C_m^{ij}(x, y, t) \Big|_{y=0} = \beta_c^{ij} C_c^{ij}(x, t),$$

$$(6.4) \quad F^{ij}(x, t) = D_m^i (\theta_m \alpha_m^{ij} C_m^{ij})_y \Big|_{y=0}.$$

また、(6.1) から (6.4) に加え、以下の初期条件及び境界条件を考慮する。

$$(6.5) \quad C_c^{ij}(x, 0) = C_m^{ij}(x, y, 0) = 0, \quad \forall x \in (0, L), \forall y \in (0, l),$$

$$(6.6) \quad \begin{aligned} v_c \beta_c C_c^{ij}(0, t) - D_c (\beta_c C_c^{ij})_x \Big|_{x=0} &= S_0^{ij}(t), \quad \forall t \geq 0 \\ v_c \beta_c C_c^{ij}(L, t) - D_c (\beta_c C_c^{ij})_x \Big|_{x=L} &= S_L^{ij}(t), \quad \forall t \geq 0 \end{aligned}$$

$$(6.7) \quad (\alpha_m^{ij} C_m^{ij})_{y=l} = 0, \quad \forall t \geq 0$$

$L$  : チャンネルの長さ[m]

$l$  : マトリクス内の浸透深さ[m]

$S_0^i, S_L^i$  : 核種  $i$  の瞬時平衡グループ  $j$  の  $x = 0, L$  におけるフラックス

### 6.2.3 シャドウサブモデル

一般化された移流、分散、マトリクス拡散方程式には、いくつかの未設定のパラメータが含まれている。6.2.2 に述べた定式化において残されている自由度を最大限に活用させて、人工バリア内外の様々なプロセスが引き起こす核種移行への影響をモデル化するために、以下のいくつかのシャドウ関数を定義する。

#### (1) 流速

$m$  番目の数列の  $k$  番目のレグにおける部分的な流れを、 $q_{km} = q_{km}(t) \geq 0, \forall t \geq 0$  とし、そして  $q_{km}(t) \leq q_{k+1,m}(t), \forall t \geq 0$  と仮定すると、このレグにおける全体の流速は以下の式で表せる。

$$(6.8) \quad q_k = \sum_m \text{sgn}(k, m) q_{km}(t),$$

ここで、 $\text{sgn}(k, m)$  は  $m$  番目の数列の  $k$  番目のレグにおける部分的な流れの方向であり、全ての点の集合に任意の順位付けを行うことにより整合的に定義することができる。

#### (2) チャンネルの断面積、単位体積の地下水あたりの表面積及びマトリクス空隙率

チャンネルの断面積  $A_c$ 、及びチャンネルの単位体積の地下水あたりの表面積  $\delta_c$  は任意の合理的（例えば、連続かつ微分可能）な  $x, t$  の関数で有り得る。また、マトリクス空隙率  $\theta_c$  も同様に任意の合理的な  $x, y, t$  の関数で有り得る。

#### (3) 平均拡散係数及び平均移流速度

他のシャドウ関数と異なり、平均拡散係数及び平均移流速度は全体濃度及び地球化学指数、 $\Psi$ 、にも依存しており、以下の様に表現される。

$$(6.9) \quad \begin{aligned} \alpha_m^{ij} &= \alpha_m^{ij}(C_m^{ij}(x, y, t), \Psi(x, y, t)), \\ \beta_c^{ij} &= \beta_c^{ij}(C_c^{ij}(x, t), \Psi(x, 0, t)). \end{aligned}$$

### 6.3 シャドウ関数のための関数形のテンプレート

その生起があり得ないと考えられない様な全てのシステム挙動を取り扱うことが可能であると同時に、シャドウ核種移行モデルの入力パラメーター空間の大きさ (=次元) が計算可能な範囲内に収まる様に、既に述べたシャドウ関数として具体的にどの様なタイプのものを用いるかを最適化することが極めて重要である。以下に、プロトタイプのシャドウ移行モデルに使用可能な関数形のテンプレートをいくつか例示する。最適なシャドウ関数を見出すのに最も有効な方法は、最も単純な形から始め、より複雑な特質はその都度、必要に応じてつけ加えていくというものである。この意味からは、以下に述べる関数は今後、莫大な可能性の範囲を反復的に調べて行くためにのむしろ出発点として取り扱われるべきである。

#### 6.3.1 区分的に線形な関数

シャドウ関数のうち最も単純なものは、1つの変数のみに依存するタイプであり、例としてはある固定された地球化学的指数における平均拡散係数と平均移流速度、及び部分的な流れの流速  $q_{km}(t)$  が挙げられる。一般的に、これらのシャドウ関数は区分的に線形な関数が適している。

#### 6.3.2 n+1次元における楕円体

シャドウ関数のもう一つの単純、しかし重要な種類としては、地球化学的な酸化還元フロントや腐食（または一般的に、鉱物学的劣化・風化）フロントの様な2つの異なる状態の間のフロントの伝播がある。このようなn次元におけるフロントのような構造の伝播を表現するにあたっての出発点はn+1次元の楕円体である。

例えば楕円体を使い以下の様な方法でチャンネルの漸進的な開口あるいは閉鎖をモデル化することができる。

(1)  $(x,t)$ -面において $\Omega_i(x,t)=0$ として楕円を定義し、そして  $i$  番目の数列におけるフロントがそこに在ると仮定する。つまり、
$$a_{ci} = \begin{cases} A_c^0, & \text{if } \Omega_i(x,t) \geq 0 \\ A_c^1, & \text{if } \Omega_i(x,t) < 0 \end{cases};$$

(2) 各々の数列においてフロントの動きを、 $A_c(x,t) = \max_i [a_{ci}(x,t)]$ 、といった簡単なルールによって統合し、与えられた時間及び位置での各チャンネルの横断面積を表現する。

もう一つの例として2重空隙媒体における地球化学指数がある。マトリクス  
の存在により、フロントは2次元的な拡がりを有するが、上記の例と同じ様に楕円体を使ってフロントの伝播をモデル化することができる。

(1)  $(x,y,t)$ 面において $\Omega_i(x,y,t)=0$ として楕円を定義し、そして、 $i$  番目の数列のフロントがそこに在ると仮定する。つまり、
$$\psi_i = \begin{cases} \Psi^0, & \text{if } \Omega_i(x,y,t) \geq 0 \\ \Psi^1, & \text{if } \Omega_i(x,y,t) < 0 \end{cases};$$

(2) 各々の数列においてフロントの動きを、 $\Psi(x,y,t) = \max_i [\psi_i(x,y,t)]$ といった簡単なルールによって統合し、与えられた時間及び位置での地球化学指数を表現する。

#### 6.4 例題についての解析

本節では、具体的な例題を作成する事によりニアフィールド核種移行シャドウモデルの内容を説明する。また、本報告書で取り上げる例題は、標記モデルのテストケースとして新しい version の WASP を用いて SPADE により計算される。

なお、以下で検討する例はシャドウニアフィールド核種移行モデルの「典型的」な問題であるが、モデルの適応範囲内の一部分でしかないと、更なる使用可能範囲は今後更に、探求される必要があることに留意されたい。

##### 6.4.1 核種移行挙動についてのシャドウサブモデル及び環境条件の変遷に関するシャドウ関数の分類

###### (1) 核種移行挙動のシャドウサブモデル

表 6.4.1 に単一チャンネル及びこれに隣接した岩体マトリクスにおける瞬時平衡グループの一般的な移流・分散・マトリクス拡散方程式で使用するパラメータをまとめる。また、ここでも、人工バリア中核種移行シャドウモデルの場合と同様に、以下の二つの瞬時平衡グループに焦点をあてることとする。

瞬時平衡グループ I：溶有イオン及びこれと瞬時平衡が成立している化学形態全てを含む瞬時平衡グループ。

瞬時平衡グループ II：瞬時平衡グループ I のメンバーのいずれかとの間に速度論的反応が有存している化学形態の瞬時平衡グループ。更に、これらは全て不動であると仮定する。

以上の仮定は、瞬時平衡グループ I についてのみ平均拡散係数及び平均移流速度としての移動特性関数を定義すれば良いことを意味している。従って、以下では、瞬時平衡グループを示す添字（即ち、 $j$ ）を省略することとする。

表 6.4.1 一般化された移流・分散・マトリクス拡散方程式で使用するパラメータ

チャンネル内の移行	$A_c$ : チャンネルの断面積 [ $m^2$ ] $D_c$ : チャンネル内の分散係数 [ $m^2/year$ ] $q_c$ : チャンネル内の地下水流速 [ $m^3/year$ ] $\beta_c^i$ : 核種 $i$ の瞬時平衡グループ I の平均移流速度 [-] $R^i$ : 瞬時平衡グループ I から II への速度論的反応速度 [ $mols/m^3/year$ ] $\lambda^i, \lambda^{i-1}$ : 核種 $i$ 及びその親核種の崩壊定数 [ $1/year$ ] $\delta_c$ : 単位体積の水流あたりの表面積 [ $m^2/m^3$ ] $L$ : チャンネルの長さ [ $m$ ]
マトリクス内の移行	$\theta_m$ : マトリクスの空隙率 [-] $D_m^i$ : マトリクス内の溶存形の核種 $i$ の拡散係数 [ $m^2/year$ ] $\alpha_m^i$ : 核種 $i$ の平均拡散速度 [-] $\xi_m$ : 座標係数 例えは、1次元直交座標では $\xi_m = 1$ , 1次元円筒座標では $\xi_m = y$ $l$ : マトリクス内の浸透深さ [ $m$ ]

さらに、核種移行挙動についてのパラメーターを以下の様に細分化する。

### 分散係数

$$(6.4.1) \quad D_c = dLv_c,$$

$d$  :  $L$ により規格化された分散長

$v_c$  : 地下水流速度 ( $=q_c/A_c$ ) [m/year]

注：(6.4.1) は  $d$  を数値解析用メッシュの規格化された長さ (=グリッド数の逆数  $1/n$ ) と直接比較できる為、元の数式より都合が良い。またグリッド内のペクレ数  $Pe$  が必ず  $Pe < 1$  を満たす様に以下の条件を追加する。

$$(6.4.2) \quad d > \frac{1}{n}.$$

### 拡散及び移流による移行

人工バリア中核種移行シャドウモデルと同様に、以下の条件を仮定して、平均拡散係数及び平均移流速度による移行を区分的に線形な関数で表現する。

- ・コロイドの様に可動な固体はチャンネル内にしか存在しない。
- ・全てのマスが最も移行性の高い化学状態 (マトリクス内の溶解イオン及びチャンネル内のコロイド) にある時の値を平均の移行性は超えることができない。
- ・地球化学的異常内における平均移行特性は、通常の化学条件での平均移行特性を全体的に移動したものとして表される。

$$(6.4.3) \quad \alpha_m^i C_m^i = \min \left[ C_m^i, \frac{C_m^{i_0}}{R_\alpha^i} \left\{ 1 + \left( \frac{C_m^i}{C_{\alpha 1}^{i*}} \right)^{d_1} \right\}^{\frac{a_1^i - a_i^i}{d_1}} \left\{ 1 + \left( \frac{C_m^i}{C_{\alpha 2}^{i*}} \right)^{d_2} \right\}^{\frac{-a_i^i}{d_2}} \right],$$

$$\beta_c^i C_c^i = \min \left[ m C_c^i, \left\{ 1 - \text{Heaviside}[C_c^i - C_{\beta 3}^{i*}] \right\} \frac{C_c^{i b_0^i}}{R_\beta^i} \left\{ 1 + \left( \frac{C_c^i}{C_{\beta 1}^{i*}} \right)^{d_1} \right\}^{\frac{-b_0^i}{d_1}} \left\{ 1 + \left( \frac{C_c^i}{C_{\beta 2}^{i*}} \right)^{d_2} \right\}^{\frac{b_2^i}{d_2}} \right. \\ \left. + \text{Heaviside}[C_c^i - C_{\beta 3}^{i*}] \frac{C_{\beta 3}^{i* b_0^i}}{R_\beta^i} \left\{ 1 + \left( \frac{C_{\beta 3}^{i*}}{C_{\beta 1}^{i*}} \right)^{d_1} \right\}^{\frac{-b_0^i}{d_1}} \left\{ 1 + \left( \frac{C_{\beta 3}^{i*}}{C_{\beta 2}^{i*}} \right)^{d_2} \right\}^{\frac{b_2^i}{d_2}} \right]$$

但し、

$C_c^i, C_m^i$  : 核種  $i$  の瞬時平衡グループ I のチャンネル及びマトリクス中での全  
体濃度

$C_{\alpha k}^{i*}$  及び  $C_{\beta k}^{i*}$  : 節点の位置、 $C_{\alpha k}^{i*} \leq C_{\alpha k+1}^{i*}, C_{\beta k}^{i*} \leq C_{\beta k+1}^{i*}$

$a_k^i, b_k^i$  : 拡散及び移流による移行性の  $k$  番目の区分の角度、 $d_k$  は節点の堅さ

$R_\alpha^i$  及び  $R_\beta^i$  : 低濃度領域に於ける遅延係数

$m$  : コロイドの可動性 (移流) の係数

注：容易にチェックできる様に、(6.4.3) は  $\log(\alpha_M^i C_m^i)$ 、及び  $\log(\beta_M^i C_m^i)$  を殆ど  
の場所で線形な関数でありながら、微分可能な、「殆ど区分的に線形な関数」  
として表す。

設点濃度、 $C_{\alpha k}^{i*}(\Psi)$ 、及び  $C_{\beta k}^{i*}(\Psi)$  は地球化学指数  $\Psi : (x, y, t) \rightarrow \{0, 1\}$  に依存して  
おり、以下の数式で表される。

$$(6.4.4) \quad \begin{aligned} \text{Log} C_{\alpha k}^{i*}(1) &= \text{Log} C_{\alpha k}^{i*}(0) + K, \\ \text{Log} C_{\beta k}^{i*}(1) &= \text{Log} C_{\beta k}^{i*}(0) + K, \\ K &\geq 0. \end{aligned}$$

注：もし  $\Psi(x, y, t) = 0$ 、ならば  $(x, y, t)$  は通常の化学条件に対応した領域内にあるとし、  
もし  $\Psi(x, y, t) = 1$ 、ならば  $(x, y, t)$  は変則的な化学条件に対応した領域内にあるとする。

### 速度論的反應速度

再び、人工バリア中核種移行シャドウモデルと同様に、瞬時平衡グループ I  
から II への速度論的反應速度を以下のように定式化する。

$$(6.4.5) \quad \begin{aligned} R_c^i &= -\mu_{c1}^i(1-\alpha_c^i)C_c^i + \mu_{c2}^i S_c^i, \\ R_m^i &= -\mu_{m1}^i(1-\beta_m^i)C_m^i + \mu_{m2}^i S_m^i, \end{aligned}$$

但し、

$\mu_{mk}^i, \mu_{ck}^i$  : 反応速度定数

$S_m^i, S_c^i$  : 瞬時平衡グループ II の核種 i の濃度

## (2) 環境条件変遷を記述するシャドウ関数の分類

つぎに、一般化された移流・分散・マトリクス拡散方程式及び式 (6.4.1) から (6.4.5) のパラメーターをシャドウ関数で表し、環境条件の変遷が核種移行に及ぼし得る影響をどの様にモデル化するかを検討する。このため、前述したパラメーターを以下の基準に従い分類する。

- ・ 時間依存性があるか否か
- ・ 空間的に一定か不均一性を有するか

さらに空間的不均一性については、以下の種類のものを考慮する。

- ・ それぞれのレグで一定
- ・ チャンネル内で不均一
- ・ マトリックス内で不均一

テストケースのための分類を、表 6.4.2 にまとめる。しかし、これは単に一例でしかなく、評価に使用する分類を適切に定義するためには、様々な分野の専門家の意見を必要とする。

表 6.4.2：環境条件変化のためのシャドウ関数の分類

	時間に依存しない	時間依存
一定	一般的な分散の長さ, $D_c$ 速度論的反応速度定数, $m$	
それぞれのレグで一定	チャンネルの長さ, $L$ マトリクス内の浸透深さ, $l$ 流速, $q_c$ チャンネルの断面積, $A_c$ 単位体積の地下水あたりの表面積, $d_c$	(流速, $q_c$ )* (チャンネルの断面積, $A_c$ )* (単位体積の地下水あたりの表面積, $d_c$ )*
チャンネル内での変化		地球化学指数, $Y$
マトリクス内での変化		マトリクス空隙率, $q_m$ 地球化学指数, $Y$

注1：時間に依存した流速、チャンネルの断面積及び単位体積の地下水あたりの表面積についてのケースも、代替的テストケースとして考慮する。

注2：崩壊定数等の明らかなものを除き、全てのパラメーターが時間と空間の関数として表現できる様に、ニアフィールド核種移行シャドウモデル自体も柔軟にプログラムするものとする。

#### 6.4.2 チャンネルネットワーク及び環境条件の例

##### (1) チャンネルネットワーク

図 6.4.1 は 6.2 に述べた手法により統計的に作られたチャンネルネットワークの例である。

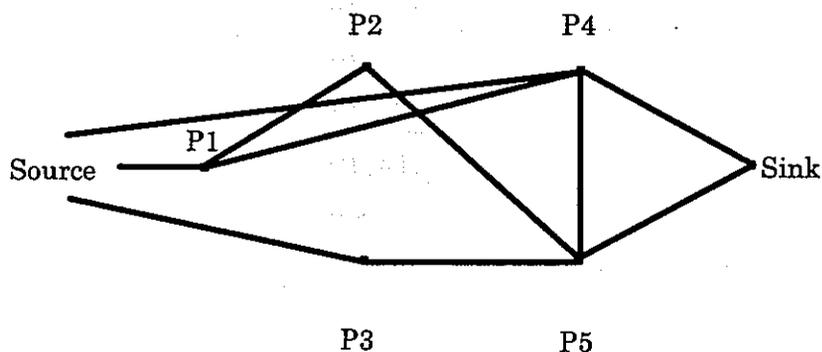


図 6.4.1 テストケースの対象とするチャンネルネットワークの例

表 6.4.3 に、この例においてそれぞれの点に相当する疑似順位をまとめる。P 4 及び P 5 は同一のランクに属するため、レグ (P 4, P 5) の流れの方向が逆に成ることも可能である。

表 6.4.3 チャンネルネットワークに含まれる点及びこれらのランク

ランク	点
1	P1
2	P2, P3
3	P4, P5

(2) 形状及び流れ

簡単化のため、チャンネルネットワークに含まれている 10 個のレグに表 6.4.4 に示す様な番号付けを行う。また、表 6.4.5 に示すように 長さ  $L$ 、断面積  $A_c$ 、マトリクス内の浸透深さ  $l$ 、及び単位体積の地下水あたりの表面積  $\delta c$  は統計的にサンプルされた値を用いることとする。

表 6.4.4 レグの番号

番号	レグ
1	{Source, P1}
2	{Source, P3}
3	{Source, P4}
4	{P1, P2}
5	{P1, P4}
6	{P2, P5}
7	{P3, P5}
8	{P4, P5}
9	{P4, Sink}
10	{P5, Sink}

表 6.4.5 各レグの形状

レグの番号	長さ[m]	断面積[m <sup>2</sup> ]	マトリクス内の浸透深さ[m]	単位体積の地下水あたりの表面積[m <sup>2</sup> ]
1	9.73	3.82e-6	0.176	4.99e-4
2	2.07	8.26e-5	0.339	5.50e-4
3	4.49	3.40e-5	0.164	7.54e-4
4	9.37	9.36e-5	0.432	2.25e-4
5	3.29	9.82e-6	0.104	2.15e-5
6	0.714	5.77e-5	0.762	8.04e-4
7	0.985	5.39e-5	0.50	9.02e-4
8	8.91	7.12e-5	0.917	8.95e-4
9	4.42	3.73e-5	5.87e-3	5.78e-4
10	5.05	4.37e-5	0.223	1.38e-4
範囲 (分布)	0 ~ 1e1 (一様)	0 ~ 1e-4 (一様)	0 ~ 1 (一様)	0 ~ 1e-3 (一様)

地下水流の分布を考慮して、表 6.4.6 に示す様な 4 つの部分的な流れを作り、それらを統合することにより例 1 の時間に依存しない流れを定義する。

表 6.4.6 例 1 に於ける流速分布(x 1e-6 [m<sup>3</sup>])

	部分的な 流れ 1	部分的な 流れ 2	部分的な 流れ 3	部分的な 流れ 4	全体の流れ
レグ 1	1	1	0	0	2
レグ 2	0	0	1	0	1
レグ 3	0	0	0	1	1
レグ 4	0	3	0	0	3
レグ 5	1	0	0	0	1
レグ 6	0	5	0	0	5
レグ 7	0	0	1	0	1
レグ 8	0	0	-4	3	-1
レグ 9	4	0	7	0	11
レグ 10	0	5	0	3	8

また、以下に示す“スイッチ”関数を導入し、例2の時間依存性の流れの分布を表6.4.7に示す様に定義する。

$$\gamma^+(t) = \frac{3}{4} + \tanh[s(t-t^*)]$$

$$\gamma^-(t) = \frac{3}{4} - \tanh[s(t-t^*)]$$

但し、sは定数である。

明らかに、小さいtでは $\gamma$  ( $\bar{\gamma}$ )は1/2 (1)に近く、 $t > t^*$ の場合1 (1/2)に近づく。

表6.4.7 例2に於ける流速分布(x 1e-6 [m<sup>3</sup>])

	部分的な 流れ 1	部分的な 流れ 2	部分的な 流れ 3	部分的な 流れ 4	全体の流れ
レグ 1	$\bar{\gamma}$	$\bar{\gamma}$	0	0	$\bar{\gamma} + \bar{\gamma}$
レグ 2	0	0	$\bar{\gamma}^+$	0	$\bar{\gamma}^+$
レグ 3	0	0	0	$\bar{\gamma}$	$\bar{\gamma}$
レグ 4	0	$3\bar{\gamma}$	0	0	$3\bar{\gamma}$
レグ 5	$\bar{\gamma}^+$	0	0	0	$\bar{\gamma}^+$
レグ 6	0	$5\bar{\gamma}$	0	0	$5\bar{\gamma}$
レグ 7	0	0	$\bar{\gamma}^+$	0	$\bar{\gamma}^+$
レグ 8	0	0	$-4\bar{\gamma}^+$	$3\bar{\gamma}$	$-4\bar{\gamma}^+ + 3\bar{\gamma}$
レグ 9	$4\bar{\gamma}^+$	0	$7\bar{\gamma}^+$	0	$11\bar{\gamma}^+$
レグ 10	0	$5\bar{\gamma}$	0	$3\bar{\gamma}$	$8\bar{\gamma}$

また、テストケース2では、s及びt\*をそれぞれ以下のように定義する。

$$s=10,$$

$$t^*=1e4 \text{ 年}$$

注： テストケース2のレグ8の流れの方向は約t=1e4年後に逆になる。

### (3) 地球化学

つぎに、微分形式のテンプレート (6.3 参照) を使って、地球化学シャドウ関数を定式化する。また、ここで、昨年度の研究[4]で開発した“シャープフロント”近似を用いた2次元の地球化学シャドウサブモデルをそのプロトタイプとして考慮する。

まず始めに、各レグでの地球化学異常の“フロント”及び“テイル”を定義する。ただし、両方向の流れが可能なレグにおいては、“フロント”及び“テイル”のセットを2組考慮する必要があるため、“一方通行”のレグのフロント及びテイルには各々のレグと同じ番号を付け、両方向の流れが可能なレグについては、その後に“逆方向”のフロント及びテイルの番号を付ける。この結果、前項で取り上げた例では以下の様なフロントの番号付けができる。

表 6.4.8 フロント及びテイルの番号

フロント及びテイルの番号	レグの番号
1	1
2	2
3	3
4	4
5	5
6	6
7	7
8	8
9	9
10	10
11	-8

注：“-”マークは流れが逆方向であることを意味している。

さて、各レグのチャンネル上の点として、各フロント及びテイルを  $f_i(t)$  及び  $g_i(t)$ ,  $i=1, 2, \dots, 11$ , とそれぞれ定義し、つぎに、集合論的関数 UP を次の様に定義

する： $f_i(t)$  及び  $g_i(t)$ ,  $i=1, 2, \dots, 11$ , の上流に接続するフロント及びテイルの番号を  $UP(i)$  とする。例えば、 $UP(10) = \{6, 7, 8\}$ 。

更に、表 6.4.8 にまとめた各フロントとレグの対応性を写像  $LG$  として表現する。

これらに基づき、 $f_i(t)$  及び  $g_i(t)$ ,  $i=1, 2, \dots, 11$ , についての微分形式のシャドウモデル (6) ~ (8) を以下の仮定に従いながら設定する。

(C1) 各レグは同時には 1 組のフロント及びテイルのセットしか有さない。

(C2) フロント及びテイルは流れと同じ方向に、一定の速度で伝播し、それは流速に比例して一定の割合で遅延されている。

(C3) あるレグのフロントは最低 1 つの“上流側”レグのフロントが終点到達すると伝播し始める。

(C4) あるレグのテイルはそのレグのフロントの伝播が既に始まっており、かつ、そのレグより上流側のレグ全てが以下の条件を満たすと伝播し始める。

(a) 上流側のレグのテイルが終点到達する

又は

(b) 上流のレグのフロントが終点到達していない

(C5) 一度伝播し始めると、フロント及びテイルは終点到達するまで、又は (C6) が起こるまで伝播し続ける。

(C6) 同一のレグのテイルがフロントに追いつくと、地球化学異常は終了し、フロント及びテイルの両点がスタート地点に戻る (リセット)。

(6.4.6)

$$\frac{df_i}{dt} =$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{q_{cLG(i)}}{A_{cLG(i)}} \frac{1}{Y_{fLG(i)}}, \text{ if } 0 < f_i(t) < L_{LG(i)} \text{ and} \\ \langle g_i(t) < f_i(t), (LG(i) > 0) \text{ or } g_i(t) > f_i(t) (LG(i) < 0) \rangle, \\ \text{or} \\ \text{if } \left\{ \begin{array}{l} f_i = 0 \text{ and } \text{Max}_{k \in UP(i)} [f_k - L_{LG(k)}] \geq 0 \text{ and } q_{cLG(i)} \geq 0, (LG(i) > 0) \\ f_i = L_{LG(i)} \text{ and } \text{Max}_{k \in UP(i)} [-f_k] \geq 0 \text{ and } q_{cLG(i)} \leq 0, (LG(i) < 0) \end{array} \right. \\ \\ 0, \text{ if } \left\{ \begin{array}{l} f_i = 0 \text{ and } \langle \text{Max}_{k \in UP(i)} [f_k - L_{LG(k)}] < 0 \text{ or } q_{cLG(i)} < 0 \rangle \text{ and} \\ \langle (LG(i) > 0) \text{ or } g_i(t) > f_i(t) (LG(i) < 0) \rangle \\ f_i = L_{LG(i)} \text{ and } \langle \text{Max}_{k \in UP(i)} [-f_k] < 0 \text{ or } q_{cLG(i)} > 0 \rangle \\ \langle (LG(i) < 0) \text{ or } g_i(t) < f_i(t) (LG(i) > 0) \rangle \end{array} \right. \\ \\ -V_{reset} \text{ if } g_i(t) \geq f_i(t) > 0, (LG(i) > 0) \\ V_{reset} \text{ if } g_i(t) \leq f_i(t) < L_{LG(i)}, (LG(i) < 0) \end{array} \right.$$

$$f_i(0) = \begin{cases} 0, & LG(i) > 0 \\ L_{LG(i)} & LG(i) < 0 \end{cases}$$

(6.4.7)

$$\frac{dg_i}{dt} =$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{q_{cLG(i)}}{A_{cLG(i)}} \frac{1}{Y_{gLG(i)}}, \text{ if } 0 < g_i(t) < L_{LG(i)} \text{ and} \\ \quad \langle g_i(t) < f_i(t), (LG(i) > 0) \text{ or } g_i(t) > f_i(t) (LG(i) < 0) \rangle, \\ \quad \text{or} \\ \quad \text{if } \left\{ \begin{array}{l} g_i = 0 \text{ and } \text{Min}_{k \in UP(i)} [\text{Max}[g_k - L_{LG(k)}, L_{LG(k)} - f_k]] \geq 0 \text{ and } q_{cLG(i)} \geq 0 \\ \quad \text{and } f_i > 0, (LG(i) > 0) \\ g_i = L_{LG(i)} \text{ and } \text{Min}_{k \in UP(i)} [\text{Max}[-g_k, f_k - \varepsilon]] \geq 0 \text{ and } q_{cLG(i)} \leq 0 \\ \quad \text{and } f_i < L_{LG(i)}, (LG(i) < 0) \end{array} \right. \\ \\ 0, \text{ if } \left\{ \begin{array}{l} g_i = 0 \text{ and } \langle \text{Min}_{k \in UP(i)} [\text{Max}[g_k - L_{LG(k)}, L_{LG(k)} - f_k]] < 0 \text{ or } q_{cLG(i)} < 0 \text{ or } f_i \leq 0 \rangle \text{ and} \\ \quad \langle (LG(i) > 0) \text{ or } g_i(t) > f_i(t) (LG(i) < 0) \rangle \\ g_i = L_{LG(i)} \text{ and } \langle \text{Max}_{k \in UP(i)} [\text{Max}[-g_k, f_k - \varepsilon]] < 0 \text{ or } q_{cLG(i)} > 0 \text{ or } f_i \geq L_{LG(i)} \rangle \text{ and} \\ \quad \langle (LG(i) < 0) \text{ or } g_i(t) < f_i(t) (LG(i) > 0) \rangle \end{array} \right. \\ \\ -V_{reset} \text{ if } g_i(t) \geq f_i(t) > 0, (LG(i) > 0) \\ V_{reset} \text{ if } g_i(t) \leq f_i(t) < L_{LG(i)}, (LG(i) < 0) \end{array} \right.$$

$$g_i(0) = \begin{cases} 0, & LG(i) > 0 \\ L_{LG(i)}, & LG(i) < 0 \end{cases}$$

但し、

$Y_r, Y_g$  : フロント及びテイルの伝播の遅延係数

$\varepsilon$  : (十分小さい) 正の定数

$V_{reset}$  : (十分大きい) 正の定数

また、source での伝播の開始を他のレグと同様に扱うため、「ダミー」のフ

フロント、 $f_0(t)$ 、及びテイル、 $g_0(t)$ 、を以下のように定義する。

$$(6.4.8) \quad f_0(t) = \begin{cases} 0, & t < t_f \\ 1, & t \geq t_f \end{cases}$$

$$g_0(t) = \begin{cases} 0, & t < t_g \\ 1, & t \geq t_g \end{cases}$$

但し、 $t_f$ 、 $t_g$ は正の定数であり、また(6.4.6)及び(6.4.7)をsourceとながっているレグにも適用出来る様に $L_0=1$ とする。物理的な観点からすると、 $t_f$ 、 $t_g$ は地球化学異常の始まりと終わりの時間にそれぞれ相当する。また、「リセット」機能(C6)により、必要に応じてこのような異常が繰り返し考慮可能である。なお、同じ様な方法により地球化学異常をsource以外の点から開始することもできる。

ここで取り上げているテストケースでは、 $t_f = 5e4$ 年及び $t_g = 7.5e4$ 年と設定する。各レグでの遅延係数はレグ毎に一定と仮定し、 $0 \sim 100$  ( $Y_f$ )及び $0 \sim 50$  ( $Y_g$ )の範囲から統計的にサンプリングする。表6.4.9に本例のためにサンプリングした数値をまとめる。

表6.4.9 ヘッド及びテイルの遅延係数

レグ	$Y_f$ [-]	$Y_g$ [-]
1	29.9	0.140
2	0.336	48.7
3	15.2	28.9
4	90.7	9.77
5	13.7	16.6
6	66.3	25.7
7	36.4	25.6
8	36.0	26.9
9	20.8	48.0
10	30.1	38.2

地球化学異常の生成及び消滅についての計算結果を図6.4.2にまとめる。ここで、チャンネルに沿った地球化学指数 $\Psi(x, 0, t)$ は、地球化学異常の中では1、

それ以外の場合は0である。

つぎに、以下の仮定に基づき、 $i$  番目のレグに隣接した岩体のマトリクス中のフロント及びテイルの挙動を定式化する。

(M1) フロント  $fm_i(x, t)$  は、チャンネル上の点  $x$  が地球化学異常に属する場合、チャンネルからマトリクスへの移行を開始する。

(M2) フロントが既にマトリクス内にある場合 (つまり  $fm_i(x, t) > 0$ )、点  $x$  が地球化学異常にもはや属さなくなった時点でフロントは停止する。

(M3) テイル  $gm_i(x, t)$  は、点  $x$  が地球化学異常に属さず、フロントがマトリクス中にある場合 (つまり  $fm_i(x, t) > 0$ )、チャンネルからマトリクスへの移行を開始する。

(M4) マトリクス中でテイルがフロントに追いつくと地球化学異常は消滅し、フロント及びテイルの両点がスタート地点に戻る (リセット)。

さらに、簡易化のために、以下を仮定する。

(M5) フロント (テイル) の伝播速度はフロント (テイル) の位置のべき乗に比例する。

特に、本テストケースにおいては、以下を仮定する。

(M5') フロント (テイル) の伝播の速度は、フロント (テイル) の位置に反比例する (つまり、べき = -1)。

物理的には、(M5') はマトリクス拡散が準定常状態にあるという仮定に相当する。

さて、(M1) から (M5') に基づき以下の様にフロント及びテイルの挙動を定式化する。

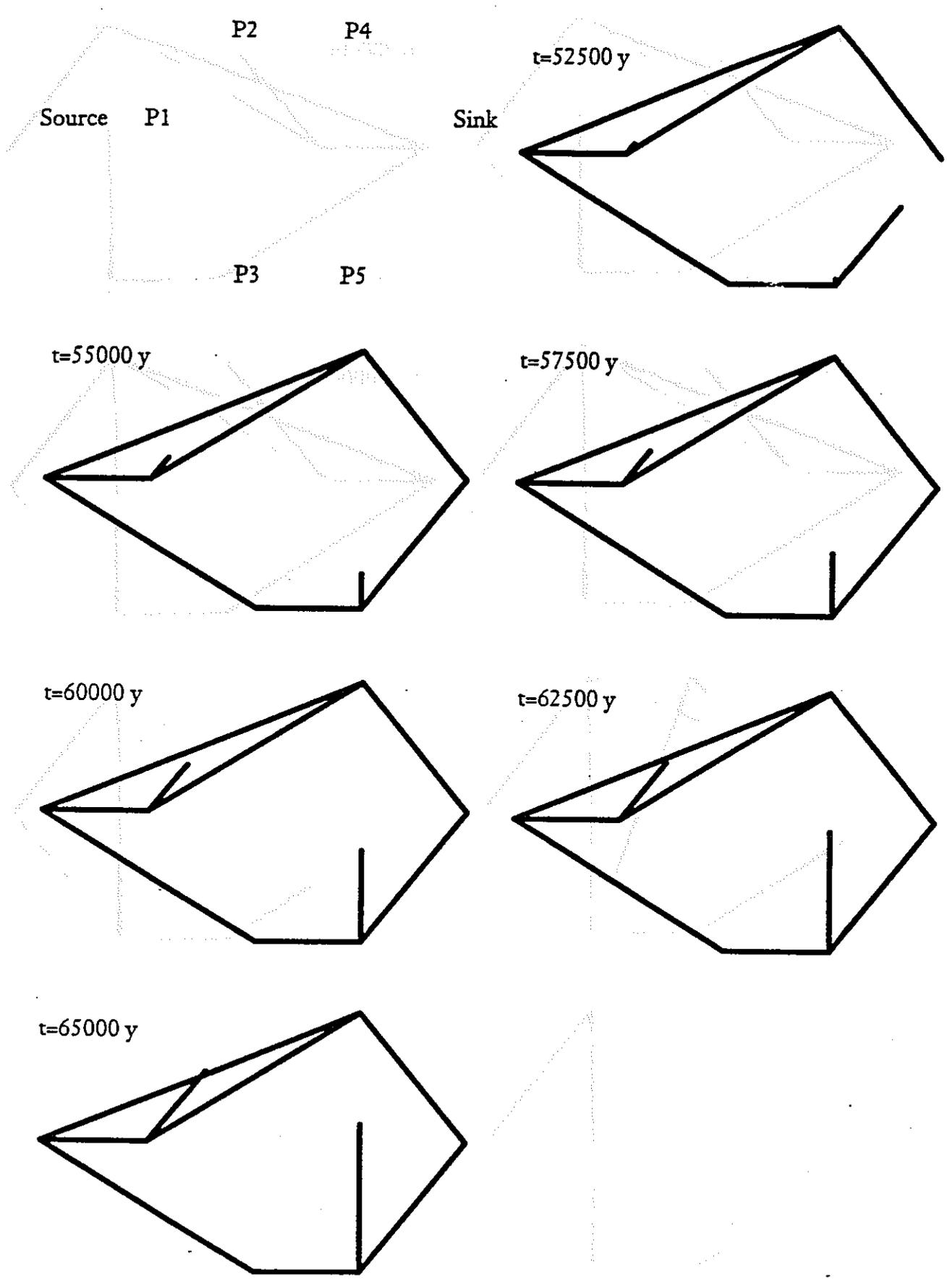


図 6.4.2 チャンネルに沿った地球化学異常の生成及び消滅の例 (1)

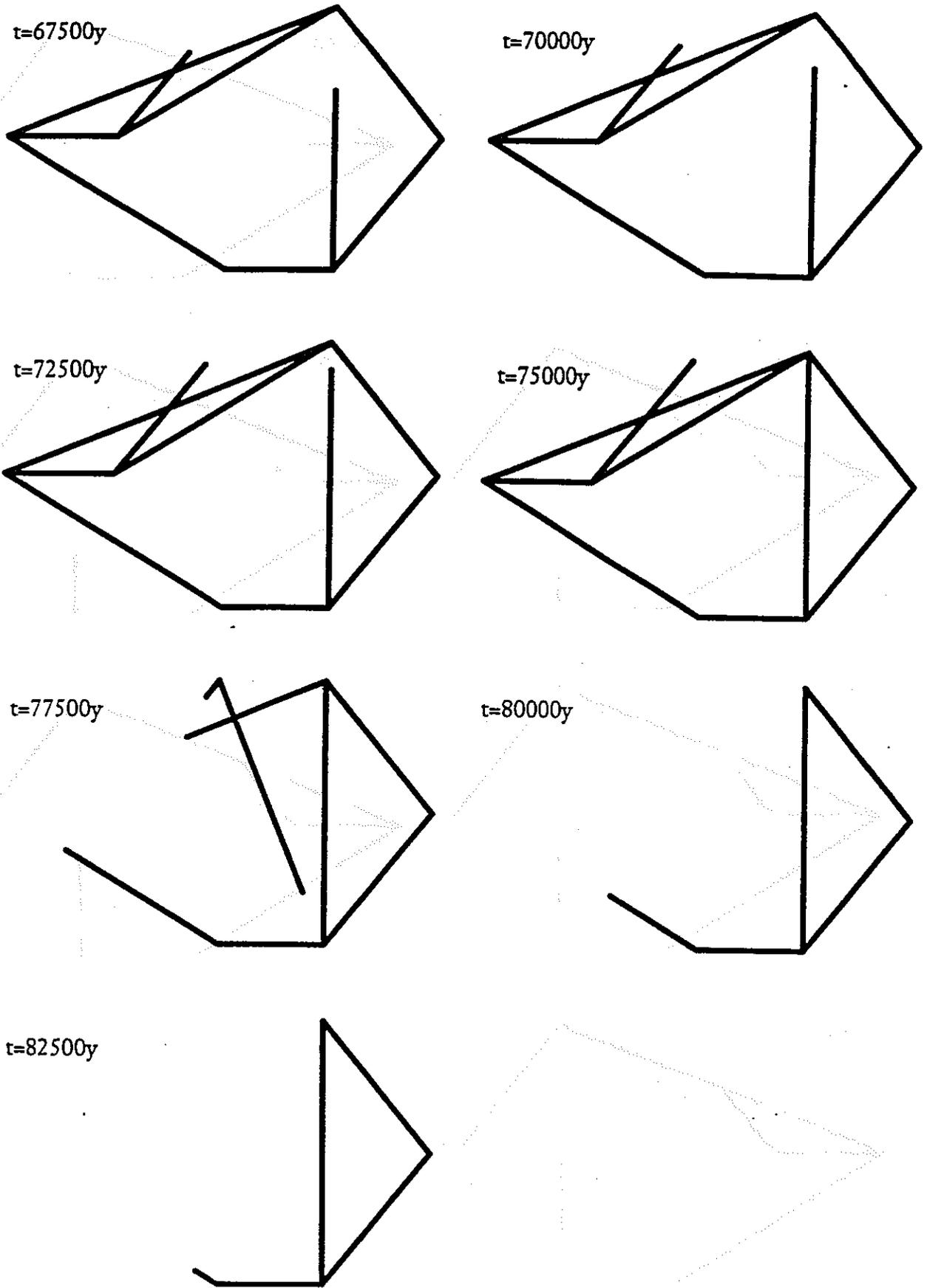


図 6.4.2 チャンネルに沿った地球化学異常の生成及び消滅の例 (2)

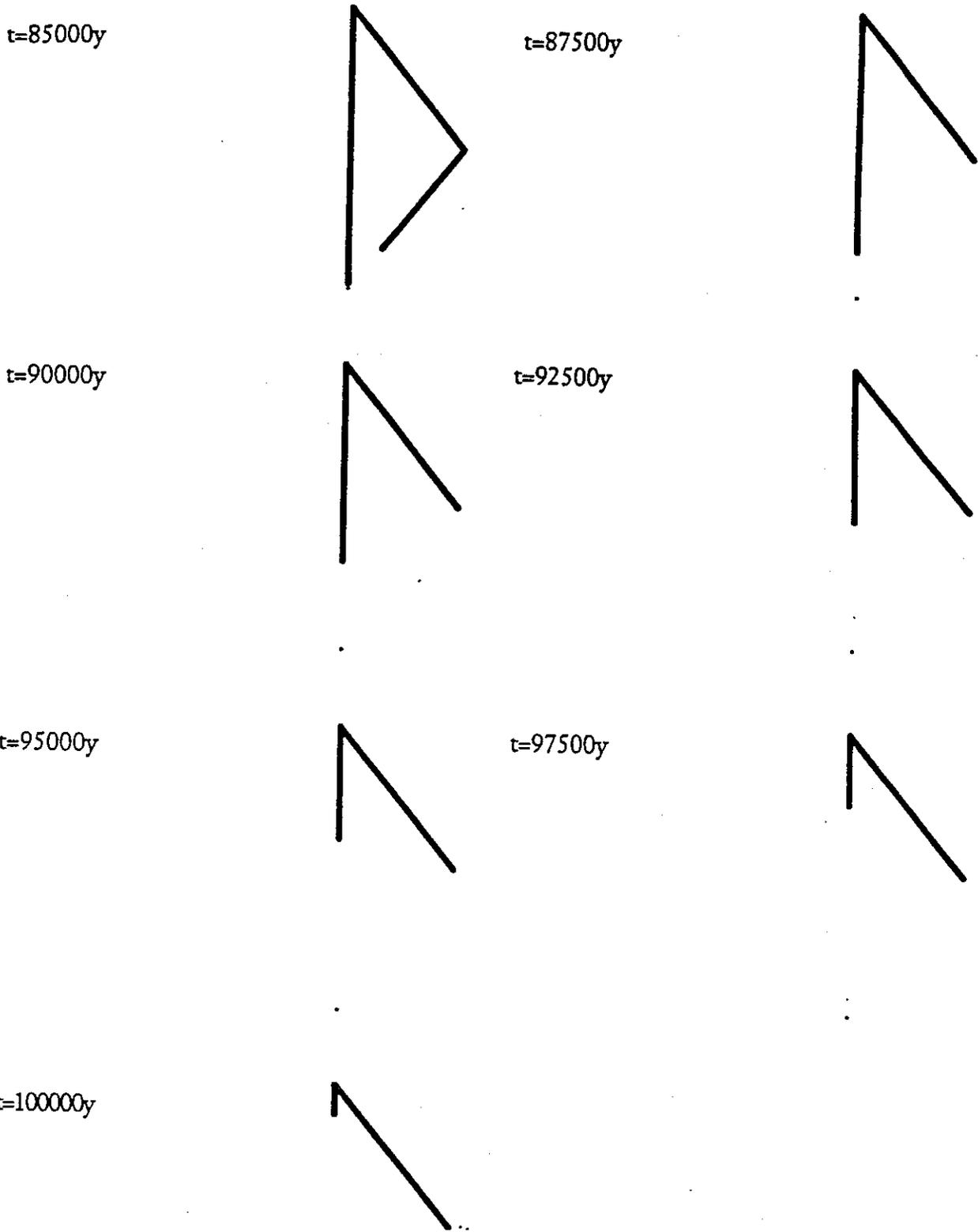


図 6.4.2 チャンネルに沿った地球化学異常の生成及び消滅の例 (3)

(6.4.9)

$$\frac{df_{mi}}{dt} = \begin{cases} \theta_m \frac{D_m}{Y_f f_{mi}}, & \text{if } 0 \leq f_{mi} < l_i \text{ and} \\ & \langle g_j(t) < x \leq f_j(t), (LG(j) = i) \text{ or } g_j(t) > x \geq f_j(t), (LG(j) = -i) \rangle \\ 0, & \text{if } f_{mi} = l_i > g_{mi} \text{ or} \\ & \langle g_j(t) \geq x > 0, (LG(j) = i) \text{ or } g_j(t) \leq x < L_j, (LG(j) = -i) \rangle \text{ or} \\ & \langle f_j(t) < x < L_j, (LG(j) = i) \text{ or } f_j(t) > x > 0, (LG(j) = -i) \rangle \\ -D_{Reset}, & \text{if } 0 < f_{mi} \leq g_{mi}, \end{cases}$$

$$f_{mi}(0) = 0,$$

(6.4.10)

$$\frac{dg_{mi}}{dt} = \begin{cases} \theta_m \frac{D_m}{Y_g f_{mi}}, & \text{if } 0 \leq g_{mi} < l_i \text{ and} \\ & \langle g_j(t) \geq x > 0, (LG(j) = i) \text{ or } g_j(t) \leq x < L_j, (LG(j) = -i) \rangle \\ 0, & \text{if } g_{mi} = 0 \text{ and} \\ & \langle g_j(t) < x < L_j, (LG(j) = i) \text{ or } g_j(t) > x > 0, (LG(j) = -i) \rangle \\ -D_{Reset}, & \text{if } 0 < f_{mi} \leq g_{mi}, \end{cases}$$

$$g_{mi}(0) = 0,$$

但し、 $D_{Reset}$  は (十分に大きい) 正の定数

地球化学異常の伝播は、マトリクス中の緩衝作用を有する鉱物の消費に伴うものであり、従って一般にフロントの前後で、即ち地球化学異常の内と外とでマトリクスの鉱物組成は異なる。このことから、マトリクス空隙率は、一次鉱物の消費が二次鉱物の生成量を体積的に上回る場合には増加し、逆の場合には低下することとなる。以下の例では、このうち前者の状況を想定して、マトリクスの空隙率  $\theta_m(x, y, t)$  と地球化学指数の間には、以下に記す単純な関係が成り立つものと仮定する。

$$(6.4.11) \quad \theta_m(x, y, t) = \begin{cases} 0.01, & \text{if } \Psi(x, y, t) = 0 \\ 0.1, & \text{if } \Psi(x, y, t) = 1. \end{cases}$$

図 6.4.3 に  $D_m = 0.01 \text{ m}^2/\text{年}$  の値を使用し、マトリクス内の地球化学異常の生成と消滅とを計算した結果を示す。

### 6.4.3 テストケース

#### (1) 単一レグケース

表 6.4.10 に示す条件で、単一のレグから成る系を作成した。また、核種移行特性としては表 6.4.11 に示す規格化平均拡散係数及び移流速度を用いる。なお、表記は人工バリア中の核種移行と同一である。

表 6.4.10 単一レグモデルの解析条件

	設定値
$A_c$	$1.0 \text{ E-}5 \text{ m}^2$
$L$	$1 \text{ E}3 \text{ m}$
$D_c$	$=dL q_c / A_c$ ( $d=0.1$ )
$q_c$	$1 \text{ E-}5 \text{ m}^3/\text{yr}$
$\delta_c$	$4 \text{ E}3 \text{ m}^{-1}$
$q_m$	1
$\theta_m$	0.01
$D_m$	$1.0 \text{ E-}5 \text{ m}^2/\text{yr}$
$\lambda$	$0 \text{ yr}^{-1}$

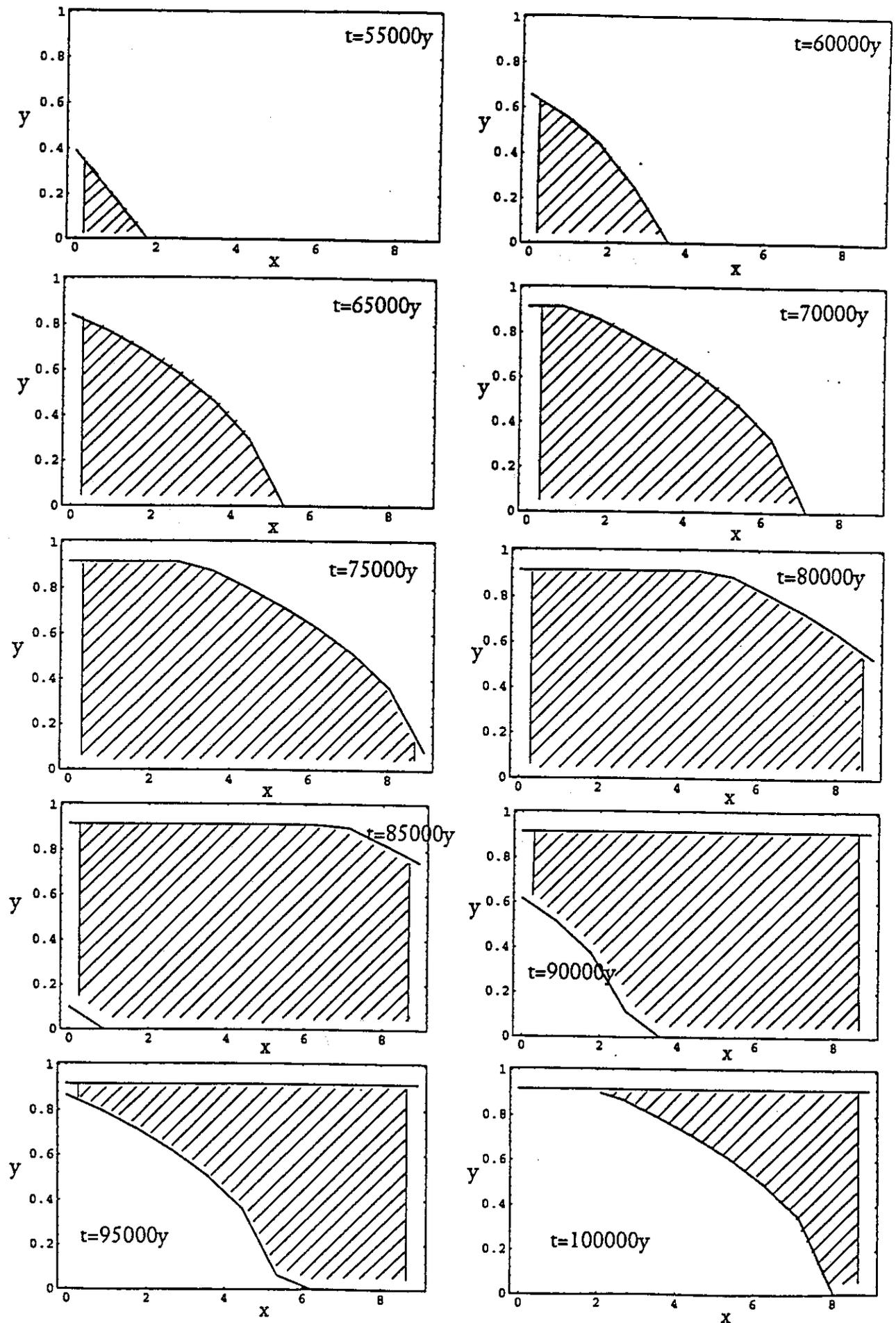


図 6.4.3 レグ [P4, P5]のマトリクス中に於ける地球化学異常の生成及び消滅の例

表 6.4.11 規格化平均拡散係数及び移流速のパラメータ値

	設定値
$a_0$	1
$a_1$	0
$b_0$	1
$b_1$	0
$m$	0.01
$c_{\alpha 1}^*$	100
$c_{\alpha 2}^*$	200
$c_{\beta 1}^*$	100
$c_{\beta 2}^*$	200
$c_{\beta 3}^*$	300
$R_\alpha$	100
$R_\beta$	100
$K$	0
$d_1$	10
$d_2$	10

上流側境界条件としては濃度固定（総濃度=100）、下流側境界条件としては濃度勾配 0 と設定した。なお、同表から明らかな通り、この例においては解析対象核種は安定同位体であるとし、また、地球化学異常における溶解度変化は考慮されていない。

解析結果として得られたチャンネル内及びマトリクス中の総濃度分布の時間変化を図 6.4.4~6 に示す。また、この解析結果においては、各点での濃度の連続性及び物質収支の確認、及び定常時の解析解との比較により基本的な検証がなされている。

## (2) 複数レグケース

(1) の単一レグの問題を、複数のより小さいレグに分割することによって、ジョイント部の濃度及びフラックスの連続性の確認を行った。結果を図 6.4.7 に示す。

Concentration profiles at increasing times in the channel for a single leg model

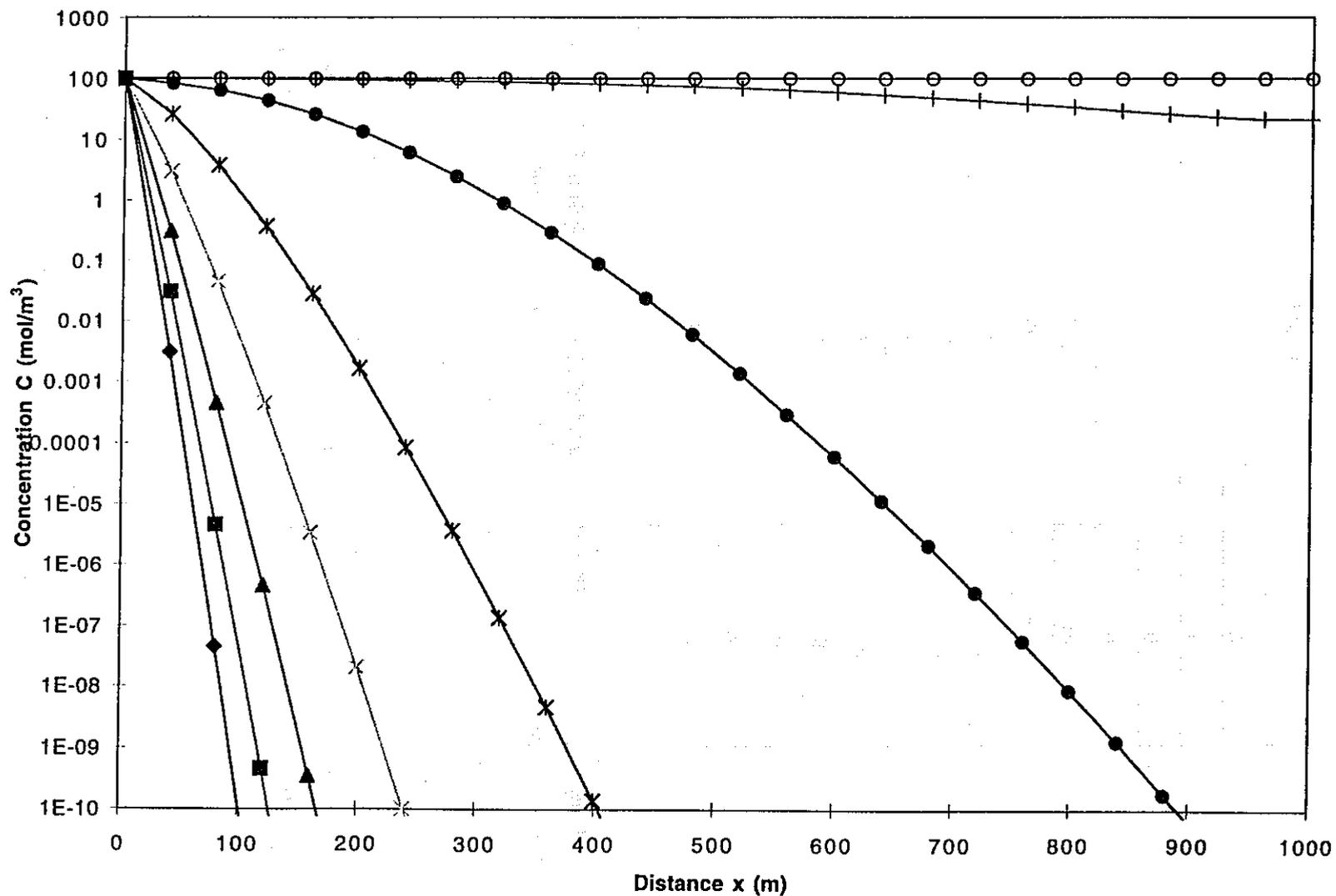


図 6.4.4 単一レグケースにおけるチャンネル内総濃度分布の時間変化

Concentration at increasing times in the matrix at x=40m for a single leg model

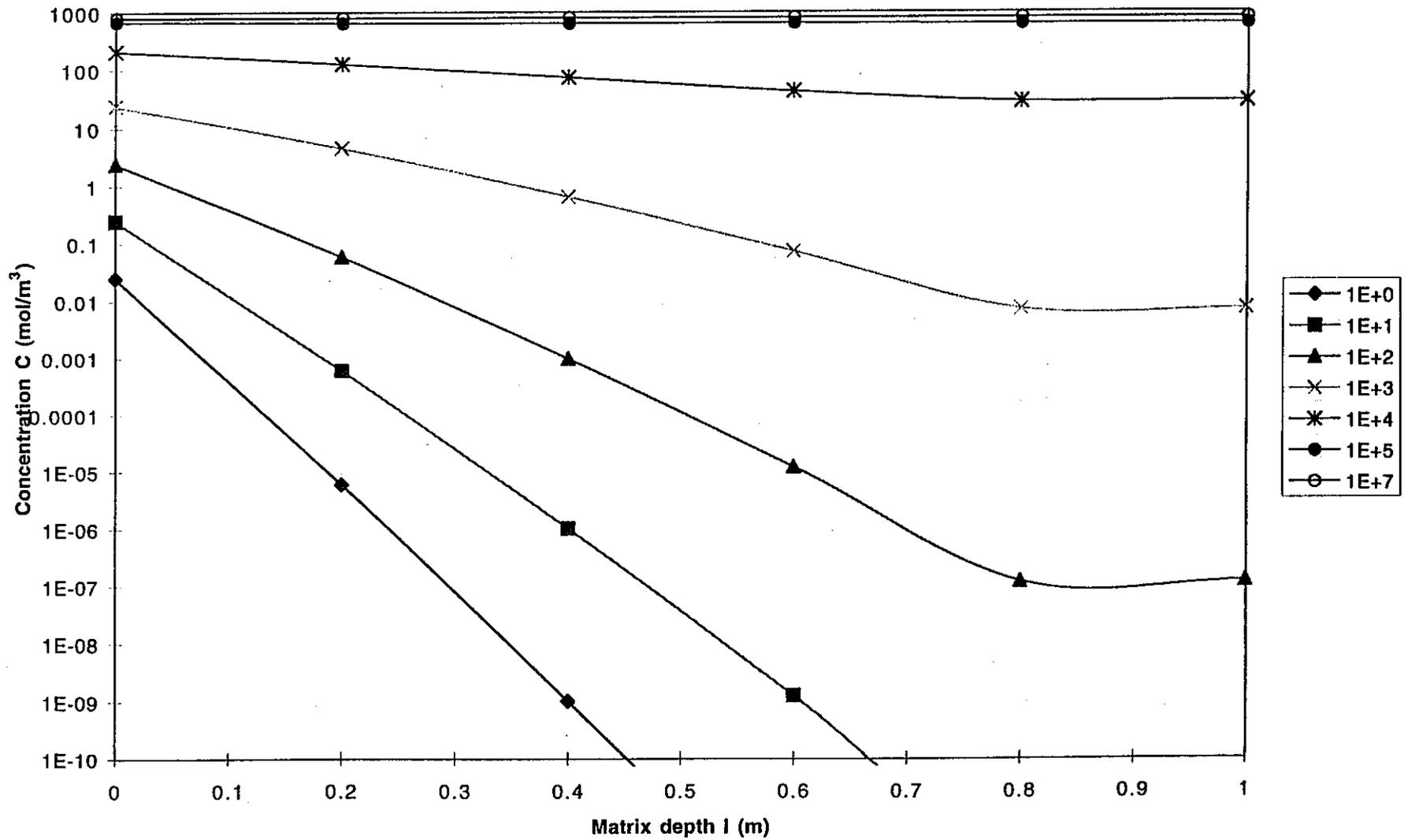


図 6.4.5 単一レグケースにおけるマトリクス内総濃度分布の時間変化 (x=40m)

Concentration profiles at increasing times in the matrix at  $x=200\text{m}$  for a single leg model

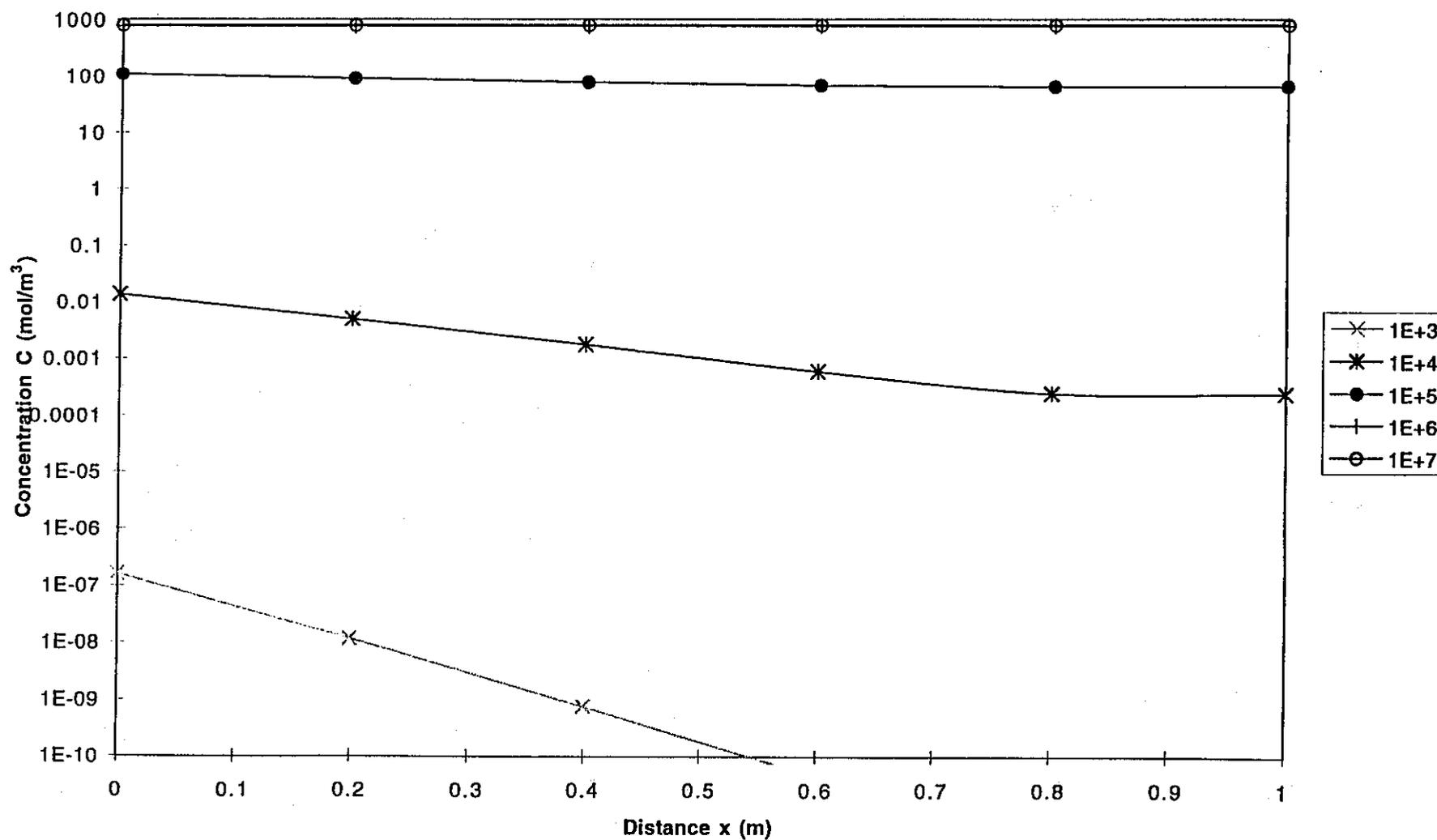


図 6.4.6 単一レグケースにおけるマトリクス内総濃度分布の時間変化  
( $x=200\text{m}$ )

Concentration at increasing times in the channel for a 5-leg model

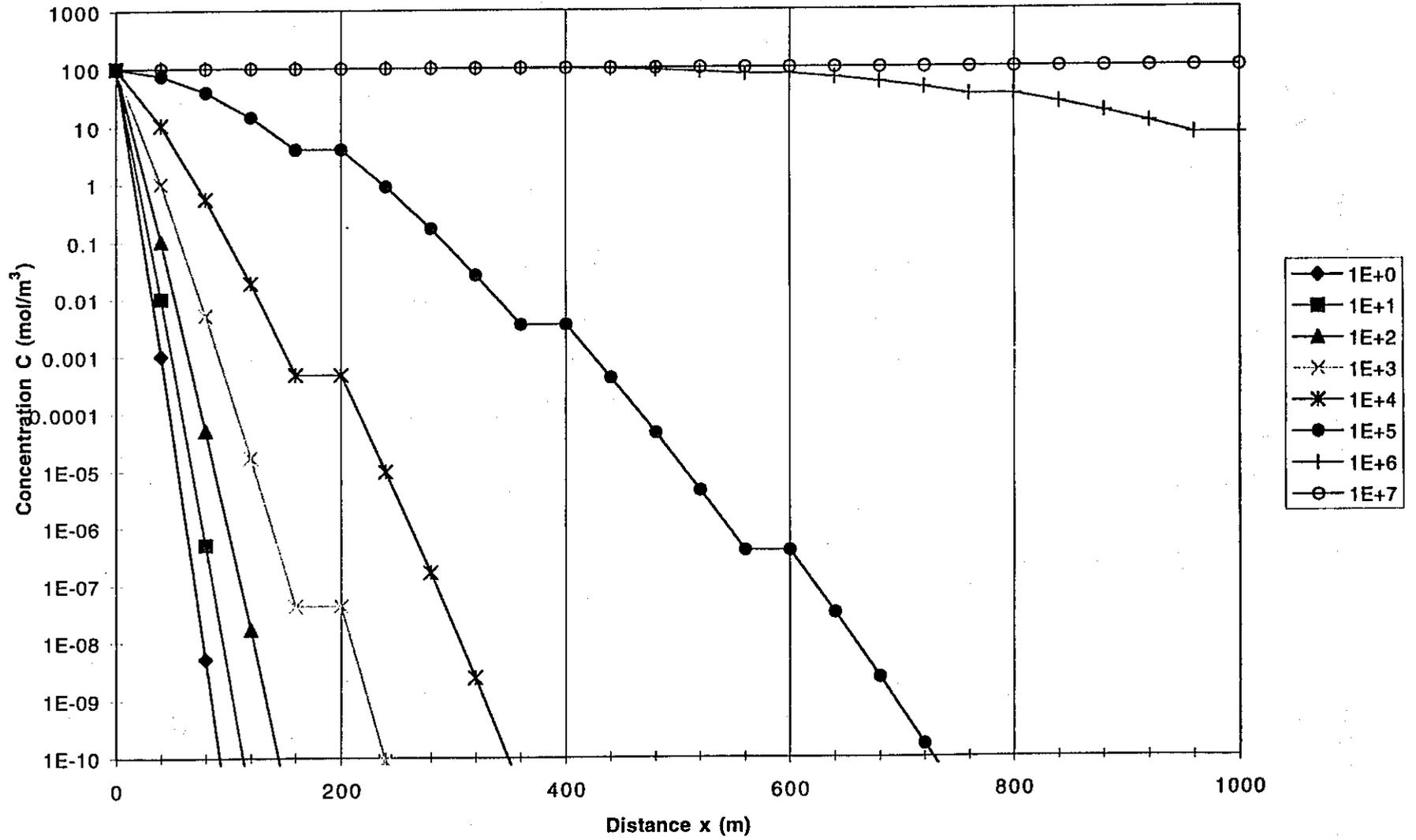


図 6.4.7 複数レグケースにおけるチャンネル内総濃度分布の時間変化

なお、この例ではレグ間のジョイント部分において0分散フラックスの境界条件を置いているために、ジョイントとその上流側の点における濃度は同一である。また、この境界条件のために、最初のジョイント以降の濃度プロファイルの立ち上がりが図 6.4.4 に比して遅延されている。なお、これら二つの差は、差分メッシュのサイズを小さくするに従って低減するものである。

### (3) チャンネルネットワーク

統計的に作成された図 6.4.8 に示すチャンネルネットワークについて、単一核種の移行解析を行った。解析条件を表 6.4.12 に示す。

図 6.4.9~13 は、偶数番のレグにおけるチャンネル内の総濃度分布の時間変化である。また、図 6.4.14 はマトリクス内総濃度の時間変化の例を表す。図から明らかな通り、チャンネル内の濃度プロファイルは時間の経過とともに下流側に伝播しており、上流側のチャンネル 0 及び 2 では 10 万年経過時点ではほぼ定常状態に至っているものと考えられる。また、チャンネル 0 の 2 m 地点におけるマトリクス内濃度分布もほぼ定常状態を示している。他方、チャンネル 4 及び 6 においては、10 万年及び 100 万年後の濃度プロファイル間の差異が顕著であり、未だ過渡状態にあるものと考えられる。図 6.4.15 は、ソースから流入する核種フラックスとシンクに流出するフラックスとを、1000 万年まで比較したものである。この図からは、少なくともフラックスに関しては 1000 万年までに定常状態が達成されているものと考えられる。なお、同図においてソースからの流入フラックスよりもシンクへの流出フラックスが数桁小さいのは、マトリクスへの吸着を含めた系内の膨大な核種マスの崩壊分を補償しているためである。

これまでの例題と同様、本チャンネルネットワークモデルにおいても偶数番のレグについてマスバランスの確認を行った。

#### 6.4.4 まとめ及び課題

前節において述べた 3 種類の異なる複雑さのテストケースのいずれにおいても物質収支による計算結果の検証を行った。また、各出力の定性的な特徴の比較からも、本プロトタイプコードは所定の問題を正しく解法しているものと考えられる。

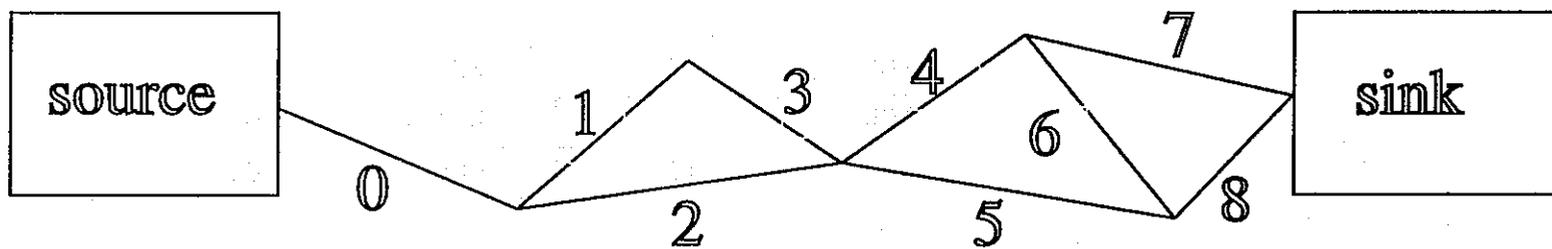


図 6.4.8 テストケースのために作成されたチャンネルネットワークの例

表 6.4.12 チャンネルネットワークに関する解析条件

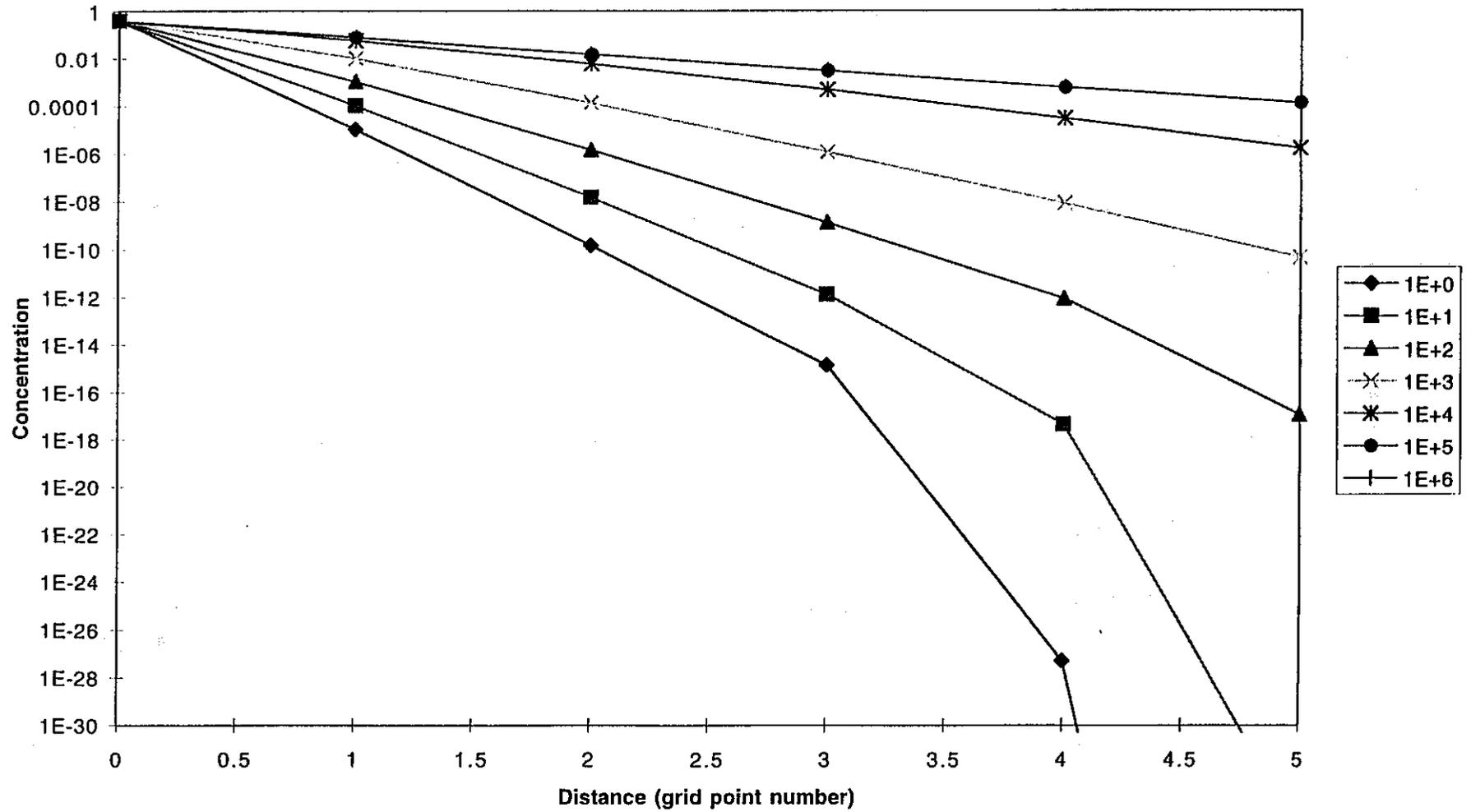
(チャンネル特性に関するパラメータ群)

レグ番号	レグ長さ	マトリクス 拡散深さ	断面積 Ac (x 1e-7)	単位流体あたり 表面積 $\delta C$	流量 qc (x 1e-6)	フロント 遅延係数	テール 遅延係数
0	2.797	0.964	5.43	617	5	48.4	22.5
1	3.218	0.562	3.39	360	4	19.0	12.8
2	6.953	0.912	4.17	545	7	84.5	3.97
3	3.445	0.422	9.80	194	4	57.1	8.85
4	8.082	0.680	6.91	306	17	34.7	47.1
5	4.785	0.952	7.05	805	4	33.6	36.5
6	3.952	0.830	9.71	688	14	70.9	20.6
7	5.940	0.753	6.01	694	8	35.8	24.0
8	1.930	0.122	5.25	503	21	62.4	40.0

(核種移行特性に関するパラメータ群)

a0	1.337	$c*\beta 1$	4.87e-10	d1	10	$\theta_{min}$	0.01
a1	1.271	$c*\beta 2$	0.494	d2	10	$\theta_{max}$	0.1
b0	1.865	$c*\beta 3$	3.303	m	0.01	Dm anomaly	0.01
b1	0.0537	$R\alpha$	12035	$\lambda$	9.30e-5	Tf	50000yr
$c*\alpha 1$	135	$R\beta$	19842	nd	5	Tg	75000yr
$c*\alpha 2$	5.32e-5	K	4.989	Dm	1e-5	initial mass	1e-7

Channel concentration in leg 0 at increasing times



-391-

図 6.4.9 レグ 0 のチャンネル内総濃度分布の時間変化

### Channel concentration in leg 2 at increasing times

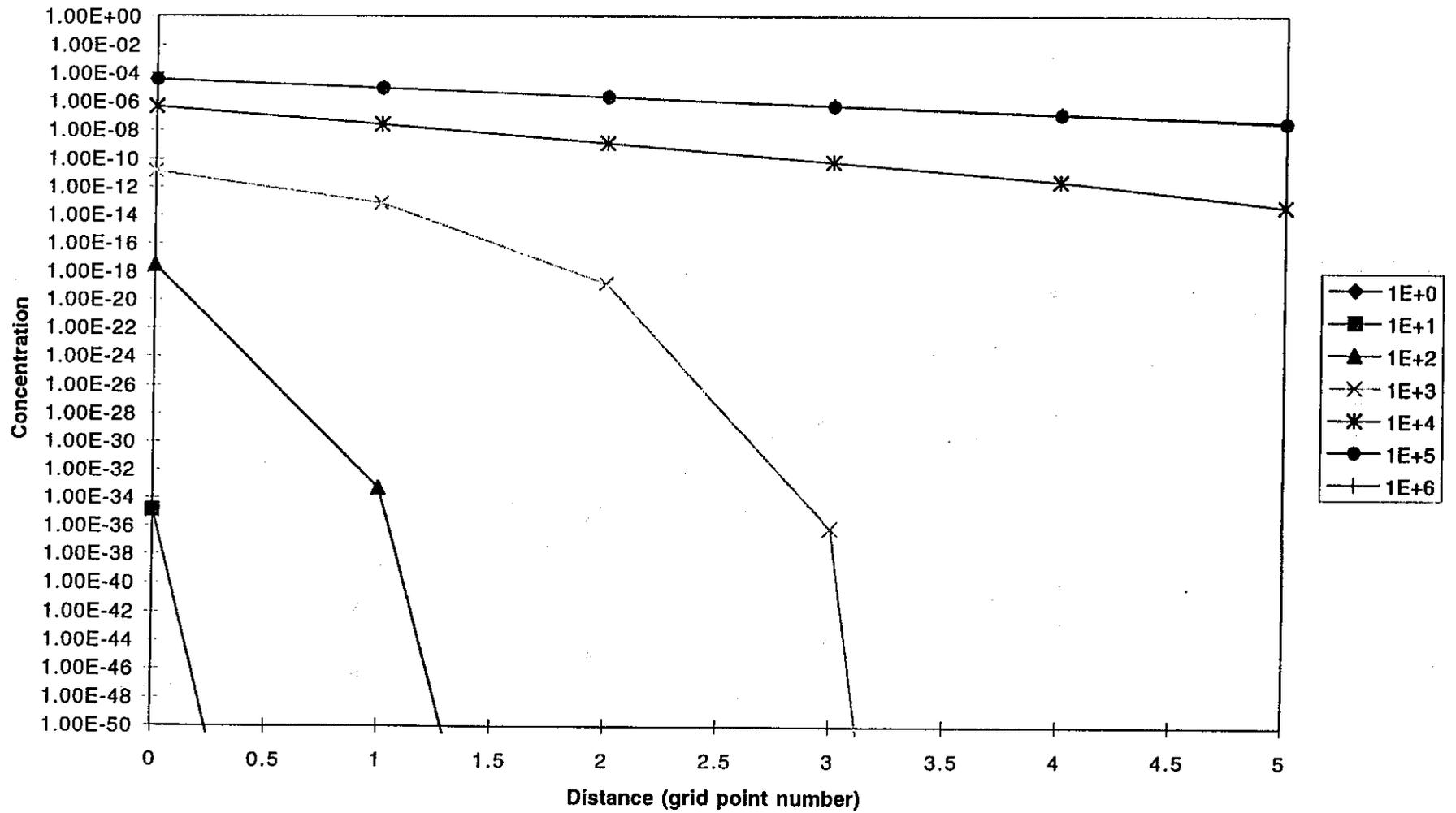


図 6.4.10 レグ 2 のチャンネル内総濃度分布の時間変化

Channel concentration in leg 4 at increasing times

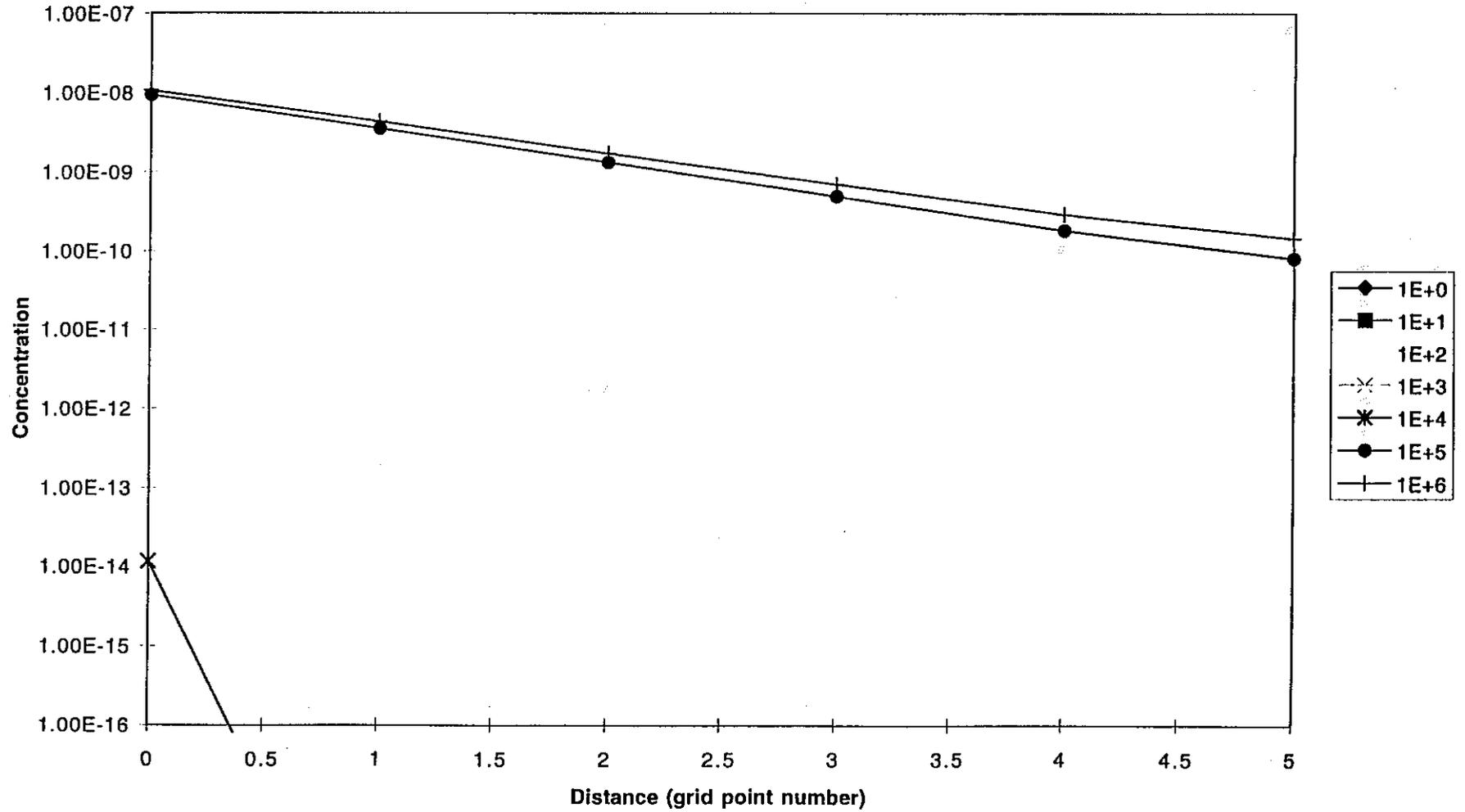


図 6.4.11 レグ 4 のチャンネル内総濃度分布の時間変化

### Channel concentration in leg 6 at increasing times

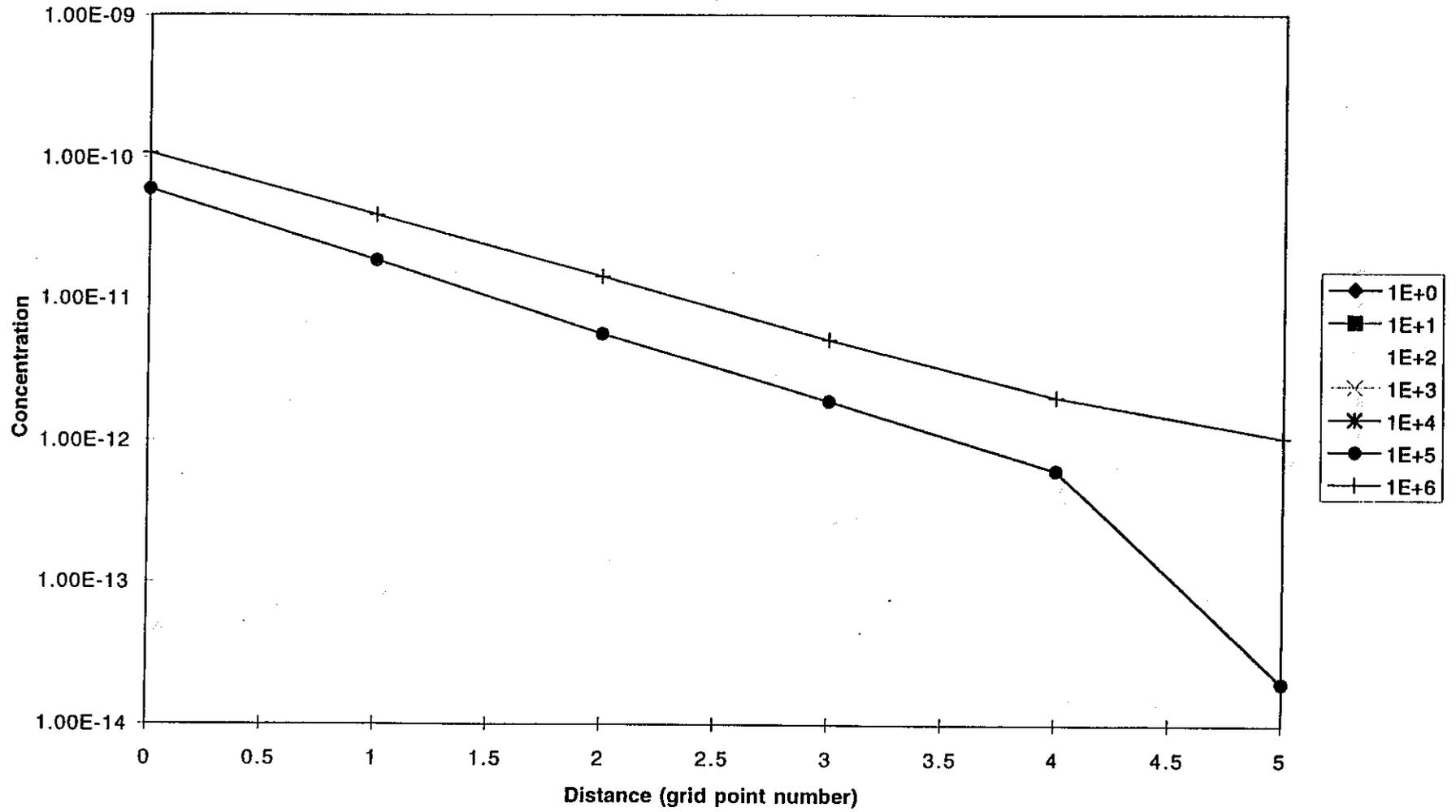


図 6.4.12 レグ 6 のチャンネル内総濃度分布の時間変化

### Channel concentration in leg 8 at increasing times

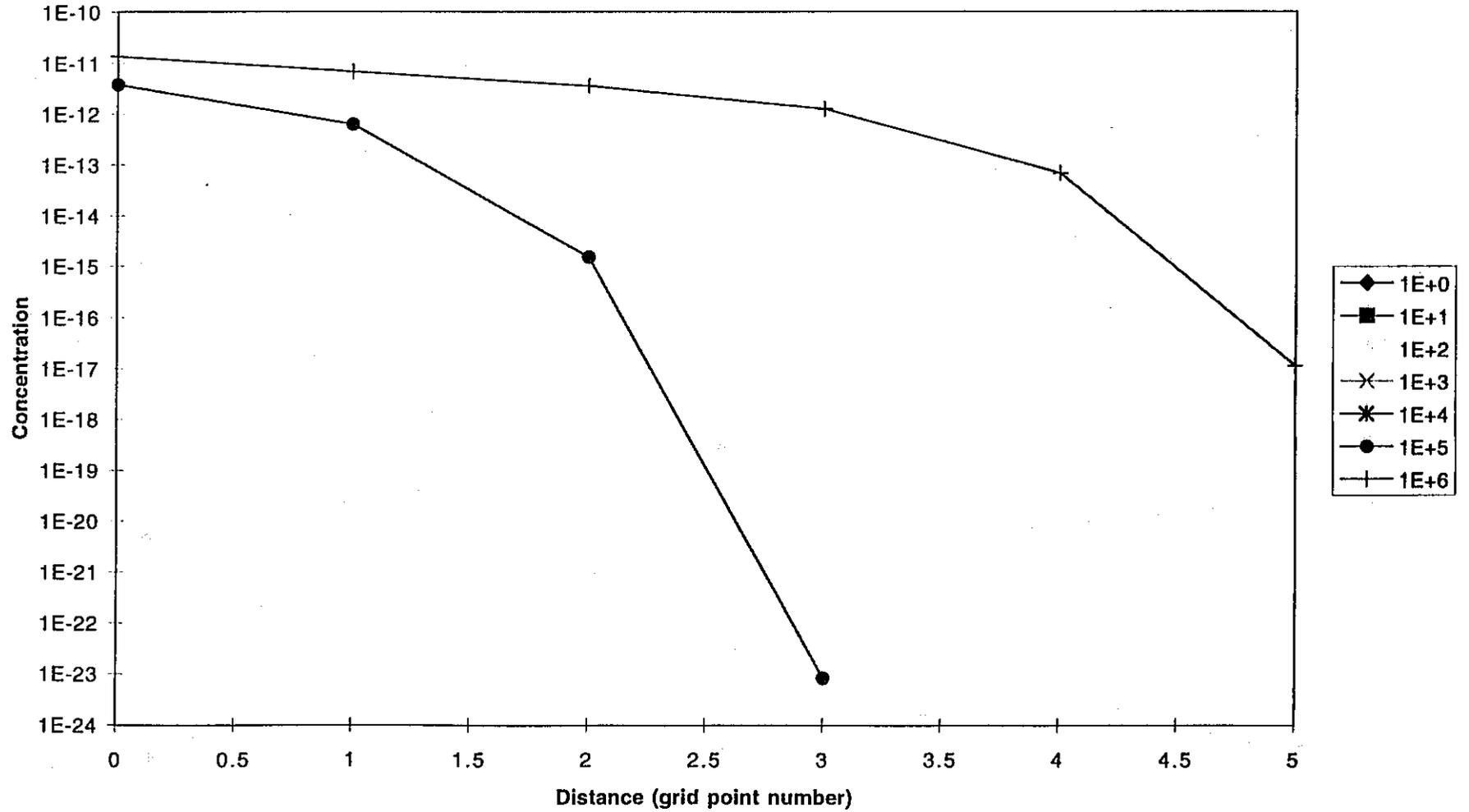


図 6.4.13 レグ 8 のチャンネル内総濃度分布の時間変化

Concentration in the matrix at x=2 in leg 0 for the 3 channel model

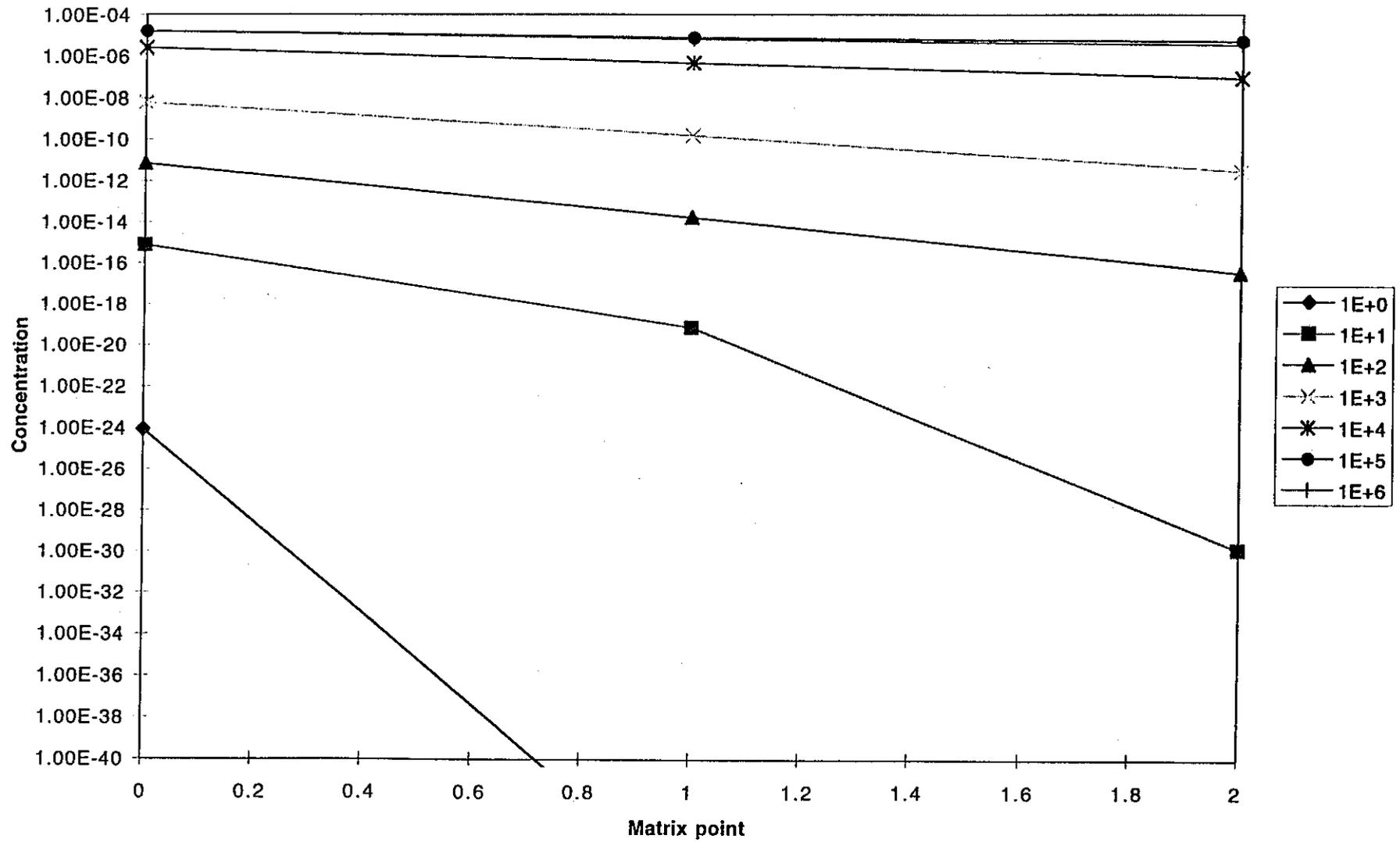


図 6.4.14 マトリクス内総濃度分布の時間変化

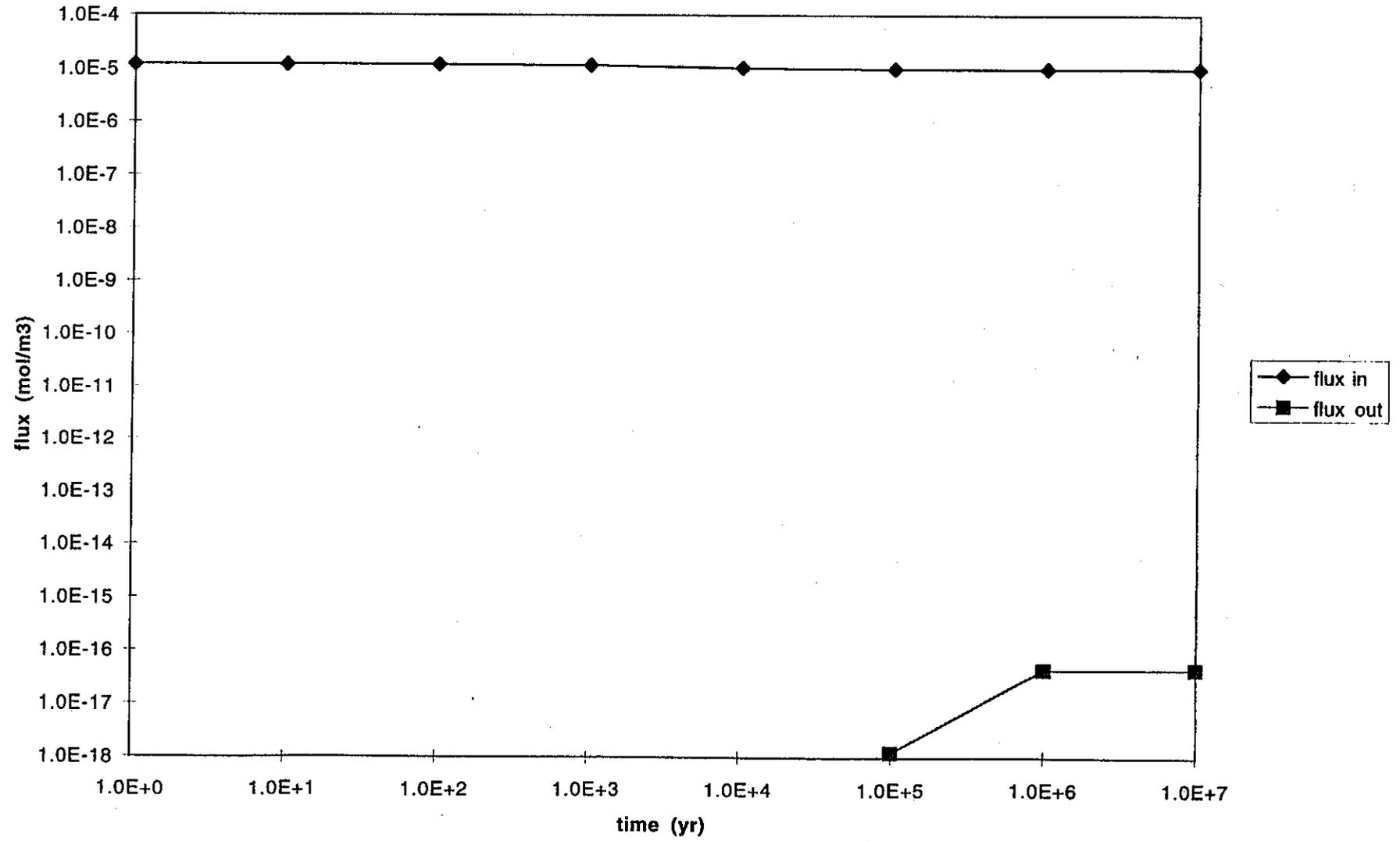


図 6.4.15 ソースからの核種流入フラックスとシンクへの流出フラックスとの比較

現在のプロトタイプコードは最適化されていないために、計算効率は必ずしも高くはなく、5 レグのテストケースで 15 分程度、9 レグのテストケースで 45 分程度の CPU タイムを要している（但し、これらは SPADE が .spf ファイルを読み込む時間を含む）。来年度の統計的解析においては、多数の解析ケースを実施するために、ソルバ自体の変更も含めた最適化を図ることが必要である。このような代替的なソルバとしては、6 年前に開発された SPADE に代わる新鋭機として QuantiSci 社が既に開発を終えている DYLAN が有力な候補である。DYLAN は、SPADE のアプリケーションにおいて計算効率の点でも定式化の自由度の点でも大きな制約となっている Symbolic なユーザーインターフェイスを削除し、さらにソルバ機能にも多くの改良を施したものであり、本章において述べた様な問題については SPADE に比して数倍の効率が期待できる。

定式化の点では、地球化学異常の取り扱いに改良の余地があるものと考えられる。本プロトタイプでは、地球化学異常の位置をフロントとテイルの組みによって表現することとし、これらの移動についての連立常微分方程式系を解法している。この手法は、未知数の数を低減するという意味では適切であるが、反面、チャンネル数が多くなるに従いステップ関数で表現される条件文の数が膨れ上がるという短所を有する。この点についての代替的な手法としては、地球化学異常の原因となる様な反応物質について簡単な溶質移動方程式（偏微分方程式）を立式し、その濃度があるしきい値以上の領域を地球化学異常と見なすアプローチがある。この方法は、QuantiSci 社が前出の DYLAN 上で開発している TIGER コードにおいて用いられているものである。

## 6 章参考文献

- [1] H. Takase, P. Grindrod, S. J. Einchcomb, A. J. Lee, H. Makino and H. Umeki, 'On EBS Modelling for Performance Assessment: Using Shadow Models to Identify Robust System Responses', Scientific Basis for Radioactive Waste Management XXI, 847-856, Materials Research Society (1998)
  
- [2] P. Robinson, 'PICNIC Version 1.0 Technical Details', Intera Information Technologies Report IM4286-1 Version 2 (1995)
  
- [3] E. Kreyszig, 'Introductory Functional Analysis with Applications', John Wiley & Sons (1978)
  
- [4] 動力炉・核燃料開発事業団 研究委託内容報告書、地層処分システム性能  
評  
ための概括的感度解析手法の高度化、PNC ZJ1281 97-007 1997年3月

## 7. まとめ

(1) 人工バリア中核種移行シャドウモデル及びこれを用いた感度解析の効率を改善した上で、最も放出率の高いケース及び動燃事業団殿によって定義されたリファレンスケース周辺の統計的解析を反復的に行うことにより(合計約17,000ケース)、これらの代表点を中心とする感度構造を明確にした。また、この結果に対応してFEPの重要性についての検討を加えた。

(2) 動燃事業団殿によって指定されたリファレンスケース周辺の代替的ケース群に対して、人工バリア中核種移行シャドウモデルを決定論的に用いた解析を行い、MESHNOTEコードとの比較を行った。

(3) 探索型システム性能評価の方法論を拡張し、個々のレグが二重空隙媒体である様な時間に依存したチャンネルネットワークモデルとして表現される母岩中の核種移行に関するシャドウモデルを開発し、例題に対してこれを適用した。