

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)

研究概要

1998年2月

技術資料		
開示区分	レポートNo.	受領日
Z	J1281 98-006	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		

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)

Kiyoshi 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 behavior 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 behavior 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 behaviors 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 behavior.

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

1. はじめに	1
2. 探索型システム性能評価の方法論	1
3. 統計的解析及び感度解析の効率向上に関する検討	2
3.1 全域的サンプリング数の充足性の評価	2
3.2 重要性に応じた局部的サンプリング	3
3.3 パラメータ数の低減	3
3.4 統計的解析の手順	3
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	5
4.1 解析上の前提及び解析条件	5
4.2 全域的サンプリングによる統計的解析の結果	6
4.3 全域的解析結果に対する感度分析	8
4.3.1 クラスタ分割	8
4.3.2 Moving Band 法による入力パラメータの重要度分析	10
4.3.3 感度解析	11
4.4 第二次局部サンプリングによる統計的解析	11
4.4.1 局部サンプリングの目的と範囲	11
4.4.2 第二次サンプリングの解析条件	11
4.4.3 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	11
4.4.4 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	15
4.5 第三次局部サンプリングによる統計的解析	17
4.5.1 第三次サンプリングの解析条件	17
4.5.2 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	17
5. 人工バリア中核種移行に関する決定論的解析	20
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	20
5.1.1 リファレンスケースの設定	20
5.1.2 リファレンスケースに対する摂動の考え方	20
5.1.3 解析結果	21
5.1.3.1 リファレンスケース	21

5.1.3.2	ガス圧による緩衝材空隙水の移動	21
5.1.3.3	速度論的な溶解・沈澱反応の影響	25
5.1.3.4	元素に依存した拡散係数の影響	25
5.1.3.5	空隙水の放射線分解により生ずる酸化剤の影響	25
5.1.3.6	オーバーパック腐食生成物の影響	25
5.2	MESHNOTE を用いた決定論的人工バリア中核種移行解析	26
5.2.1	シャドウモデルを用いた解析結果との比較	26
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	27
5.2.2.1	解析ケースの設定	27
5.2.2.2	解析結果	27
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	28
6.1	概念モデル	28
6.2	数学的定式化	28
6.2.1	チャンネルネットワークの表現	28
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	29
6.2.3	シャドウサブモデル	30
6.3	シャドウ関数のための関数形のテンプレート	31
6.3.1	区分的に線形な関数	31
6.3.2	$n+1$ 次元における楕円体	32
6.4	例題についての解析	32
7.	まとめ	35

1. はじめに

本研究では、探索型システム性能評価の手法を、以下の3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、これまでの統計的解析の成果をより確かなものとする
こと。
- 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。

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、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、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という質問に答える事が可能となる。

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の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。

3. 統計的解析及び感度解析の効率向上に関する検討

3.1 全域的サンプリング数の充足性の評価

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。クラスタ分析のためには、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って、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。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、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。

3.2 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。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。

3.3 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に、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が可能である。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、核種を指定すること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。

3.4 統計的解析の手順

以上の検討成果をまとめた統計的解析の手順を図 3.1 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。

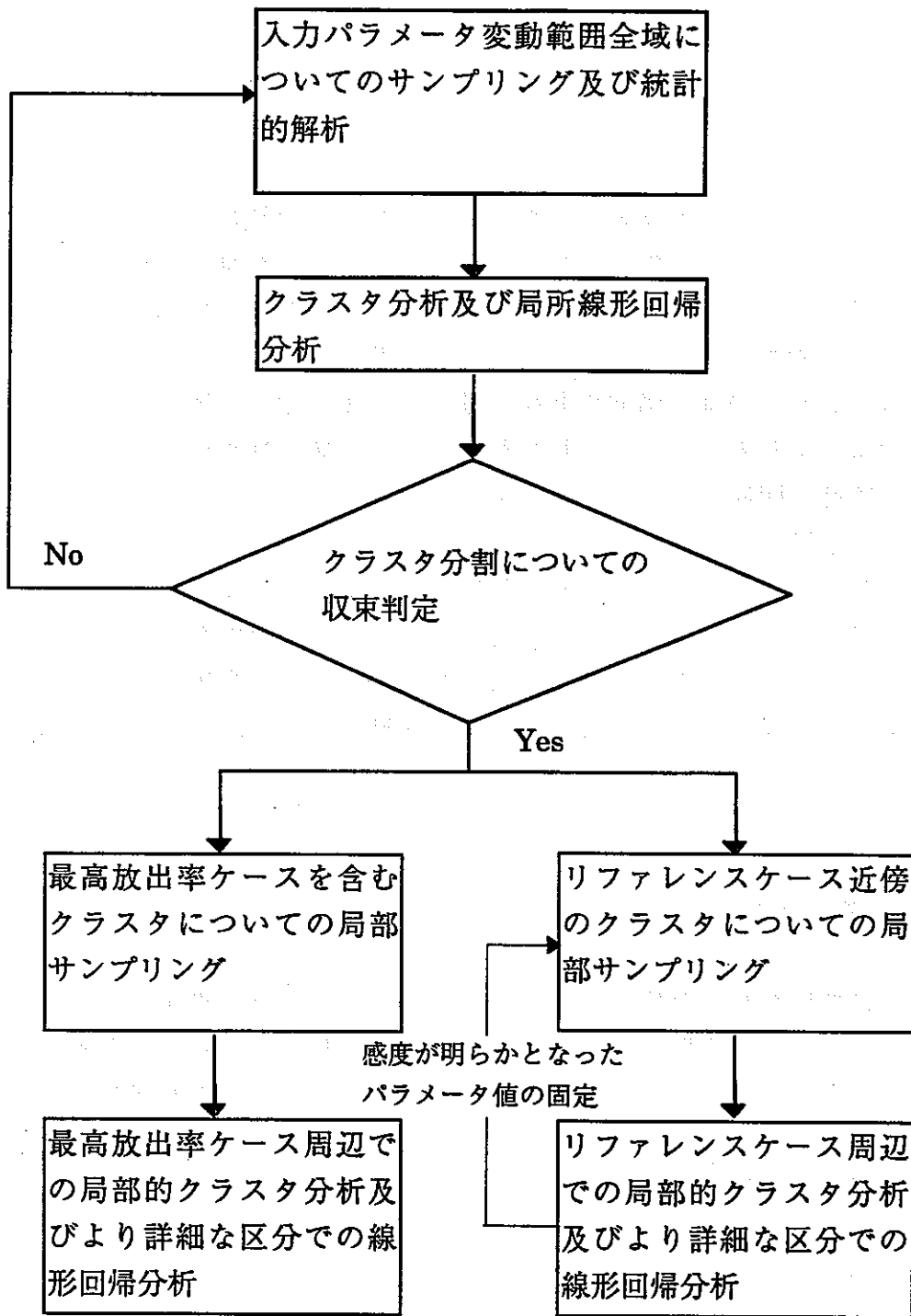


図 3.1 統計的解析の全体手順

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。

4.1 解析上の前提及び解析条件

解析上の前提及び各パラメータの範囲は、昨年度のワークショップに於いて確認された内容を基にまとめる。なお、本年度の解析では、評価対象核種を特に限定せず、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表 4.1.1 以下の範囲からランダムにサンプリングする。

表 4.1.1 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)

放射性元素の化学及び移行特性シャドウサブモデルに関しては、それぞれ $V C = v \beta C$ 及び $D C = D_0 \alpha C$ 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としては、以下の点が挙げられる。

- ・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。

4.2 全域的サンプリングによる統計的解析の結果

前述(4.1)の問題設定に対応して全域的なサンプリングを行い、約6,000ケースの統計的解析を実施した。

図4.2.1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キッタープロットしたものである。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。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、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。

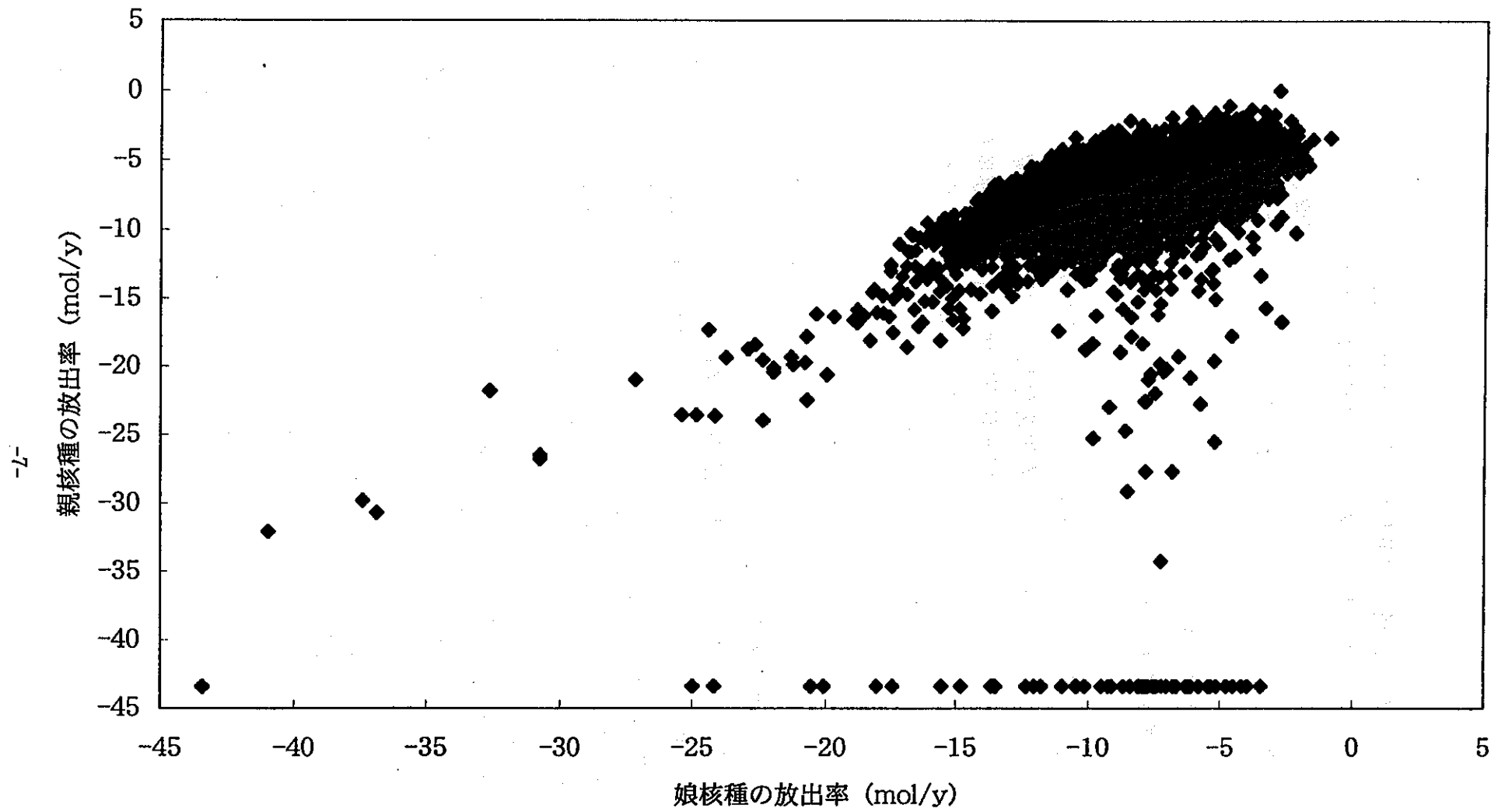


図 4.2.1 全域的サンプリングによる統計的解析結果のスキッタープロット
(常用対数スケール)

4.3 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

本研究の感度解析においては、主としてケース数の少ない極値に対して 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とする。

4.3.1 クラスタ分割

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ー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) とクラスター数の関係を図 4.3.1 に示す。MSE はクラスター数の増加に伴って急速に減少し、クラスター数が 6 以上になるとほとんど 0 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ーは、いずれも核種放出率が大きい範囲に対応しており、かつ、各クラスターの大きさはそれぞれ数ケース程度に過ぎない。

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、比較的クラスター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。

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。クラスター分析の結果を図 4.3.2 に示す。

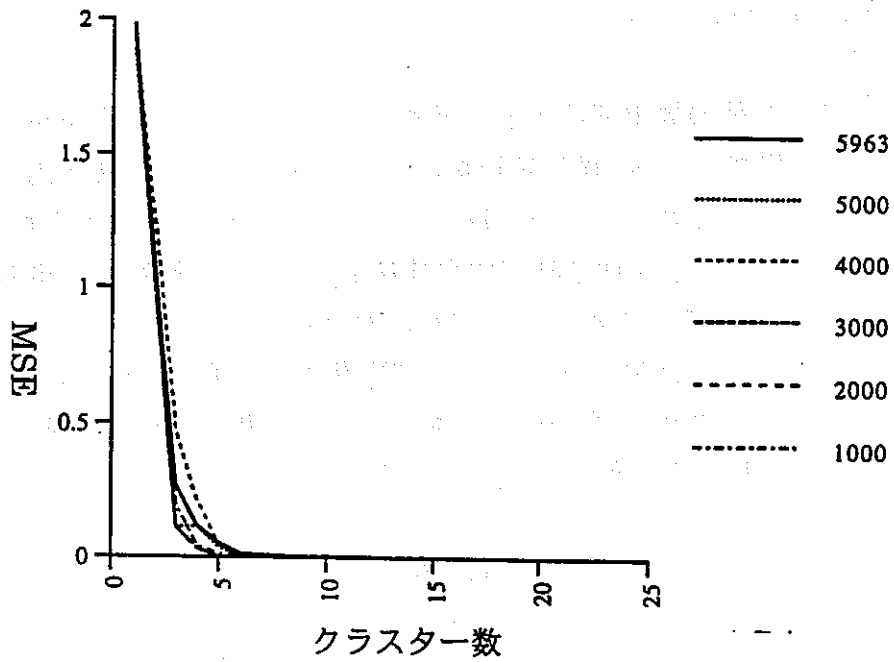


図 4.3.1 全域的サンプリングによる統計的解析結果について計算された平均二乗残差(MSE)とクラスター数との関係 (リニアスケール)

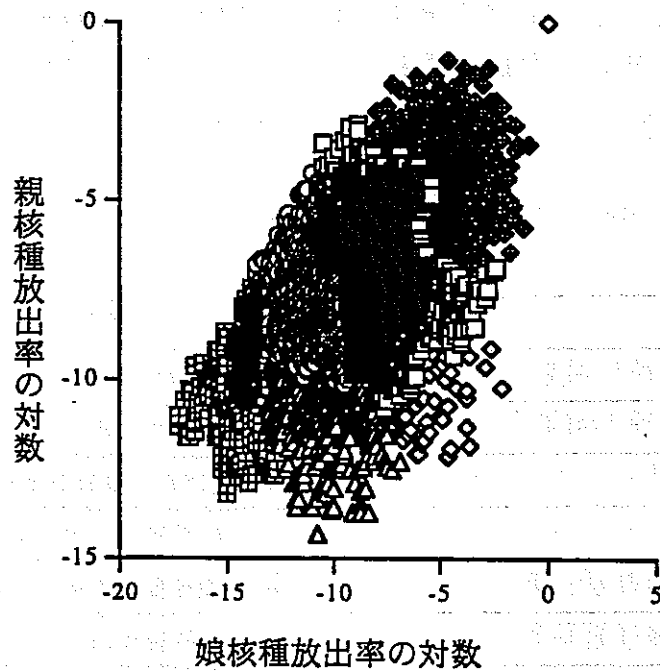


図 4.3.2 対数スケールにおけるクラスター分析により同定された主要クラスターの分布 (2)

4.3.2 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 μ_m とする。また、N 個全体での平均を μ_N とし、 C_m 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 σ_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。

$$(4.1) \quad S_m = \frac{\mu_m - \mu_N}{\sigma_m}$$

S_m のある信頼性限界値は既知であり、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とが可能である。本研究では、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。

有意な放出率領域 (例えば 10^{-20} mol/yr 以上) において非零のトレンドを有するパラメータを表 4.3.1 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 4.3.1 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)

4.3.3 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について、まず主成分分析を行い、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。

有意な放出率領域（例えば 10^{-20} 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は、前節のパラメータの特殊性分析（Moving Band 法）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。

4.4 第二次局部サンプリングによる統計的解析

4.4.1 局部サンプリングの目的と範囲

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、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。

4.4.2 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 4.3.1 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。

4.4.3 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 4.4.1 のスキヤ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

全域的な解析と同様の方法で行った Moving Band 解析の結果として、非零のトレンドを有する入力パラメータを表 4.4.1 に示す。

表 4.4.1 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)

表 4.4.1 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。

図 4.4.2 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 (パラメータ番号 23) 及び動水勾配最小値 (パラメータ番号 25) 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。

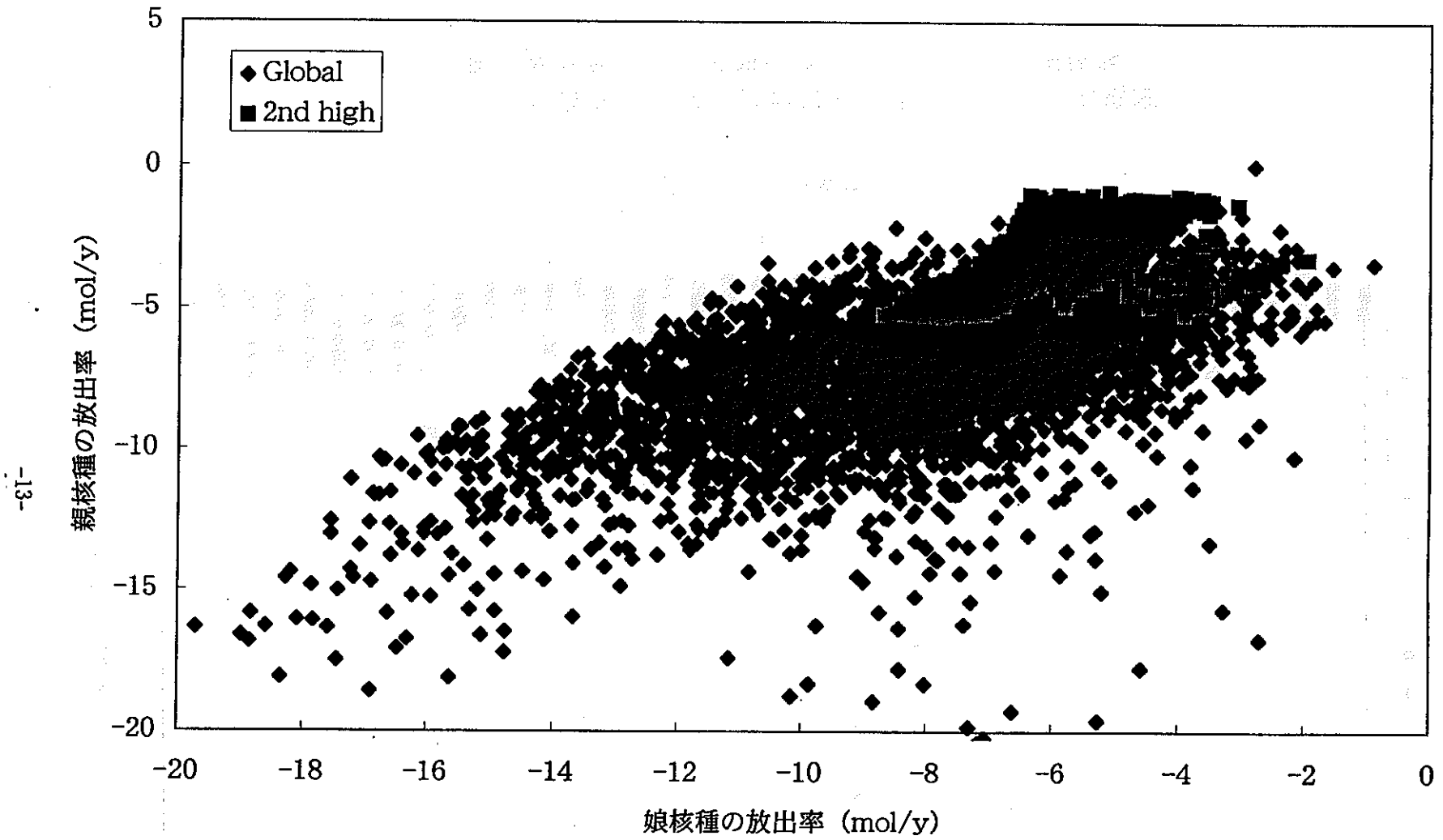


図 4.4.1 最大放出率ケースの第2次サンプリングによる統計的解析結果 (3800ケース)

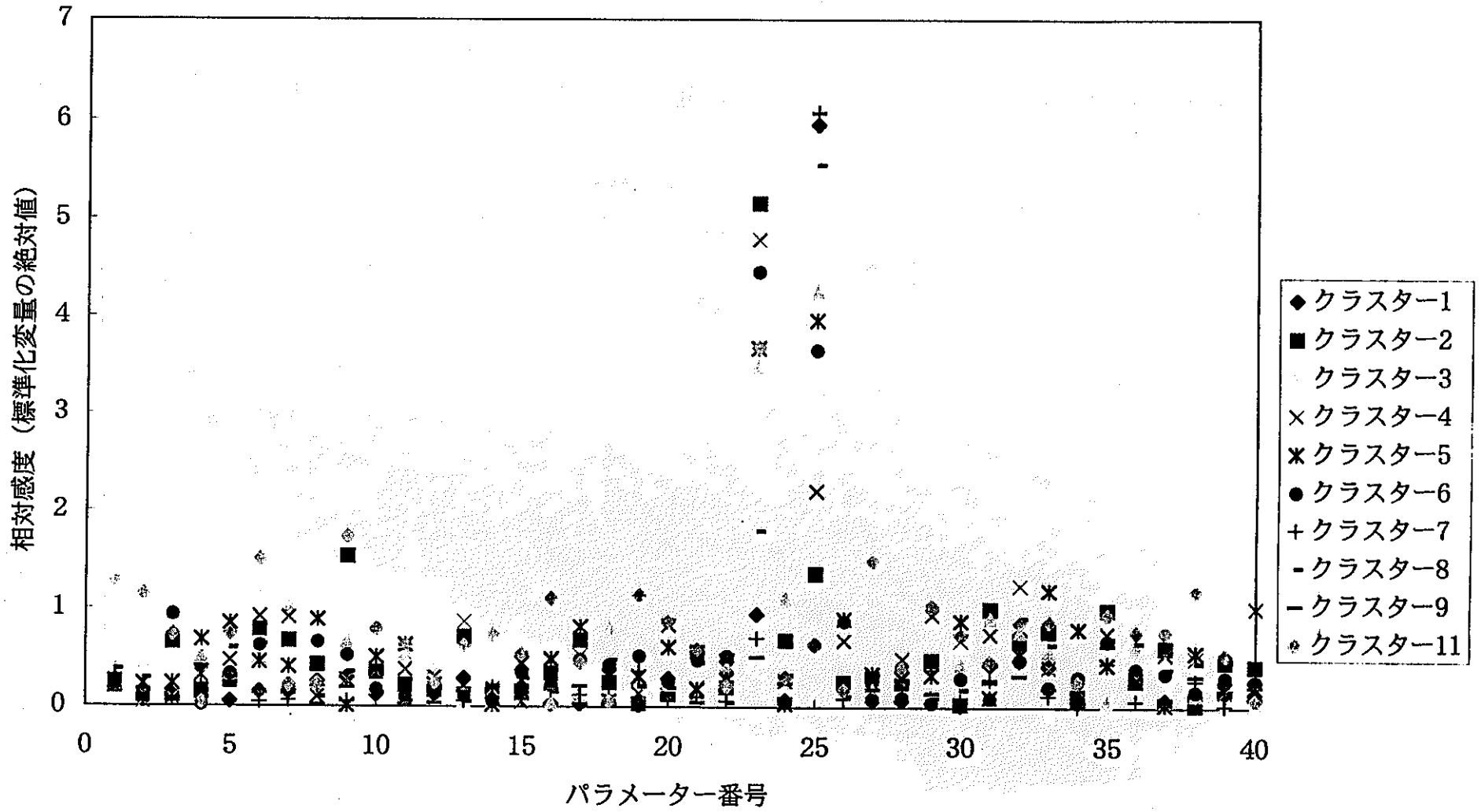


図 4.4.2 各クラスターにおける入力パラメータの感度
(最大放出率ケース近傍の第二次サンプリング：親核種)

4.4.4 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

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 4.4.3 のスキャ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。これらの、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クラスタ分析の結果得られた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。非零のトレンドを有する入力パラメータは表 4.4.2 に示す通りである。

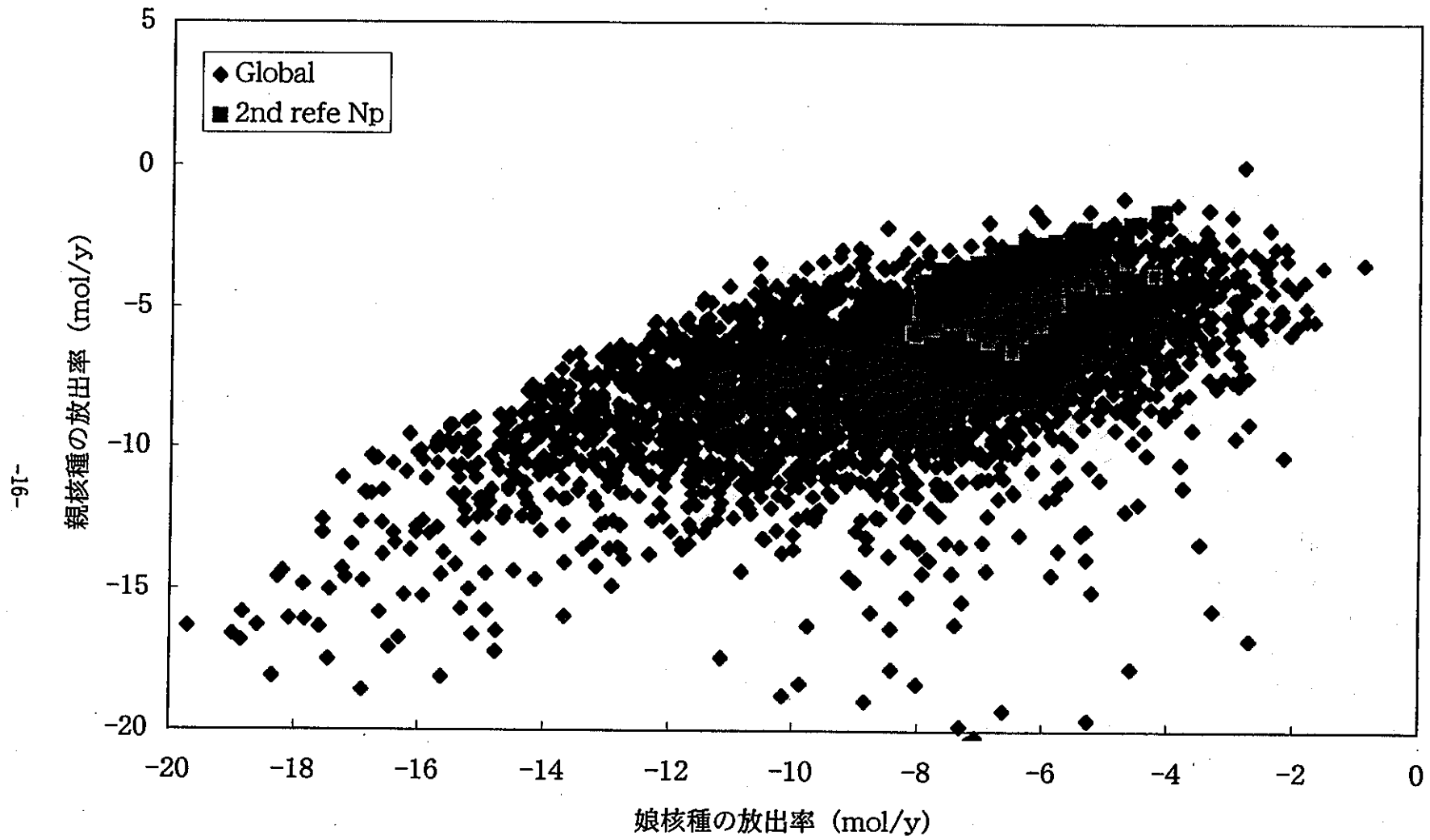


図 4.4.3 リファレンスケース近傍の第2次サンプリングによる統計的解析結果 (Np237, Th229 : 2200ケース)

表 4.4.2 Moving Band 解析において非零のトレンドを有するパラメータ
 (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。

4.5 第三次局部サンプリングによる統計的解析

4.5.1 第三次サンプリングの解析条件

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 4.4.2 に挙げた 10 個の入力パラメータの値を更に固定し、残りの 30 個のパラメータについて統計的サンプリングを実施した。

4.5.2 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

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 4.5.1 のスキヤ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。

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、クラスタ分析の結果得られた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 解析の結果として、非零のトレンドを有する入力パラメータは表 4.5.1 に示す通りである。

表 4.5.1 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)

第三次サンプリングの解析結果から、以下の推定が成立する。

「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。

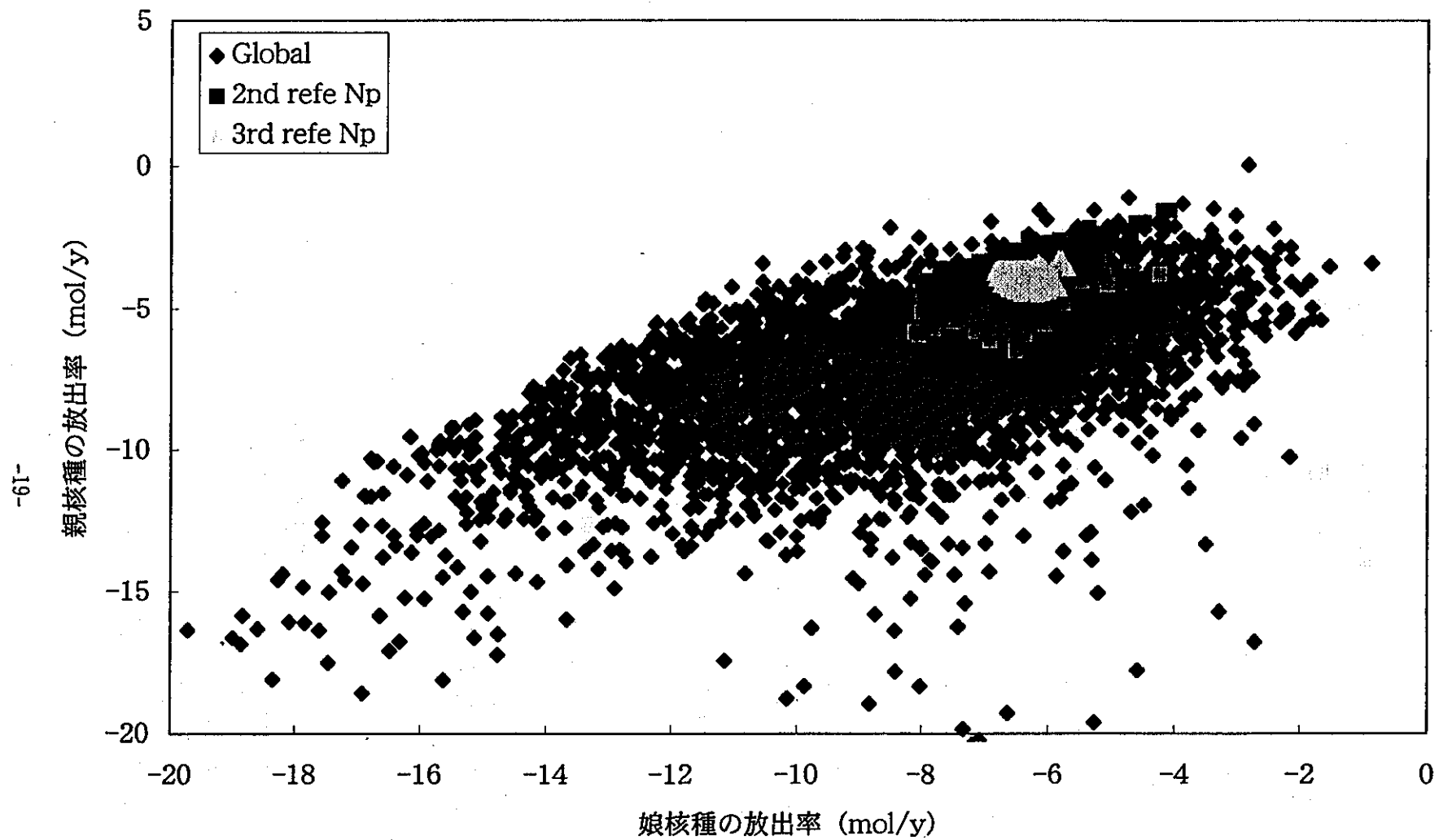


図 4.5.1 リファレンスケース近傍の第3次サンプリングによる統計的解析結果
(Np237, Th229 : 2000ケース)

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

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。また、これらの解析により、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の設定

リファレンスケースのニアフィールドは以下の要素から成るものとする。

- ・ 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

さらに、対象核種としては、

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。

5.1.2 リファレンスケースに対する摂動の考え方

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として、以下に示すような現象及びその影響を考慮した。

- ・ 人工バリアシステム形状の変化としてのオーバーパック腐食生成物による膨張
- ・ 人工バリアシステム内及び周辺の流れの摂動としてのゆるみ域における不完全な混合の影響及びガス圧による緩衝材空隙水の移動
- ・ ガス圧による緩衝材空隙水の移動
- ・ 核種移行特性の変化として速度論的な溶解・沈殿反応の影響、元素に依存した拡散係数の影響及び腐食生成物層への吸着による影響

- ・地球化学的条件の変遷としての空隙水の放射線分解により発生する酸化剤の影響

5.1.3 解析結果

5.1.3.1 リファレンスケース

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。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 5.1.3.1 にまとめる。

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 5.1.3.2 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。

5.1.3.2 ガス圧による緩衝材空隙水の移動

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バーをリスタートすることにより 10 年間の解析を行った。

空隙半径を 0.1mm としたケース及び 1mm としたケースについての解析結果を図 5.1.3.3 にまとめる。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、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。

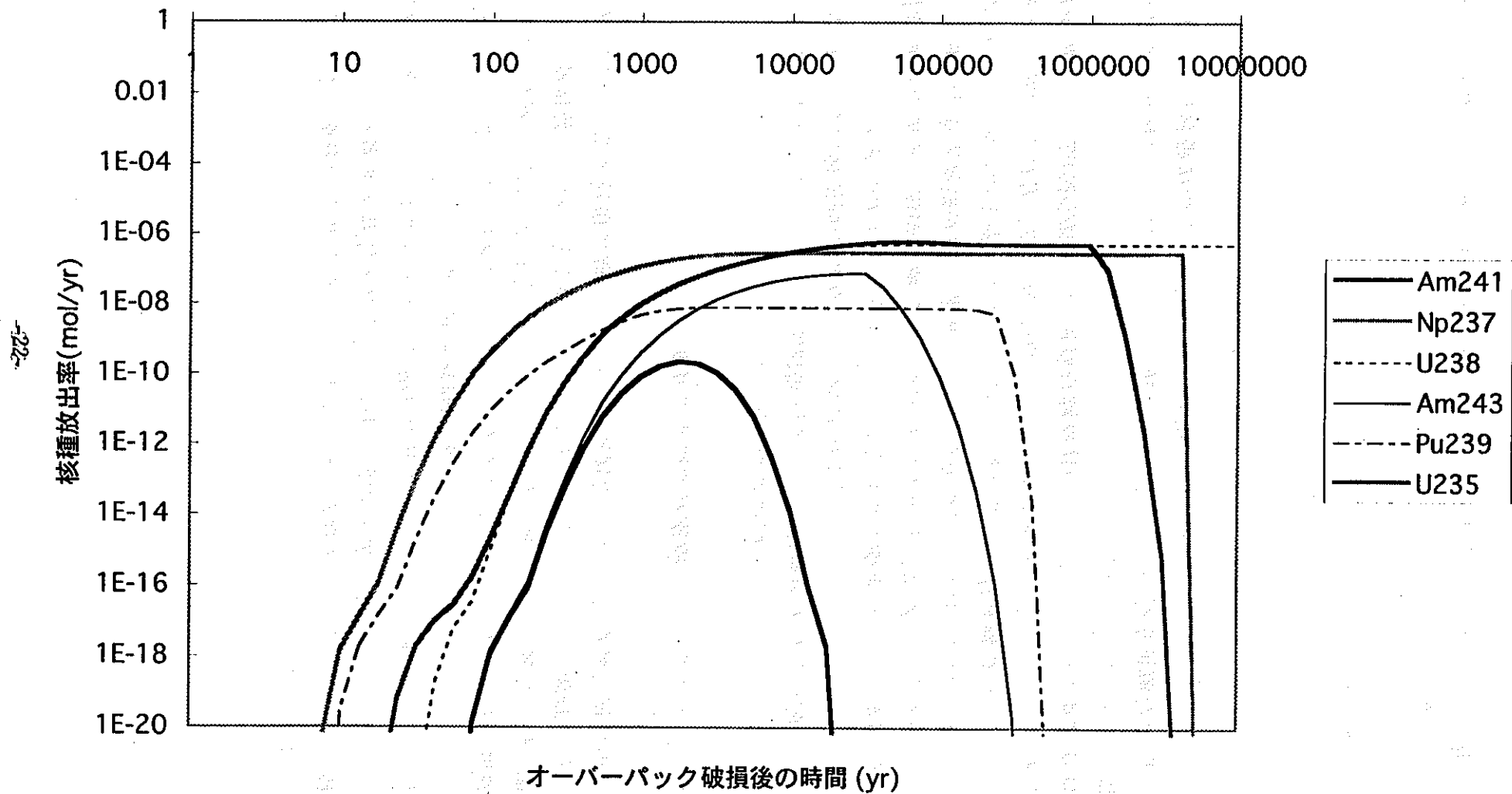


図 5.1.3.1 人工バリア中核種移行シャドウモデルによるリファレンスケースの解析結果

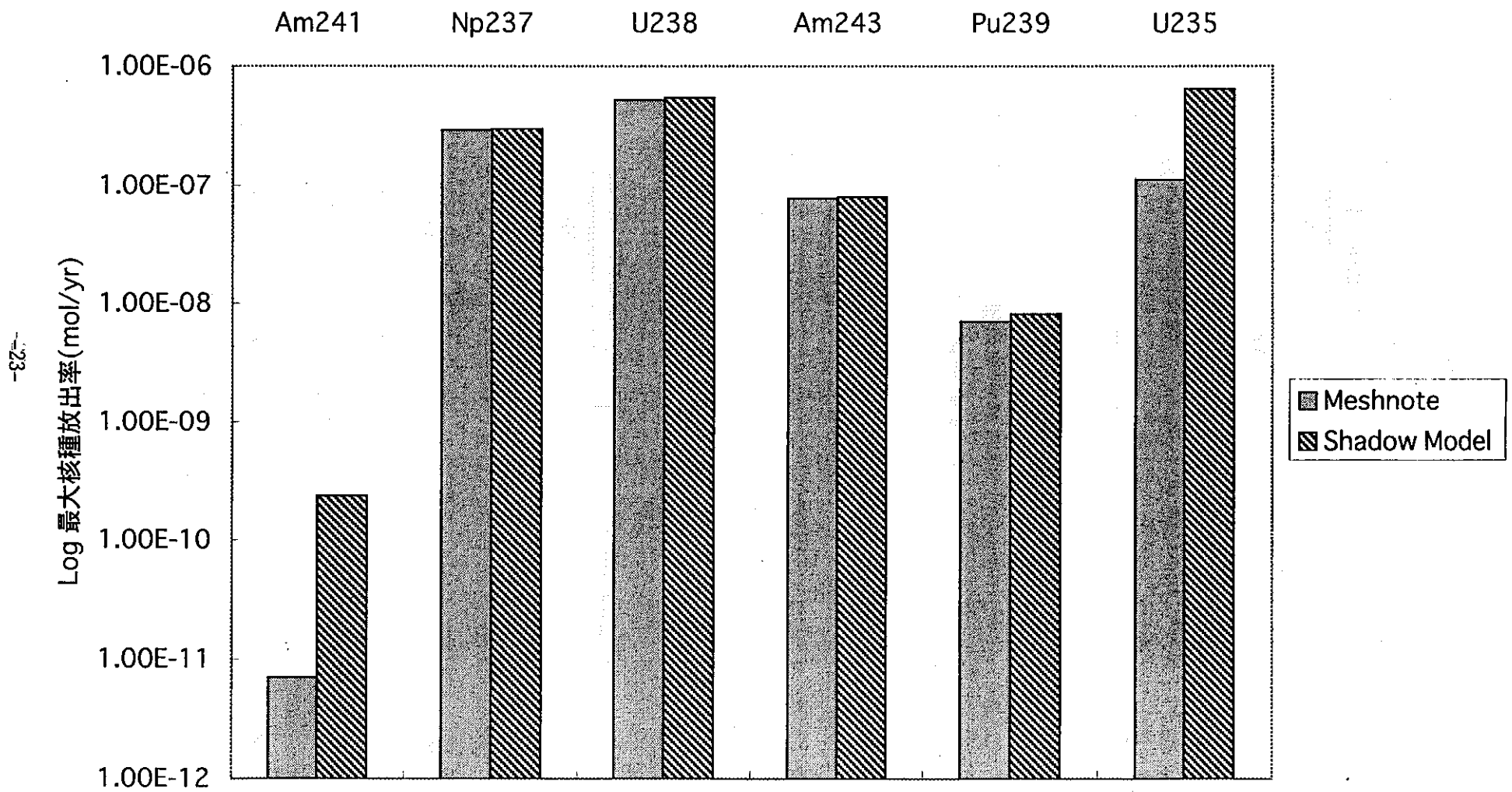


図 5.1.3.2 MESHNOTE及び人工バリア中核種移行シャドウモデルによるリファレンスケース解析結果の比較

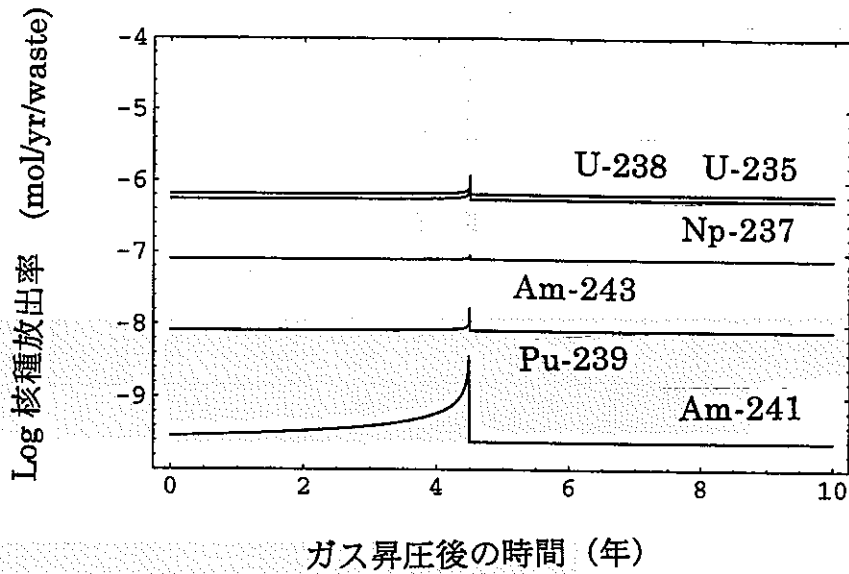


図 5.1.3.3 ガス圧による移流の影響についての解析結果
(ケース 1a: 毛管半径 0.1mm)

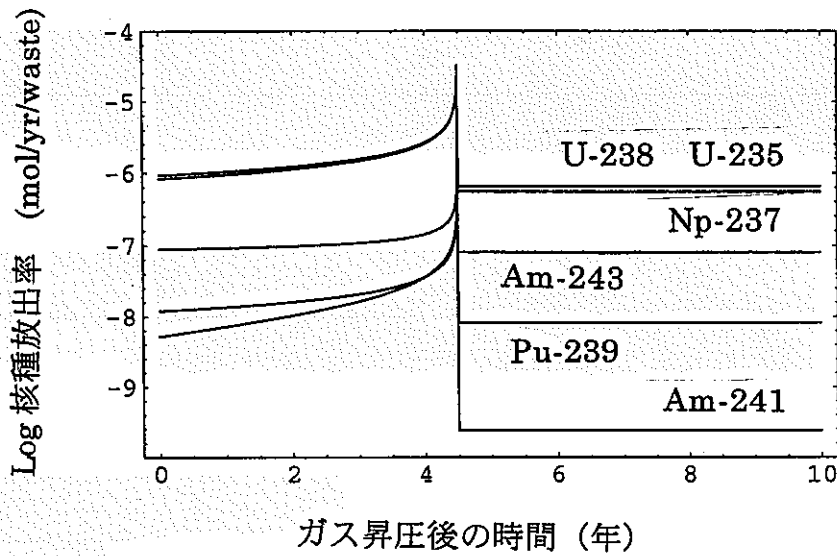


図 5.1.3.3 ガス圧による移流の影響についての解析結果
(ケース 1b: 毛管半径 1.0mm)

5.1.3.3 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、ここでは保守的に一次反応速度定数 $\mu=0.1-1.0$ /年と設定して解析を実施した。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。

5.1.3.4 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。

表 5.1.3.1 元素依存の拡散係数値

	空隙水中拡散係数 (m ² /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。

5.1.3.5 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解析を行った。結果として、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。

5.1.3.6 オーバーパック腐食生成物の影響

シャドウモデルを用い、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。

解析結果によれば、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、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。

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、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パ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。

解析結果を以下にまとめる。リファレンスケースでは、前述のようにシャドウモデルと MESHNOTE の解析結果は良い一致をみた。

また、酸化剤生成の影響を考慮したケースでは、時間的に連続な酸化還元フロントの進展をステップ状に、6段階に区分して近似的に解析を実施したが、両者の解析結果はほぼ同じであった。

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でも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をステップ状に、6段階に区分して近似的に解析を実施し、同位体分配の効果を除けば、シャドウモデルとほぼ同じ結果が得られた。

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

5.2.2.1 解析ケースの設定

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。

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

5.2.2.2 解析結果

腐食生成物の核種吸着効果を含むオーバーパック腐食膨張の核種移行への影響、及び放射線分解による酸化フロント進展の影響ではリファレンスケースとほぼ同じ結果となった。

また、緩衝材周りでの地下水の回り込みの影響について結果を見ると、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。

地下水の回り込みの影響を考慮して設定した溶解度は、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。

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。

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

6.1 概念モデル

人工バリアシステムから放出される周辺母岩中の移行をモデル化することとし、母岩はチャンネルネットワークと岩体マトリクスという2つの構成物から成るものと仮定する。

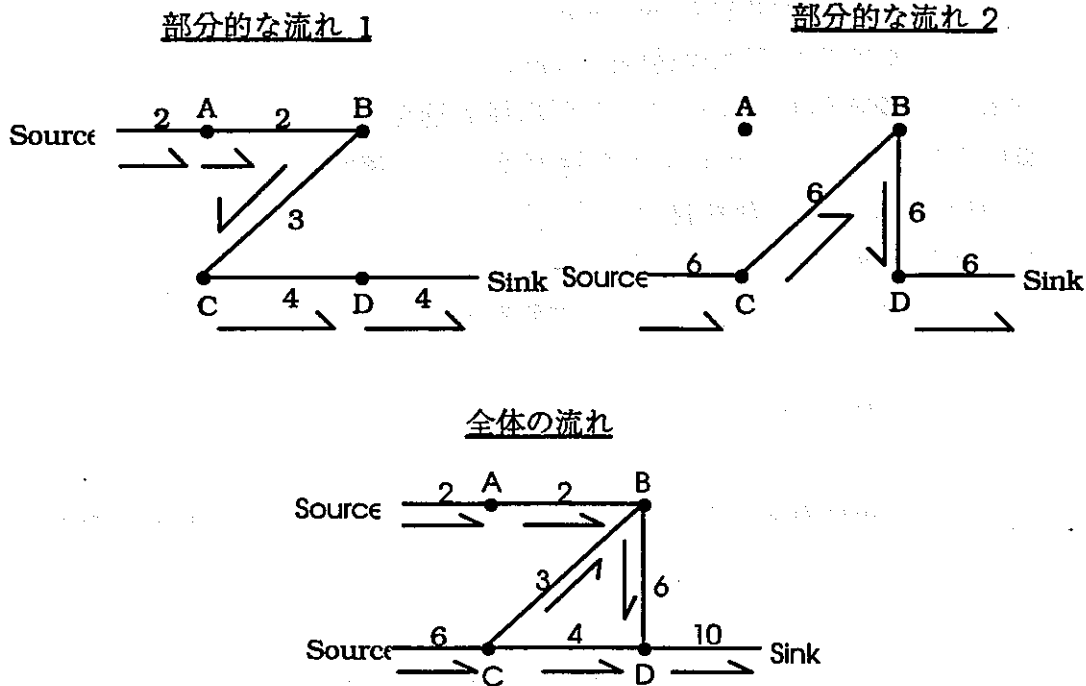
また主なニアフィールド環境変化は、以下の様なカテゴリーに分けることができる。

- (a) 形状変化 = チャンネル及びマトリクスの大きさ及び形状の変化
- (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應速度の変化

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

「疑似順序」という概念を導入し、作成したネットワークの例を図 6.2.1 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 6.2.1 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

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

$$\left(A_c C_c^{ij} \right)_t = D_c \left[A_c \left(\beta_c^{ij} C_c^{ij} \right)_x \right]_x - \left[q_c \beta_c^{ij} C_c^{ij} \right]_x - \sum_{j \neq k} A_c R^i \left(C_c^{ij}, C_c^{ik} \right) - \lambda^i A_c C_c^{ij} + \lambda^{i-1} A_c C_c^{i-1j} - \delta_c A_c F^{ij}$$

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 [$m^3/year$]
 β_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 [$mols/m^3/year$]
 λ, λ^{-1} : 核種 i 及びその親核種の崩壊定数 [$1/year$]
 δ_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

θ_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
 [$mols/m^3$]

D_m^i : マトリクス内の溶存形の核種 i の拡散係数 [$m^2/year$]

ξ_m : 座標係数 例え、1次元の Cartesian は $\xi_m = 1$, 1次元の Cylindrical は $\xi_m = y$

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 $q_{km}(t) \leq q_{k+1m}(t), \forall t \geq 0$ 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。

$$(6.3) \quad q_k = \sum_m \text{sgn}(k, m) q_{km}(t),$$

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 δ_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 θ_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 Ψ にも依存しており、以下の様に表現される。

$$(6.4) \quad \begin{aligned} \alpha_m^{ij} &= \alpha_m^{ij}(C_m^{ij}(x, y, t), \Psi(x, y, t)), \\ \beta_c^{ij} &= \beta_c^{ij}(C_c^{ij}(x, t), \Psi(x, 0, t)) \end{aligned}$$

6.3 シャドウ関数のための関数形のテンプレート

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。

6.4 例題についての解析

最初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。

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核種移行挙動についてのパラメータをシャドウ関数で表し、モデル化を検討する。

統計的に作られたチャンネルネットワークの例を図 6.4.1 に示す。

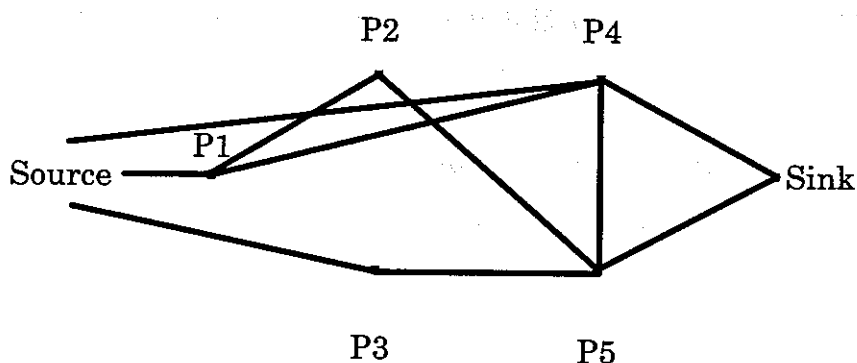


図 6.4.1 テストケースの対象とするチャンネルネットワークの例

各点のランクは、P1がランク1、P2及びP3がランク2、P4及びP5がランク3とする。

単一のレグからなる系について、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解析した。また、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。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。

さらに、統計的に作成された図 6.4.2 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。

解析の結果、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。

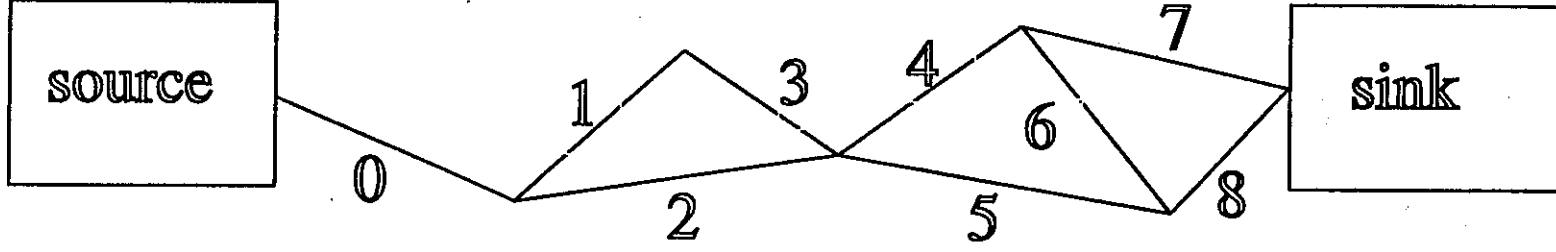


図 6.4.2 テストケースのために作成されたチャンネルネットワークの例

7. まとめ

(1) 人工バリア中核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り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。

(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で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。

1. Introduction

We expand and apply the methodology of Scenario Exploration Method to the following three field.

- 1) To conduct a more thorough stochastic calculations using SSTM with improved efficiency and to support the results obtained so far.
- 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. The existing deterministic calculation code is also applied for the 'reference' case provided by PNC. Both calculation results was estimated.
- 3) To extend the methodology further and develop a shadow model for nuclide transport through near-field host rock. To analyze the exercises using this developed model.

2. The methodology of Scenario Exploration Method

The scenario exploration methodology described in this report provides an alternative to top-down scenario analysis. The objective of the methodology is to search for key scenarios within an envelope of possible behavior. Complex internal and external events are included within simulations by default, rather than being omitted on the basis of subjective expert judgment. The search conducted is exhaustive and incorporates many degrees of freedom in the possible scenarios. The search is, therefore, more complete than a conventional language-based top-down scenario analysis, where coverage of calculational cases is prescribed prior to calculation, and is limited by the resolution of the terminology.

An exhaustive search can be carried out because the focus of the methodology is on the generic behavior, so rather than deploying extremely detailed models, the methodology uses shadow models whose focus is on functional behavior. This facilitates the inclusion of more features, events and processes and the generalization of extrapolation of known scenarios. Hence we can answer question such as "was the assessment framework designed to be inclusive, and incorporate a wide variety of possible impacts upon and changes to the system?" with the confident response "a wide range of externalities are characterized by their generic impacts upon the migration

system, not by their source”.

The outputs from the search for key scenarios are quantitative answers to questions such as “what kind of scenarios may lead to behavior that is critical to performance assessment?” and “how can events and processes combine and be sequenced in order to obtain high release behavior?”. The quantitative answers identify common properties from scenarios having similar radionuclide releases and enable precise reporting of results to an expert group. This is an advance on the top-down scenario approach, since instead of asking experts broad questions such as “what can happen?” or “how can high or critical release occur?”, experts are shown particular scenarios that result in critical releases and are asked focused and specific questions like “can this happen?” or “what is uncertain?”. Thus expert knowledge is channelled to considering only scenarios of critical interest.

3. Stochastic calculations and improving efficiency of it

To show the reliable results of stochastic calculations, we need to check the number of samples is enough to achieve the analysis compared with the volume of analytical space. Firstly there is a necessity of comprehensive and uniform sampling for cluster analysis. We need the number of samples is enough to achieve the goal to fix cluster division.

On the second level of sampling, dominant parameters set on typical figures like a reference case or high peak release rate case. Under these condition, sensitivity of the other parameter were examined.

To improve efficiency of analysis, the number of parameters was decreased. To fix the nuclide is efficient way because more than half of parameters depend on the nuclide feature.

The procedure of stochastic calculations was shown in the Figure 3.1. Combined cluster analysis and linear regression was tried on both linear scale and log scale.

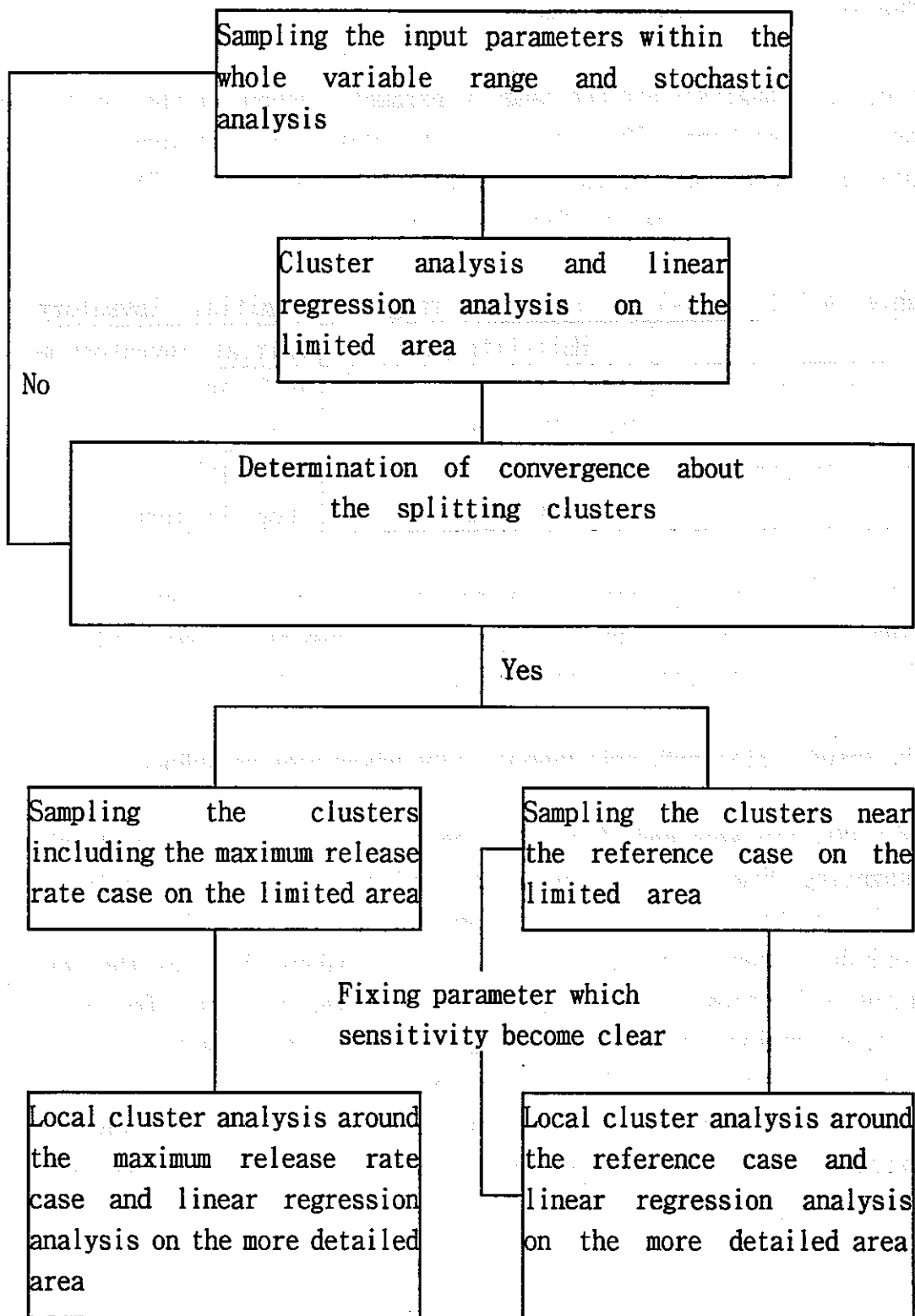


Fig.3.1 Procedure of whole stochastic analysis.

4. Stochastic calculations and sensitivity analysis relating to migration in engineered barrier system

4.1 The premise and condition of analysis

The premise of analysis and the range of parameter depend on the conclusion of last year's workshop. The feature of this year's calculations is to set the abstract decay pair of initial inventory and half-life. The range of these parameter are shown in Table 4.1.1.

Table 4.1.1 Half-life and the range of initial inventory

	Half-life(year)	Initial inventory(mol)
Parent nuclide	$10^3 \sim 10^7$ (Log Uniform)	$10^{-2} \sim 10^1$ (Log Uniform)
Daughter nuclide	$1 \sim 10^7$ (Log Uniform)	$10^{-2} \sim 10^1$ (Log Uniform)

The shadow sub model of chemical and migration feature are represented by the form of $V C = v \beta C$ and $D C = D_0 \alpha C$. V represents mean advection coefficient. D represents mean diffusive coefficient.

4.2 The result of stochastic calculations on the whole area sampling

Around 6,000 runs were made for the stochastic calculations from the whole area sampling. Figure 4.2.1 shows scatter plots of stochastic analysis of common logarithms scale of results from the sampling over the whole area. The nuclide release rate differ over the 100 orders. Most of the result is in the order from 0 to -25. There are two kind of tails. One of them is on the extension line of crowded region in the order from 0 to -25. This tail makes the trend that the two nuclide's release rate is almost same.

Another tail is diverge into just under direction. This tail cope with the extremely low release rate. The sensitivity is obviously decided by the half life of each nuclide.

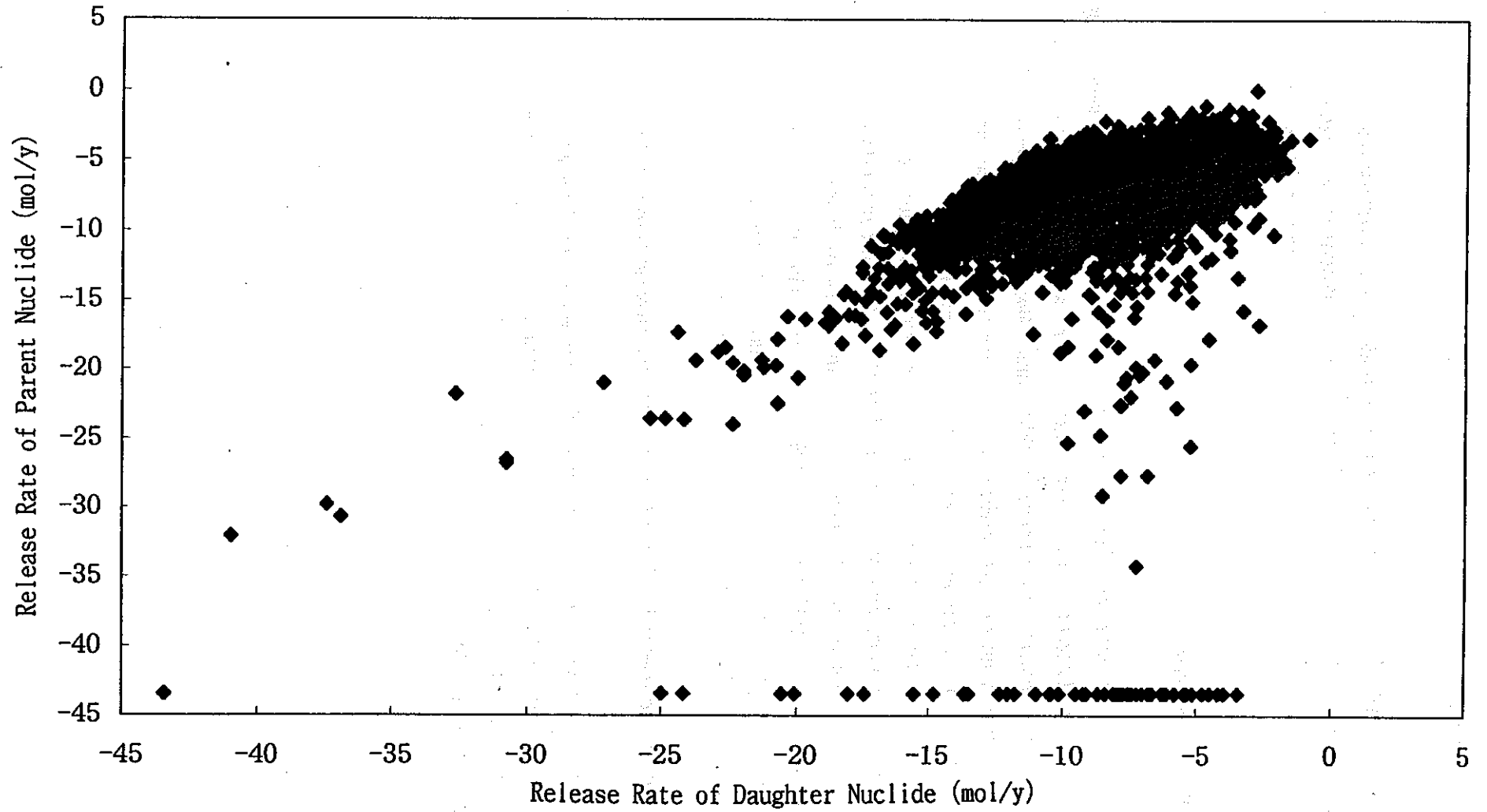


Fig.4.2.1 Scatter plots of stochastic analysis results from the sampling over the whole area. (Common logarithms scale)

4.3 Sensitivity analysis over the whole area

Stochastic calculations using shadow model are correspond stochastic samples to two output (highest release rate of daughter nuclides and their parents). It is the function from two dimensional space to 49's dimensional space.

4.3.1 Division of clusters

The correlation between cluster analysis of linear scale and mean square errors obtained from partial linear regression is shown in Fig 4.3.1. Sample volume of the results is around 6,000 runs. Mean square errors decrease rapidly accompanied by the number of the clusters. The mean square errors will be almost 0 in cases of more than 6 clusters.

Clusters identified on linear scale correspond to higher release rate and they include only some analysis cases. Results of cluster analysis on linear scale should be used for the sensitivity analysis of higher release rate. For this purpose, 1,000 cases of sampling over the whole area is enough. As the same way, cluster analysis of logarithm scale and mean square errors obtained from partial linear regression is shown in Fig 4.3.2.

4.3.2 Importance analysis of input parameter by moving band method

Moving band analysis was performed for parents and daughter nuclide. Parameters of non-zero trend on the moving band analysis were shown in Table 4.3.1. In the table, "positive" means high input parameter makes high release rate and "negative" means high input parameter makes low release rate.

Table 4.3.1 Parameters having non-zero trend on the Moving Band analysis.

	Parameter	Trend of release rate
1	Parent half-life	Positive(parent, daughter)
2	Daughter half-life	Positive(daughter)
3	Parent inventory	Positive(parent, daughter)
4	daughter inventory	Positive(daughter)
7	Parent retardation factor	Negative(parent)
19	Daughter retardation factor	Negative(daughter)
31	Glass dissolution time	Negative(parent, daughter)
34	Hydraulic conductivity of EDZ	Positive(parent, daughter)
35	Hydraulic conductivity of rock	Positive(parent, daughter)

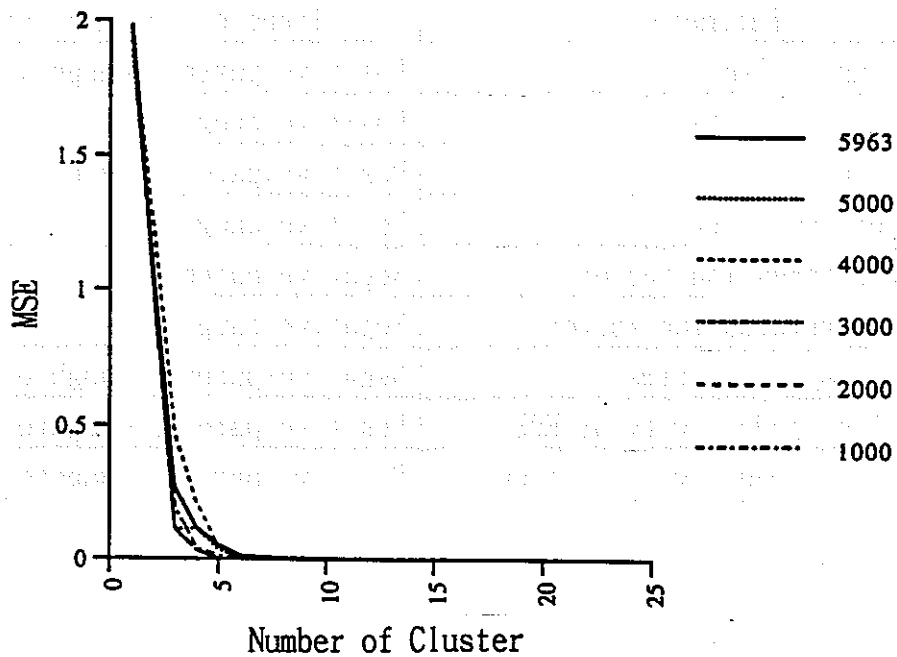


Fig.4.3.1 Correlation between the cluster numbers and Mean Square Errors(MSE) calculated by the stochastic analysis results from the sampling over the whole area. (Linear scale)

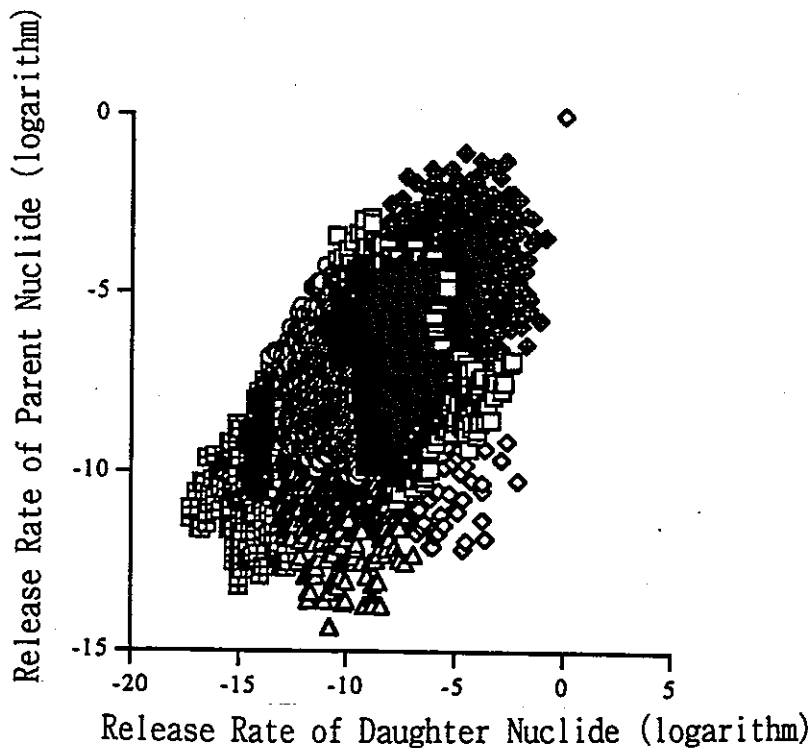


Fig.4.3.2 Distribution of major clusters identified by the cluster analysis on logarithm scale.

4.3.3 Sensitivity analysis

Main component analysis was performed about main 6 clusters identified by cluster analysis on logarithm scale. Dominant parameters identified by main component 1 and 2 of cluster 4 and 2 including meaningful release rate region are almost same as identified non-zero trend parameters by moving band analysis.

4.4 Stochastic calculations by the 2nd local sampling

4.4.1 Area and purpose of local sampling

Sensitivity analysis to results of stochastic calculations over the whole area indicates obviously important parameters is dominant to the sensitivity of the result. Sensitivities of other parameters are covered these dominant parameters. Under these circumstances, the local sampling is efficient to get more highly advanced information. In the local sampling, obvious parameters are fixed on typical figures and other parameters which is not identified its importance and sensitivity are sampled.

4.4.2 Analytical condition of local sampling

In the 2nd sampling, 9 parameters are fixed corresponding to highest release case or reference case. The other 40 parameters are sampled over the whole area.

4.4.3 The result of 2nd local sampling corresponding to highest release case

Figure 4.4.1 shows results of stochastic calculations on 2nd local sampling near highest release case (3,800 cases). These results show the "y" shape correlation between the release rate of parent nuclides and daughter nuclides. The long side of "y" shape is characterized by radioactive equilibrium of Np-237 and Th-229. The short side of "y" shape is characterized by release rate of Th-232 which rate is determined by glass dissolution rate. Table 4.4.1 shows the parameters having non-zero trend on the Moving Band analysis.

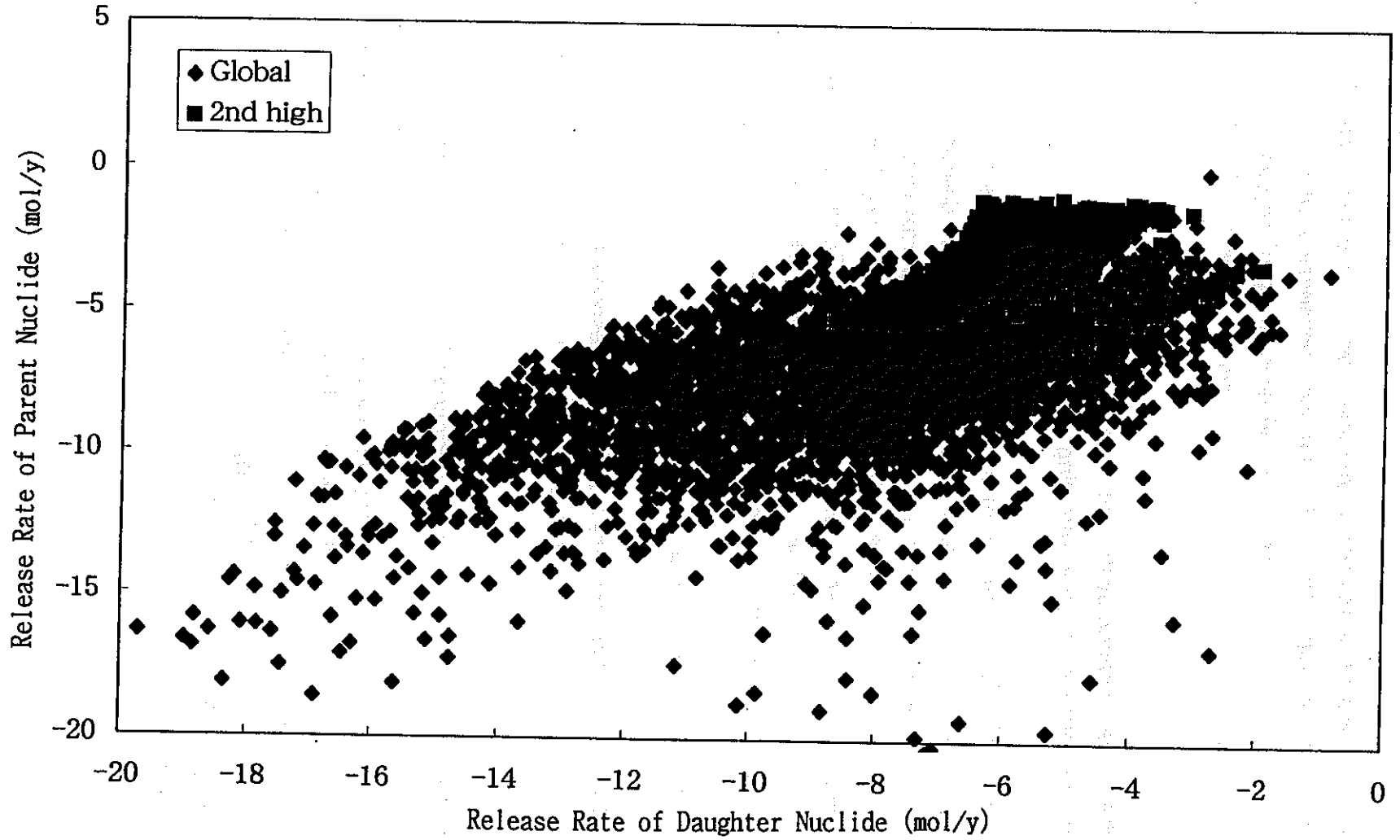


Fig.4.4.1 Stochastic analysis results from the second sampling in the maximum release case.(3800 case)

Table4.4.1 Parameters having non-zero trend on the Moving Band Analysis

	Parameter	Trend of release rate
23	Over-pack corruption time	Positive(daughter)
25	Minimum hydraulic gradient	Positive(parent, daughter)
32	Times when the rapid transition starts	Negative(parent, daughter)
33	Time scale of the rapid transition	Positive(parent, daughter)

The common feature of above shown 4 parameters is relating with physical retardation of nuclides.

Figure4.4.2 shows the sensitivity of input parameters in each cluster. Over-pack corruption time and minimum hydraulic gradient are dominant in each cluster. They cover the more complicated and subtle sensitivity.

4.4.4 The result of 2nd local sampling corresponding to reference case

Figure4.4.3 shows results of stochastic calculations on the 2nd local sampling near reference case (2,200 cases). These results show boundary-line on logarithm release rate of parent and daughter :each -3 to -4 or -6 order.

The release rate of Np-237 in the -3 to -4 order is corresponding to glass dissolution rate. The release rate of Th-229 in the -6 order is also corresponding to glass dissolution rate. It is interesting that some results beyond boundary-line. These cases are not included in the main cluster because the number of them is small.

We can use the moving band method over the whole area including the small cases which are not in the cluster.

Table4.4.2 shows the parameters having non-zero trend on the Moving Band analysis.

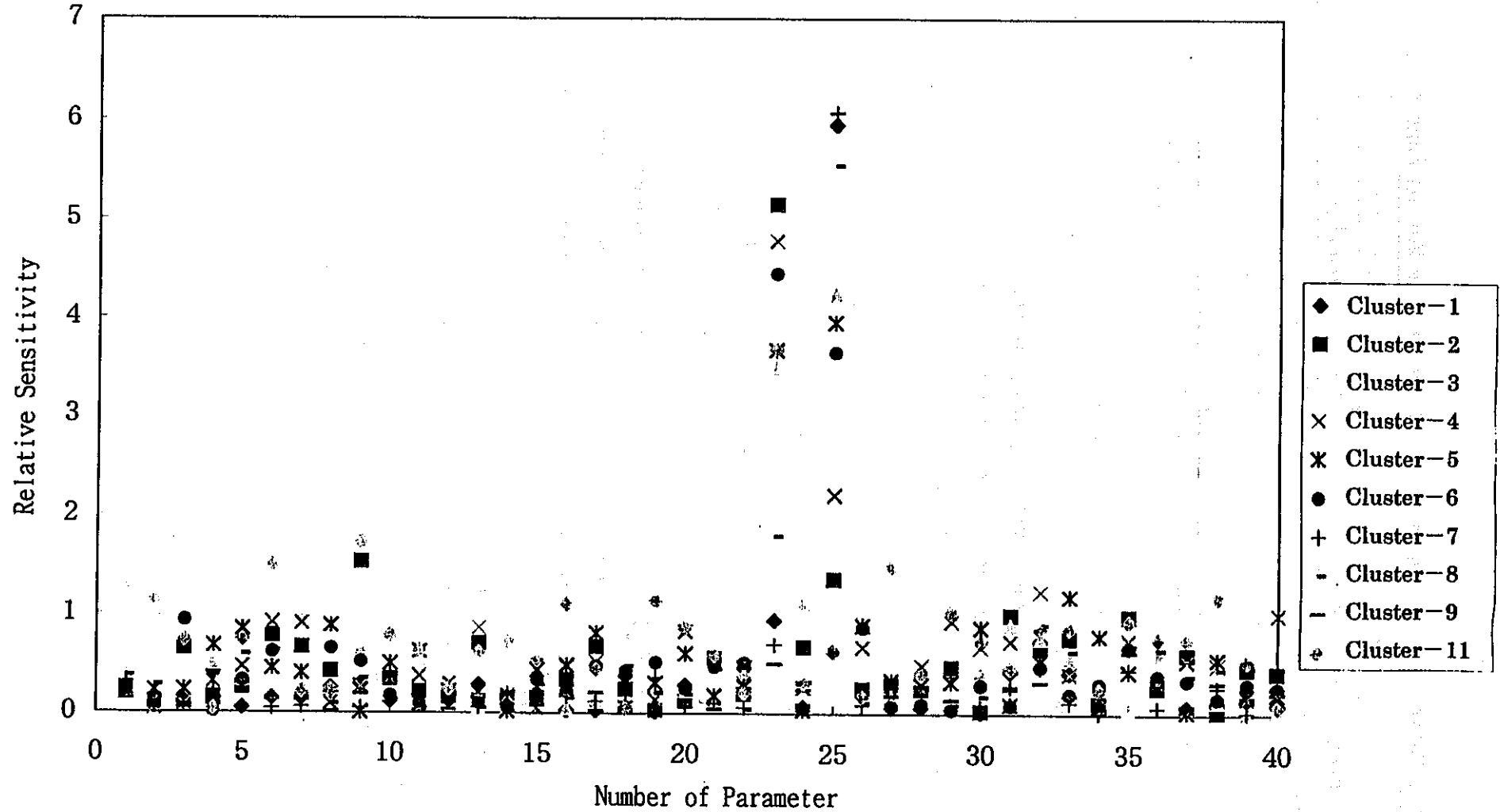


Fig.4.4.2 Sensitivity of input parameters in each cluster.
(Second sampling near the maximum release case:
parent nuclide)

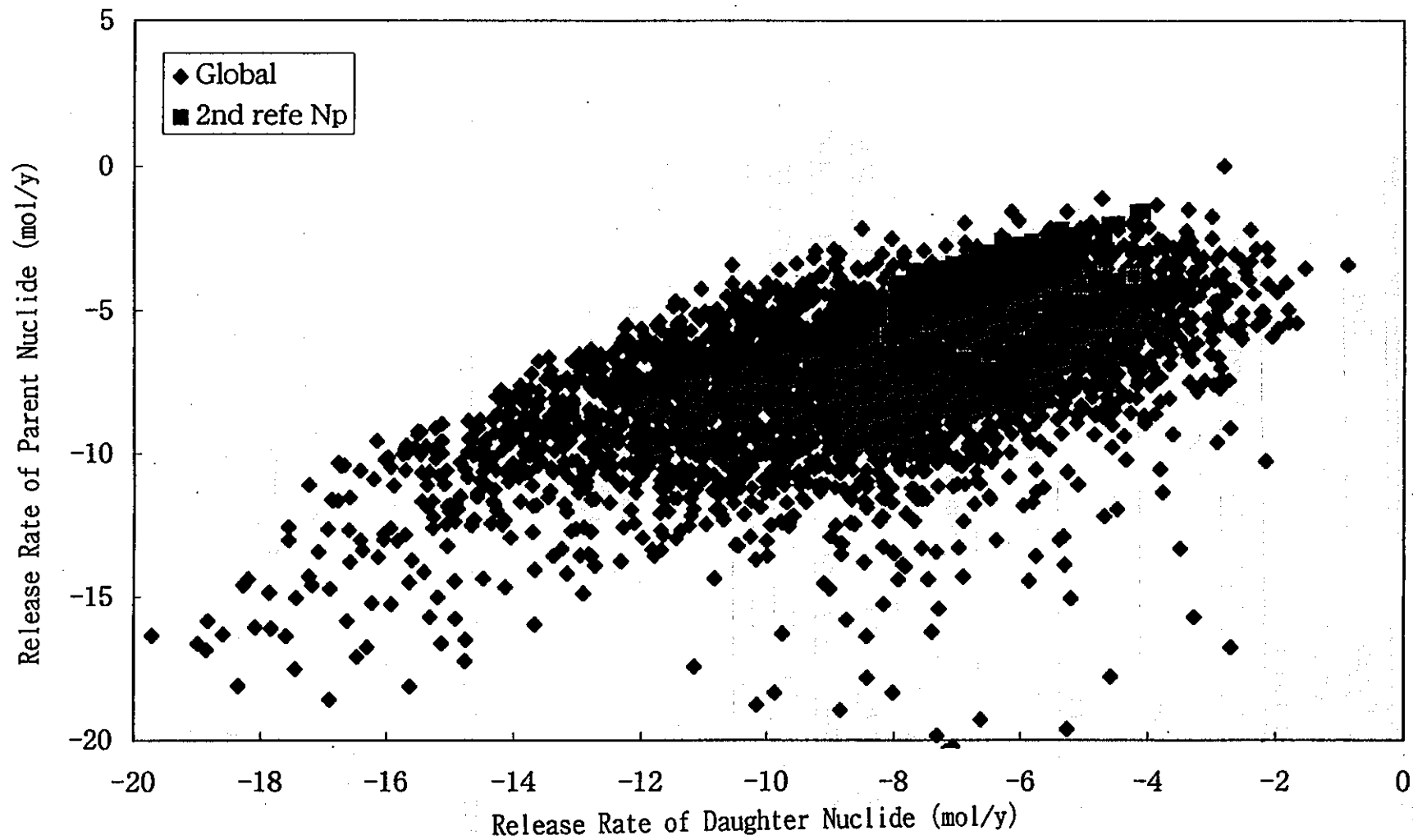


Fig.4.4.3 Stochastic analysis results from the second sampling near the reference case.(Np237,Th229: 2200 case)

Table 4.4.2 Parameters having non-zero trend on the Moving Band analysis.
(Second sampling near the reference case about Np-237 and Th-229)

	Parameter	Trend of release rate
1	The second gradient of parent nuclide (diffusion)	Positive(parent)
10	Passivation rate of parent nuclide	Negative(parent)
11	Dissolution rate of stable phase of parent nuclide	Positive(parent)
12	The second gradient of daughter nuclide (diffusion)	Positive(daughter)
21	Passivation rate of daughter nuclide	Negative(daughter)
22	Dissolution rate of stable phase of daughter nuclide	Positive(daughter)
25	Minimum hydraulic gradient	Positive(parent, daughter)
31	Maximum hydraulic gradient	Negative(parent, daughter)
33	Time scale of the rapid transition	Positive(parent, daughter)
39	Time scale of the chemical anomaly	Positive(parent, daughter)

Parameter 1, 10, 11, 12, 21, 22 show different trend that they are beyond or under the border line. This will make a guess that above mentioned migration mechanism beyond the glass dissolution determining rate is depend on the precipitation front.

4.5 Stochastic calculations by the 3rd local sampling

The following estimation is introduced from the result of 3rd stochastic calculations:

There is a possibility that kinetic passivation like a irreversible adsorption, precipitation as stable phase and crystallization make a buffer reaction to rapid alteration of system and play a important role to the robustness of multi-barrier system.

5. Deterministic calculations for migration in the engineered barrier

5.1 Deterministic calculations using shadow source term model

To apply the SSTM in a deterministic mode where all the shadow functions are specified according to a set of physical (real) phenomena which need to be taken account in the H12 performance assessment as perturbations to the reference case.

5.1.1 Reference case

The near field of reference case consist of;

- glass waste form,
- steel overpack,
- buffer material (70% Kunigel-V1 bentonite + 30% sand),
- decomposition zone in the host rock,

The nuclides to be taken into account in the reference case calculations are as follows;

- Am-243 → Pu-239 → U-235
- U-238
- Am-241 → Np-237

5.1.2 Perturbations to reference case

In what follows we list the perturbations to reference case to be modeled by the SSTM.

- Geometry transition of engineered barriers from the swelling of overpack corrosion product
- Effect of incomplete mixing in decompressed zone
- Flow of buffer pore water driven by gas pressure
- Effect of kinetic dissolution/precipitation reactions
- Effect of element dependent diffusivity
- Effect of sorption onto corrosion product layer
- Effect of redox product by the radiolysis of porewater

5.1.3 Results

5.1.3.1 Reference case

Figure 5.1.3.1 shows the result of reference case. Figure 5.1.3.2 shows the comparison of analysis results of reference case by shadow model related

to migration analysis in engineered barriers with those by MESHNOTE. We can understand peak release rates of Np-237, U-238, Pu-239 and Am-243 calculated by shadow model and MESHNOTE are almost same. On the contrary, Those of U-235 and Am-241 differ from each other. This is because that shadow model did not consider the shared solubility. MESHNOTE consider the shared solubility of U and Am.

5.1.3.2 Porewater transition by gas

Time scale of Porewater transition by gas is so short compared with the nuclide migrate scale. The result is not so different from the result of reference case.

5.1.3.3 Effect of kinetic dissolution/precipitation reactions

Experiments of precipitation shows solubility determining solid phase like a hydroxide are observed around several weeks to several years. So first order kinetic coefficient was set 0.1 to 1 per year. These results are almost same compared with the result of reference case.

5.1.3.4 Effect of element dependent diffusivity

Each element dependent diffusivity was set as shown in the Table 5.1.3.1

Table 5.1.3.1 Diffusion coefficients depending on the species of element.

Nuclide	Diffusion coefficient in porewater (m ² /yr)
A m	1.89E-3
P u	1.89E-3
U	1.42E-2
N p	1.42E-2

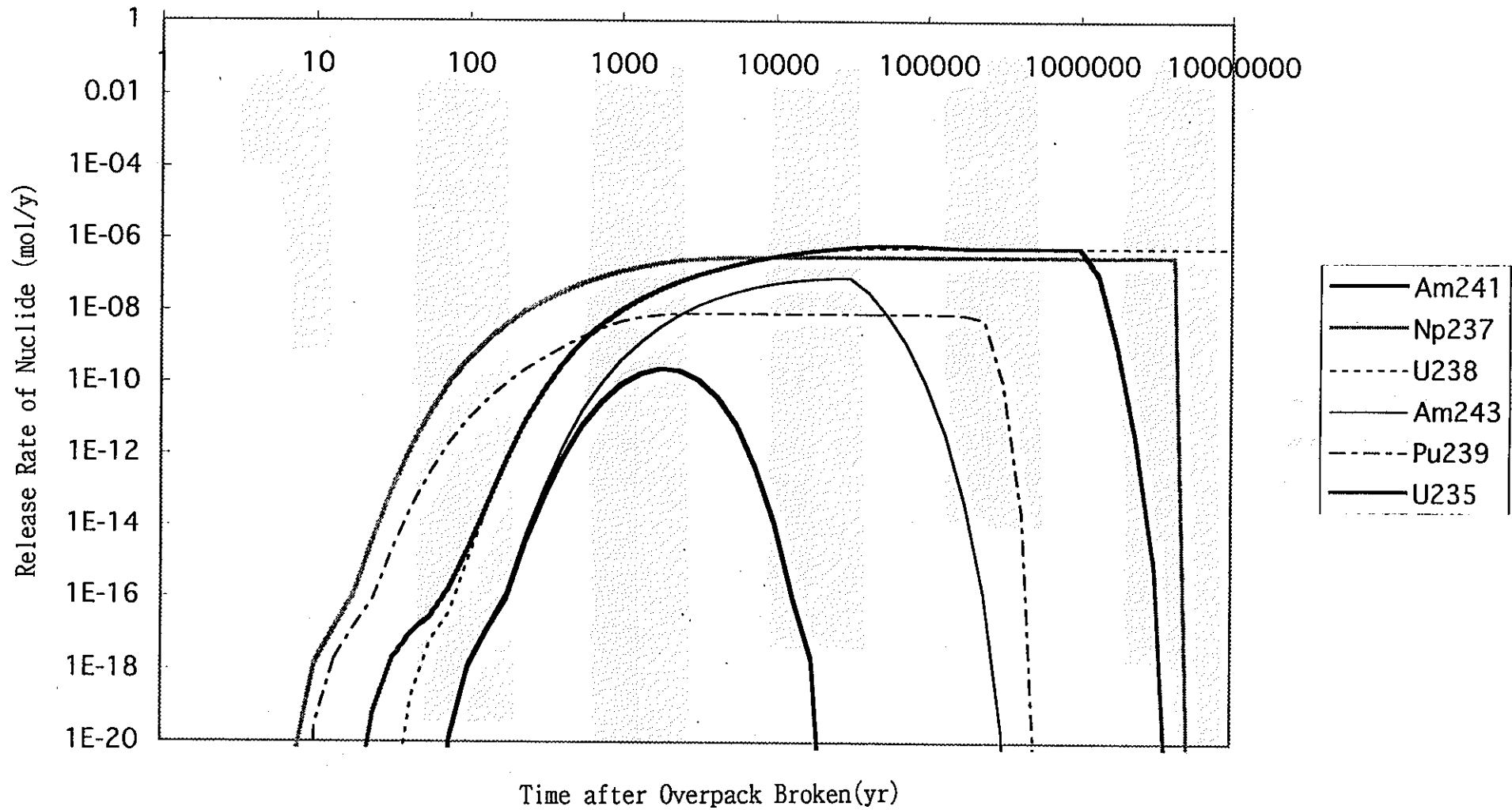


Fig.5.1.3.1 Analysis results of the reference case by use of the shadow models related to migration analysis in the engineered barrier.

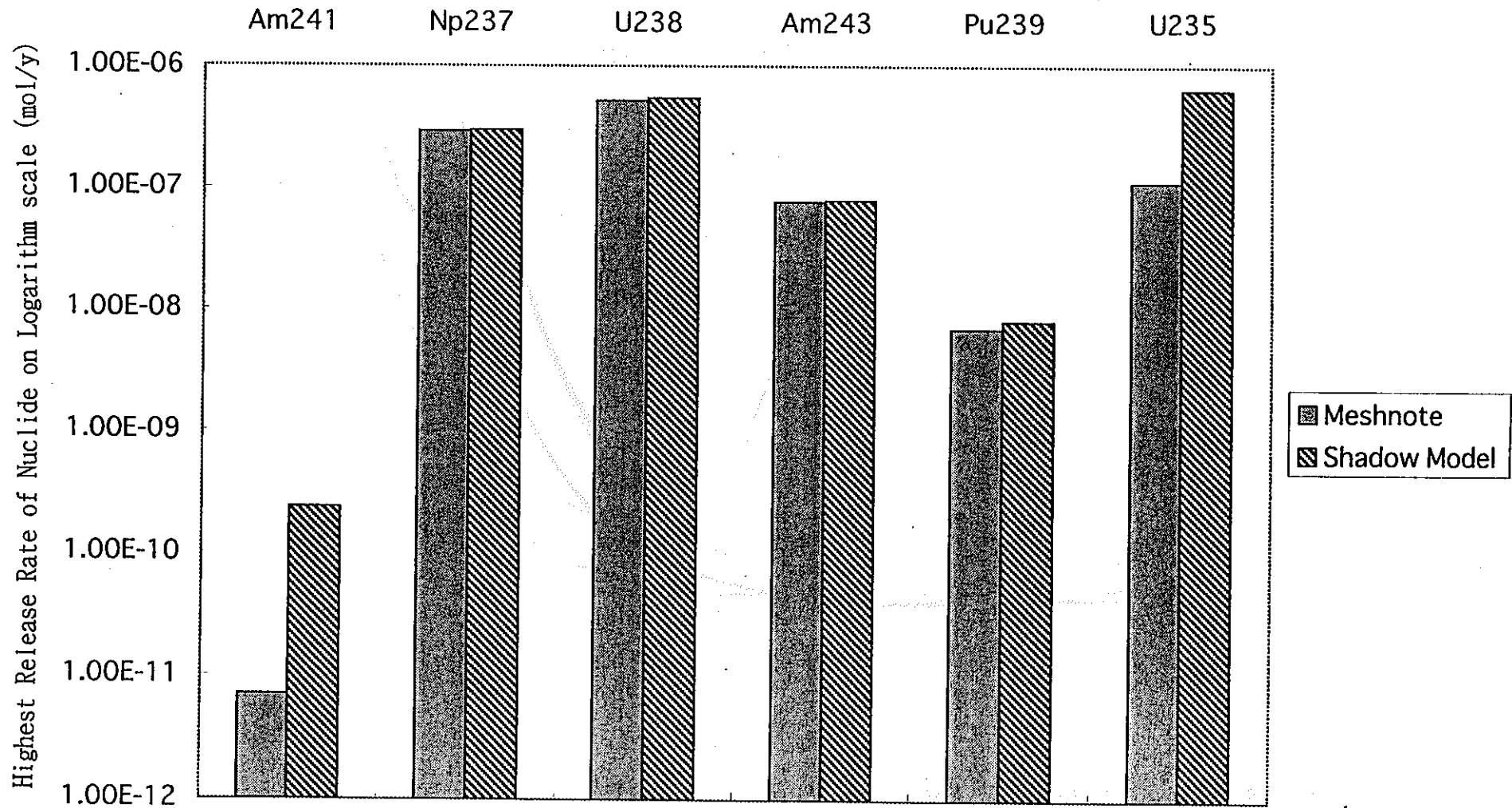


Fig.5.1.3.2 Comparison of the analysis results of the reference case by the shadow models related to migration analysis in engineered barrier with those by MESHNOTE.

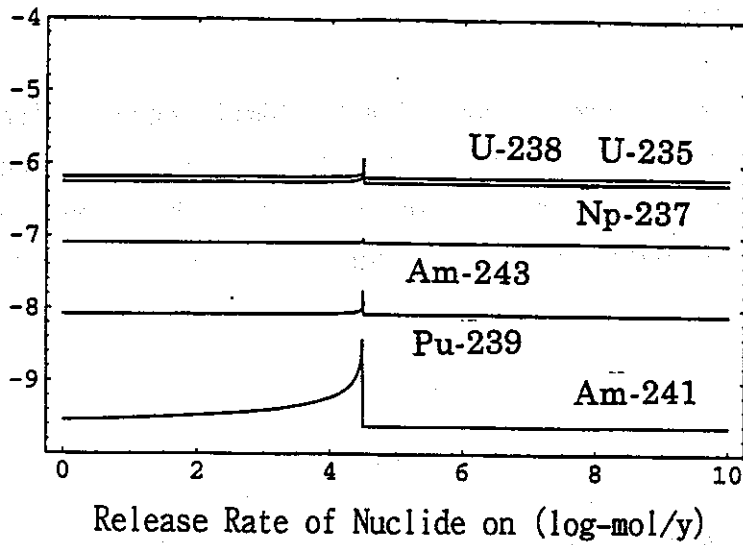


Fig.5.1.3.3 Analysis results of the influence on the advection by gas pressure.(Case 1a: capillary radius 0.1mm)

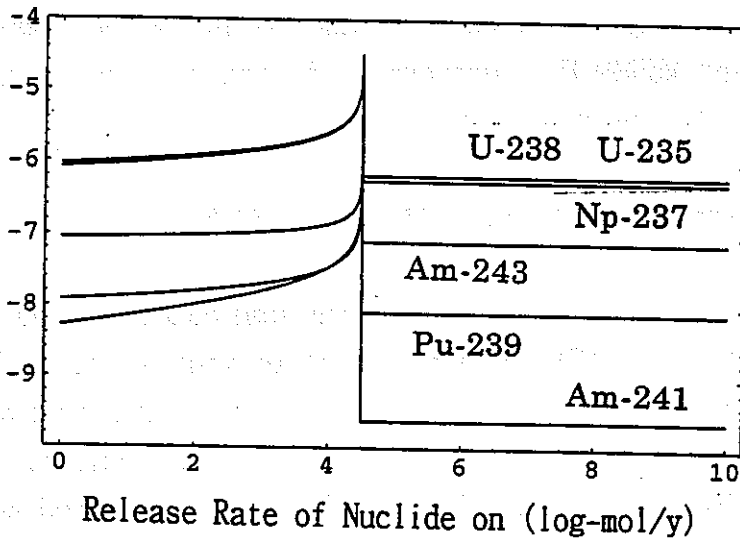


Fig.5.1.3.3 Analysis results of the influence on the advection by gas pressure.(Case 1b: capillary radius 1.0mm)

5.1.3.5 Effect of redox product by the radiolysis of porewater

Redox front will move forward about 11cm for 10million years from the result of calculation that all of oxidizing agents produced by radiolysis go through the overpack to buffer material and they react with pyrite instantaneously in buffer material. Under this condition, we analyzed that the result is not take more high peak release rate than that of reference case.

5.1.3.6 Effect of overpack corrosion product

Using SSTM the Effect of overpack corrosion product was analyzed. We calculated migration of Am-241 and Np-237 in the engineered barriers. The result is almost same compared with that of reference case. It shows the effect of overpack corrosion product to the transition of geometry in the engineered barrier is small.

5.2 Deterministic calculations using MESHNOTE

To support analysis of reference case by MESHNOTE which is a calculation code for migration in engineered barriers applied by PNC, we compared with results by SSTM and MESHNOTE. Furthermore We analyzed perturbations of reference case in the engineered barriers.

5.2.1 Comparison with the results by SSTM and MESHNOTE

We analyzed the migration of nuclides under the same condition and parameter which is same as those of SSTM. We analyzed three kind of cases. Those are reference case fixed by PNC, effect of overpack corrosion product and effect of redox product by the radiolysis of porewater. The result of reference case is shown in Figure 5.1.3.2. Without the effect of shared solubility of nuclide, Results of calculations by SSTM and MESHNOTE are almost same in all cases.

5.2.2 Perturbations of reference case

5.2.2.1 Analysis case

We analyzed the migration of nuclides under the condition of perturbations

of reference case in engineered barriers. Cases as perturbations of reference case are;

- Geometry transition of engineered barriers from the swelling of overpack corrosion product
- Effect of ground water taking the long way round in decompressed zone
- Effect of sorption onto corrosion product layer
- Effect of redox product by the radiolysis of porewater

5.2.2.2 Results

Results of effect of overpack corrosion product and redox product by radiolysis of porewater are almost same as that of reference case.

The result of the effect of ground water taking the long way round in decompressed zone is not differ distinctly. This is because the fixed solubility is relatively high and under this condition nuclides do not make precipitation. The solubility for each nuclide set up as considering the effect of ground water taking the long way round.

All of results do not have higher peak release rate because the soundness of bentonite buffer was kept through the estimate period.

6. Formulation of shadow near field rock transport model

6.1 Model

The migration of shadow near field rock transport is modeled. We assume that the host rock consist of the two distinctive component. One is net work channel. The other is matrices of rock.

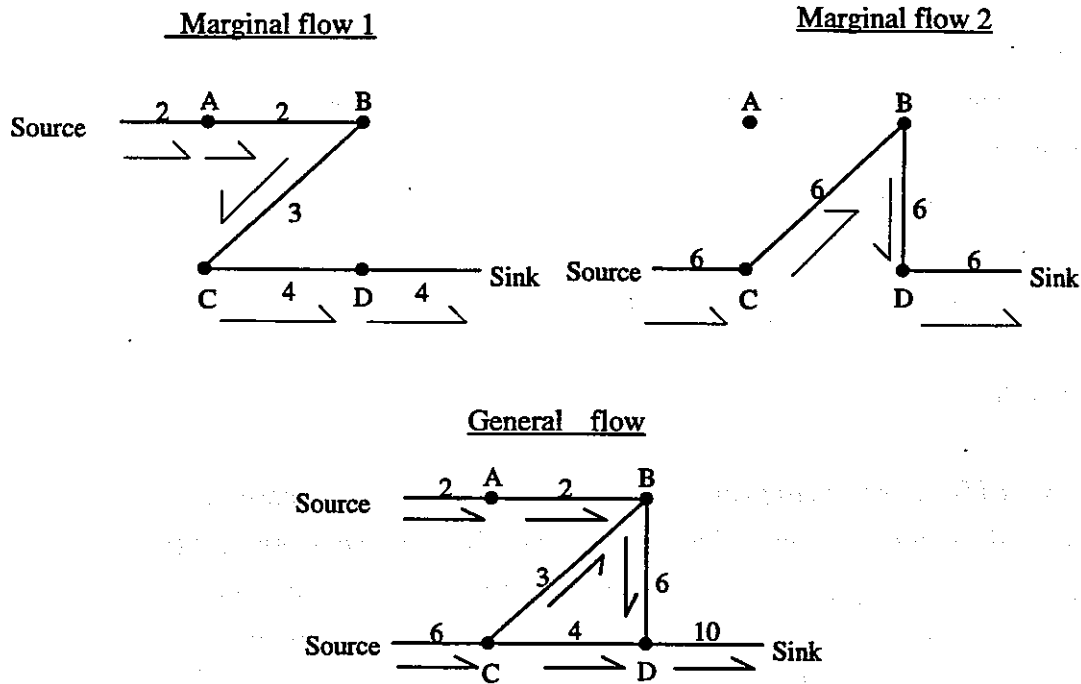
Main transition of near field environment is categorized as follows;

- transition of geometry
- transition of hydrology
- Transition of geochemistry

6.2 Mathematical formulation

6.2.1 representation of channel network

We introduce the concept of "pseudo-order". Figure 6.2.1 shows example of network. In this particular example, We introduce four points, {a, b, c, d} and introduce the following "pseudo-order" shown in Figure 6.2.1 and define two marginal flows.



Rank 1	A
Rank 2	B,C
Rank 3	D

Fig.6.2.1 Definition of the distribution of flow and channel network.

6.2.2 General advection-dispersion-matrix diffusion equation for single leg

We formulate a general advection-dispersion-matrix diffusion system for the collected state j of a nuclide i in a single leg by the following equations;

(1) Channel transport equation

$$(A_c C_c^{ij})_t = D_c [A_c (\beta_c^{ij} C_c^{ij})]_x - [q_c \beta_c^{ij} C_c^{ij}]_x - \sum_{j \neq k} A_c R^i (C_c^{ij}, C_c^{ik}) - \lambda^i A_c C_c^{ij} + \lambda^{i-1} A_c C_c^{i-1j} - \delta_c A_c F^{ij},$$

where

X : Coordinate along the channel,

A_c : Cross section of the channel [m^2]

$C_c^{ij}(x,t)$: Total concentration of collected state j of nuclide i in the channel [$mols/m^3$],

D_c : Dispersion coefficient in the channel [$m^2/year$],

q_c : Flow rate in the channel [$m^3/year$],

β_c^{ij} : Advective mobility of collected state j of nuclide i [-],

R^i : Kinetic reaction rate from collected state j to k [mols/m³/year],
 λ^i, λ^{i-1} : Decay constant of nuclide i and its parent respectively [1/year],
 δ_c : Surface area unit volume of flowing water [m²/m³]
 F^{ij} : Loss rate from the channel to the matrix [mols/m²/year],

(2) Matrix transport equation

$$(\theta_m C_m^{ij})_t = \frac{1}{\xi_m(y)} \left[\theta_m D_m^i \xi_m(y) (\alpha_m^{ij} C_m^{ij})_y \right] - \sum_{j \neq k} \theta_m R^i (C_m^{ij}, C_m^{ik}) - \lambda^i \theta_m C_m^i + \lambda^{i-1} \theta_m C_m^{i-1},$$

Where

y : Coordinate in the matrix,
 θ_m : Porosity of the matrix [-],
 $C_m^i(x,y,t)$: Total concentration of collected state j of nuclide i in the matrix [mols/m³],
 D_m^i : Diffusion coefficient of dissolved nuclide ii in the matrix [m²/year],
 α_m^{ij} : Diffusive mobility of collected state j of nuclide i [-],
 ζ_m : Coordinate factor, e.g., $\zeta_m=1$ for Cartesian-1D, $\zeta_m=y$ for Cylindrical-1D.

6.2.3 Shadow submodel

In the general advection-dispersion-matrix diffusion equation, number of "free" parameters are involved. We design the following set of shadow submodels so that we can model impacts of a wide range of internal/external processes on nuclide transport by making optimal use of the degree of freedom remaining in the formulation described in 6.2.2.

6.2.3.1 Flow rate

We denote the "marginal" flow rate through the k th leg in the m th sequence by $q_{km} = q_{km}(t) \geq 0, \forall t \geq 0$ and we claim $q_{km}(t) \leq q_{k+1m}(t), \forall t \geq 0$. Then the flow rate of this leg is given by

$$q_k = \sum_m \text{sgn}(k,m) q_{km}(t),$$

where $\text{sgn}(k,m)$ is direction of the marginal flow through the k th leg in the m th sequence which can be defined in an unambiguous manner by taking any ordering in the set of points (joints of the legs).

6.2.3.2 Channel cross-section, flow wet surface and matrix porosity

The channel cross-section, A_c , and the flow wet surface of the channel, δ_c , can be any reasonable (e.g., continuous and differentiable) function of x, t , while the matrix porosity, θ_c , can be any reasonable function of x, y, t which needs to be reasonable as a function of x, t .

6.2.3.3 Mobility functions

Unlike the other shadow functions, the mobility functions are also dependent on the total concentrations and the geochemical index, Ψ . Hence we have

$$\alpha_m^{ij} = \alpha_m^{ij}(C_m^{ij}(x, y, t), \Psi(x, y, t)),$$
$$\beta_c^{ij} = \beta_c^{ij}(C_c^{ij}(x, t), \Psi(x, 0, t)).$$

6.3 Functional templates

6.3.1 Piecewise linear template

One of the simplest class of the shadow function is the ones which depend on a single variable, e.g., the "marginal" flow rate $q_{km}(t)$ and the mobility functions at a fixed geochemical index. For these shadow functions, it is often appropriate to apply the piecewise linear template.

6.3.2 n+1-dimensional ellipsoid template

Another simple but important class of the shadow function corresponding to propagation of the front two distinctive states. A simple starting point to describe propagation of such front-like structure in n-dimensional space is an n+1-dimensional ellipsoid.

6.4 analysis of exercises

The example of stochastic channel network is shown in Figure 6.4.1.

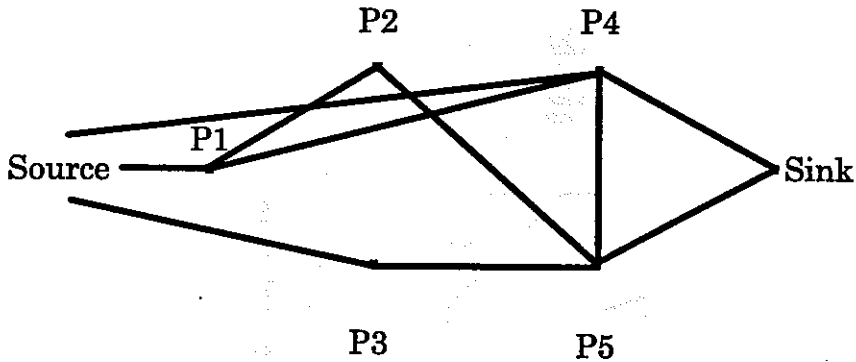


Fig.6.4.1 An example of the channel network targeted by the test case.

Rank of each points are as follows;

rank1 : P1

rank2 : P2, P3

rank3 : P4, P5

We analyzed time dependent total concentration in channels and matrices consist of single leg.

Furthermore we analyzed single nuclide transportation with an example of the stochastic channel network constructed for the test case. The result shows concentration profile is expanding to lower side with progressing of time. Upper side like channel 0 and channel 2 are in a steady state after 100thousand years. On the contrary, channel 4 and channel 6 are not in a steady state because concentration profiles after 100thousand years and 1million years differ distinctively.

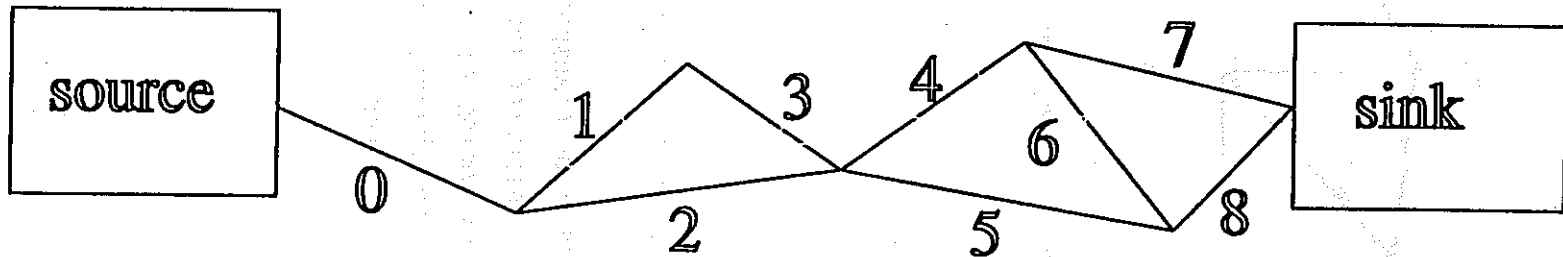


Fig.6.4.2 An example of the channel network constructed by the test case.

7. Conclusion

- (1) We clarified the sensitivity structure by conducting a more thorough stochastic calculations using SSTM with improved efficiency and to support the results. This includes a set of (repeated) importance sampling around high release cases and the 'reference' case defined by PNC.
- (2) We used the SSTM in a deterministic mode and produce a set of calculations for a number of perturbations around the 'reference' case provided by PNC. We also calculated using MESHNOTE. Their results were compared with those of SSTM.
- (3) We extended 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. The developed model was tested through exercise.