

# TRU廃棄物処分の人工バリアシステム

における物質移行－地球化学連成挙動解析に関する研究

## － 成果報告書 －

技術資料		
開示区分	レポートNo.	受領日
△	J1458 94-003	1995.1.5

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

1994年3月

コンピュータソフト開発株式会社

この資料は、動燃事業団の開発業務を進めるため、特に限られた関係者だけに開示するものです。については、複製、転載、引用等を行わないよう、また第三者への開示又は内容漏洩がないよう管理して下さい。また今回の開示目的以外のことには使用しないよう特に注意して下さい。

本資料についての問合わせ下記に願います。

〒107 東京都港区赤坂1-9-13

動力炉・核燃料開発事業団

技術協力部 技術管理室

社内資料  
PNC ZJ 1458 94-003  
1994年3月

## TRU廃棄物処分の人工バリアシステムにおける 物質移行－地球化学連成挙動解析に関する研究

根山敦史<sup>\*1</sup> 郡 正治<sup>\*2</sup> 西村和哉<sup>\*1</sup>  
明石浩一<sup>\*1</sup> 石川裕一<sup>\*1</sup> 渡辺健一<sup>\*1</sup>

### 要 旨

本研究は、TRU廃棄物の処分システムの挙動を長期にわたって予測するための個別現象のうち、化学反応と物質移行現象を結合した評価コードを対象として、以下の研究を実施した。

- (1) 化学反応と物質移行モデルの連成に関する文献を対象として、モデルの概要、解析コードの長短所、適用例について検討する。本研究では、これらの調査研究から米国で開発されたHYDROGEOCHEMコードを選定した。
- (2) 地球化学モデルによる結果は、適切な熱力学データの量と品質に依存している。本研究では、広く使用され且つ高品質である動燃殿所有のPHREEQE 熱力学データベースをHYDROGEOCHEM用の熱力学データベースに変換するプログラムを作成した。
- (3) 解析コードの適用性に関する検討として、一般的な手順に基づき検証・確証解析を実施した。物質移行モジュールの検証は、FEMWATER/FEMWASTE、解析解とのベンチマーク解析を行い、化学モジュールの検証は、PHREEQE とのベンチマーク解析を行った。また、確証は動燃殿で実施した室内実験に基づく解析を行った。
- (4) TRU廃棄物処分システムの人工バリアを対象として、核種移行挙動の試解析を実施した。

---

本報告書は、コンピュータソフト開発株式会社が動力炉・核燃料開発事業団の委託により実施した研究の成果である。

契約番号：050D0305  
事業団担当部課室及び担当者：環境技術開発部地層処分開発室（間野 正）  
\*1 技術本部 科学技術部  
\*2 技術本部

## Studies on Coupling Analysis of Transport and Geochemical to Engineered Barrier System for TRU Waste Isolation

Atsushi Neyama\*<sup>1</sup>, Masaharu Kohri\*<sup>2</sup>  
Kazuya Nishimura\*<sup>1</sup>, Koichi Akashi\*<sup>1</sup>  
Yuichi Ishikawa \*<sup>1</sup>, Kenichi Watanabe\*<sup>1</sup>

### Abstract

In this study, the following tasks have performed in order to take in consideration of coupling of transport and geochemical for performance assessment of engineered barrier system for TRU waste isolation.

- (1) We have researched on the literature for coupling of transport and geochemical models/codes, and discussed their applicability to performance assessment for engineered barrier system of TRU waste isolation. And we have selected coupling code for engineered barrier system of TRU waste isolation. This code is HYDROGEOCHEM which is developed by Dr. Yeh of the Pennsylvania State University under contract with U.S. DOE.
- (2) We have studied on method of operation to thermodynamic database for some models and codes. And we have developed interface program in order to generate thermodynamic database of HYDROGEOCHEM code from data of PHREEQE.
- (3) We have analyzed on verification and validation to confirm applicability of HYDROGEOCHEM code. We have verified FEMWATER/FEMWASTE as benchmark analyses, PHREEQE and analytical equation. And we have refer small scale experimental data which is interaction with water and pure concrete.
- (4) We have analyzed on long term evolution of bentnite and nuclide migration of engineered barrier system for TRU waste isolation by using HYDROGEOCHEM code.

---

Work performed by Computer Software Development Co., Ltd. under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation.

PNC Liaison : Waste Technology Development Division, Geological Isolation Section, Tadashi Mano

\*1 Scientific Engineering Department Engineering Division.

\*2 Engineering Division.

## 目 次

	項 i iii v vii ix
・要 旨	-----
・要 旨	-----
・目 次	-----
・表目次	-----
・図目次	-----
1. まえがき	1-1
2. 実施内容	
2-1 既存コードの調査	2-1
2-2 热力学データベースの効率的な運用方法の検討	2-1
2-3 モデルの適用性の検討	2-1
2-4 人工バリアの長期挙動解析および核種移行解析の試解析	2-2
3. 検討結果	
3-1 既存コードの調査	3-1
3-2 热力学データベースの効率的な運用方法の検討	3-2
(1)標準データを作成してこれを使用する方法	3-2
(2)HYDROGEOCHEM熱力学データ作成用のジェネレータ	3-2
3-3 モデルの適用性の検討	3-3
(1)水理モデルのベンチマーク解析	3-3
(2)物質移行モジュールのベンチマーク解析	3-3
(3)地球化学モジュールのベンチマーク解析	3-4
(4)確認解析	3-5
3-4 人工バリアの長期挙動解析および核種移行解析の試解析	3-6
(1)人工バリアの長期挙動試解析	3-6
(2)核種移行試解析	3-7
4. あとがき	4-1

目 次

	項
付録 A HYDROGEOCHEM に関する最新情報	A-1
付録 B HYDROGEOCHEM 化学モジュールの主要変数の説明	B-1
付録 C 人工バリアの長期挙動試解析の入力データリスト	C-1
付録 D 核種移行試解析の入力データリスト (Cs-135 :セメント固化体系)	D-1
付録 E 核種移行試解析の入力データリスト (Cs-135 :アスファルト固化体系)	E-1
付録 F 核種移行試解析の入力データリスト (I -129 :セメント固化体系)	F-1
付録 G 核種移行試解析の入力データリスト (I -129 :アスファルト固化体系)	G-1
付録 H 核種移行試解析の入力データリスト (Tc- 99 :酸化物系)	H-1
付録 I 核種移行試解析の入力データリスト (Tc- 99 :水酸化物系)	I-1
付録 J 核種移行試解析の入力データリスト (U -234 :酸化物系)	J-1
付録 K 核種移行試解析の入力データリスト (U -234 :水酸化物系)	K-1

## 表 目 次

	頁
表 3-1 既存連成コードの調査結果	3-11
表 3-2 水理・物質移行ベンチマーク解析で使用したパラメータ	3-12
表 3-3 HYDROFLOW(水理モジュール) 検証結果	3-13
表 3-4 HYDROGEOCHEM (移行モジュール) 検証結果	3-14
表 3-5 HYDROGEOCHEM (移流機能) 検証結果	3-15
表 3-6 HYDROGEOCHEM ver.1-1ベンチマーク解析結果 (純水中における方解石の溶解・沈殿平衡)	3-16
表 3-7 HYDROGEOCHEM ver.1-1ベンチマーク解析結果 (純水中におけるCSH(1.8)の溶解・沈殿平衡)	3-17
表 3-8 HYDROGEOCHEM 改良版ベンチマーク解析結果 (純水中における方解石の溶解・沈殿平衡)	3-18
表 3-9 HYDROGEOCHEM 改良版ベンチマーク解析結果 (純水中におけるCSH(1.8)の溶解・沈殿平衡)	3-19
表 3-10 HYDROGEOCHEM 改良版ベンチマーク解析結果 (純水中における黄鉄鉱の溶解・沈殿平衡)	3-20
表 3-11 HYDROGEOCHEM 改良版ベンチマーク解析結果 (純水中における黄鉄鉱・方解石の溶解・沈殿平衡)	3-21
表 3-12 HYDROGEOCHEM 改良版の適用性の検討 (酸化還元平衡の入力に対する解の安定性)	3-22
表 3-13 確証解析結果のまとめ	3-23
表 3-14 ベントナイトの変質解析条件	3-24
表 3-15 核種移行試解析に関する入力条件 (その1)	3-25
表 3-16 核種移行試解析に関する入力条件 (その2)	3-26
表 3-17 核種移行試解析に関する入力条件 (濃度条件)	3-27

## 図 目 次

	頁
図 3-1 移行と化学モジュールの関係（その1）	3-28
図 3-2 移行と化学モジュールの関係（その2）	3-29
図 3-3 移行と化学モジュールの関係（その3）	3-30
図 3-4 移行と化学モジュールの関係（その4）	3-31
図 3-5 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用シェーフローチャート（その1）	3-32
図 3-6 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用シェーフローチャート（その2）	3-33
図 3-7 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用シェーフローチャート（その3）	3-34
図 3-8 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用シェーフローチャート（その4）	3-35
図 3-9 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用入力データ	3-36
図 3-10 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用出力データ	3-37
図 3-11 検証・確証解析に関する手続きのフロー	3-38
図 3-12 水理・物質移行ベンチマーク解析モデル	3-39
図 3-13 ベンチマーク解析（拡散）結果	3-40
図 3-14 ベンチマーク解析（移流）結果	3-41
図 3-15 円柱供試体浸漬試験結果	3-42
図 3-16 確証解析モデル	3-43
図 3-17 確証解析結果	3-44
図 3-18 核種移行解析モデル概念	3-45
図 3-19 核種移行解析モデル	3-46
図 3-20 ベントナイトの変質試解析例（ベントナイト成分濃度）	3-47
図 3-21 ベントナイトの変質試解析例（ベントナイト中方解石量）	3-48
図 3-22 ベントナイトの変質試解析例（間隙水中のpH）	3-49
図 3-23 Cs-135の核種移行試解析例（セメント固化体系）	3-50
図 3-24 Cs-135の核種移行試解析例（アスファルト固化体系）	3-51
図 3-25 I-129の核種移行試解析例（セメント固化体系）	3-52
図 3-26 I-129の核種移行試解析例（アスファルト固化体系）	3-53
図 3-27 Tc-99の核種移行試解析例（酸化物系、1000年）	3-54
図 3-28 Tc-99の核種移行試解析例（水酸化物系）	3-55
図 3-29 Tc-99の核種移行試解析例（水酸化物系、1年）	3-56
図 3-30 Tc-99の核種移行試解析例（水酸化物系、1000年）	3-57
図 3-31 U-234の核種移行試解析例（酸化物系、1000年）	3-58
図 3-32 U-234の核種移行試解析例（酸化物系、1000年）	3-59
図 3-33 U-234の核種移行試解析例（水酸化物系、1年）	3-60

図 目 次

	頁
図 3-34 U-234の核種移行試験解析例（水酸化物系, 1000年）	3-61
図 3-35 U-234の核種移行試験解析例（水酸化物系, 1年）	3-62
図 3-36 U-234の核種移行試験解析例（水酸化物系, 1000年）	3-63
図 3-37 U-234の核種移行試験解析例（水酸化物系）	3-64

## 1. まえがき

TRU廃棄物の処分システムの挙動を長期にわたって予測するには、処分環境において考えられる様々な個別現象についてモデル化を行い、それらを適切に連成させて評価を行う必要がある。考えられる主な個別現象としては人工バリア（廃棄体、コンクリート、ペントナイト）と地下水との化学反応や人工バリア中の物質移行がある。

本研究では、化学反応と物質移行とを連成させたモデルを対象として既存コードの調査・分析を行いモデルの現状を明確にし、解析コード運用に際して必要となる熱力学データベースの効率的な運用方法を検討する。さらにモデルの適用性の検討を踏まえて人工バリアの長期挙動解析および核種移行の試解析を行う。

## 2. 実施内容

本年度は以下の範囲について研究を実施した。

- (1)既存連成コードの調査
- (2)熱力学データベースの効率的な運用方法の検討
- (3)モデルの適用性の検討
- (4)人工バリアの長期挙動解析および核種移行の試解析

各項目毎の実施内容について順次記載する。

### 2-1既存連成コードの調査

既存連成コードの調査においては、化学反応と物質移行とのモデルの連成に関する公開文献を対象として、モデルの概要、解析コードの長短所を明確にするとともに、その適用例について検討する。また、速度論を含めたコードの拡張性についても検討を行なう。この検討結果から、最も適切なモデルを選定しモデル式、入出力情報およびその設定方法に着目した詳細な分析を行う。

### 2-2熱力学データベースの効率的な運用方法の検討

化学反応と物質移行との連成モデルによる解析結果は、膨大な熱力学データの量と品質に依存するものと考える。現在のところ熱力学データは、解析コード毎に管理されているか、あるいは解析コードがデータベースを持っていない場合は、解析を行う毎に熱力学データベースを作成しなければならない。従って、解析作業の効率性、信頼性の観点から熱力学データベースの運用方法について検討を行う。

### 2-3モデルの適用性の検討

モデルの適用性の検討は検証および確認の一般的な手続きを踏まえて行う。モデルの検証については、化学反応および物質移行の各々の個別現象について実施するものとする。検証解析において使用する解析コードについては、化学平衡および物質移行解析コードとして広く使用されているPHREEQE およびFEMWATER/FEMWASTE を使用することとす

る。モデルの確証については、動燃殿が別途実施している「コンクリートの変質挙動に関する実験」データに基づく解析を実施する。

#### 2-4人工バリアの長期挙動解析および核種移行解析の試解析

TRU 廃棄物処分システムにおいて人工バリアとして考えられているコンクリートの変質挙動、コンクリートによるベントナイトのCa型化および核種移行の試解析を行う。

### 3. 検討結果

#### 3-1既存連成コードの調査

既存連成コードの調査においては、化学反応と物質移行とのモデルの連成に関する入手可能な文献を対象として、モデルの概要、解析コードの調査を行った。本研究では、以下の

- ① CHEMTRAN
- ② CHEQMATE
- ③ HYDROFLOW/HYDROGEOCHEM
- ④ ChemXport

コードを対象とした。既存連成コードの調査結果を表 3-1に示すが、化学モジュールの機能、解析次元および入手の可能性に関して充実しているコードは、HYDROFLOW/HYDROGEOCHEMであると判断した。従って、本研究では、HYDROFLOW/HYDROGEOCHEMを採用した。

HYDROFLOW は広く使用されているFEMWATERを簡素化したプログラムであり、HYDROGEOCHEMで必要としている水理情報（任意の時間における圧力水頭の空間分布、全水頭、含水比、ダルシー流速）を計算するコードである。支配方程式、境界条件は、FEMWATERと同じである。

HYDROGEOCHEMは、物質移行の機能としては移流・分散を考慮しており、化学反応においては、固相の沈澱／溶解、イオン交換、表面錯体、化学種分配、酸化還元などの機能を持っている。HYDROGEOCHEMの連成手法は、物質移行と化学反応の支配方程式を同時に解法するのではなく、最初に任意の時間において空間的な溶液中の物質移動について解法し、次に計算された濃度に基づき固液間の平衡計算を行う。参考のため、HYDROGEOCHEMの物質移行と化学平衡モジュールをコントロールしているサブルーチンGM2DXZのフローを図 3-1～図 3-4に示す。

また、HYDROFLOW/HYDROGEOCHEMの詳細な分析を目的として、HYDROFLOW/HYDROGEOCHEMの取扱い説明書を邦訳した。さらに、文献調査結果の詳細は、別冊の文献集に添付した。

### 3-2熱力学データベースの効率的な運用方法の検討

地球化学モデルの解析結果は、膨大な熱力学データベースの量と品質に依存する。一般的には、熱力学データベースの統一的な管理はされておらず、熱力学データベースは解析コード毎に管理（PHREEQE, EQ3/6）されるか、または解析コードが熱力学データベースを持っていない場合は、その都度膨大な時間を費やして熱力学データベースを作成しなければならない(HYDROGEOCHEM, CHEMTRAN)。従って、熱力学データベースの品質維持と解析作業の効率性の観点から、熱力学データベースの整備に関する検討を実施した。検討結果を以下に示す。

#### (1)標準データを作成してこれを使用する方法

標準データとは、HYDROGEOCHEM用の熱力学データベースを先ず作成して、これを標準データベースと呼ぶこととする。先ず、PHREEQE の熱力学データベースを全てHYDROGEOCHEM用に変換しておく。次に、解析に応じて変換された熱力学データベースを入力条件として実行する方法、または変換された熱力学データベースから、解析に関与するデータのみを自動選択させる方法が考えられる。以上的方法は、インターフェイスプログラム (PHREEQE  $\Rightarrow$  HYDROGEOCHEM) 、解析に関与するデータを自動選択するためのインターフェイスプログラムまたは、HYDROGEOCHEM本体のプログラム修正などの作業が必要となる。

#### (2)HYDROGEOCHEM熱力学データ作成用のジェネレーター

熱力学データ作成用のジェネレーターとは、ユーザーはHYDROGEOCHEMのデータセット19まで（要素化学種の指定）を作成し、これ以降のデータを自動的に作成するプログラムのことである。ユーザーは、HYDROGEOCHEMのデータセット19までを作成し、このファイルを一旦保存する。ただし、データセット19では、予めPHREEQE の熱力学データベースにおいて登録されている親化学種の認識番号（例えば、Caは 4、Feは 8）を59～60カラムの位置で指定する。その後で、ユーザーは熱力学データ作成用のジェネレーターを実行することにより、PHREEQE の熱力学データベースとHYDROGEOCHEMのデータセット19までのデータに基づき、データセット 1～19を含むデータセット20以降のデータを作成するものである。

以上の検討により、早急に対処可能となる方法としては、HYDROGEOCHEM熱力学データ作成用のジェネレーター作成であると考え、この方針に基づきプログラムを作成した。作成したプログラムのフローチャートを図3-5～図3-8に示す。また、本プログラムにを起動した際の入力データ、作成したHYDROGEOCHEM用の熱力学データの一例を図3-9、図3-10に示す。

### 3-3モデルの適用性の検討

TRU廃棄物処分システムの性能を評価するに際しては、まずモデルの適用性について検討する必要がある。モデルの適用性に関する判断基準としては、一般的にモデルの検証および確認を実施しておく必要がある。検証および確認の一般的な手続きの概念を図3-11に示す。本研究の検証では、HYDROFLOW/HYDROGEOCHEMの水理・物質移行・地球化学モジュール各々について検証を実施した。検証解析の方法としては、一般的に広く採用されているベンチマーク解析を行った。検討内容としては、水理モデルは、FEMWATERとHYDROFLOWの比較を実施し、物質移行モジュールは、拡散、移流機能に対してそれぞれFEMWASTEとHYDROGEOCHEMの比較および解析解とHYDROGEOCHEM（拡散機能のみ）の比較を行った。地球化学モジュールは、PHREEQEとHYDROGEOCHEMの比較を行った。

#### (1)水理モデルのベンチマーク解析

水理モデルのベンチマーク解析は、図3-12に示すカラムモデルとした。解析で用いた物性値は、表3-2に示すデータを採用した。また、境界条件はディリクレ条件にて水頭圧力を入力しており、節点1、2において0.317(cm)、節点41、42において0(cm)とした。解析の結果を表3-3に示すが、FEMWATERとHYDROFLOWの結果（ダルシー流速および水頭圧力）は一致していることを確認した。

#### (2)物質移行モジュールのベンチマーク解析

物質移行の検証として拡散機能に着目した解析は、水理情報においてダルシー流速を0とした。解析で用いた物性値は、表3-2に示すデータを採用した。また、境界条件はディリクレ条件にて濃度を入力しており、節点1、2において $10^{-11}$ (mol/L)とし、外側の節点41、42において $10^{-30}$ (mol/L)のディリクレ条件を与えた。解析の結果を

表 3-4に示すが、FEMWASTEとHYDROGEOCHEMの結果は時間の増加とともに一致するが、初期段階（本研究では40日）では差が大きくなる。一方、解析解とHYDROGEOCHEMの解は、時空間における濃度がほぼ一致することを確認した。また、参考のためカラム内の濃度分布を図3-13に示す。

移流機能に着目した解析は、3-3 (1)で得られた水理情報に基づき実施した。解析で用いた物性値は、表 3-2に示すデータを採用した。また、境界条件はディリクレ条件にて濃度を入力しており、節点1、2において $10^{-11}$ (mol/L)とし、外側の境界条件はFEMWASTEではノイマンの条件を設定し、HYDROGEOCHEMでは外方向にダルシー流速のみ設定した。解析の結果を表 3-5に示すが、FEMWASTEとHYDROGEOCHEMはほぼ一致していることを確認した。また、参考のためカラム内の濃度分布を図3-14に示す。

### (3) 地球化学モジュールのベンチマーク解析

地球化学モジュールのベンチマーク解析は、地球化学の現象に応じて溶解、沈澱、酸化還元の検証解析を実施した。溶解・沈澱の機能確認を行うため、方解石／純水およびCSH(1.8)／純水系の平衡計算を行った。ベンチマーク解析結果を表 3-6、3-7 に示すが、HYDROGEOCHEMはPHREEQE の結果と著しく異なることが確認できた。従って、米国の著者に確認すること及びHYDROGEOCHEMに関する情報を入手する目的として、打合せを行った（議事録の詳細は文献集に記載）。結論としては、現バージョンのHYDROGEOCHEMでは溶解問題が解析出来ないため、すでに米国では改良したことであった（詳細は付録 Aに記載）。ただし、沈澱後の再溶解機能は使用可能であることから、溶解現象を取り扱う場合は、初期条件において沈澱させる必要がある。以上のことから、純粋な溶解機能を可能にするため、付録 Aの要領に基づき地球化学モジュールのみの改良を行った。

改良バージョンを用いて、ベンチマーク解析を行った結果を表 3-8～3-11に示す。

表 3-8は、方解石／純水系の平衡計算結果であり、HYDROGEOCHEMとPHREEQE は一致することを確認した。また、このケースの沈澱問題においてはオリジナルのHYDROGEOCHEMも同一の解を与える。

表 3-9は、CSH(1.8)／純水系の平衡計算結果であり、HYDROGEOCHEMとPHREEQE は一致することを確認した。

表3-10は、黄鉄鉱／純水系の平衡計算結果である。先ず、鉄と硫黄の初期濃度を0とした場合は、PHREEQEのイオン濃度よりも大きめの解を得る。一方、鉄と硫黄の初期濃度を $10^{-2.0}$ (mol/l)にした場合において、各イオン濃度はPHREEQEの結果と同一のオーダとなるが、PHREEQEよりも低めの値となる。

表3-11は、黄鉄鉱・方解石／純水系の同時平衡計算結果である。結果の傾向としては、方解石との平衡は両者とも一致するが、黄鉄鉱との平衡に関連し、鉄および硫黄の濃度は前記の傾向と同様にHYDROGEOCHEMの方が低めの値となっている。

また、表3-12は、酸化還元平衡の計算(例えば、黄鉄鉱／純水系)において、入力で指定するp eの範囲を変化させた場合の結果の一例を示している。p eを20~-20.とした場合は、地球化学モジュールの中で処理しているヤコビアンマトリックスの計算においてエラーが発生した。これらのことから、酸化還元平衡に関与する化学種を取り扱う場合は、p eの範囲指定に際して十分に注意する必要がある。一般的に、p eを20~-20.は水の安定限界を含むが、現実的な数値とは言えないことから、p eの範囲指定は-10.~10程度が適切であると思われる。

#### (4)確証解析

確証解析においては、動燃殿が別途実施している「コンクリートの変質挙動に関する研究」で取得した実験データに基づく解析を実施した。実験は、溶液中にコンクリートを充填した円柱供試体を浸漬するものであり、得られた結果の一例として、図3-15は浸漬1年後における円柱供試体内部のCaOの分布を示す。今回の確証解析においては、円柱供試体内部の残存Caを計算し、実験値と比較するものである。本報告では、現在バージョンのHYDROGEOCHEMが純粹な溶解機能を持たないことから、HYDROGEOCHEMの再溶解機能を用いて実施した。解析モデルを図3-16に示す。尚解析で使用した物性値を以下に示す。

- ・固相側のデータ

ダルシー流速	:	0.0 (m/sec)
分散長	:	0.0 (m)
実効拡散係数	:	$1 \times 10^{-10}$ (m <sup>2</sup> /sec)

空隙率 : 0.34 (-)  
 乾燥密度 : 2.35 (g/cm<sup>3</sup>)  
 鉱物 : 方解石

・溶液側のデータ

ダルシー流速 : 0.0 (m/sec)  
 分散長 : 0.0 (m)  
 実効拡散係数 :  $1 \times 10^{-10}$  (m<sup>2</sup>/sec)  
 空隙率 : 0.99 (-)  
 境界濃度 :  $1 \times 10^{-0.5}$  (mol/L)  
 水溶性化学種 : 方解石／純水相互作用で支配的な化学種

解析による一年後の残存Ca量（最大値で無次元化）の分布を図3-17に示す。定性的には分析値と同一の傾向を示すが、定量的には分析値よりも残存Ca量は少ない。この差は、以下のことが考えられる。また、参考のため、360日後における残存Ca量（最大値で無次元化）を表3-8に示す。

- ・固相の設定において、CSHシリーズ及び $\text{Ca}(\text{OH})_2(s)$ よりも溶解度の低い方解石を設定している。
- ・実験の液固比に対して解析モデルの液固比は小さめとなっていることから、本解析モデルの溶液側は短時間で濃度が均一となる。

### 3-4人工バリアの長期挙動解析および核種移行解析の試解析

#### (1)人工バリアの長期挙動試解析

ここでは、人工バリアの長期挙動試解析を図3-19に示す一次元カラムモデルにより、カラム内に充填されているベントナイト／間隙水の相互作用を考慮した試解析を実施することとする。ベントナイト／間隙水の相互作用では、ベントナイト中方解石の溶解および方解石の溶解によって浸出したCaとベントナイトに含有しているナトリウムモ

ンモリナイトのNaとのイオン交換を考慮している。また、物質移行は拡散を考慮している。解析で考慮した境界条件（境界濃度）のうち、廃棄体側はコンクリートによって間隙水が支配されていると考え、高pH条件、高Ca濃度条件としている。これらの値は、別途、地球化学平衡モデルPHREEQEにより、CSH(1.8)との平衡を考慮して設定した。ベントナイトの変質試解析を実施する際の境界濃度、地球化学、移行に関する条件の詳細を表3-14に示す。

ベントナイトの変質試解析の結果の一例を図3-20～図3-22に示す。図3-20は、ベントナイトの成分濃度として、Z-Na（ナトリウムモンモリナイトに相当）とZ<sub>2</sub>-Ca（カルシウムモンモリナイトに相当）に着目し、0年と1000年の時点における分布を示したものである。イオン交換の効果により、Z-Naはカラム全体に渡って減少し、それに対してZ<sub>2</sub>-Caは時間とともに増加する傾向を示している。Z<sub>2</sub>-Caのカラム内の分布は、岩体側でピークを示しており、これは、カラム内において岩体側の方がCa濃度が低く、ベントナイト中方解石の溶解が促進されていると考える。

図3-21は、ベントナイト中方解石の濃度分布を示している。ベントナイト中方解石は、前述の様に岩体側のCa濃度がコンクリート側に比べて低いことから、時間の経過について消費されていく。一方、コンクリート側の方解石濃度は、廃棄体として考えているコンクリートからの高Ca濃度の流入の影響により、沈殿する傾向にある。

図3-22は、ベントナイト間隙水中のpHの分布を示したものである。間隙水中のpHは時間の経過に従って増加する傾向にある。ここで、pH分布のピーク(pH=12.2)は、イオン交換によりCa型のベントナイトが最も多くなる位置を示している。

なお、参考のためベントナイトの変質試解析を行った際の入力データリストを付録Cに示す。

## (2)人工バリアの核種移行試解析

核種移行試解析は、人工バリアの長期挙動試解析で使用した一次元モデルにて行った。また、ベントナイト／間隙水相互作用のモデル化についても人工バリアの長期挙動試解析と同一の条件・方法を用いている。核種移行試解析では、TRU廃棄物処分において

て代表的な核種としてCs-135, I-129, Tc-99, U-234を採用した。さらに、これらの核種のうち、Cs-135, I-129はセメント固化体、アスファルト固化体のケースを考慮し、Tc-99, U-234は、酸化物、水酸化物のケースを対象として、計8ケースの試解析を行った。

本試解析では、各核種の吸着メカニズムとして、Cs-135はイオン交換モデル、I-129はKdモデル、Tc-99、U-234は表面錯体モデルをそれぞれ採用した。

試解析の入力条件のうち、各々の核種の溶解度（境界濃度）、その他の元素の境界濃度、使用した水溶性化学種および鉱物種、使用した吸着化学種の条件を、表3-15および表3-17(核種以外の境界濃度)に示す。また、表面錯体モデルのパラメータ、ベントナイト／間隙水相互作用の情報、ベントナイトの物性、水理、その他の条件を表3-16に示す。

Cs-135(セメント固化系、アスファルト固化系)の試解析結果の一例を、それぞれ図3-23、図3-24に示す。図3-23は、セメント固化体系における、カラム内のCs濃度およびベントナイトに吸収されたCs濃度(Z-Cs)の分布を示したものである。この図では、イオン交換(Cs-135)を考慮しない場合のCs濃度についてもプロットしており、1000年後のCs濃度は、カラムの全領域においてCsのイオン交換により、低下している。ただし、岩体近傍において、極端なCs濃度の減少が見られるが、これは、岩体近傍におけるメッシュ分割が粗いことが原因であると思われる。アスファルト固化体系の結果を図3-24に示すが、セメント固化体系と同一の傾向を示している。

尚、参考のため、Cs-135(セメント固化系、アスファルト固化系)の試解析を行った際の入力データリストを、それぞれ付録-D、付録-Eに示す。

I-129(セメント固化系、アスファルト固化系)の試解析結果の一例を、それぞれ図3-25、図3-26に示す。図3-25は、セメント固化体系における、カラム内のI-濃度および吸収されたI-濃度(仮想的な吸着化学種)の分布を示したものである。カラム内で一定のKdを与えていることから、吸着濃度は、溶解濃度に比例したスムーズな分布となっ

ている。アスファルト固化体系の結果を図3-26に示すが、セメント固化体系と同一の傾向を示している。

尚、参考のため、I-129（セメント固化系、アスファルト固化系）の試解析を行った際の入力データリストを、それぞれ付録F、付録Gに示す。

Tc-99（酸化物系、水酸化物系）の試解析結果の一例を、それぞれ図3-27～図3-30に示す。図3-27は、酸化物系における1000年時点での吸着量を上面と下面についてプロットしたものである。本来は、一次元的な取扱い（境界濃度の設定において各端面とも上下面はそれぞれ同一の値とし、また上下方向において物質移動の定義はしていない。）であることから、各面の上下は同一の値になるべきである。しかし、図3-27の1000年時点での吸着濃度は、上下でバラツキが見られる。ただし、トータル濃度および溶解濃度は上下面とも同じである。この原因として、Tc-99（酸化物系）の溶解度は、約 $10^{-24}$ (mol/l)であり、極めて小さいことから、表面錯体の計算において数値的な誤差が生じたものと考える。

図3-28は、カラム内における100年、1000年時点での水酸化物系の全溶解濃度と全吸着濃度分布を示したものである。このケースでは、酸化物系の溶解度に比べて約16桁高いことから、全吸着濃度はベントナイト中で連続的な分布を示している。

図3-29は、カラム内（水酸化物系）における1年時点での吸着化学種の分布を示したものである。カラム内全域において、 $\text{SOH}_2\text{TcO(OH)}_2^+$ が支配化学種となっている。

図3-30は、カラム内（水酸化物系）における1000年時点での吸着化学種の分布を示したものである。岩体近傍から中央部分にかけては、 $\text{SOH}_2\text{TcO(OH)}_2^+$ が支配化学種となっており、一方中央部分からコンクリート側にかけて $\text{SOH}_2\text{TcO}_4$ が支配化学種となっていることを示している。

尚、参考のため、Tc-99（酸化物系、水酸化物系）の試解析を行った際の入力データリストを、それぞれ付録H、付録Iに示す。

U-234（酸化物系、水酸化物系）の試解析結果の一例を、それぞれ図3-31～図3-37に示す。図3-31は、酸化物系における1000年時点での全溶解濃度と全吸着濃度をプロットしたものである。全吸着濃度分布は全溶解濃度とほぼ同一の分布傾向を示すが、カラム

の全域にわたって約 1～2桁全吸着濃度が低いことから、ここで取り扱った条件では、吸着の効果が小さいと言える。

図3-32は、酸化物系における1000年時点での吸着化学種分布を示す。岩体のごく近傍では、 $\text{SOH}(\text{OH})_4$  が支配的となるが、ほぼ全域にわたって、 $\text{SOCaOH}(\text{OH})_4$  が支配的な吸着化学種となる。

図3-33は、水酸化物系における 1年時点での全溶解濃度と全吸着濃度の分布を示したものである。カラム全域にわたって、全吸着濃度は全溶解濃度に比べて約 3桁低い。

図3-34は、水酸化物系における1000年時点での全溶解濃度と全吸着濃度の分布を示したものである。全吸着濃度は、カラムの中央よりやや岩体側で顕著となり、酸化物系で見られない傾向を示している。

図3-35は、水酸化物系における 1年時点での吸着化学種濃度の分布を示したものである。カラム全域にわたって、 $\text{SOCaOH}(\text{OH})_4$  が支配的な吸着化学種となっている。一方、 $\text{SOH}(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_8$ 、 $\text{SOH}(\text{UO}_2)(\text{OH})_2$  は 支配的な吸着化学種となっていないが、カラム内で急激な増減挙動を示している。

図3-36は、水酸化物系における1000年時点での吸着化学種濃度の分布を示したものである。カラムの岩体近傍から中央部よりコンクリート側までは $\text{SOH}(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_8$  が支配的な吸着化学種となっており、コンクリート側の近傍では $\text{SOCaOH}(\text{OH})_4$  が支配的な吸着化学種となっている。これら、両方の吸着化学種ともカラム内において顕著な増減分布を示している。また、 $\text{SOH}(\text{UO}_2)(\text{OH})_2$ 、 $\text{SOH}(\text{OH})_4$  は、支配的な吸着化学種となっていないが、カラム内全域にわたってほぼ均一な分布を示している。

図3-37は、水酸化物系における 100年、1000年時点における $\log(K_d)$  分布をプロットしたものである。1000年時点での $K_d$ は、カラムの両端で低くなり、カラム内で不均一な分布をしており、表面錯体モデルの特徴を表している。

尚、参考のため、U-234（酸化物系、水酸化物系）の試解析を行った際の入力データリストを、それぞれ付録-J、付録-Kに示す。

表 3-1 既存連成コードの調査結果

対象コード	化学モジュール機能	次元	動燃殿所有	入手可能性	拡張性	検証	確認	熱力学データ	適用例	総合評価
CHEMTRAN	△ 酸化還元、溶解の機能チェック必要 ----- 沈殿、イオン交換機能あり。	△ 1 D	○	○	○	不明	不明	×	(1)原位置トレーサ試験解析	△
CHEQMATE	△ 吸着の機能なし。 ----- 溶解・沈殿、イオン交換、酸化還元の機能あり。	△ 1 D	×	△ 高価 AEA, UK	○	○	○	○	(1)コンクリート中の酸化還元プロット解析  (文献集 2.2引用)	◎
HYDROFLOW HYDROGEOCHEM	○ 溶解・沈殿、イオン交換、吸着、酸化還元の機能あり	○ 1 D ↓ 2 D	○	○	○	○	不明	×	(1)カラム解析 (2)ミルティング解析  (文献集 2.1引用)	○
CHEMXPORT	○ 溶解・沈殿、イオン交換、吸着、酸化還元の機能あり	○ 1 D ↓ 2 D	×	△ 高価 MMC, JP	○	不明	×	不明	(1)PNC殿委託研究 TRU性能評価	○

表 3-2 水理・物質移行ベンチマーク解析で使用したパラメータ

水理パラメータ	パラメータの設定根拠	設定数値	単位
透水係数 $K$	日本の地層で考えられる透水係数は、多孔質媒体を対象とした場合、 $10^{-8} \sim 10^{-4} \text{cm/sec}$ である。以上のことから中間値を採用する。	$10^{-6}$	$\text{cm/sec}$
水頭差 $\Delta H$	多孔質媒体中の空隙内ダルシー流速 $V$ は、動燃殿の性能評価解析において $5.3 \times 10^{-5} \sim 6.3 \times 10^{-1} \text{m/year}$ である。中間値の $10^{-2} \text{m/year}$ を採用し、ダルシーの法則 $V=K(\Delta H)/L$ に基づき透水係数 $K=10^{-6} \text{cm/sec}$ , $V=10^{-2} = 3.17 \times 10^{-8} \text{cm/sec}$ , 1次元長さ $L=10\text{cm}$ とすると水頭差 $\Delta H$ は $0.317\text{cm}$ となる。	0.317	$\text{cm}$
物質移行パラメータ	パラメータの設定根拠	設定数値	単位
実効拡散係数 $D_e$	実効拡散係数は花崗岩、凝灰岩、泥岩、玄武岩に対してトリチウム水を用いたスルーティフュージョン試験に基づき $5 \times 10^{-10} \sim 5 \times 10^{-11} \text{m}^2/\text{sec}$ である。中間値 $10^{-10} \text{m}^2/\text{sec}$ を採用している。	$10^{-6}$	$\text{cm}^2/\text{sec}$
分散係数 $D_L$	分散係数を $D_L = \alpha_L \cdot V + D_e$ と定義する。ただし、FEMWASTEの分散係数の拡散項は分子拡散係数と屈曲度の積で表示されており、これらを入力する必要がある。従って、便宜的に分子拡散係数=実効拡散係数とし、屈曲度=1としている。	—	—
分子拡散係数 $a_m$	分散係数 $D_L$ に記載済	$10^{-6}$	$\text{cm}^2/\text{sec}$
屈曲度 $T$	分散係数 $D_L$ に記載済	1.0	—
分散長 $\alpha_L$	分散長は現在のところ経験的に設定されるパラメータであるが、 $\alpha_L = L/10$ (評価地点までの距離; m) の関係式が用いられていることから、本検討においても採用した。 $L=0.1\text{m}$	1.0	$\text{cm}$
空隙率 $\phi$	花崗岩、凝灰岩、泥岩、玄武岩に対して水中飽和法による測定データに基づき、多孔質媒体における設定範囲は、0.3~0.6である。本検討では中間値を採用する。	0.45	—
濃度 $C$	還元条件下の希薄系地下水で考えられ得る元素濃度を設定することとする。対象元素としてはTRU 廃棄物処分システムにおいて重要な元素であるPuを考える。 $\text{PuO}_2(\text{cr})$ を溶解度制限固相とした場合、溶解度は約 $2.5 \times 10^{-11} (\text{mol/L})$ となる。 従って、設定溶解度は $10^{-11} (\text{mol/L})$ とした。	$10^{-11}$	$\text{mol/L}$

表 3-3 HYDROFLOW(水理モジュール)検証結果

評価項目	FEMWATERの解	HYDROFLOWの解	備 考
ダルシー流速 (cm/sec) 節点 1～節点 42	$3.17 \times 10^{-8}$	$3.17 \times 10^{-8}$	
節点 1の全水頭 (cm)	$3.1700 \times 10^{-1}$	$3.1700 \times 10^{-1}$	
節点 7の全水頭 (cm)	$2.6945 \times 10^{-1}$	$2.6945 \times 10^{-1}$	
節点13の全水頭 (cm)	$2.2190 \times 10^{-1}$	$2.2190 \times 10^{-1}$	
節点19の全水頭 (cm)	$1.7435 \times 10^{-1}$	$1.7435 \times 10^{-1}$	
節点25の全水頭 (cm)	$1.2680 \times 10^{-1}$	$1.2680 \times 10^{-1}$	
節点31の全水頭 (cm)	$7.9250 \times 10^{-2}$	$7.9250 \times 10^{-2}$	
節点37の全水頭 (cm)	$3.1700 \times 10^{-2}$	$3.1700 \times 10^{-2}$	
節点41の全水頭 (cm)	$0.0000 \times 10^{-0}$	$0.0000 \times 10^{-0}$	

表 3-4 HYDROGEOCHEM(移行モジュール)検証結果  
[ ] : 解析解、( ) : FEMWASTE

経過時間 (日)	節点濃度 (mol/L)					
	3	5	13	21	31	39
40	8.488 e-12 [8.492 e-12] (8.988 e-12)	7.031 e-12 [7.037 e-12] (7.993 e-12)	2.538 e-12 [2.538 e-12] (4.454 e-12)	5.822 e-13 [5.720 e-13] (2.030 e-12)	4.805 e-14 [4.332 e-14] (5.450 e-13)	2.977 e-15 [2.371 e-15] (7.993 e-14)
120	9.125 e-12 [9.126 e-12] (9.398 e-12)	8.260 e-12 [8.262 e-12] (8.799 e-12)	5.096 e-12 [5.098 e-12] (6.473 e-12)	2.711 e-12 [2.712 e-12] (4.349 e-12)	9.360 e-13 [9.350 e-13] (2.040 e-12)	1.587 e-13 [1.584 e-13] (3.983 e-13)
240	9.371 e-12 [9.371 e-12] (9.490 e-12)	8.745 e-12 [8.745 e-12] (8.980 e-12)	6.332 e-12 [6.334 e-12] (6.946 e-12)	4.175 e-12 [4.178 e-12] (4.933 e-12)	1.918 e-12 [1.919 e-12] (2.453 e-12)	3.713 e-13 [3.716 e-13] (4.896 e-13)
320	9.435 e-12 [9.435 e-12] (9.498 e-12)	8.871 e-12 [8.872 e-12] (8.996 e-12)	6.662 e-12 [6.664 e-12] (6.988 e-12)	4.582 e-12 [4.584 e-12] (4.985 e-12)	2.205 e-12 [2.206 e-12] (2.490 e-12)	4.347 e-13 [4.350 e-13] (4.977 e-13)
360	9.453 e-12 [9.454 e-12] (9.499 e-12)	8.908 e-12 [8.907 e-12] (8.998 e-12)	6.760 e-12 [6.761 e-12] (6.995 e-12)	4.703 e-12 [4.704 e-12] (4.993 e-12)	2.290 e-12 [2.291 e-12] (2.495 e-12)	4.535 e-13 [4.538 e-13] (4.989 e-13)
400	9.467 e-12 [9.467 e-12] (9.500 e-12)	8.935 e-12 [8.935 e-12] (9.000 e-12)	6.829 e-12 [6.830 e-12] (6.997 e-12)	4.789 e-12 [4.790 e-12] (4.997 e-12)	2.350 e-12 [2.351 e-12] (2.498 e-12)	4.669 e-13 [4.671 e-13] (4.995 e-13)
440	9.476 e-12 [9.477 e-12] (—)	8.953 e-12 [8.954 e-12] (—)	6.878 e-12 [6.879 e-12] (—)	4.849 e-12 [4.851 e-12] (—)	2.394 e-12 [2.394 e-12] (—)	4.765 e-13 [4.766 e-13] (—)
480	9.483 e-12 [9.483 e-12] (—)	8.967 e-12 [8.967 e-12] (—)	6.913 e-12 [6.914 e-12] (—)	4.893 e-12 [4.894 e-12] (—)	2.424 e-12 [2.425 e-12] (—)	4.832 e-13 [4.834 e-13] (—)
520	9.488 e-12 [9.488 e-12] (—)	8.976 e-12 [8.977 e-12] (—)	6.938 e-12 [6.939 e-12] (—)	4.924 e-12 [4.924 e-12] (—)	2.446 e-12 [2.447 e-12] (—)	4.881 e-13 [4.882 e-13] (—)
560	9.492 e-12 [9.492 e-12] (—)	8.983 e-12 [8.983 e-12] (—)	6.956 e-12 [6.957 e-12] (—)	4.946 e-12 [4.946 e-12] (—)	2.462 e-12 [2.462 e-12] (—)	4.915 e-13 [4.916 e-13] (—)
600	9.494 e-12 [9.494 e-12] (—)	8.988 e-12 [8.988 e-12] (—)	6.969 e-12 [6.969 e-12] (—)	4.961 e-12 [4.962 e-12] (—)	2.473 e-12 [2.473 e-12] (—)	4.940 e-13 [4.940 e-13] (—)
640	9.496 e-12 [9.496 e-12] (—)	8.992 e-12 [8.992 e-12] (—)	6.978 e-12 [6.978 e-12] (—)	4.973 e-12 [4.973 e-12] (—)	2.481 e-12 [2.481 e-12] (—)	4.957 e-13 [4.958 e-13] (—)
680	9.497 e-12 [9.497 e-12] (—)	8.994 e-12 [8.994 e-12] (—)	6.984 e-12 [6.984 e-12] (—)	4.980 e-12 [4.981 e-12] (—)	2.486 e-12 [2.486 e-12] (—)	4.969 e-13 [4.970 e-13] (—)
720	9.498 e-12 [9.498 e-12] (—)	8.996 e-12 [8.996 e-12] (—)	6.989 e-12 [6.989 e-12] (—)	4.986 e-12 [4.986 e-12] (—)	2.490 e-12 [2.490 e-12] (—)	4.978 e-13 [4.979 e-13] (—)

表 3-5 HYDROGEOCHEM(移流機能)検証結果

[ ] : FEMWASTE

経過時間 (日)	節点濃度 (mol/L)					
	3	5	13	21	31	39
400	9.606 e-12 [9.617 e-12]	9.035 e-12 [9.065 e-12]	5.337 e-12 [5.454 e-12]	1.810 e-12 [1.854 e-12]	2.011 e-13 [1.760 e-13]	1.985 e-14 [1.097 e-14]
600	9.808 e-12 [9.811 e-12]	9.522 e-12 [9.532 e-12]	7.316 e-12 [7.383 e-12]	4.085 e-12 [4.172 e-12]	1.136 e-12 [1.144 e-12]	2.884 e-13 [2.634 e-13]
800	9.896 e-12 [9.897 e-12]	9.740 e-12 [9.744 e-12]	8.413 e-12 [8.447 e-12]	5.966 e-12 [6.040 e-12]	2.670 e-12 [2.719 e-12]	1.129 e-12 [1.126 e-12]
1000	9.941 e-12 [9.941 e-12]	9.850 e-12 [9.852 e-12]	9.037 e-12 [9.053 e-12]	7.304 e-12 [7.354 e-12]	4.316 e-12 [4.379 e-12]	2.468 e-12 [2.501 e-12]
1200	9.965 e-12 [9.965 e-12]	9.911 e-12 [9.911 e-12]	9.403 e-12 [9.410 e-12]	8.209 e-12 [8.239 e-12]	5.775 e-12 [5.832 e-12]	3.986 e-12 [4.040 e-12]
1400	9.978 e-12 [9.978 e-12]	9.945 e-12 [9.945 e-12]	9.623 e-12 [9.626 e-12]	8.810 e-12 [8.828 e-12]	6.945 e-12 [6.990 e-12]	5.414 e-12 [5.471 e-12]
1600	9.986 e-12 [9.986 e-12]	9.966 e-12 [9.965 e-12]	9.759 e-12 [9.760 e-12]	9.208 e-12 [9.218 e-12]	7.833 e-12 [7.864 e-12]	6.616 e-12 [6.666 e-12]
1800	9.991 e-12 [9.991 e-12]	9.978 e-12 [9.978 e-12]	9.844 e-12 [9.844 e-12]	9.472 e-12 [9.476 e-12]	8.482 e-12 [8.503 e-12]	7.561 e-12 [7.600 e-12]
2000	9.994 e-12 [9.994 e-12]	9.986 e-12 [9.986 e-12]	9.898 e-12 [9.898 e-12]	9.647 e-12 [9.649 e-12]	8.947 e-12 [8.960 e-12]	8.272 e-12 [8.300 e-12]
2200	9.996 e-12 [9.996 e-12]	9.991 e-12 [9.991 e-12]	9.933 e-12 [9.933 e-12]	9.763 e-12 [9.764 e-12]	9.274 e-12 [9.283 e-12]	8.791 e-12 [8.810 e-12]
2400	9.998 e-12 [9.998 e-12]	9.994 e-12 [9.994 e-12]	9.956 e-12 [9.955 e-12]	9.841 e-12 [9.841 e-12]	9.503 e-12 [9.507 e-12]	9.161 e-12 [9.174 e-12]
2600	9.998 e-12 [9.998 e-12]	9.996 e-12 [9.996 e-12]	9.971 e-12 [9.970 e-12]	9.893 e-12 [9.893 e-12]	9.660 e-12 [9.663 e-12]	9.422 e-12 [9.430 e-12]
2800	9.999 e-12 [9.999 e-12]	9.997 e-12 [9.997 e-12]	9.980 e-12 [9.980 e-12]	9.928 e-12 [9.928 e-12]	9.769 e-12 [9.770 e-12]	9.591 e-12 [9.608 e-12]
3000	9.999 e-12 [9.999 e-12]	9.998 e-12 [9.998 e-12]	9.987 e-12 [9.987 e-12]	9.952 e-12 [9.951 e-12]	9.843 e-12 [9.843 e-12]	9.729 e-12 [9.732 e-12]
3200	1.000 e-11 [1.000 e-11]	9.999 e-12 [9.999 e-12]	9.991 e-12 [9.991 e-12]	9.967 e-12 [9.967 e-12]	9.893 e-12 [9.893 e-12]	9.816 e-12 [9.817 e-12]
3400	1.000 e-11 [1.000 e-11]	9.999 e-12 [9.999 e-12]	9.994 e-12 [9.994 e-12]	9.978 e-12 [9.978 e-12]	9.928 e-12 [9.927 e-12]	9.875 e-12 [9.875 e-12]
3600	1.000 e-11 [1.000 e-11]	9.999 e-12 [9.999 e-12]	9.996 e-12 [9.996 e-12]	9.985 e-12 [9.985 e-12]	9.951 e-12 [9.951 e-12]	9.915 e-12 [9.915 e-12]
3800	1.000 e-11 [1.000 e-11]	1.000 e-11 [1.000 e-11]	9.997 e-12 [9.997 e-12]	9.990 e-12 [9.990 e-12]	9.967 e-12 [9.967 e-12]	9.942 e-12 [9.942 e-12]
4000	1.000 e-11 [1.000 e-11]	1.000 e-11 [1.000 e-11]	9.998 e-12 [9.998 e-12]	9.993 e-12 [9.993 e-12]	9.978 e-12 [9.977 e-12]	9.961 e-12 [9.961 e-12]

表 3-6 HYDROGEOCHEM ver.1-1 ベンチマーク解析結果  
(純水中における方解石の溶解・沈澱平衡)

入力条件				
コード	PHREEQE	HYDROGEOCHEM オリジナルバージョン		
初期溶液条件	純水			
pH	7.0	7.0		7.0
Eh	pe=4.0			
Ca	—	0.0 (mol/l)	10 <sup>20</sup> (mol/l)	
C	—	0.0 (mol/l)	10 <sup>20</sup> (mol/l)	
解析モデル	バッチ系 	カラム系 		
熱力学データベース	PHREEQE PNC ver. 热力学データベース - Aqueous species      - Mineral 1. Ca <sup>2+</sup> 7. CaOH <sup>+</sup> 1. Calcite 2. CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> 8. CaCO <sub>3</sub> 3. H <sup>+</sup> 9. CaHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup> 4. OH <sup>-</sup> 5. HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 6. H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>			
解析結果				
		PHREEQE	HYDROGEOCHEM オリジナルバージョン	
pH		9.8080	0.0000	6.0990
濃度 mol/l	pe	4.0000	—	—
	Ca全溶解濃度	1.2232e-4	0.0	2.4802e+3
	Ca <sup>2+</sup>	1.165 e-4	0.0	2.480 e+3
	CaCO <sub>3</sub>	5.519 e-6	0.0	5.559 e-6
	C全溶解濃度	1.2232e-4	0.0	7.3973e-4
	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	8.294 e-5	0.0	2.542 e-8
	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	3.371 e-5	0.0	1.598 e-12
CO <sub>2</sub> (aq)		2.251 e-8	—	—
溶解量			溶解量	沈澱量
Calcite		1.2232e-4	0.0	1.000 e+20

表 3-7 HYDROGEOCHEM ver.1-1 ベンチマーク解析結果  
(純水中におけるCSH(1.8)の溶解・沈澱平衡)

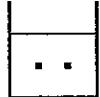
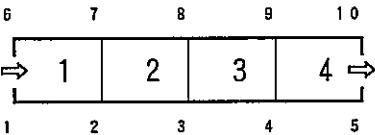
入力条件			
コード	PHREEQE	HYDROGEOCHEM オリジナルバージョン	
初期溶液条件	純水		
pH	9.0	9.0	9.0
Eh	pe=4.0		
Ca	—	10.0 (mol/l)	10 <sup>-2</sup> (mol/l)
Si	—	10.0 (mol/l)	10 <sup>-2</sup> (mol/l)
解析モデル	バッチ系 	カラム系 	
熱力学データベース	PHREEQE PNC ver. 热力学データベース - Aqueous species 1. Ca <sup>2+</sup> 7. CaOH <sup>+</sup> 13. SiO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>-2</sup> 2. Si(OH) <sub>4</sub> (aq)      8. Si <sub>3</sub> O <sub>5</sub> (OH) <sub>5</sub> <sup>-3</sup> 9. Si <sub>3</sub> O <sub>6</sub> (OH) <sub>3</sub> <sup>-3</sup> - Mineral 3. H <sup>+</sup> 10. Si <sub>4</sub> O <sub>3</sub> (OH) <sub>13</sub> <sup>-3</sup> 11. Si <sub>4</sub> O <sub>7</sub> (OH) <sub>5</sub> <sup>-3</sup> - Calcite 4. OH <sup>-</sup> 12. SiO(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup> 5. Si <sub>2</sub> O <sub>2</sub> (OH) <sub>5</sub> <sup>-</sup> 6. Si <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (OH) <sub>4</sub> <sup>-2</sup>		
解析結果			
		PHREEQE	HYDROGEOCHEM オリジナルバージョン
pH		11.5798	3.0466
濃度 mol/l	pe	4.0000	—
	Ca全溶解濃度 Ca <sup>2+</sup> CaOH <sup>+</sup>	3.0504e-3 2.845 e-3 2.059 e-4	1.0000e+1 1.000 e+1 2.373 e-13
mol/l	Si全溶解濃度 Si(OH) <sub>4</sub> (aq) Si <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (OH) <sub>4</sub> <sup>-2</sup> SiO(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup> SiO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>-2</sup> 溶解量 CSH(1.8)	1.6960e-3 2.462 e-5 1.297 e-5 1.601 e-3 3.808 e-5 3.0504e-3	1.0000e+1 1.000 e+1 1.260 e-11 1.456 e-10 9.125 e-17 沈澱量 0.00
			1.0000e-2 1.000 e-2 1.019 e-9 1.0000e-2 9.9998e-3 8.018 e-12 1.184 e-6 5.810 e-14 沈澱量 0.00

表 3-8 HYDROGEOCHEM 改良版ベンチマーク解析結果  
(純水中における方解石の溶解・沈澱平衡)

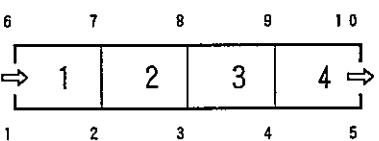
入力条件			
コード	PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン	
初期溶液条件	純水		
pH	7.0	7.0	7.0
Eh	pe=4.0		
Ca	—	1.0 (mol/l)	0.0 (mol/l)
C	—	1.0 (mol/l)	0.0 (mol/l)
解析モデル	バッチ系 	カラム系 	
熱力学データベース	PHREEQE PNC ver. 热力学データベース - Aqueous species      - Mineral 1. Ca <sup>2+</sup> 7. CaOH <sup>+</sup> 1. Calcite 2. CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> 8. CaCO <sub>3</sub> 3. H <sup>+</sup> 9. CaHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup> 4. OH <sup>-</sup> 5. HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 6. H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>		
解析結果			
		PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン
pH		9.8080	9.9101
濃度 mol/l	pe	4.0000	—
	Ca全溶解濃度 Ca <sup>2+</sup> CaCO <sub>3</sub>	1.2232e-4 1.165 e-4 5.519 e-6	1.2287e- 4 1.170 e- 4 5.559 e- 6
mol/l	C全溶解濃度 HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> CO <sub>2</sub> (aq)	1.2232e-4 8.294 e-5 3.371 e-5 2.251 e-8	1.2287e- 4 8.330 e- 5 3.387 e- 5 —
	溶解量 Calcite	1.2232e-4	沈澱量 1.2287e- 4
			沈澱量 1.2287e- 4

表 3-9 HYDROGEOCHEM 改良版ベンチマーク解析結果  
(純水中におけるCSH(1.8)の溶解・沈澱平衡)

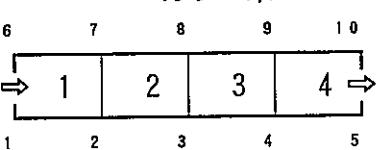
入力条件			
コード	PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン	
初期溶液条件	純水		
pH Eh Ca Si	9.0 pe=4.0 — —	9.0 — 0.0 (mol/l) 0.0 (mol/l)	
解析モデル	バッチ系 	カラム系 	
熱力学データベース	PHREEQE PNC ver. 热力学データベース <u>- Aqueous species</u> 1. $\text{Ca}^{2+}$ 7. $\text{CaOH}^+$ 13. $\text{SiO}_2(\text{OH})_2^{-2}$ 2. $\text{Si}(\text{OH})_4(\text{aq})$ 8. $\text{Si}_3\text{O}_5(\text{OH})_5^{-3}$ 3. $\text{H}^+$ 9. $\text{Si}_3\text{O}_6(\text{OH})_3^{-3}$ - Mineral 4. $\text{OH}^-$ 10. $\text{Si}_4\text{O}_3(\text{OH})_{13}^{-3}$ - Calcite 5. $\text{Si}_2\text{O}_2(\text{OH})_5^-$ 11. $\text{Si}_4\text{O}_7(\text{OH})_5^{-3}$ 6. $\text{Si}_2\text{O}_3(\text{OH})_4^{-2}$ 12. $\text{SiO}(\text{OH})_3^-$		
解析結果			
		PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン
pH		11.5798	11.5800
濃度 mol/l	pe	4.0000	—
	Ca全溶解濃度 $\text{Ca}^{2+}$ $\text{CaOH}^+$	3.0504e-3 2.845 e-3 2.059 e-4	3.0500e-3 2.845 e-3 2.052 e-4
濃度 mol/l	Si全溶解濃度 $\text{Si}(\text{OH})_4(\text{aq})$ $\text{Si}_2\text{O}_3(\text{OH})_4^{-2}$ $\text{SiO}(\text{OH})_3^-$ $\text{SiO}_2(\text{OH})_2^{-2}$ 溶解量 CSH(1.8)	1.6960e-3 2.462 e-5 1.297 e-5 1.601 e-3 3.808 e-5 溶解量 3.0504e-3	1.6947e-3 2.468 e-5 1.292 e-5 1.600 e-3 3.794 e-5 溶解量 3.049 e-3

表 3-10 HYDROGEOCHEM 改良版のベンチマーク解析結果  
(純水中における黄鉄鉱の溶解平衡)

入力条件				
コード	PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン		
初期溶液条件	純水			
pH	7.0	7.0	7.0	7.0
Eh	pe=7.0	7.0	7.0	7.0
Fe	—	0.0 (mol/l)	10 <sup>-20</sup> (mol/l)	10 <sup>-20</sup> (mol/l)
S	—	0.0 (mol/l)	10 <sup>-20</sup> (mol/l)	10 <sup>-20</sup> (mol/l)
解析モデル	バッチ系 	カラム系 		
熱力学データベース	PHREEQE PNC ver. 热力学データベース - Aqueous species			
	1. Fe <sup>+2</sup> 2. H <sup>+</sup> 3. e <sup>-</sup> 4. SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup> 5. H <sub>2</sub> O 6. OH <sup>-</sup> 7. H <sub>2</sub> (aq) 8. HS <sup>-</sup> 9. S <sup>-2</sup> 10. HS <sup>-</sup> 11. FeOH <sup>+</sup> 12. Fe(OH) <sub>2</sub> 13. Fe(OH) <sub>3</sub> 14. FeSO <sub>4</sub>	15. Fe(HS) <sub>2</sub> 16. Fe(HS) <sub>3</sub> 17. Fe <sup>+3</sup> 18. FeOH <sup>+2</sup> 19. Fe(OH) <sub>2</sub> <sup>+</sup> 20. Fe(OH) <sub>3</sub> 21. Fe(OH) <sub>4</sub> 22. H <sub>2</sub> S(aq) 23. H <sub>2</sub> SO <sub>3</sub> (aq) 24. HS <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 25. HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 26. S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <sup>-2</sup> 27. SO <sub>3</sub> <sup>-2</sup> 28. O <sub>2</sub> (aq)	- Mineral 1. Pyrite	
解析結果				
		PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン	
pH		7.0062	7.0000	6.9983
濃度 mol/l	pe	-3.7393	-4.8517	-3.7673
	Fe全溶解濃度 Fe <sup>+2</sup> FeOH <sup>+</sup>	4.5266e-9 4.512e-9 1.446e-11	1.4214e-8 1.417e-8 4.474e-11	2.9709e-9 2.962e-9 9.317e-12
	S 全溶解濃度 HS <sup>-</sup> SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	9.0532e-9 3.832e-9 1.183e-9	2.8428e-8 2.843e-8 9.713e-18	5.9417e-9 5.138e-9 8.038e-10
	H <sub>2</sub> (aq) O <sub>2</sub> (aq)	2.071e-10 1.072e-76	3.579e-8 3.255e-78	2.444e-8 6.979e-74
	溶解量		溶解量	溶解量
	Pyrite	4.5266e-9	1.421e-8	2.971e-9

表 3-11 HYDROGEOCHEM 改良版のベンチマーク解析結果  
(純水中における黄鉄鉱・方解石の溶解平衡)

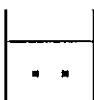
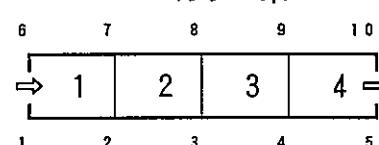
入力条件			
コード	PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン	
初期溶液条件	純水		
pH	7.0	7.0	
Eh	pe=4.0	pe=20.0	
Ca	—	10 <sup>-2.0</sup> (mol/l)	
C	—	10 <sup>-2.0</sup> (mol/l)	
Fe	—	10 <sup>-2.0</sup> (mol/l)	
S	—	10 <sup>-2.0</sup> (mol/l)	
解析モデル	バッチ系 	カラム系 	
熱力学データベース	PHREEQE PNC ver. 热力学データベース - Aqueous species		
	1. Fe <sup>+2</sup> 10. HS <sup>-</sup> 2. H <sup>+</sup> 11. FeOH <sup>+</sup> 3. e <sup>-</sup> 12. Fe(OH) <sub>2</sub> 4. SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup> 13. Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup> 5. H <sub>2</sub> O 14. FeSO <sub>4</sub> 6. OH <sup>-</sup> 15. Fe(HS) <sub>2</sub> 7. H <sub>2</sub> (aq) 16. Fe(HS) <sub>3</sub> <sup>-</sup> 8. HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 17. Fe <sup>+3</sup> 9. S <sup>-2</sup> 18. FeOH <sup>+2</sup>	19. Fe(OH) <sub>2</sub> <sup>+</sup> 28. O <sub>2</sub> (aq) 20. Fe(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup> 29. Ca <sup>2+</sup> 21. Fe(OH) <sub>4</sub> <sup>-</sup> 30. CO <sub>3</sub> <sup>-2</sup> 22. H <sub>2</sub> S(aq) 31. HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 23. H <sub>2</sub> SO <sub>3</sub> (aq) 32. H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> 24. HS <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <sup>-</sup> 33. CaOH <sup>+</sup> 25. HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 34. CaCO <sub>3</sub> 26. S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <sup>-2</sup> 35. CaHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup> 27. SO <sub>3</sub> <sup>-2</sup>	- Mineral 1. Pyrite 2. Calcite
解析結果			
		PHREEQE	HYDROGEOCHEM 改良バージョン
pH		9.9089	9.9097
濃度 mol/l	pe	-6.8647	-7.0422
	Ca全溶解濃度	1.2234e-4	1.2274e-4
	Ca <sup>2+</sup>	1.165e-4	1.168e-4
	Fe全溶解濃度	1.7823e-8	8.3832e-9
	FeOH <sup>+</sup>	1.180e-8	5.561e-9
	C 全溶解濃度	1.2234e-4	1.2274e-4
	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	8.293e-5	8.324e-5
S 全溶解濃度	SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	3.5646e-8	1.6773e-8
		2.852e-8	2.417e-9

表 3-12 HYDROGEOCHEM 改良版の適用性の検討  
(酸化還元平衡の入力に対する解の安定性)

入力条件				
コード		HYDROGEOCHEM 改良バージョン		
初期溶液条件		pH 7.0	pH 7.0	pH 7.0
pe	20.0	pe 20.0	pe 20.0	pe 20.0
Fe	$10^{-2.0}$ (mol/l)	Fe $10^{-2.0}$ (mol/l)	Fe $10^{-2.0}$ (mol/l)	Fe $10^{-2.0}$ (mol/l)
S	$10^{-2.0}$ (mol/l)	S $10^{-2.0}$ (mol/l)	S $10^{-2.0}$ (mol/l)	S $10^{-2.0}$ (mol/l)
最大pe	7.0	最大pe 7.0	最大pe 10.0	最大pe 20.0
最小pe	-5.0	最小pe -5.0	最小pe -10.0	最小pe -20.0
解析モデル		カラム系 6      7      8      9      10 ⇒ 1   2   3   4 ⇒ 1      2      3      4      5		
熱力学データベース		PHREEQE PNC ver. 热力学データベース - Aqueous species 1. Fe <sup>+2</sup> 8. HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 15. Fe(HS) <sub>2</sub> 22. H <sub>2</sub> S(aq) - Mineral 2. H <sup>+</sup> 9. S <sup>-2</sup> 16. Fe(HS) <sub>3</sub> 23. H <sub>2</sub> SO <sub>3</sub> (aq) - 1. Pyrite 3. e <sup>-</sup> 10. HS <sup>-</sup> 17. Fe <sup>+3</sup> 24. HS <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <sup>-</sup> 4. SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup> 11. FeOH <sup>+</sup> 18. FeOH <sup>+2</sup> 25. HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 5. H <sub>2</sub> O 12. Fe(OH) <sub>2</sub> 19. Fe(OH) <sub>2</sub> <sup>+</sup> 26. S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <sup>-2</sup> 6. OH <sup>-</sup> 13. Fe(OH) <sub>3</sub> 20. Fe(OH) <sub>3</sub> 27. SO <sub>3</sub> <sup>-2</sup> 7. H <sub>2</sub> (aq) 14. FeSO <sub>4</sub> 21. Fe(OH) <sub>4</sub> <sup>-</sup> 28. O <sub>2</sub> (aq)		
解析結果				
		HYDROGEOCHEM 改良バージョン		
pH		6.9983	6.9983	
濃度 mol/l	pe	-3.7673	-3.7673	
	Fe全溶解濃度	$2.9709 \times 10^{-9}$	$2.9709 \times 10^{-9}$	
	Fe <sup>+2</sup>	$2.962 \times 10^{-9}$	$2.962 \times 10^{-9}$	
	FeOH <sup>+</sup>	$9.317 \times 10^{-12}$	$9.317 \times 10^{-12}$	
	S 全溶解濃度	$5.9417 \times 10^{-9}$	$5.9417 \times 10^{-9}$	
	HS <sup>-</sup>	$5.138 \times 10^{-9}$	$5.138 \times 10^{-9}$	
	SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	$8.038 \times 10^{-10}$	$8.038 \times 10^{-10}$	ヤコビアンマトリックス において 計算不能
	H <sub>2</sub> (aq)	$2.444 \times 10^{-8}$	$2.444 \times 10^{-8}$	
	O <sub>2</sub> (aq)	$6.979 \times 10^{-74}$	$6.979 \times 10^{-74}$	
	溶解量		溶解量	
	Pyrite	$2.971 \times 10^{-9}$	$2.971 \times 10^{-9}$	

表 3-13 確証解析結果のまとめ

円柱供試体 軸方向距離 (mm)	EPMA面分析値	CaO 残存量 EPMA面分析値 無次元量	解析結果 360日後の残存トータルCa量 (-)	
			CaCO <sub>3</sub> 溶解の場合	CSH(1.8)溶解の場合
0.0	—	—	0.470	—
0.5	9.551	0.489	0.591	—
1.0	16.004	0.820	0.686	—
1.5	18.047	0.924	0.761	—
2.0	18.856	0.966	0.818	—
2.5	19.135	0.980	0.864	—
3.0	19.184	0.983	0.898	—
3.5	19.280	0.988	0.925	—
4.0	19.312	0.989	0.946	—
4.5	19.375	0.992	0.961	—
5.0	19.390	0.993	0.973	—
5.5	19.400	0.994	0.982	—
6.0	19.402	0.994	0.988	—
6.5	19.413	0.994	0.993	—
7.0	19.424	0.995	0.997	—
7.5	19.435	0.995	—	—
8.0	19.446	0.996	—	—
8.5	19.457	0.997	—	—
9.0	19.468	0.997	—	—
9.5	19.477	0.998	—	—
10.0	19.486	0.998	—	—
10.5	19.495	0.999	—	—
11.0	19.504	0.999	—	—
11.5	19.513	0.999	—	—
12.0	19.524	1.000	—	—

表 3-14 ベントナイトの変質解析条件

		濃度 (mol/l)	
元素	初期(全節点)	岩体境界	廃棄体側境界
Ca	1.0e+01	4.6 e-05	3.0 e-03
C	1.0e+01	1.9 e-03	1.9 e-03
H	1.0e-07	1.0 e-09	3.16e-12
Z	1.0e-01 (1 -19) 1.0e-20 (21, 22)	1.0 e-01	1.0 e-20
Na	1.0e+00	2.7 e-03	6.0 e-02
ベントナイトのモデル化			
(1)ベントナイトの交換性陽イオン量 $Na = 1.079 \text{ (meq/g)}$ $Ca = 0.183 \text{ (meq/g)}$			
(2)イオン交換平衡定数 $Z^- + Na^+ = ZNa \quad (\log K = 20.0)$ $2Z^- + Ca^{2+} = Z_2Ca \quad (\log K = 41.8)$			
(3)固相の溶解 $CaCO_3 \text{ (方解石)} + H_2O = Ca^{2+} + HCO_3^- + OH^-$			
ベントナイトの物性			
(1)空隙率 : 0.33 (-) (2)乾燥密度 : 1.8 (g/cm³) (3)実効拡散係数 : $3. \times 10^{-10} \text{ (m}^2/\text{sec)}$			

表 3-15 核種移行試解析に関する入力条件（その 1）

入力項目	解析ケース		Cs-135		I-129		Tc-99		U-234	
	セメント固化体	アスファルト固化体	セメント固化体	アスファルト固化体	酸化物系	水酸化物系	酸化物系	水酸化物系	酸化物系	水酸化物系
(1)溶解度 (mol/l)	1.50 e-05	1.30 e-07	8.60 e-06	3.80 e-04	7.10 e-24	3.30 e-08	3.40 e-10	3.40 e-05		
(2)他の元素濃度	表 3-17 にまとめて示す									
(3)使用した水溶性化学種、鉱物	$\text{Ca}^{2+}, \text{CO}_3^{2-}, \text{H}^+, \text{Z}^-, \text{Na}^+$ , $\text{Cs}^+; \text{OH}^-, \text{HCO}_3^-$ , $\text{H}_2\text{CO}_3$ , $\text{CaOH}^+$ , $\text{CaCO}_3$ , $\text{CaHCO}_3^+$ , $\text{ZNa}$ $\text{Z}_2\text{Ca}$ , $\text{NaHCO}_3$ , $\text{NaCO}_3^-$ , $\text{ZCs}$ Calcite 熱力学データは動燃殿所有の PHREEQE データベースを引用	$\text{Ca}^{2+}, \text{CO}_3^{2-}, \text{H}^+, \text{Z}^-, \text{Na}^+$ , $\text{I}^-; \text{OH}^-, \text{HCO}_3^-$ , $\text{H}_2\text{CO}_3$ , $\text{CaOH}^+$ , $\text{CaCO}_3$ , $\text{CaHCO}_3^+$ , $\text{ZNa}$ $\text{Z}_2\text{Ca}$ , $\text{NaHCO}_3$ , $\text{NaCO}_3^-$ Calcite 熱力学データは動燃殿所有の PHREEQE データベースを引用	$\text{Ca}^{2+}, \text{CO}_3^{2-}, \text{H}^+, \text{Z}^-, \text{Na}^+$ , $\text{H}_2\text{O}, \text{e}^-$ , $\text{TcO}^{+2}$ , $\text{SOH}$ $\text{OH}^-, \text{HCO}_3^-$ , $\text{H}_2\text{CO}_3$ , $\text{CaOH}^+$ $\text{CaCO}_3$ , $\text{CaHCO}_3^+$ , $\text{ZNaZ}_2\text{Ca}$ , $\text{NaHCO}_3$ , $\text{NaCO}_3^-$ $\text{TcO(OH)}_2$ , $\text{TcO}_4^-$ , Calcite 熱力学データは動燃殿所有の PHREEQE データベースを引用	$\text{Ca}^{2+}, \text{CO}_3^{2-}, \text{H}^+, \text{Z}^-, \text{Na}^+$ , $\text{H}_2\text{O}, \text{e}^-$ , $\text{UO}_2^{+2}$ , $\text{SOH}$ $\text{OH}^-, \text{HCO}_3^-$ , $\text{H}_2\text{CO}_3$ , $\text{CaOH}^+$ $\text{CaCO}_3$ , $\text{CaHCO}_3^+$ , $\text{ZNaZ}_2\text{Ca}$ , $\text{NaHCO}_3$ , $\text{NaCO}_3^-$ $\text{U(OH)}_4(\text{aq})$ , Calcite 熱力学データは動燃殿所有の PHREEQE データベースを引用						
(4)使用した吸着化学種	Csのイオン交換を考慮 $\text{Z}^- + \text{Cs}^+ = \text{ZCs}$ $\log K=20.83$	仮想化学種 I-SORB を仮定 $I=I-\text{SORB}$ $\log K=0.73667$ $Kd=10^{-3} (\text{m}^3/\text{kg})$ 相当	$\text{SOH} = \text{SO}^- + \text{H}^+$ $\log K = -9.52$ $\text{SOH} + \text{H}^+ = \text{SOH}_2^+$ $\log K = 5.57$ $\text{SOH} + \text{TcO}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}$ $= \text{SOH}_2\text{TcO(OH)}_2^+ + \text{H}^+$ $\log K = 10.40$ $\text{SOH} + \text{TcO}^{2+} + 3\text{H}_2\text{O}$ $= \text{SOH}_2\text{TcO}_4^- + 5\text{H}^+ + 3\text{e}^-$ $\log K = -18.90$	$\text{SO}^-$ , $\text{SOH}_2^+$ は Tc-99 と同様 $\text{SOH} + \text{U}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} - 4\text{H}^+$ $= \text{SOH}_2\text{U(OH)}_4^-$ $\log K = -4.00$ $\text{SOH} + \text{U}^{4+} + 5\text{H}_2\text{O} + \text{Ca}^{2+}$ $= \text{SOH}_2\text{CaU(OH)}_4^- + 6\text{H}^+$ $\log K = -18.50$ $\text{SOH} + \text{U}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} - 2\text{e}^-$ $= \text{SOH}_2\text{UO}_2(\text{OH})_4^- + 6\text{H}^+$ $\log K = -17.04$ $\text{SOH} + 3\text{U}^{4+} + 11\text{H}_2\text{O} - 6\text{e}^-$ $= \text{SOH}_2\text{(UO}_2)_3(\text{OH})_5^- + 18\text{H}^+$ $\log K = -17.04$ $\text{SOH} + \text{UO}_2^{+2} - 2(\text{OH})^-$ $= \text{SOH}_2\text{(UO}_2)_2(\text{OH})_4^-$ $\log K = -7.10$ $\text{SOH} + 3\text{UO}_2^{+2} - 8(\text{OH})^-$ $= \text{SOH}_2\text{(UO}_2)_3(\text{OH})_5^-$ $\log K = -31.00$						

表 3-16 核種移行試験解析に関する入力条件（その2）

入力項目 解析ケース	Cs-135		I-129		Tc-99		U-234	
	セメント固化体	アスファルト固化体	セメント固化体	アスファルト固化体	酸化物系	水酸化物系	酸化物系	水酸化物系
(5)表面錯体モデルのパラメータ	<ul style="list-style-type: none"> <li>モンモリロナイトの表面積 : <math>85 (\text{m}^2\cdot\text{g}^{-1})</math></li> <li>Triple layer parameter : <math>C_1 = 140 (\mu\text{F}\cdot\text{cm}^2)</math></li> <li>Triple layer parameter : <math>C_2 = 20 (\mu\text{F}\cdot\text{cm}^2)</math></li> </ul>							
(6)ペントナイト中のイオン交換および溶解モデル	<ul style="list-style-type: none"> <li>ペントナイトの交換性陽イオン量 : <math>\text{Na} = 1.079 (\text{meq/g})</math>, <math>\text{Ca} = 0.183 (\text{meq/g})</math></li> <li>イオン交換平衡定数 : <math>Z^- + \text{Na}^+ = Z\text{Na}</math> (<math>\log K = 20.0</math>) <math>2Z^- + \text{Ca}^{2+} = Z_2\text{Ca}</math> (<math>\log K = 41.8</math>)</li> <li>固相の溶解 : <math>\text{CaCO}_3</math>(方解石) + <math>\text{H}_2\text{O} = \text{Ca}^{2+} + \text{HCO}_3^- + \text{OH}^-</math></li> </ul>							
(7)ペントナイトの物性	<ul style="list-style-type: none"> <li>空隙率 : 0.33 (-)</li> <li>乾燥密度 : 1.8 (<math>\text{g}/\text{cm}^3</math>)</li> <li>実効拡散係数 : <math>3 \times 10^{-10} (\text{m}^2/\text{sec})</math></li> </ul>							
(8)核種移行計算時間(時間) (タイムステップ)	1000年 ( 1 年)							
(9)出力時間 (時間)	0, 100, 200, 100, 200, 300, 400, 500, 900, 1000	0, 100, 200, 100, 200, 300, 400, 500, 900, 1000	0, 100, 200, 300, 400, 500, 800 900, 1000	0, 1, 100, 200, 300, 400, 500, 800, 900, 1000	0, 100, 200, 300, 400, 500, 800 900, 1000	0, 1, 100, 200, 300, 400, 500, 800, 900, 1000	0, 100, 200, 300, 400, 500, 800 900, 1000	0, 1, 100, 200, 300, 400, 500, 800, 900, 1000
(10)水理条件	<ul style="list-style-type: none"> <li>ダルシー流速 : 0.0 (<math>\text{cm}/\text{yr}</math>)</li> <li>分散長 : 0.0 (cm)</li> </ul>							
(11)入力データ	付録- D	付録- E	付録- F	付録- G	付録- H	付録- I	付録- J	付録- K
(12)結果のまとめ	図 3-23	図 3-24	図 3-25	図 3-26	図 3-27	図 3-28 図 3-29 図 3-30	図 3-31 図 3-32	図 3-33 図 3-34 図 3-35 図 3-36 図 3-37

表 3-17 核種移行試験解析に関する入力条件（濃度条件）

解析ケース 入力項目		Cs-135		I-129		Tc-99		U-234		備考
		セメント固化体	アスファルト固化体	セメント固化体	アスファルト固化体	酸化物系	水酸化物系	酸化物系	水酸化物系	
初期濃度 (全節点)	Ca	(mol/l)	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	
	C	(mol/l)	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	1.00 e+01	
	H	(mol/l)	1.00 e-07	1.00 e-07	1.00 e-07	1.00 e-07	1.00 e-09	1.00 e-09	1.00 e-09	
	Z	(mol/l)	1.e-1(1-20), 1.e-20(21,22)	1.e-1(1-20), 1.e-20(21,22)			1.00 e-30		1.00 e-30	()node
	Na	(mol/l)	1.00 e+00	1.00 e+00	1.00 e+00	1.00 e+00	1.00 e+00	1.00 e+00	1.00 e+00	
	Cs	(mol/l)	1.00 e-20	1.00 e-20	—	—	—	—	—	
	I	(mol/l)	—	—	1.00 e-20	1.00 e-20	—	—	—	
	U	(mol/l)	—	—	—	—	—	1.00 e-30	1.00 e-30	
	Tc	(mol/l)	—	—	—	—	1.00 e-50	1.00 e-30	—	
境界濃度 (岩体側)	e	(mol/l)	—	—	—	—	1.00 e+05	1.00 e+05	1.00 e+05	
	Ca	(mol/l)	4.60 e-05	4.60 e-05	4.60 e-05	4.60 e-05	4.60 e-05	4.60 e-05	4.60 e-05	
	C	(mol/l)	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	
	H	(mol/l)	1.00 e-09	1.00 e-09	1.00 e-09	1.00 e-09	1.00 e-09	1.00 e-09	1.00 e-09	
	Z	(mol/l)	1.00 e-01	1.00 e-01	1.00 e-01	1.00 e-01	1.00 e-01	1.00 e-01	1.00 e-01	
	Na	(mol/l)	2.70 e-03	2.70 e-03	2.70 e-03	2.70 e-03	2.70 e-03	2.70 e-03	2.70 e-03	
	Cs	(mol/l)	1.00 e-20	1.00 e-20	—	—	—	—	—	
	I	(mol/l)	—	—	1.00 e-20	1.00 e-20	—	—	—	
	U	(mol/l)	—	—	—	—	—	1.00 e-30	1.00 e-30	
境界濃度 (廃棄体側)	Tc	(mol/l)	—	—	—	—	1.00 e-50	1.00 e-30	—	
	e	(mol/l)	—	—	—	—	1.00 e+05	1.00 e+05	1.00 e+05	
	Ca	(mol/l)	3.00 e-03	3.00 e-03	3.00 e-03	3.00 e-03	3.00 e-03	3.00 e-03	3.00 e-03	
	C	(mol/l)	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	1.90 e-03	
	H	(mol/l)	3.16 e-12	3.16 e-12	3.16 e-12	3.16 e-12	3.16 e-12	3.16 e-12	3.16 e-12	
	Z	(mol/l)	1.00 e-20	1.00 e-20	1.00 e-20	1.00 e-20	1.00 e-20	1.00 e-20	1.00 e-20	
	Na	(mol/l)	6.00 e-02	6.00 e-02	6.00 e-02	6.00 e-02	6.00 e-02	6.00 e-02	6.00 e-02	
	Cs	(mol/l)	1.50 e-05	1.30 e-07	—	—	—	—	—	
	I	(mol/l)	—	—	8.60 e-06	3.80 e-04	—	—	—	
U	(mol/l)	—	—	—	—	—	—	3.40 e-10	3.40 e-05	
	Tc	(mol/l)	—	—	—	—	7.10 e-24	3.30 e-08	—	
	e	(mol/l)	—	—	—	—	1.00 e+05	1.00 e+05	1.00 e+05	

サブルーチン GM2DXZ

DATAHT 水理学データ

LNDGEN

Vx(I) X方向の流速

Vz(I) Z方向の流速

TH 含水率

AFABTA 重み係数

DATACS 地球化学データ

INTERP NPの濃度を求める

TP(NP, K)=CDB

OCSPIT 各NPのTOTDC, TOTSC, TOTPCを求める。

SFLOW

CALKD

STORE

(定常の場合)

ASEMBLE 全体マトリックス

HYDROT 移行式を解きConserv. Chems. の全濃度を求める

OCSPIT

HYTRNI 移行式を解きNonconserv. Chems. の全濃度の一回目の推定をする。

→ NON-LINER LOOP

新しいTW(NP, K)=1～NON を決める。

OCSPIT\*

HYTRNC 移行式を解きNonconserv. Chems. の全濃度を求める

CONVERGENCE CHECK

OCSPIT\*

SFLOW

CALKD

PRINTT

STORE

図 3-1 移行と化学モジュールの関係 (その1)

(非定常の場合)

→ INTERP

AFABTA 重み係数

TACADC 吸着剤Comp. の全分析濃度、全当量数を(3.1.2)(3.1.3)で解く。

ASEMBLE 全体マトリックス

HYDROT 移行式を解きConserv. Chems. の全濃度を求める。

OCSPIT\*

HYTRNI 移行式を解きNonconserv. Chems. の濃度の一回目の推定をする。

→ NONLINER LOOP

新しいTW(NP, K)=1～NON を決める。

OCSPIT\*

HYTRNC 移行式を解きNonconserv. Chems. の全濃度を求める。

— CONVERGENCE CHECK

OCSPIT\*

SFLOW

CALKD

PRINTT

— Time Stepを進める

図3-2 移行と化学モジュールの関係（その2）

OCSPIT 全濃度から各NPでのTOTDC, TOTSC, TOTPCを求める。

濃度仮定 K=1～NON

EQMOD

全Sp. 濃度を推定 CN(I) I=1～NON

EQUIL

NPPT

→ PPT-DISS LOOP

ACOEF 活量係数

MODIFK 平衡定数の修正

RESIDU\* RE(I)

JACobi

DGELG

CN=CW-RE

CONVERGENCE CHECK

新しいComp. Sp. 濃度を決め、それからComplex, 吸着Sp. の濃度を決める。

またイオン交換、沈殿Sp. 濃度を決める。

TOTSP

LPOUT

INDEXX

NPPT

TOTDSP

LPOUT

C=TOTDC

S=TOTSC

P=TOTPC

図3-3 移行と化学モジュールの関係（その3）

## RESIDU

aq. Comp. Mole Balance

Comp. Sp.

Complexed, Adsorbent, Ion-Ex.

沈殿

Adsorbent Comp. Mole Balance

RADAC Adsorbent

RIES イオン交換

沈殿Sp.

## TOTDSP

Aq. Comp.

TORDC=Aq. Comp. 濃度 + Complex. Comp. 濃度

TOTSC=吸着Sp. 濃度 + イオン交換Sp. 濃度

TOTPC=沈殿Sp. 濃度

Adsorbent Comp.

TOTSC=吸着Sp. 濃度 + Adsorbent Comp. Sp. 濃度

図 3-4 移行と化学モジュールの関係（その4）

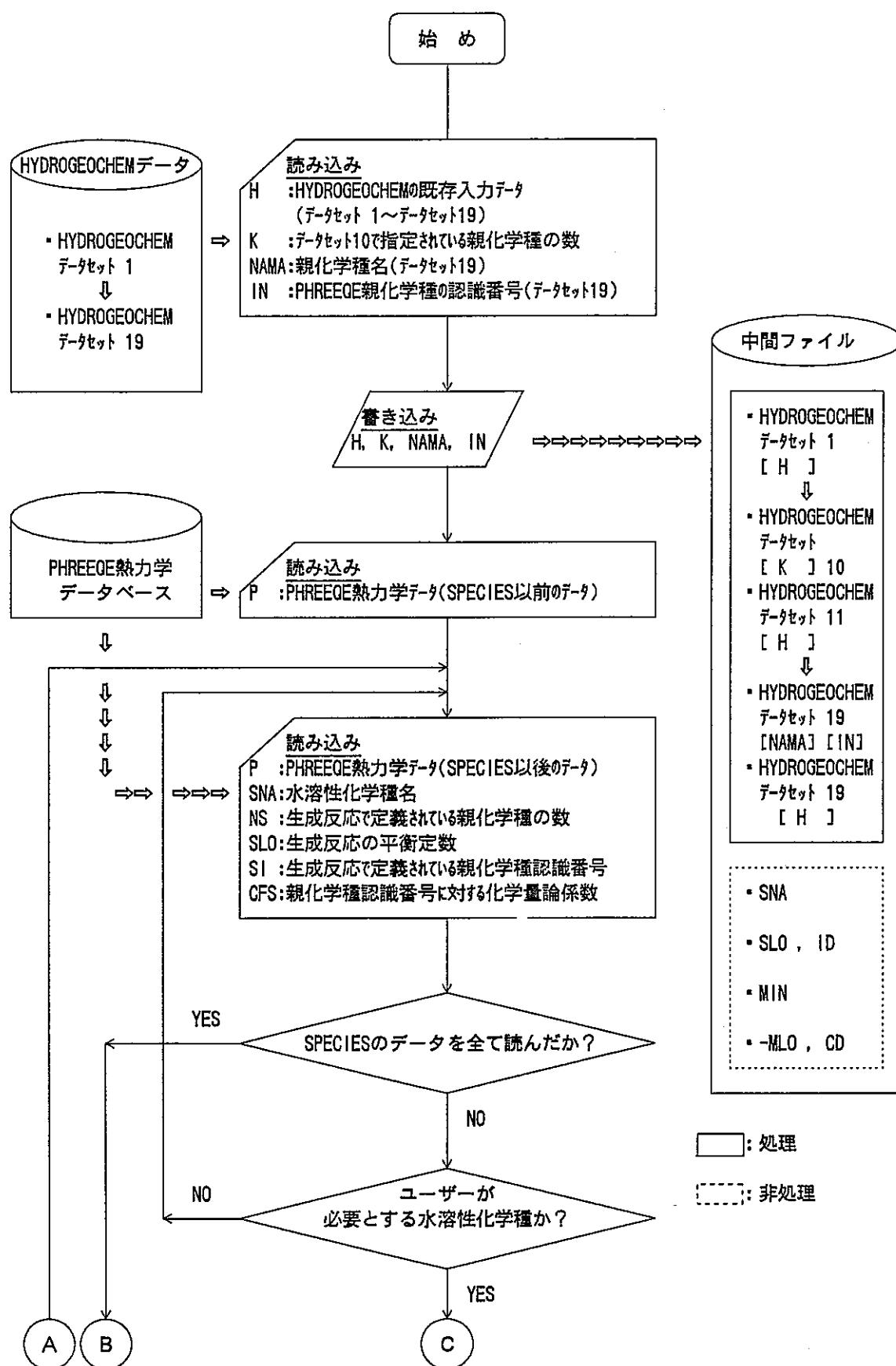
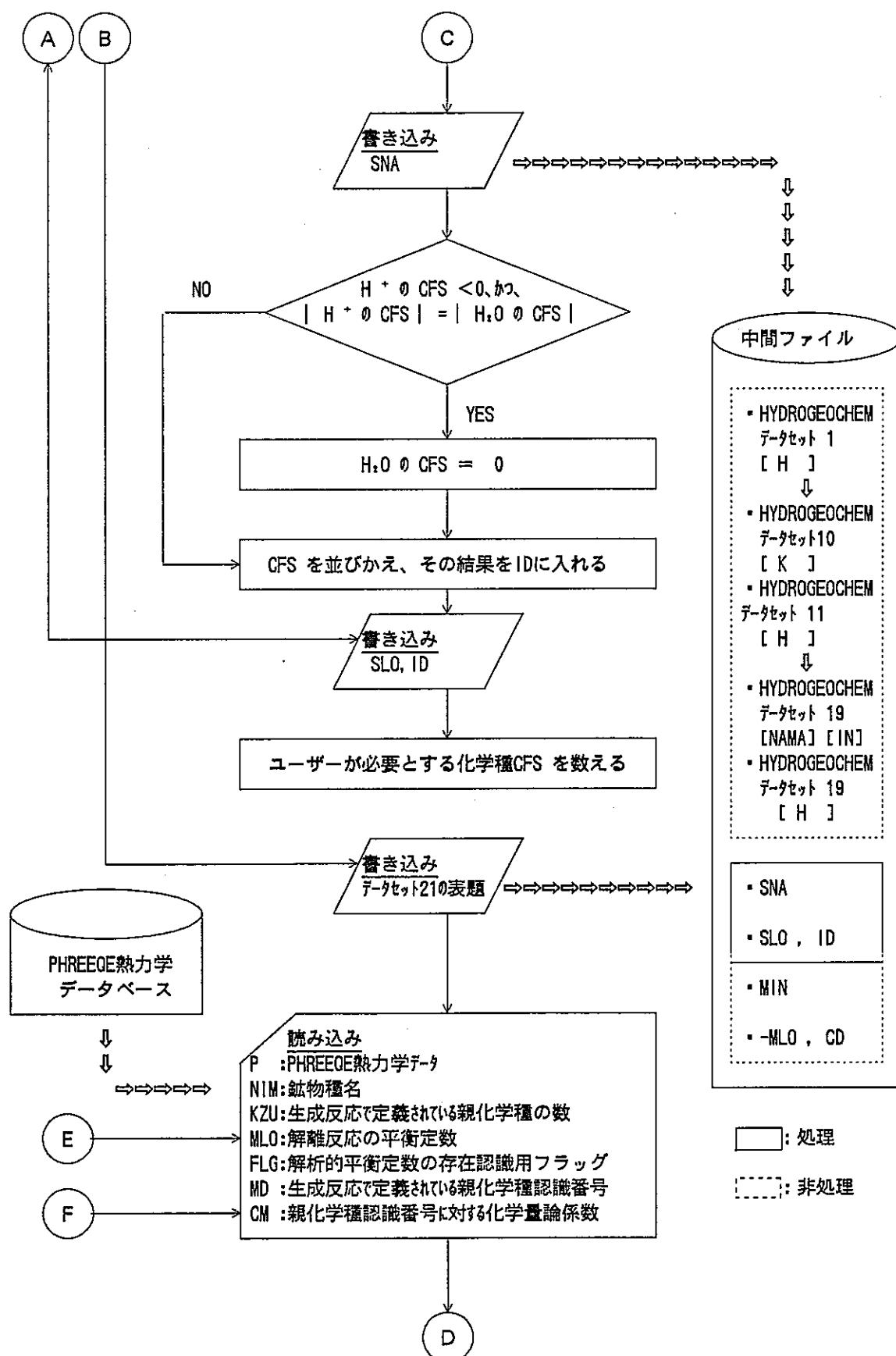


図 3-5 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用シェルエクスプローラー (その 1)



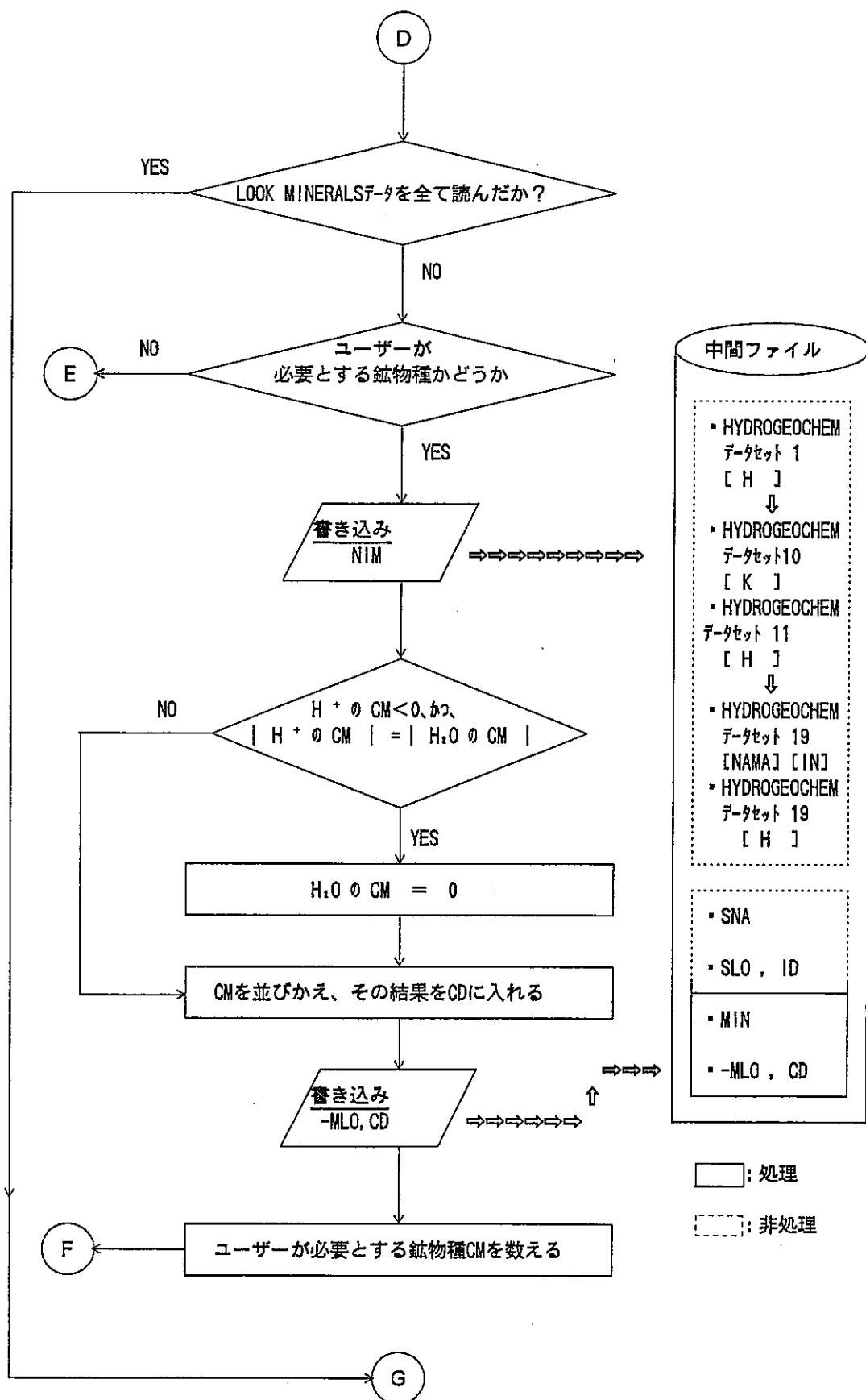


図 3-7 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用シェルフローチャート（その3）

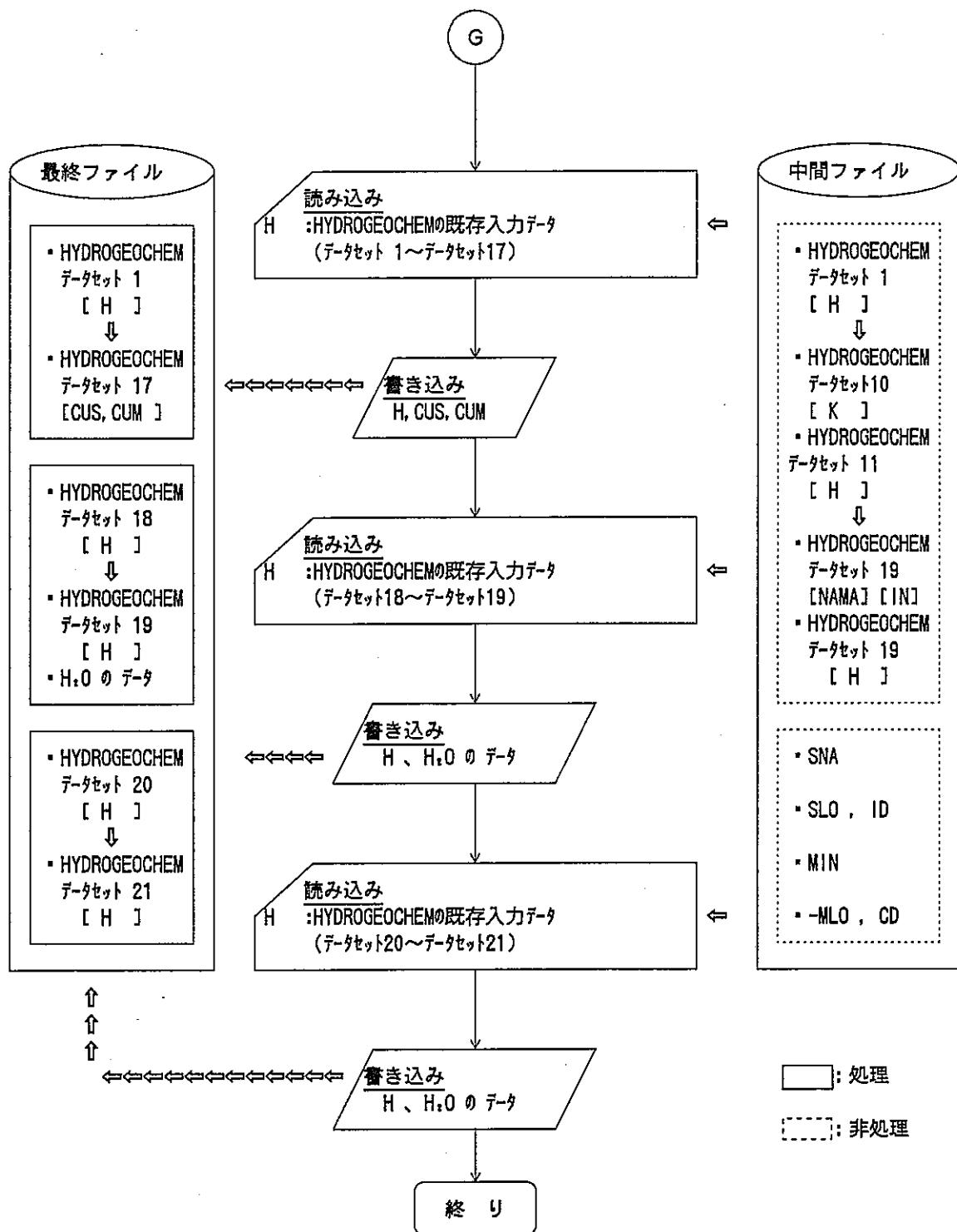


図 3-8 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用シェルフローチャート（その4）

```

1      1 HGC VERIFICATION TEST OF CHEMICAL MODULE VS. PHQ          00091
2 C ***** DATA SET 2: BASIC INTEGER PARAMETERS
3 10 4 1 0 1 0 8 -1 1 0 1 0 10 1 300 0 1 0
4 C ***** DATA SET 3: BASIC REAL PARAMETERS
5 1.0000 0.000 1.0000 1.0000 1.000 1.000 1.0000 1.0D-2 1.000
6 C ***** DATA SET 4: PRINT AND AUXILIARY STORGE CONTROL
7 33
8 11
9 B
10 1.0D38
11 C ***** DATA SET 5: CHEMICAL PRINTOUT AND CHEMICAL PROPERTY TYPE INDICATOR
12 5
13 1 2 3 4 5
14 C ***** DATA SET 6: MATERIAL PROPERTIES
15 0.000 0.000 1.0D-20 1.000 0.0 0.0 0.0 0.0
16 C ***** DATA SET 7: NODE COORDINATES
17 1   4   1   0.0   10.0   0.0
18 6   4   1   0.0   10.0   0.0
19 0   0   0   0.0   0.0   0.0
20 1   4   1   0.0   0.0   0.0
21 6   4   1   10.0  0.0   0.0
22 0   0   0   0.0   0.0   0.0
23 B
24 C ***** DATA SET 8: ELEMENT CONNECTIVITY
25 1   1   2   7   6   1   4   1
26 C ***** DATA SET 10: CHEMICAL COMPONENT INFORMATION
27 4
28 CALCIUM    1   1
29 CARBONATE   2   1
30 HYDROGEN   3   1
31 SILCATE    4   1
32 C ***** DATA SET 11: INITIAL CONDITIONS
33 1   9   1   5.1D-4 0.0   0.0
34 0   0   0   0.0   0.0   0.0
35 1   9   1   5.1D-4 0.0   0.0
36 0   0   0   0.0   0.0   0.0
37 1   9   1   1.0D-7 0.0   0.0
38 0   0   0   0.0   0.0   0.0
39 C ***** DATA SET 12: CONTROL INTEGERS FOR TRANSIENT SOURCE/SINK AND B.C.
40 0   0   0   0.0   0.0   0.0
41 C ***** DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS
42 0.000 5.1D-4 1.0D38 5.1D-4
43 1   1   1   1   0
44 0   0   0   0   0
45 0.000 5.1D-4 1.0D38 5.1D-4
46 1   1   1   1   0
47 0   0   0   0   0
48 0.000 1.0D-7 1.0D38 1.0D-7
49 1   1   1   1   0
50 0   0   0   0   0
51 1   1   1   1   5
52 0   0   0   0   0
53 C ***** DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES
54 1   9   1   0.0   0.0   0.0   0.0
55 0   0   0   0.0   0.0   0.0   0.0
56 1   3   1   0.3   0.0   0.0
57 0   0   0   0.0   0.0   0.0
58 C ***** DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES
59 3   0   6   0   0   1   250 10 1.0 1.0D-6
60 C ***** DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION
61 0.0004 1   3   0
62 298.0 1.0  0   0   0
63 -20.0  20.0 0.0  0.0  20.0
64 C ***** DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX
65 FREE CA++ 0   4
66 1.0D-9   2   0
67 FREE CO3-- 0   15
68 1.0D-9   -2  0
69 FREE H+   0   1
70 1.0D-7   1   0
71 H4SiO4(A  0   13
72 1.0D-7   0   0

```

図 3-9 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用入力データ

1 HGC VERIFICATION TEST OF CHEMICAL MODULE VS. PHQ  
 2 C \*\*\*\*\* DATA SET 2: BASIC INTEGER PARAMETERS  
 3 10 4 1 0 1 0 8 -1 1 0 1 0 10 1 300 0 1 0  
 4 C \*\*\*\*\* DATA SET 3: BASIC REAL PARAMETERS  
 5 1.0000 0.000 1.00000 1.0000 1.000 1.000 1.0000 1.0D-2 1.000  
 6 C \*\*\*\*\* DATA SET 4: PRINT AND AUXILIARY STORAGE CONTROL  
 7 33  
 8 11  
 9 B  
 10 1.0D38  
 11 C \*\*\*\*\* DATA SET 5: CHEMICAL PRINTOUT AND CHEMICAL PROPERTY TYPE INDICATOR  
 12 5  
 13 1 2 3 4 5  
 14 C \*\*\*\*\* DATA SET 6: MATERIAL PROPERTIES  
 15 0.000 0.000 1.0D-20 1.000 0.0 0.0 0.0 0.0  
 16 C \*\*\*\*\* DATA SET 7: NODE COORDINATES  
 17 1 4 1 0.0 10.0 0.0  
 18 6 4 1 0.0 10.0 0.0  
 19 0 0 0 0.0 0.0 0.0  
 20 1 4 1 0.0 0.0 0.0  
 21 6 4 1 10.0 0.0 0.0  
 22 0 0 0 0.0 0.0 0.0  
 23 B  
 24 C \*\*\*\*\* DATA SET 8: ELEMENT CONNECTIVITY  
 25 1 1 2 7 6 1 4 1  
 26 C \*\*\*\*\* DATA SET 10: CHEMICAL COMPONENT INFORMATION  
 27 4  
 28 CALCIUM 1 1  
 29 CARBONATE 2 1  
 30 HYDROGEN 3 1  
 31 SILCATE 4 1  
 32 C \*\*\*\*\* DATA SET 11: INITIAL CONDITIONS  
 33 1 9 1 5.1D-4 0.0 0.0  
 34 0 0 0 0.0 0.0 0.0  
 35 1 9 1 5.1D-4 0.0 0.0  
 36 0 0 0 0.0 0.0 0.0  
 37 1 9 1 1.0D-7 0.0 0.0  
 38 0 0 0 0.0 0.0 0.0  
 39 C \*\*\*\*\* DATA SET 12: CONTROL INTEGERS FOR TRANSIENT SOURCE/SINK AND B.C.  
 40 0 0 0 0 0 2 1 2 0 0 0 0  
 41 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 42 0.000 5.1D-4 1.0D38 5.1D-4  
 43 1 1 1 1 0  
 44 0 0 0 0 0 0  
 45 0.000 5.1D-4 1.0D38 5.1D-4  
 46 1 1 1 1 0  
 47 0 0 0 0 0 0  
 48 0.000 1.0D-7 1.0D38 1.0D-7  
 49 1 1 1 1 0  
 50 0 0 0 0 0 0  
 51 1 1 1 1 5  
 52 0 0 0 0 0 0  
 53 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 54 1 9 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 55 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0  
 56 1 3 1 0.3 0.0 0.0  
 57 0 0 0 0.0 0.0 0.0  
 58 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 59 3 0 15 0 0 8 250 10 1.0 1.0D-6  
 60 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 61 0.0004 1 3 0  
 62 298.0 1.0 0 0 0 0  
 63 -20.0 20.0 0.0 20.0  
 64 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 65 FREE CA++ 0  
 66 1.0D-9 2 0  
 67 FREE CO3-  
 68 1.0D-9 -2 0  
 69 FREE H+ 0  
 70 1.0D-7 1 0  
 71 H4SiO4(A) 0  
 72 1.0D-7 0 0  
 73 H2O(L) 1  
 74 1.0000 0 0  
 75 C \*\*\*\*\* DATA SET 20: AQUEOUS SPECIES  
 76 OH- 0  
 77 1.0D-7 -14.000 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 -1 0 0  
 78 HCO3- 0  
 79 1.0D-7 10.330 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0  
 80 H2CO3 0  
 81 1.0D-7 16.681 0 1 2 0 0 0 0 0 1 2 0 0  
 82 CAOH- 0  
 83 1.0D-7 -12.598 1 0 -1 0 0 0 0 1 0 -1 0 0  
 84 CACO3 0  
 85 1.0D-7 3.225 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0  
 86 CAHCO3+ 0  
 87 1.0D-7 11.435 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 0  
 88 SI2O2(OH) 0  
 89 1.0D-7 -8.100 0 0 -1 2 -1 0 0 0 0 -1 2 -1  
 90 SI2O3(OH) 0  
 91 1.0D-7 -19.001 0 0 -2 2 -1 0 0 0 0 -2 2 -1  
 92 SI3O5(OH) 0  
 93 1.0D-7 -27.501 0 0 -3 3 -2 0 0 0 0 -3 3 -2  
 94 SI3O6(OH) 0  
 95 1.0D-7 -28.601 0 0 -3 3 -3 0 0 0 0 -3 3 -3  
 96 SI4O3(OH) 0  
 97 1.0D-7 -34.901 0 0 -3 4 0 0 0 0 0 -3 4 0  
 98 SI4O7(OH) 0  
 99 1.0D-7 -25.501 0 0 -3 4 -4 0 0 0 0 -3 4 -4  
 100 SiO(OH)3 0  
 101 1.0D-7 -9.810 0 0 -1 1 0 0 0 0 0 -1 1 0  
 102 SiO2(OH) 0  
 103 1.0D-7 -23.141 0 0 -2 1 0 0 0 0 0 -2 1 0  
 104 CO2(AQ) 0  
 105 1.0D-7 16.681 0 1 2 0 -1 0 0 0 1 2 0 -1  
 106 C \*\*\*\*\* DATA SET 21: LOOK MINERALS  
 107 CALCITE 0  
 108 0.0 8.48 1 1 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0  
 109 ARAGONIT 0  
 110 0.0 8.34 1 1 0 0 0 1 -1 0 0 0 0 0  
 111 SIL GEL 0  
 112 0.0 2.70 0 0 0 1 -2 0 0 0 0 1 -2  
 113 SIL GLAS 0  
 114 0.0 3.02 0 0 0 1 -1 0 0 0 0 1 -1  
 115 LIME, QU 0  
 116 0.0 -32.70 1 0 -2 0 1 1 0 -2 0 1  
 117 CHALCEDO 0  
 118 0.0 3.49 0 0 0 1 -2 0 0 0 0 1 -2  
 119 QUARTZ 0  
 120 0.0 3.78 0 0 0 1 -2 0 0 0 0 1 -2  
 121 SILI(AM) 0  
 122 0.0 2.71 0 0 0 1 -2 0 0 0 0 1 -2  
 123 END OF JOB

図 3-10 HYDROGEOCHEM熱力学データベース作成用出力データ

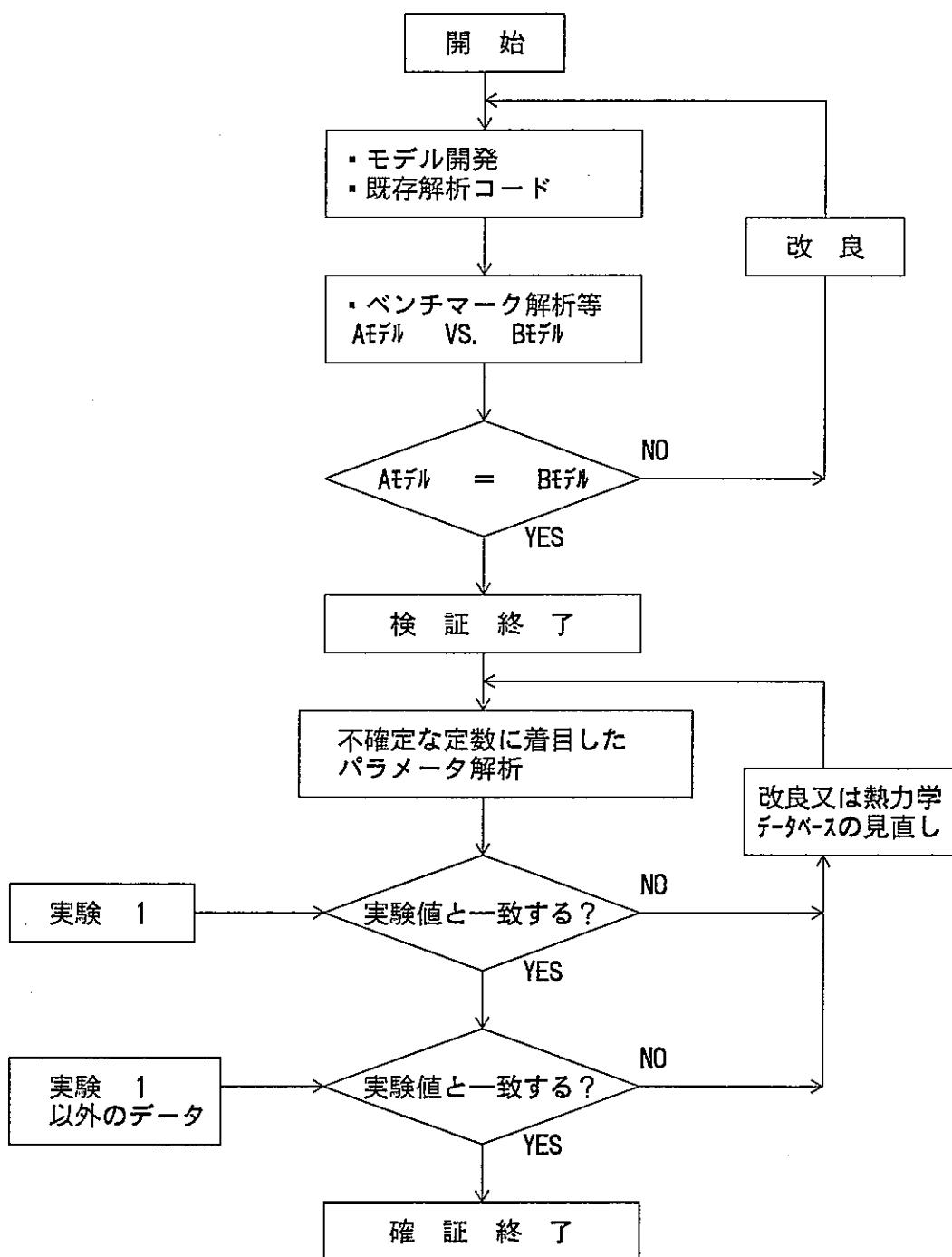


図 3-11 検証・確証解析に関する手続きのフロー

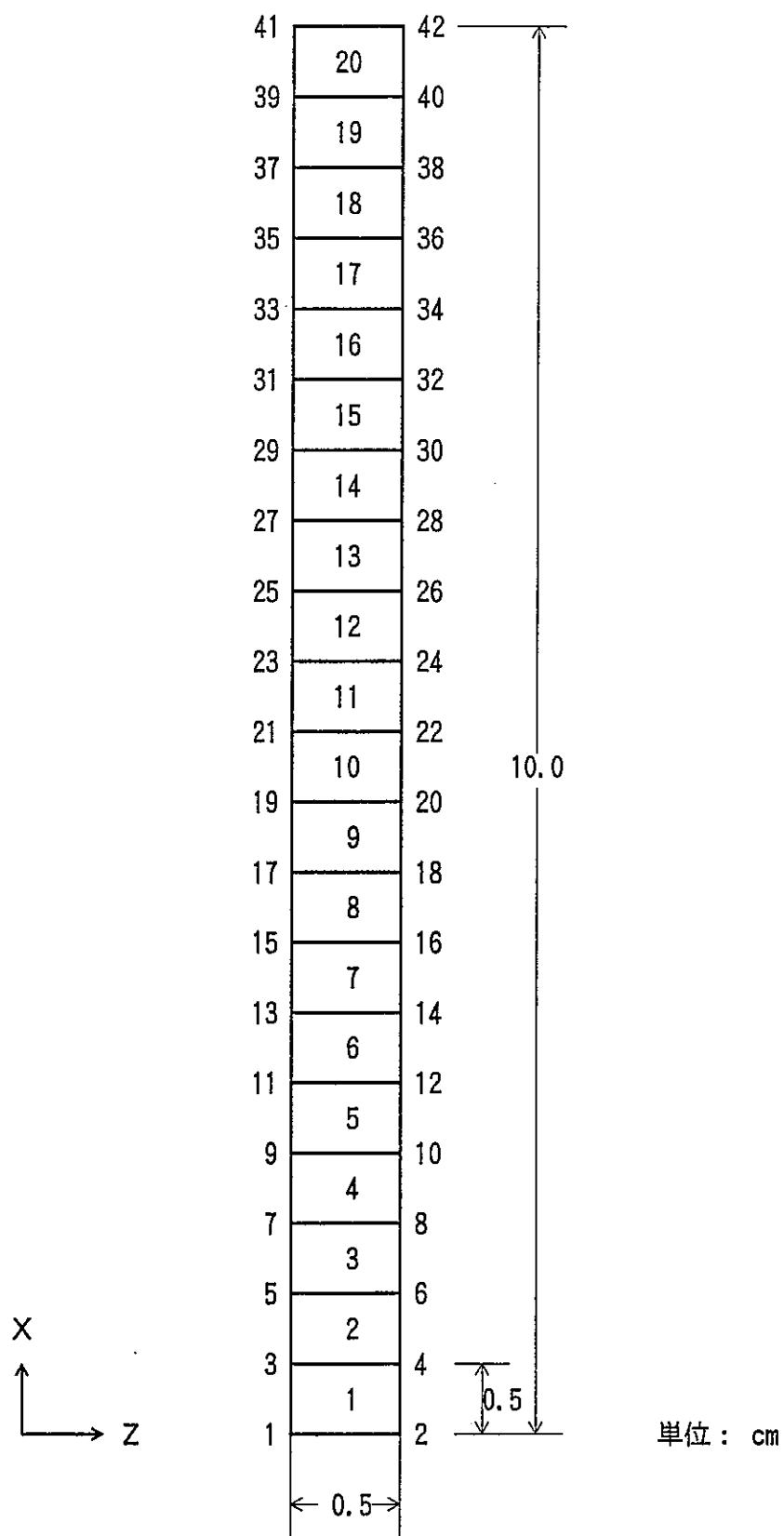


図 3-12 水理・物質移行ベンチマーク解析モデル

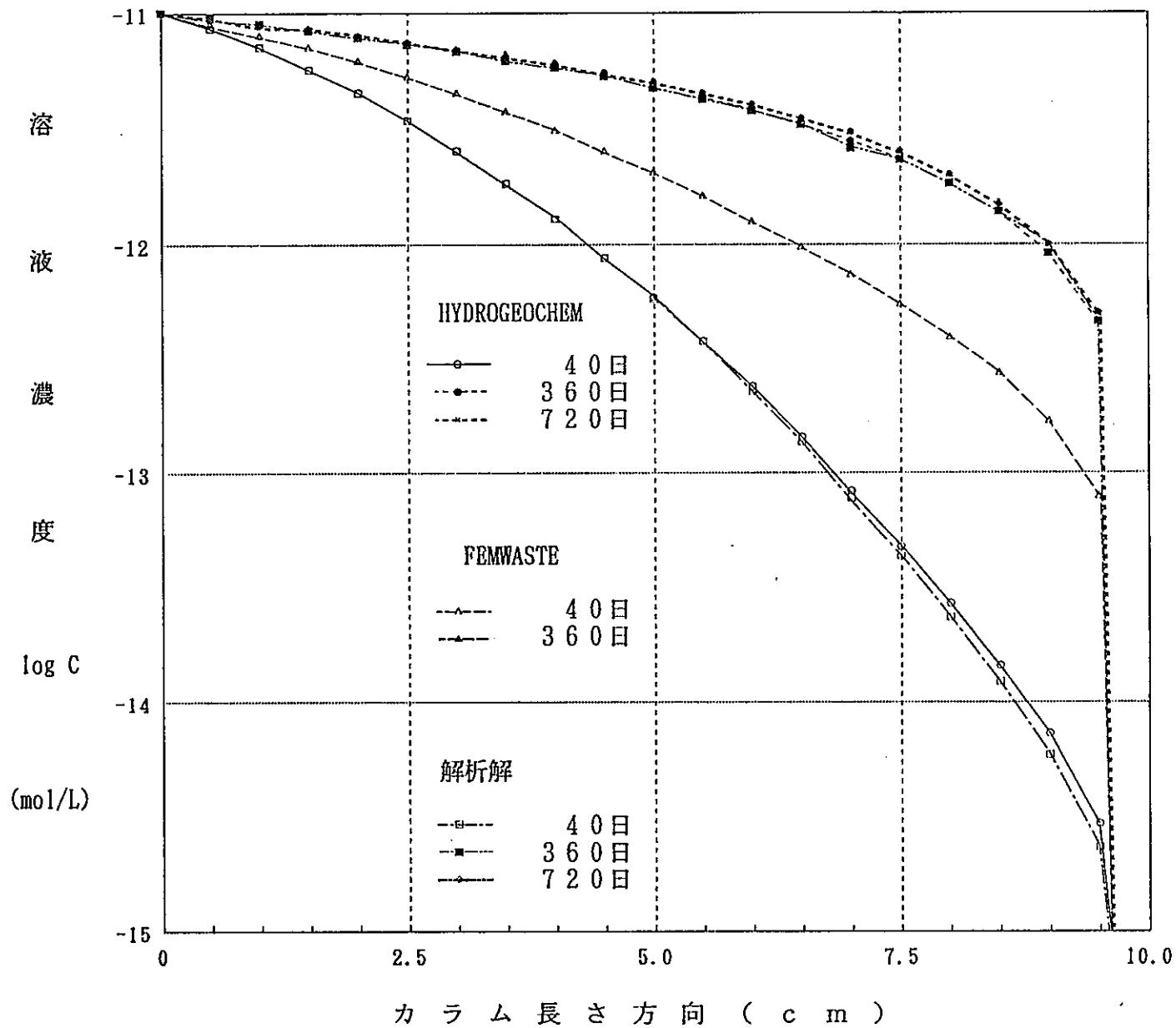


図 3-13 ベンチマーク解析(拡散)結果

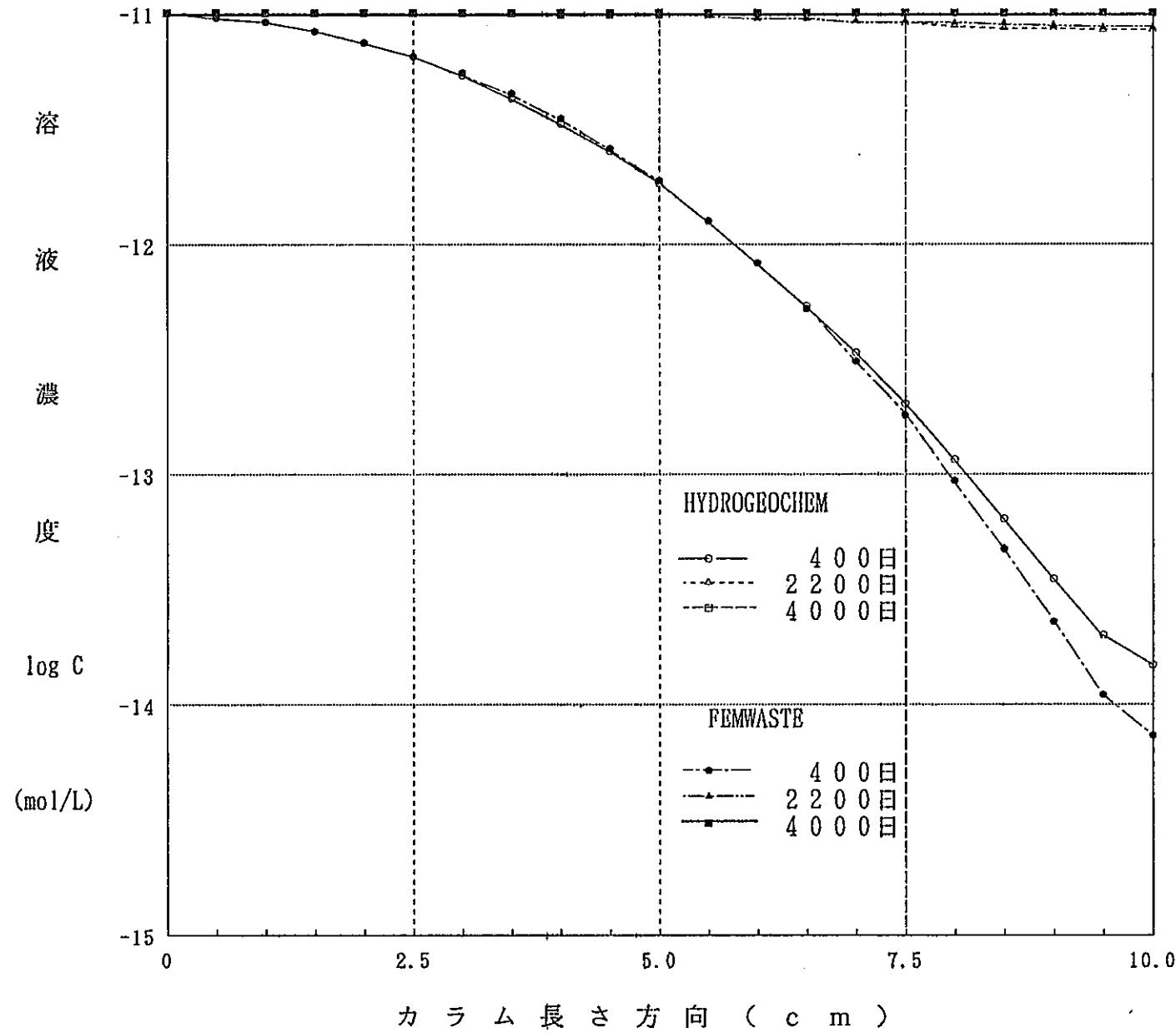


図 3-14 ベンチマーク解析(移流)結果

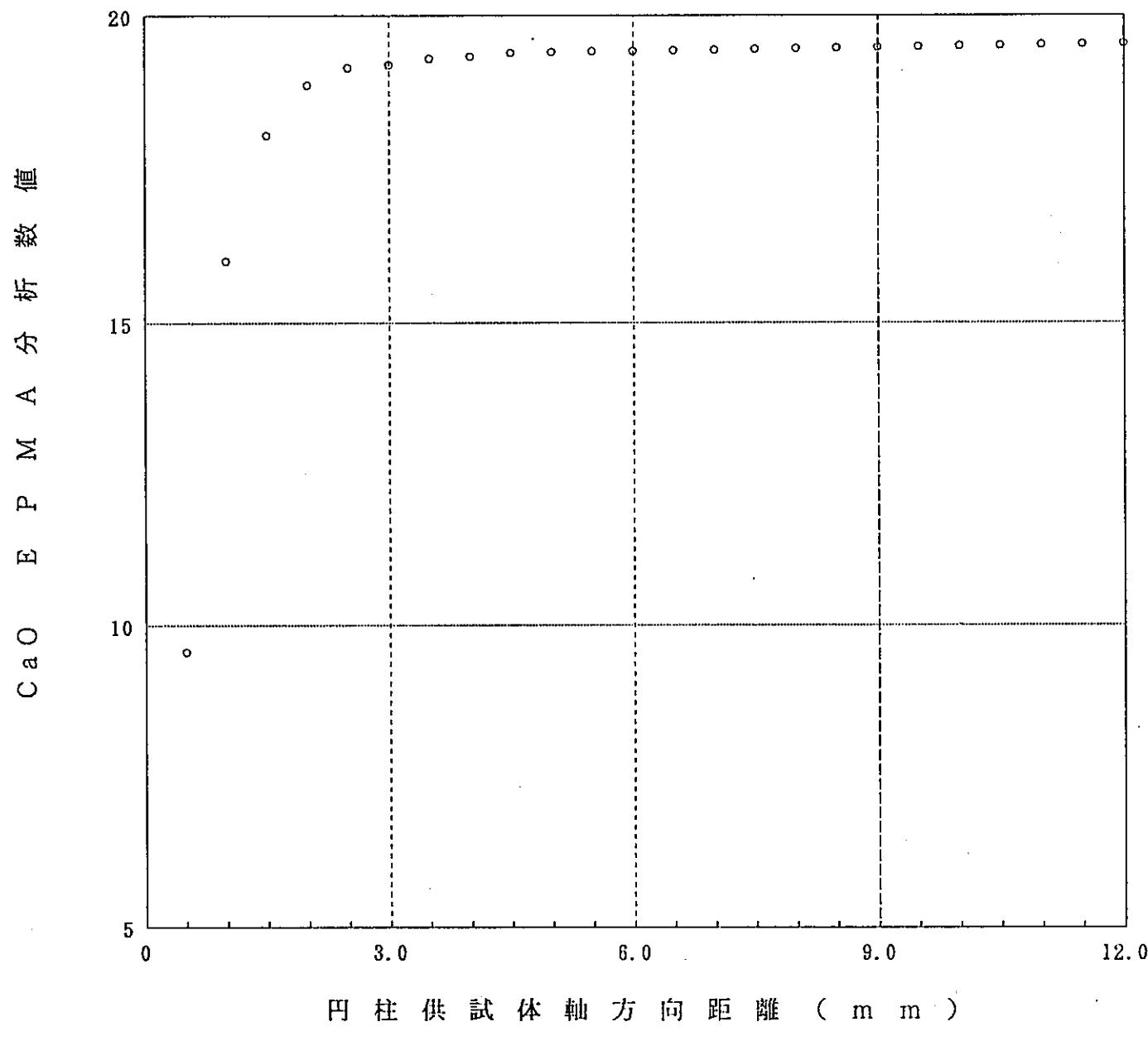


図 3-15 円柱供試体浸漬試験結果 (CaO : EPMA分析結果)

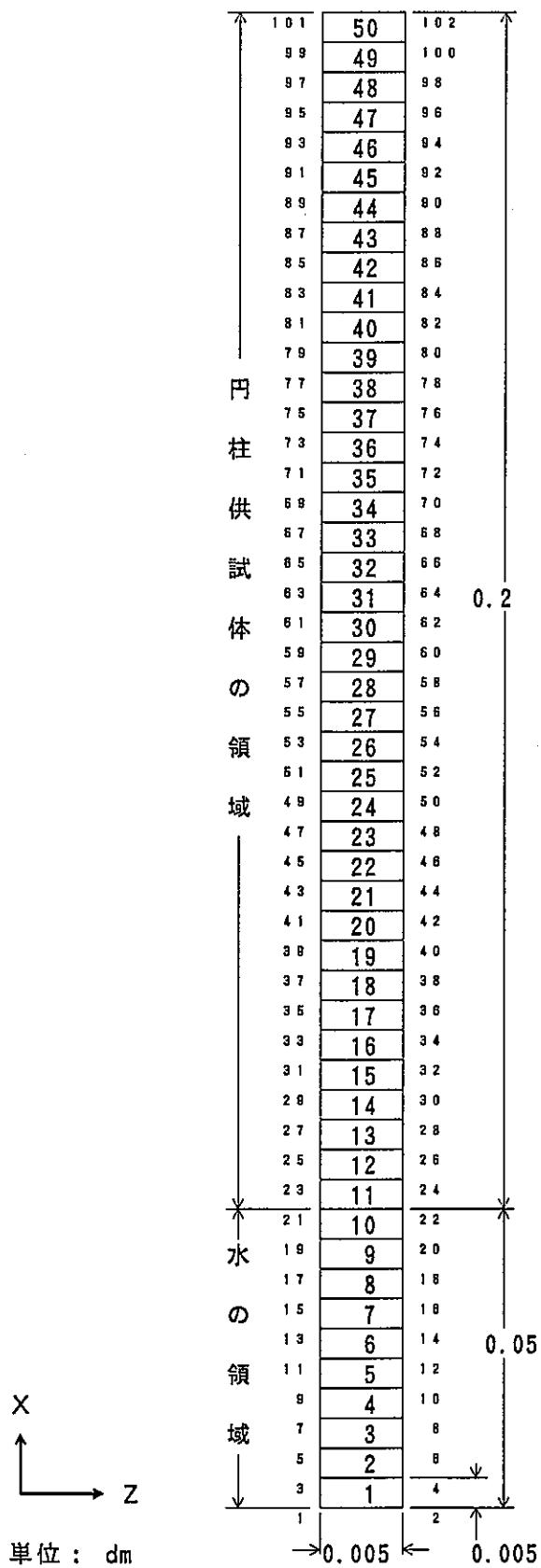


図 3-16 確証解析モデル

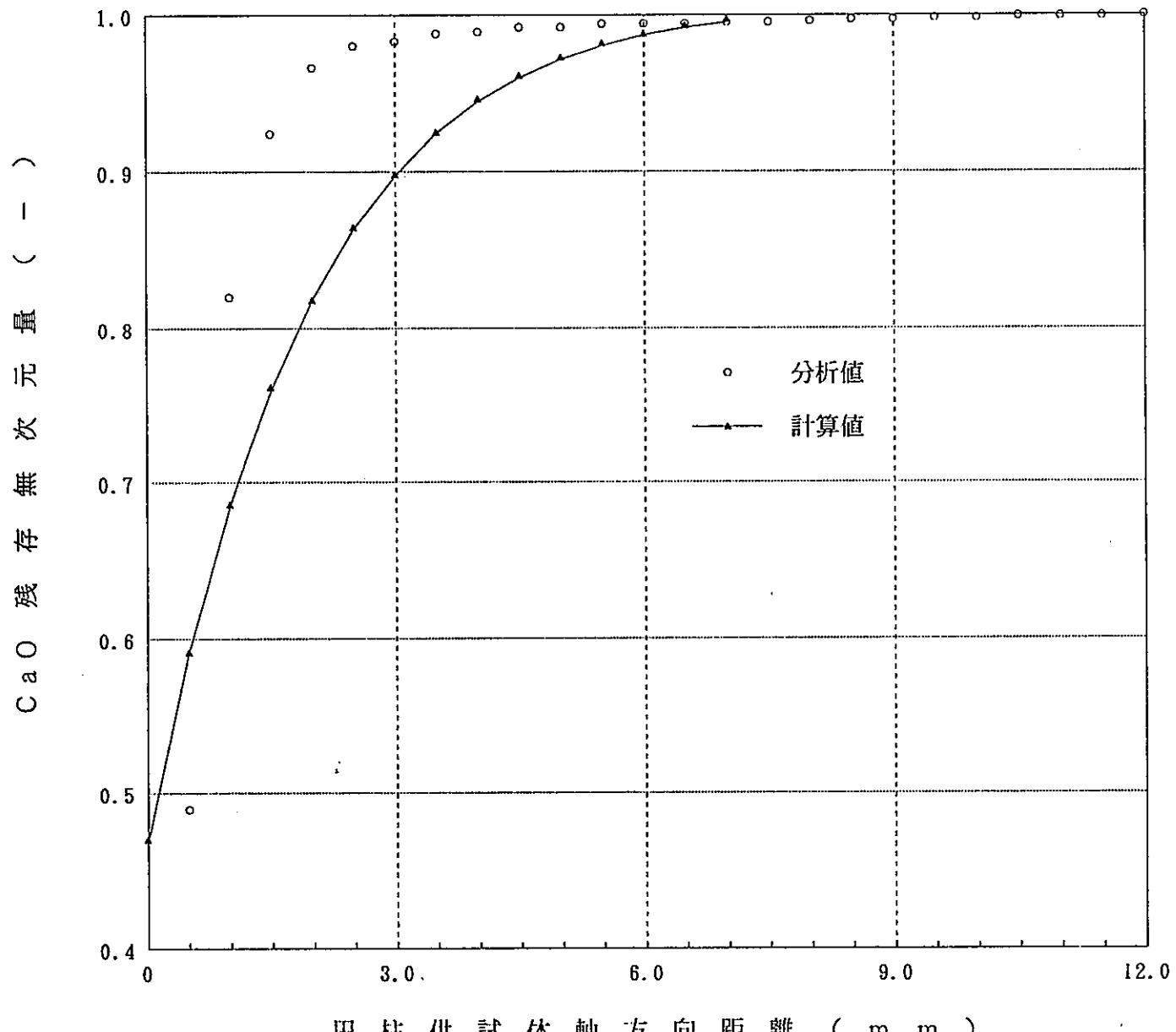


図 3-17 確証解析結果

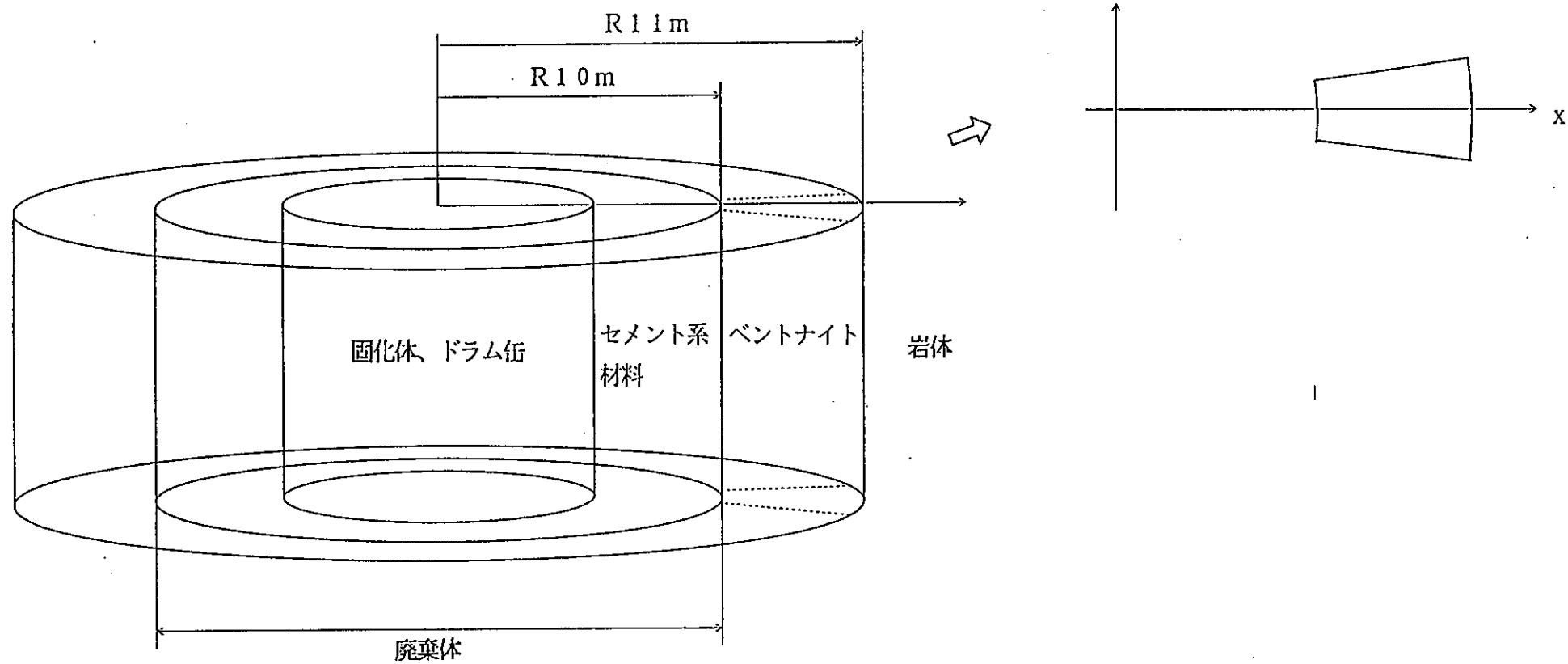


図 3-18 核種移行解析モデル概念

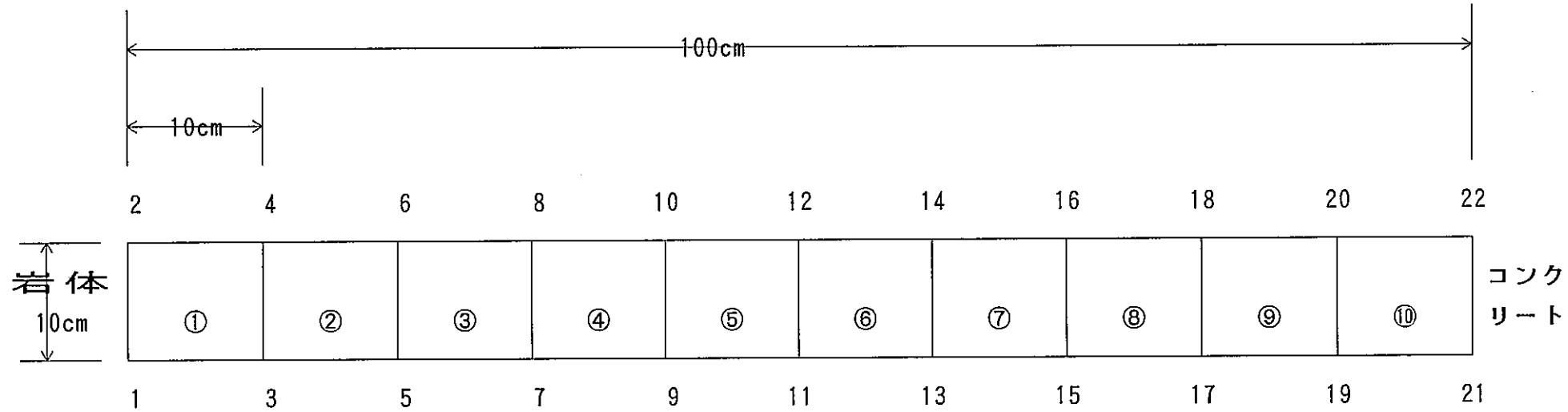


図 3-19 核種移行試験解析モデル

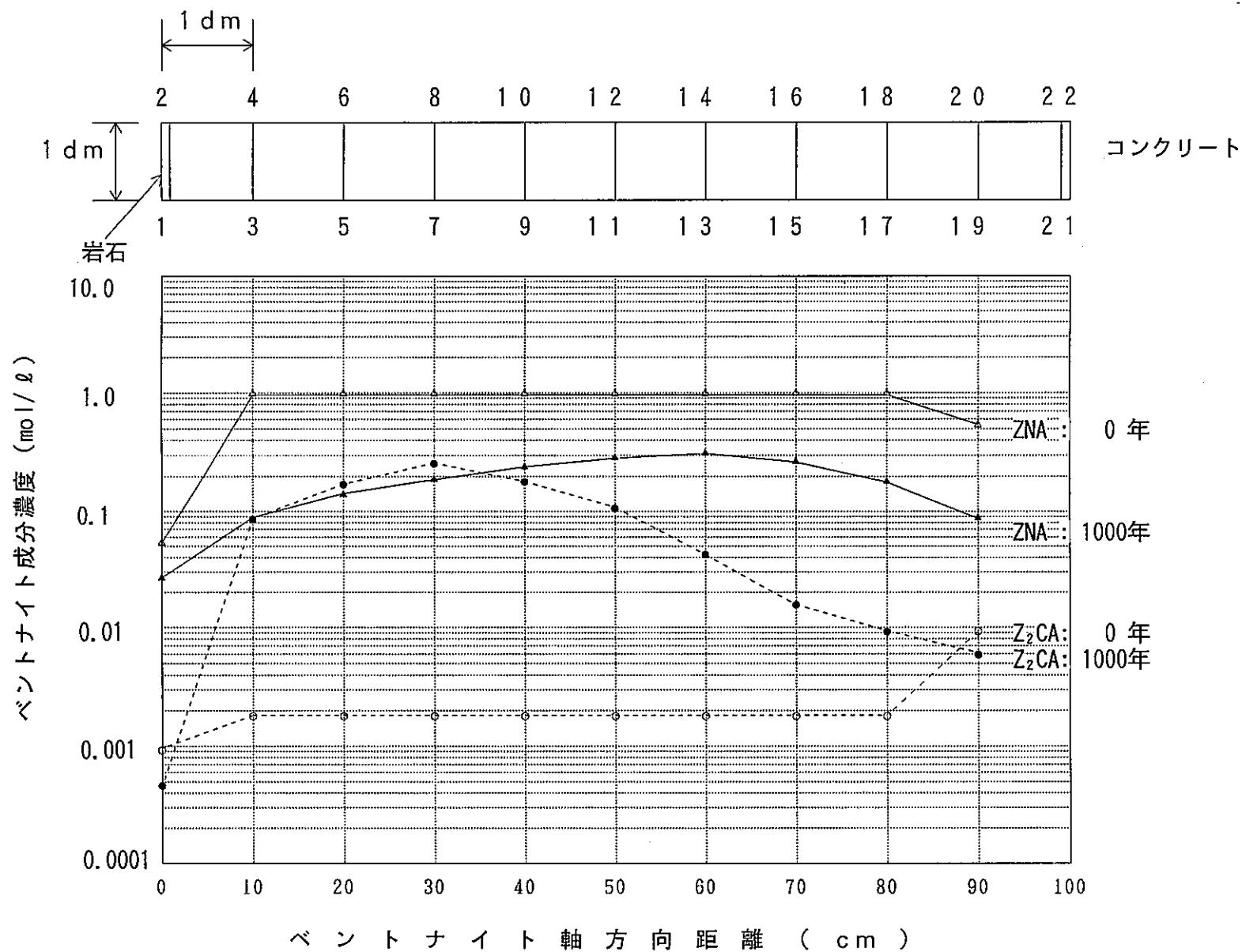


図 3-20 ベントナイトの変質試解析例 (ベントナイト成分濃度)

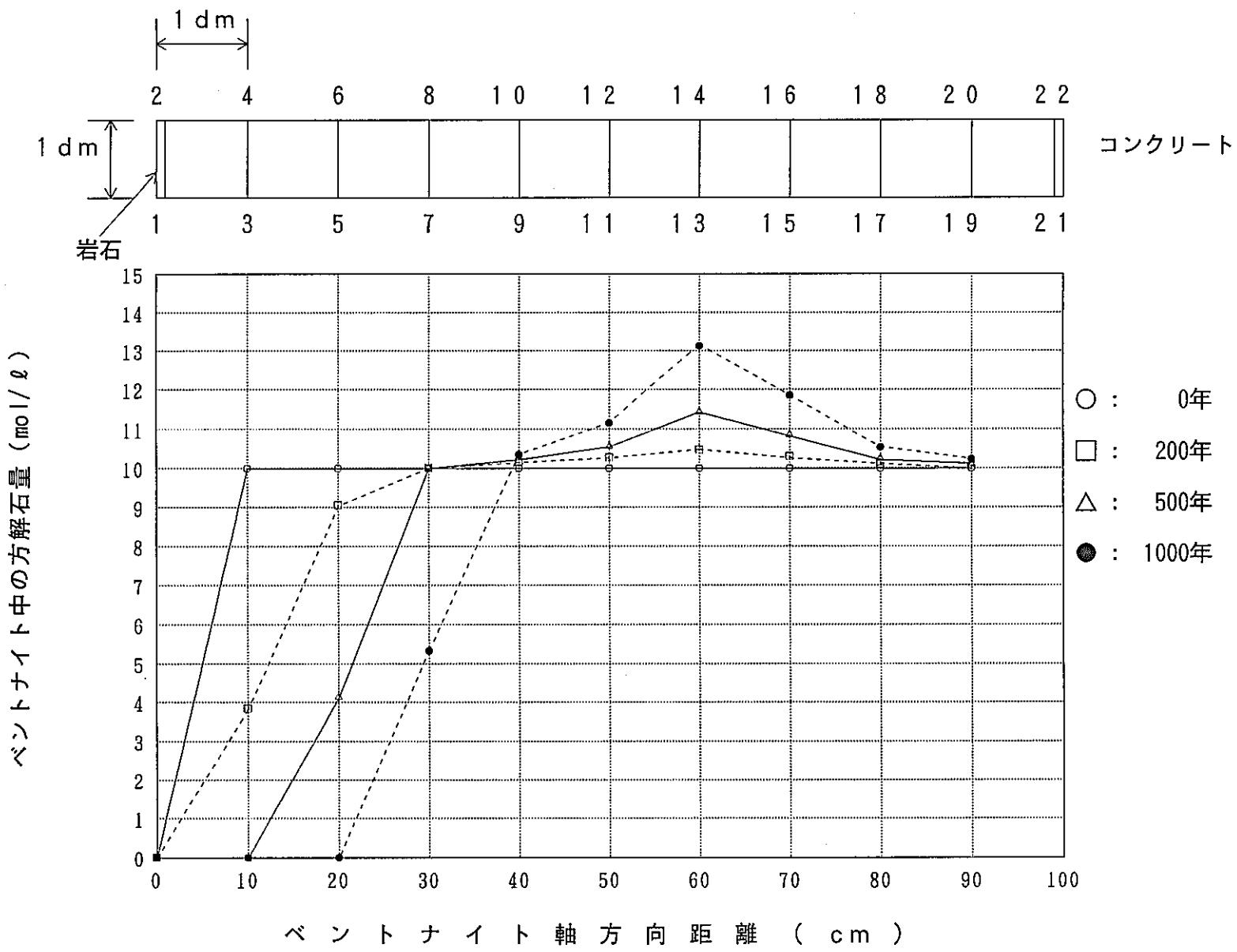


図 3-21 ベントナイトの変質試解析例(ベントナイト中方解石量)

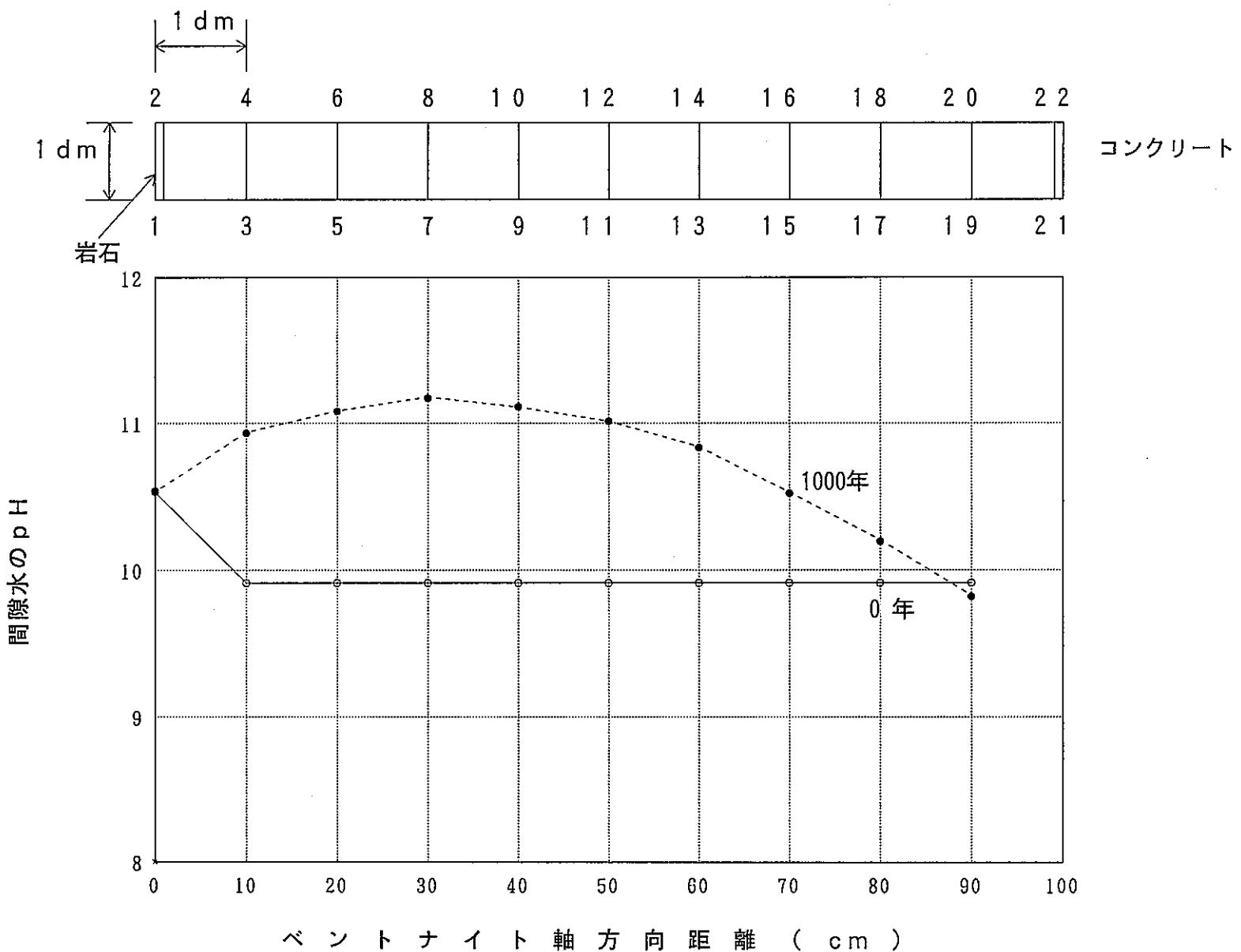


図 3-22 ベントナイトの変質試解析例 (間隙水中のpH)

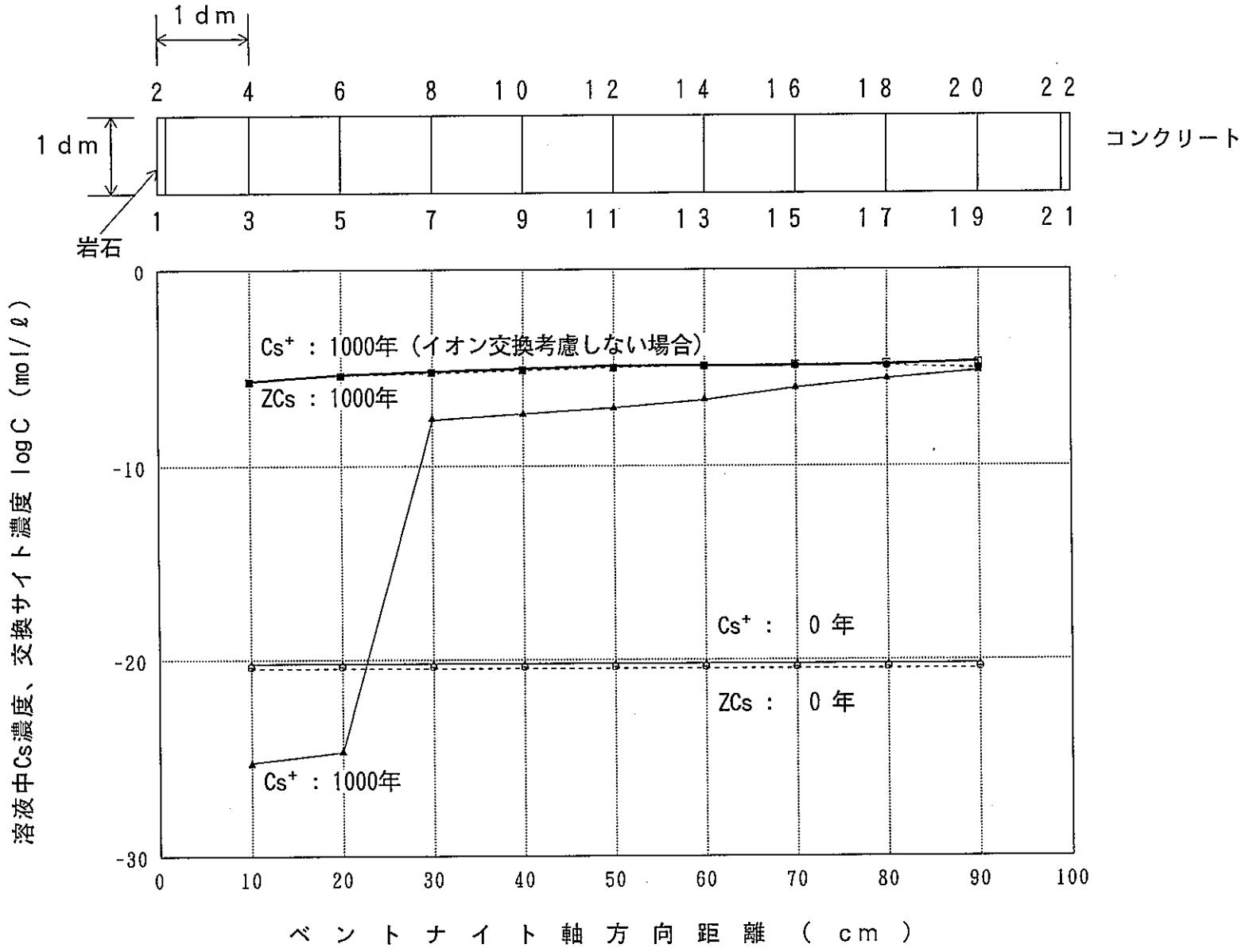


図 3-23 Cs-135 の核種移行試解釈例 (セメント固化体系)

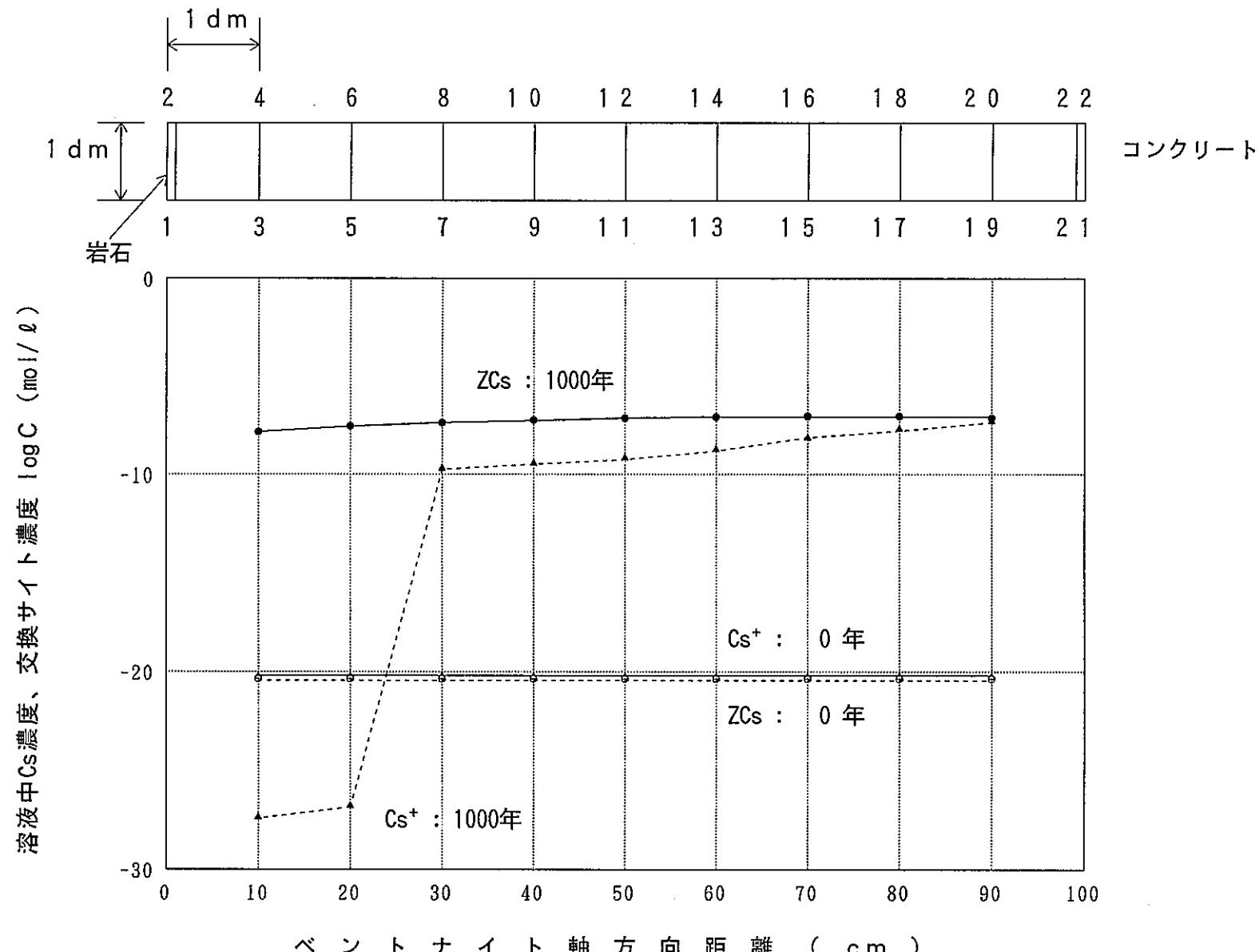


図 3-24 Cs-135 の核種移行試解分析例 (アスファルト固化体系)

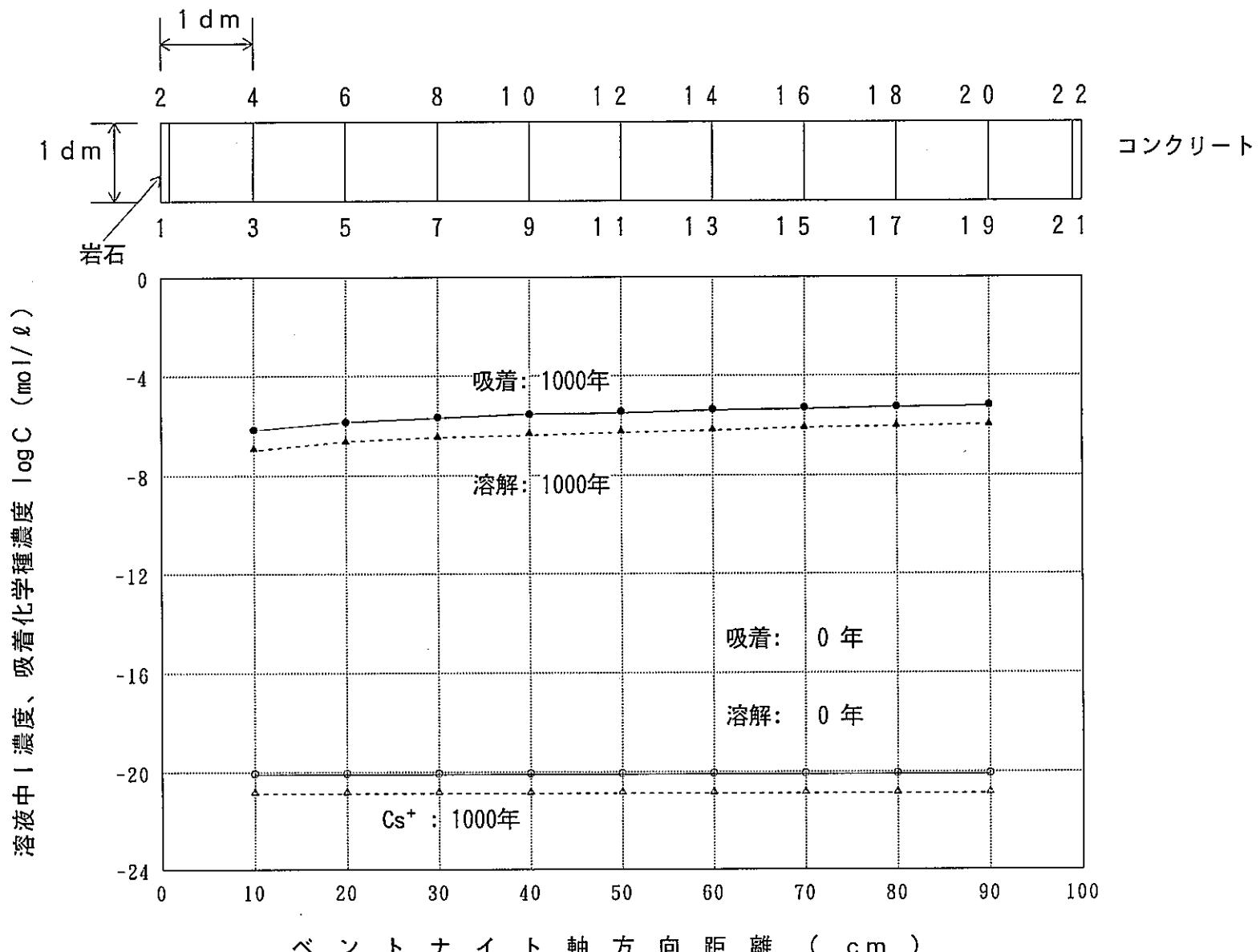


図 3-25 I-129 の核種移行試解析例 (セメント固化体系)

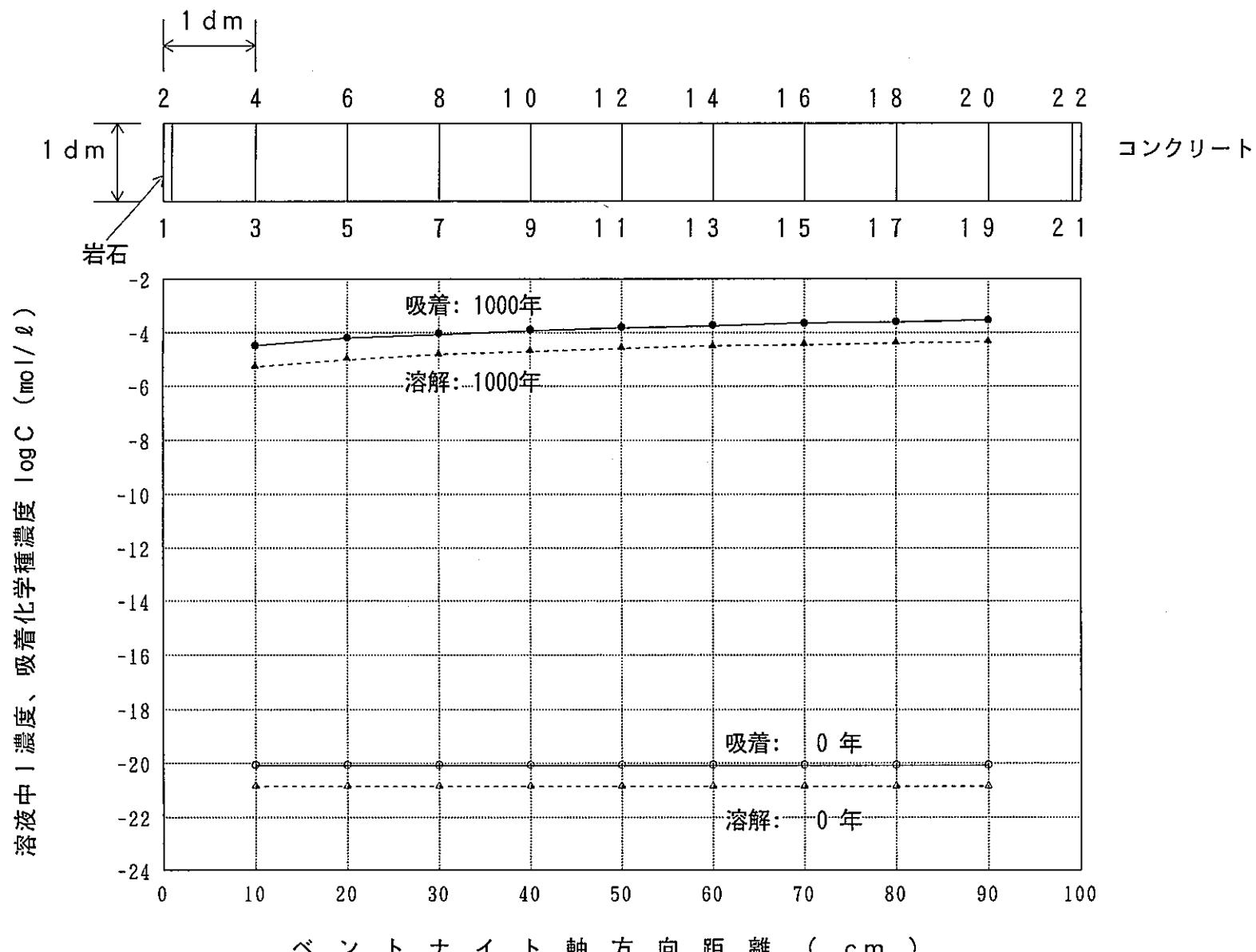


図 3-26 I-129 の核種移行試解分析例 (アスファルト固化体系)

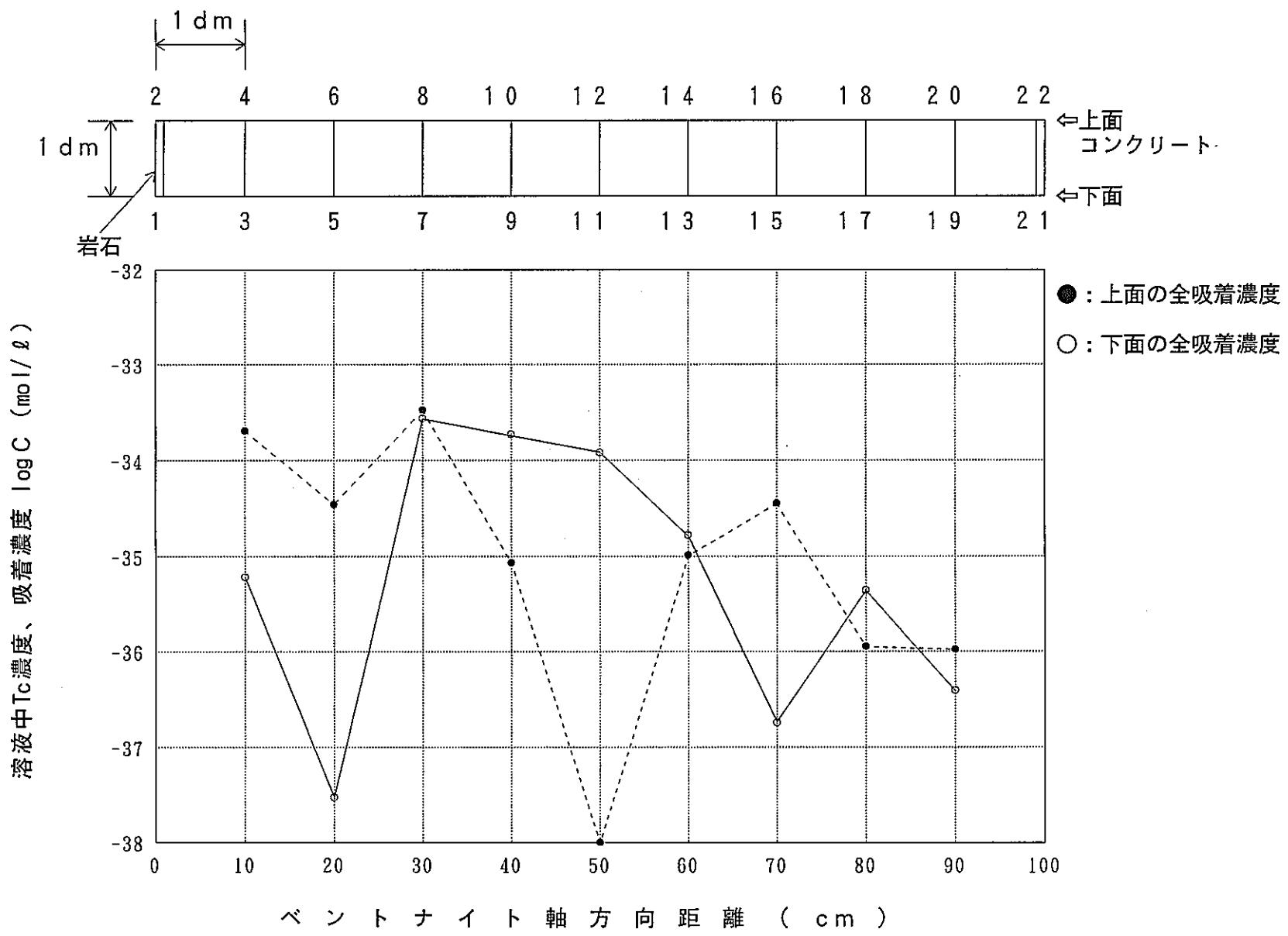


図 3-27 Tc-99 の核種移行試解分析例 (酸化物系、1000年)

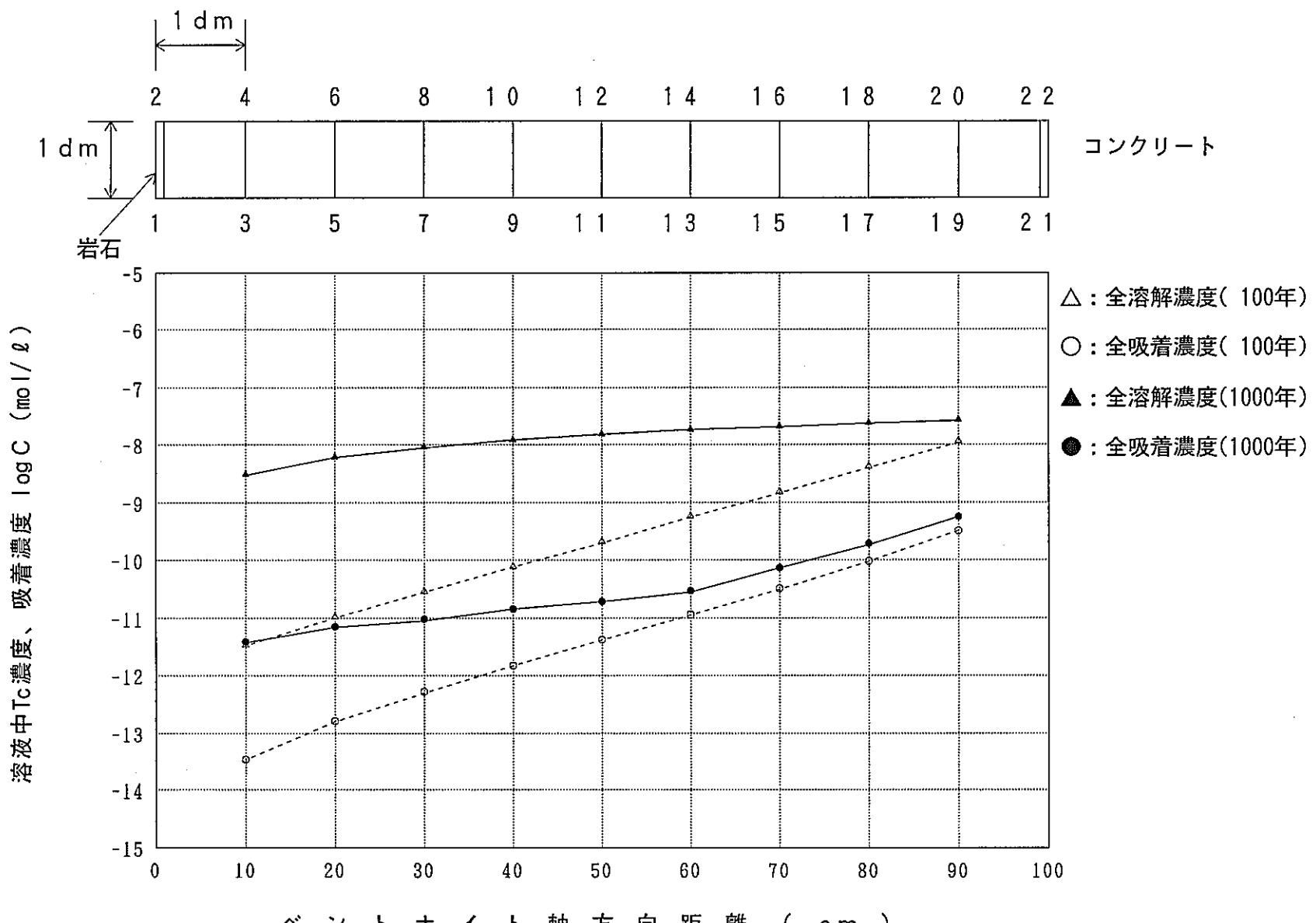


図 3-28 Tc-99 の核種移行試解釈例 (水酸化物系)

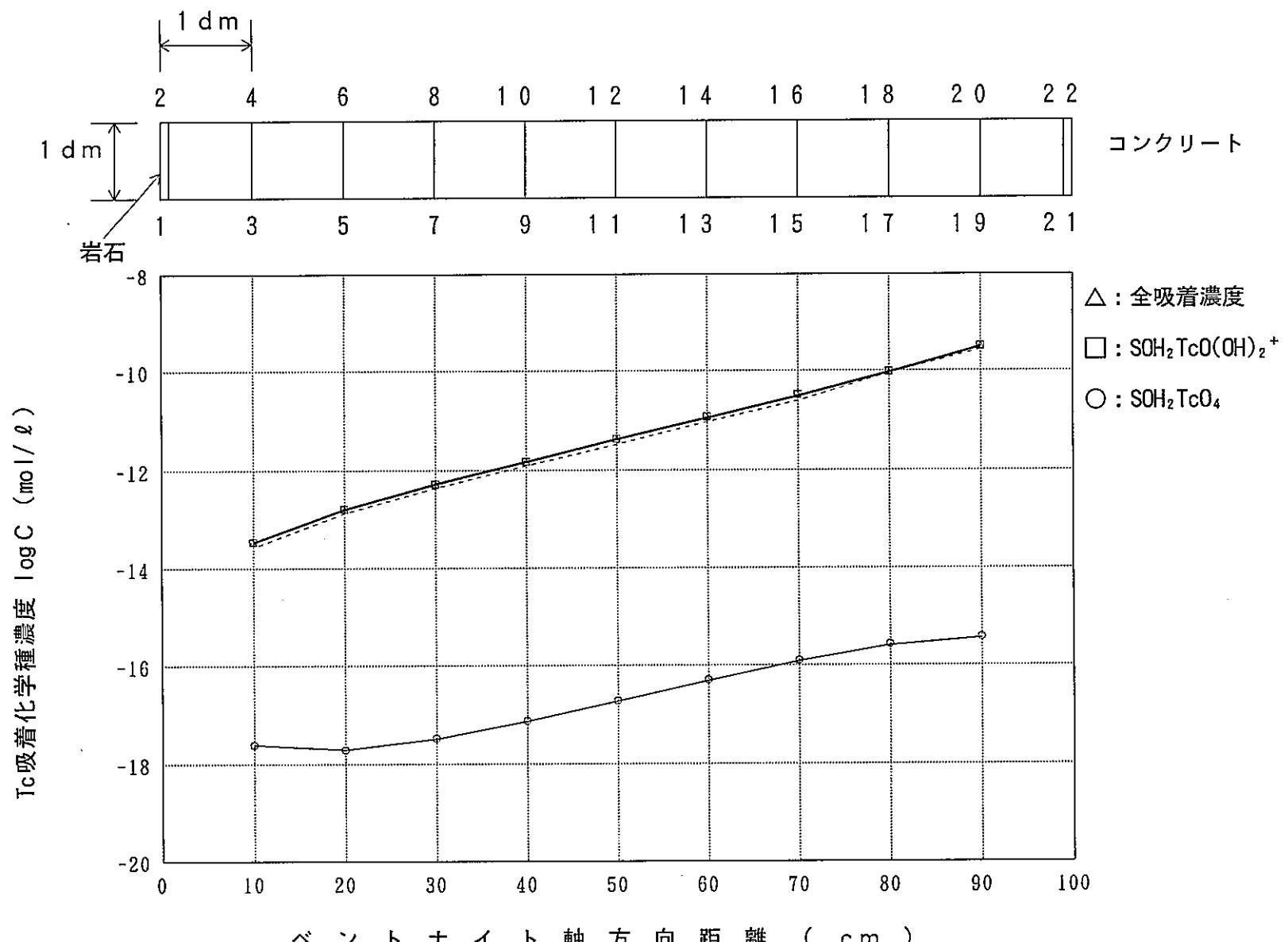


図 3-29 Tc-99 の核種移行試解分析例 (水酸化物系、1年)

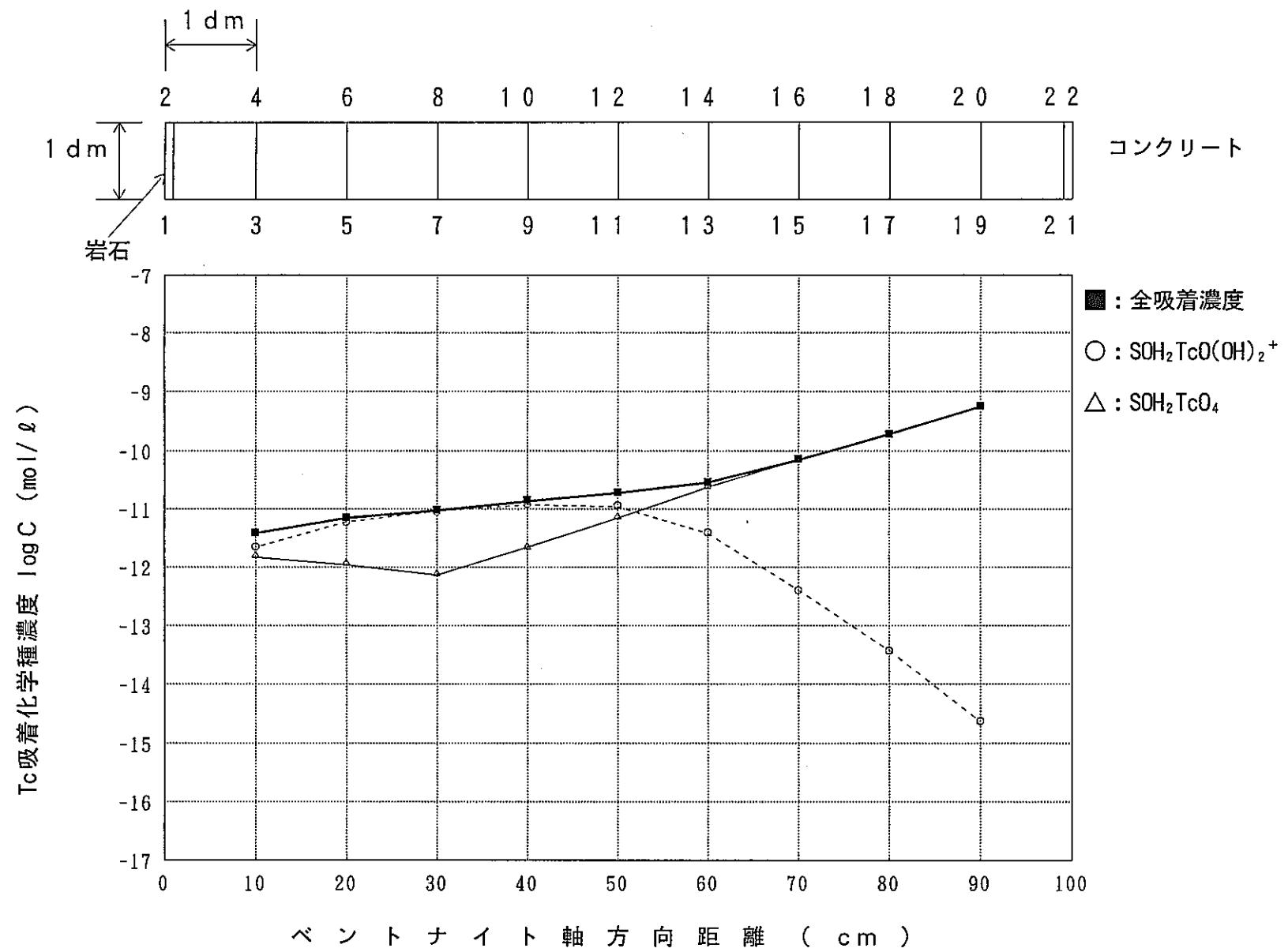


図 3-30 Tc-99 の核種移行試解析例 (水酸化物系、1000年)

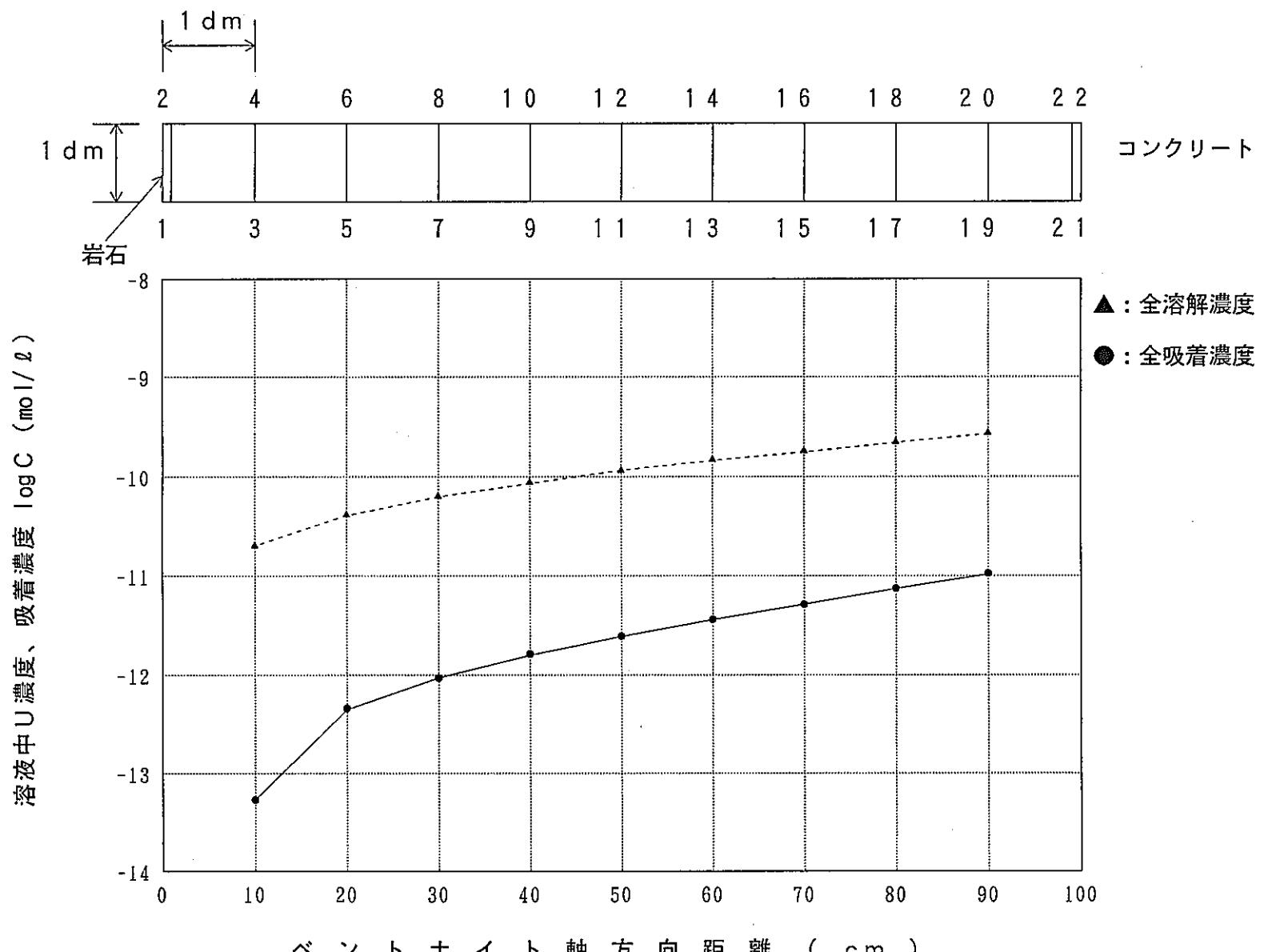


図 3-31 U-234 の核種移行試解析例 (酸化物系、1000年)

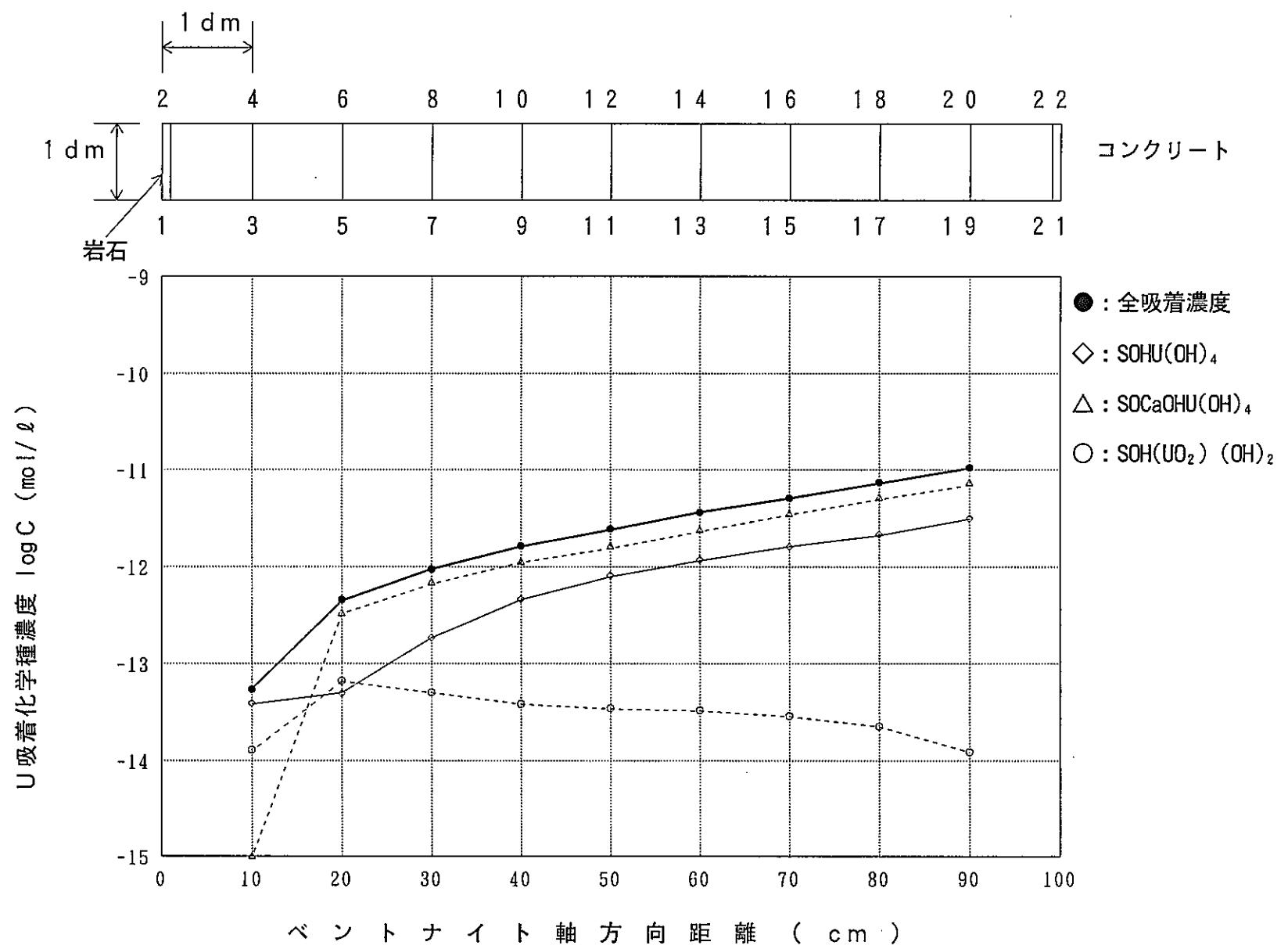


図 3-32 U-234 の核種移行試験解析例 (酸化物系、1000年)

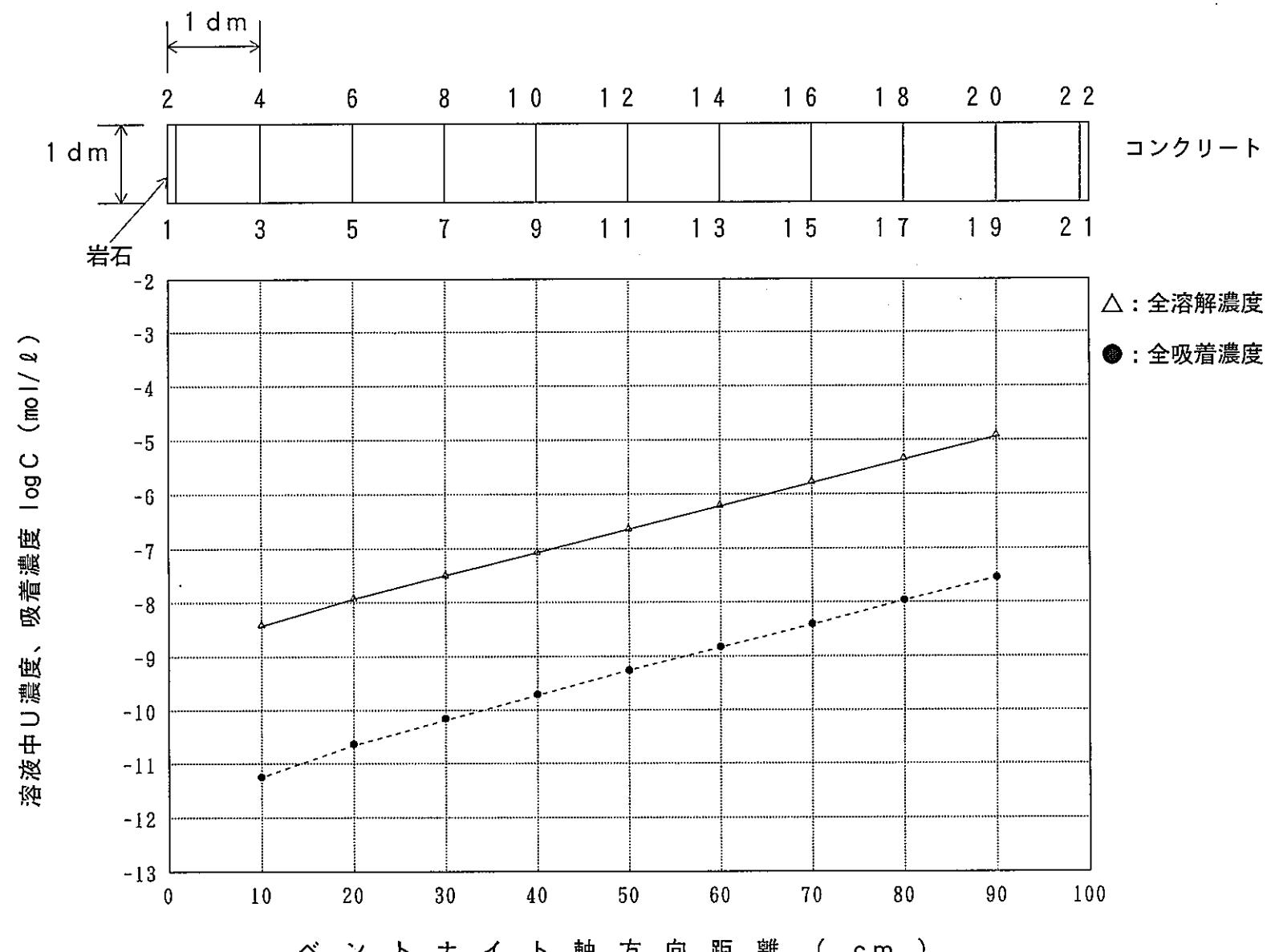


図 3-33 U-234 の核種移行試解析例 (水酸化物系、1年)

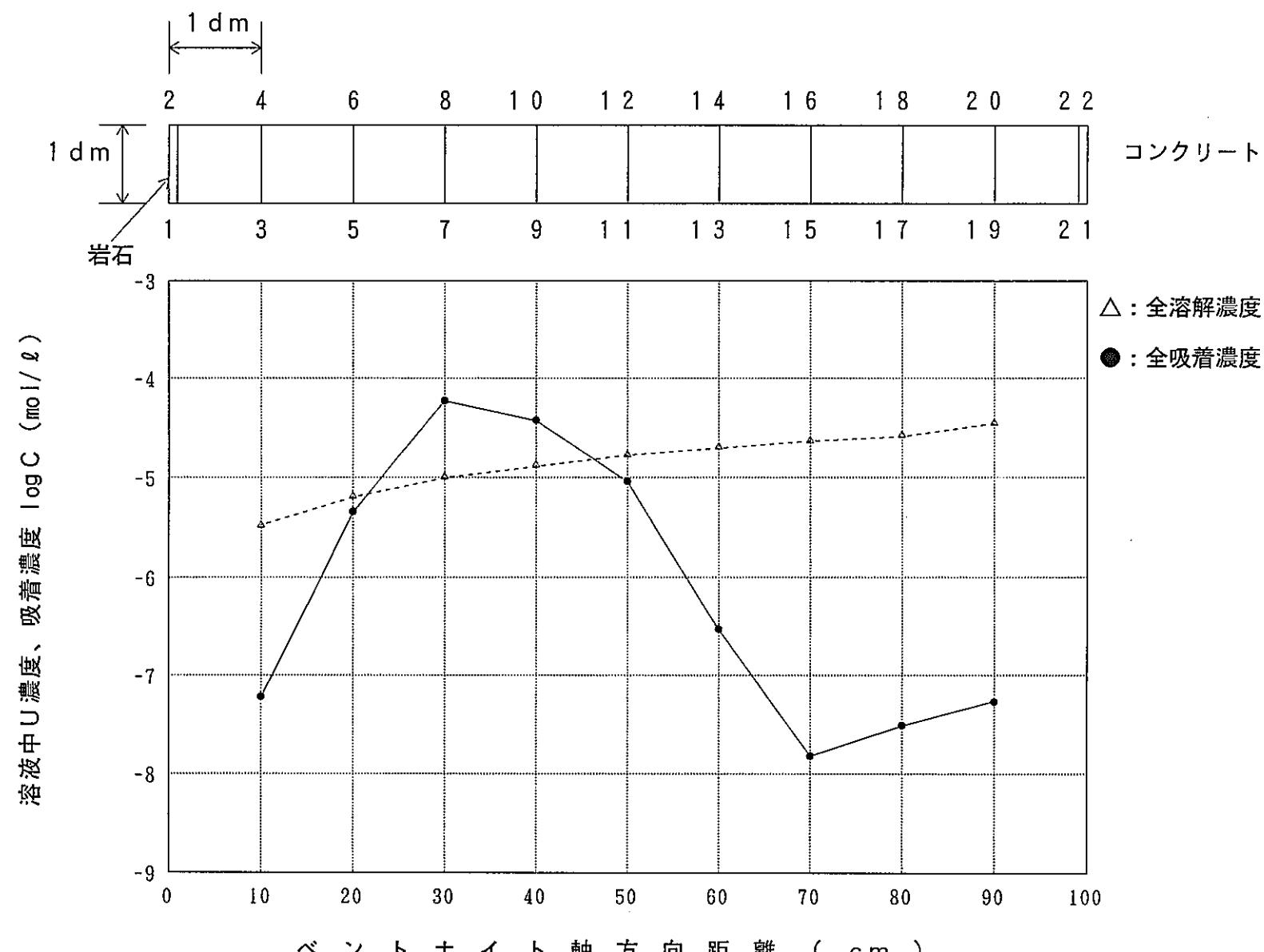


図 3-34 U-234 の核種移行試解分析例 (水酸化物系、1000年)

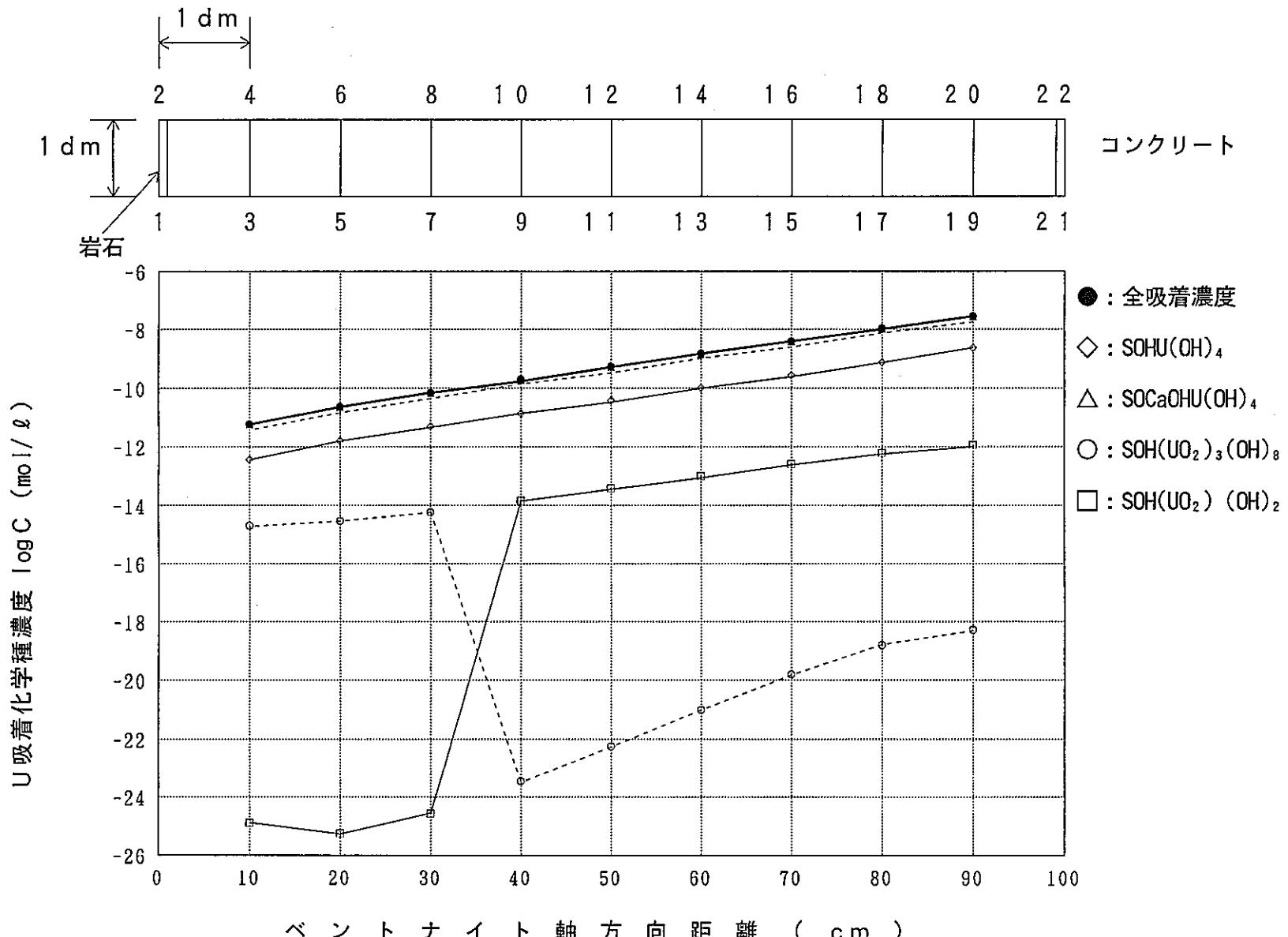


図 3-35 U-234 の核種移行試験例 (水酸化物系、1年)

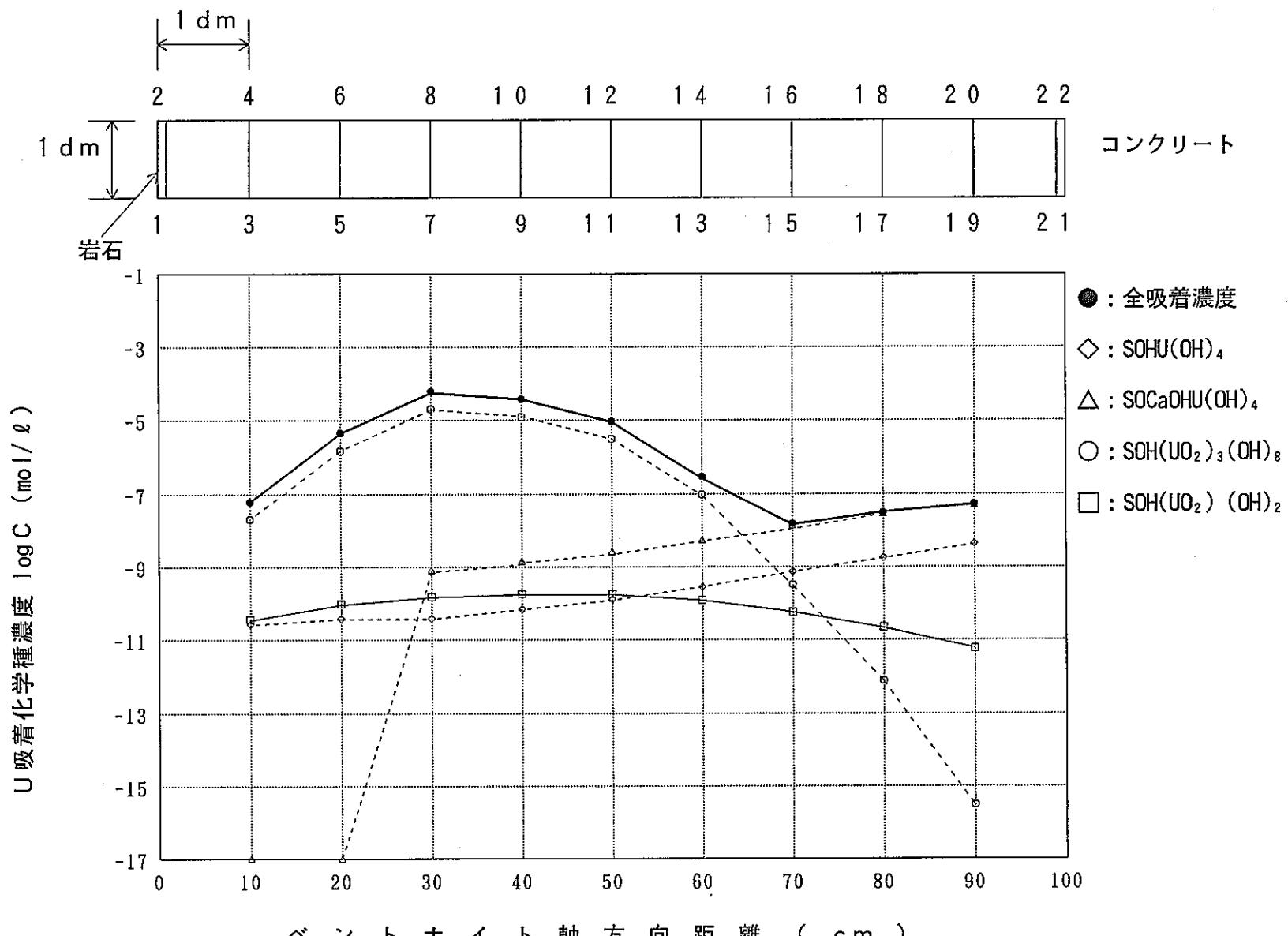


図 3-36 U-234 の核種移行試解析例 (水酸化物系、1000年)

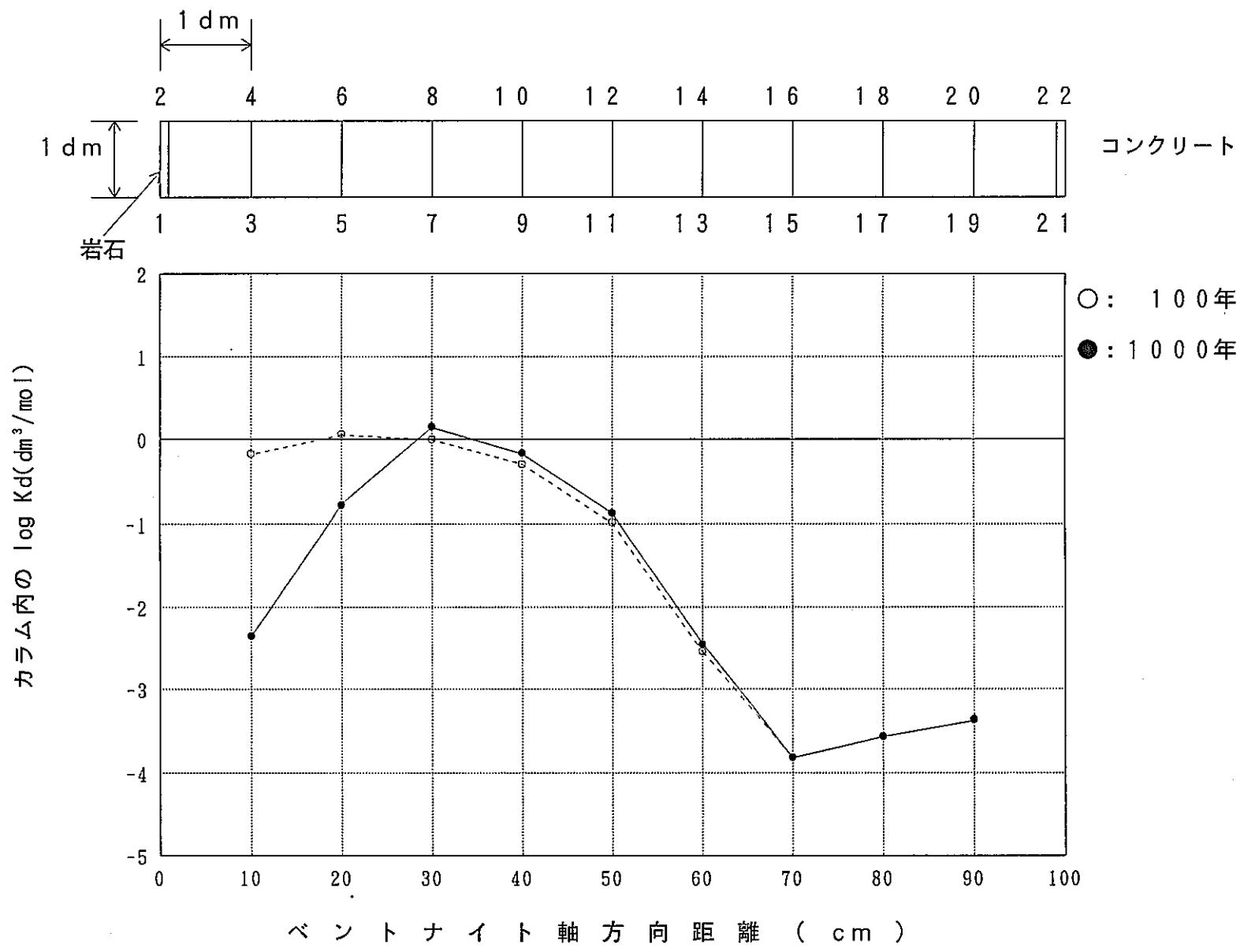


図 3-37 U-234 の核種移行試解析例 (水酸化物系)

#### 4. あとがき

TRU廃棄物処分システムの長期挙動を化学反応と物質移行とを連成させたモデルにより解析するための研究として、

- ・既存連成コードの調査
- ・熱力学データベースの効率的な運用方法の検討
- ・モデルの適用性の検討
- ・人工バリアの長期挙動解析および核種移行の試解析

を実施した。これらの検討により、現在のHYDROGEOCHEMコードの能力が明確となった。今後、更にHYDROGEOCHEMを性能評価モデルとして充実させるため、以下に示す改良が必要であると考える。

- ・溶解機能の追加、検証、確証
- ・イオン交換、収着機能の検証
- ・媒体毎の固相データの指定
- ・崩壊機能の追加
- ・後処理（結果のビジュアル化）

## 付録 A

HYDROGEOCHEM調査により著者より入手した最新資料

タイトル : An approach on simulating reactive chemical transport with  
precipitated species dominating chemical equilibrium

著者 : Gour. Tsyh. (George) Yeh, PhD. 他1名

# AN APPROACH ON SIMULATING REACTIVE CHEMICAL TRANSPORT WITH PRECIPITATED SPECIES DOMINATING CHEMICAL EQUILIBRIUM

H. P. CHENG and G. T. YEH  
Department of Civil and Environmental Engineering  
The Pennsylvania State University  
University Park, PA 16802  
U.S.A.

When hydrological transport is coupled with chemical equilibrium, the basic requirement for computing the reactive chemical transport is the capability of computing chemical equilibrium at any point of interest. In other words, the model used for computing chemical equilibrium should be able to handle as many chemical systems as possible. Most models take the aqueous component concentrations as their independent variables to compute chemical equilibrium when they are coupled with hydrological transport. However, if the amount of an aqueous component dissolving in the aqueous phase is negligible when compared with that precipitating in the solid phase (i.e., the precipitated concentration dominates), then the model might fail to conserve the mass of that aqueous component. In order to deal with such a situation, which happens in real-world problems quite often, this study presents an essential approach. Based on the approach originated in the HYDROGEOCHEM model, we use the modified total analytical concentrations (with the concentrations of dominating precipitated species excluded) rather than the total analytical concentrations as the dependent variables of transport. In addition, we save the concentrations of all the dominating precipitated species at both the previous and current time steps for calculating the rate of change due to precipitation/dissolution. The rate, playing the role of a source/sink term, appears on the right hand side of the transport governing equation. This paper presents a brief derivation of this approach and includes two designed examples to verify the approach.

## INTRODUCTION

During subsurface transport, reactive chemicals are subject to a variety of hydrophysical and chemical processes. The combined effects of all the processes on reactive chemical transport must satisfy the principle of conservation of mass. In the past decade, coupled models accounting for complex hydrophysical and chemical processes, with varying degrees of sophistication, have been developed [Yeh and Tripathi, 1991]. When chemical processes are coupled with solute transport in a mathematical/numerical model, the model needs to be constructed with some specific consideration (e.g., to generate symmetric positive definite global matrices) so that it is able to solve real-world problems for reasonably accurate solutions [Yeh and Tripathi, 1990]. No matter what consideration is taken into account, the basic requirement is that the coupled model should be able to handle as many chemical systems as possible. In computing chemical equilibrium, most models take the aqueous

components as their independent variables, which are basic quantities to be checked for convergence when solving a set of nonlinear algebraic equations of chemical equilibrium. However, if dominating precipitated species exist in a chemical system, we might obtain a non-mass conservative but convergent solution which will introduce either nonconvergency or a wrong result in the transport process. This is so because there is always a nonzero error tolerance for checking the convergence of chemical equilibrium, which could make the order of solving nonlinear equations significant and result in initial guess-dependent solutions when dominating precipitated species exist.

In order to resolve this problem, an approach, which excludes the concentrations of dominating precipitated species from the related total analytical concentrations to eliminate the non-mass conservative problem caused by dominating precipitated species, is presented in this paper. A brief derivation, examples for verification, and conclusions for the approach are given in the next three sections.

## DERIVATION

In the HYDROGEOCHEM model [Yeh and Tripathi, 1990], the chemical equilibrium is assumed to be achieved immediately, and it is computed by solving a set of nonlinear algebraic equations of (1) mass conservation of the total analytical concentrations of all components and (2) constitution describing the relationship between species and components. To overcome the non-mass conservative problem caused by dominating precipitated species, the mass conservation equations of the total analytical concentrations of aqueous components

$$T_j = c_j + \sum_{i=1}^{M_x} a_{ij}^x x_i + \sum_{i=1}^{M_y} a_{ij}^y y_i + \sum_{i=1}^{M_z} a_{ij}^z z_i + \sum_{i=1}^{M_p} a_{ij}^p p_i \quad \textcircled{1} = 1, \dots, N_a \quad (1)$$

are replaced by the mass conservation equations of the modified total analytical concentrations of aqueous components

$$\bar{T}_j = c_j + \sum_{i=1}^{M_x} a_{ij}^x x_i + \sum_{i=1}^{M_y} a_{ij}^y y_i + \sum_{i=1}^{M_z} a_{ij}^z z_i + \sum_{i=n_d p_s+1}^{M_p} a_{ij}^p p_i \quad \textcircled{1} = 1, \dots, N_a \quad (2)$$

where  $T_j$  and  $\bar{T}_j$ , given as the input for computing chemical equilibrium, are the total and the modified total analytical concentrations of the  $j$ -th aqueous component, respectively;  $c_j$  is the concentration of the  $j$ -th aqueous component species;  $x_i$ ,  $y_i$ ,  $z_i$ , and  $p_i$  are the concentrations of the  $i$ -th complexed, adsorbed, ion-exchanged, and precipitated species, respectively;  $a_{ij}^x$ ,  $a_{ij}^y$ ,  $a_{ij}^z$ , and  $a_{ij}^p$  are the stoichiometric coefficient of the  $i$ -th complexed, adsorbed, ion-exchanged, and precipitated species, respectively, on the  $j$ -th component; and  $N_a$ ,  $M_x$ ,  $M_y$ ,  $M_z$ ,  $M_p$ , and  $n_d p_s$  are the numbers of aqueous components, complexed species, adsorbed species, ion-exchanged species, precipitated species, and dominating precipitated species, respectively. Therefore, when checking the convergence of chemical equilibrium, the modified total analytical concentrations, rather than the total analytical concentrations, of aqueous components are examined for mass conservation. Although dominating precipitated species exist, they will not yield non-mass conservation because they are excluded from the equations of the modified total analytical concentrations of aqueous components. To couple chemical equilibrium to solute transport, we simply substitute Eq. (2) into the governing equations of the HYDROGEOCHEM model

$$\begin{aligned} \theta \frac{\partial T_j}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla C_j - \nabla \cdot (\theta D \cdot \nabla T_j) + q T_j + \frac{\partial \theta}{\partial t} T_j & \quad j = 1, \dots, N_a \\ = -\nabla \cdot (\theta D \cdot \nabla (S_j + P_j)) + q (S_j + P_j) + \frac{\partial \theta}{\partial t} C_j + q C_j^* \end{aligned} \quad (3)$$

to yield

$$\begin{aligned} \theta \frac{\partial T_j}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla C_j - \nabla \cdot (\theta D \cdot \nabla T_j) + q T_j + \frac{\partial \theta}{\partial t} T_j & \quad j = 1, \dots, N_a \\ = -\nabla \cdot (\theta D \cdot \nabla (S_j + \bar{P}_j)) + q (S_j + \bar{P}_j) + \frac{\partial \theta}{\partial t} C_j + q C_j^* - \sum_{i=1}^{ndps} a_{ij}^p \frac{\partial (\theta p_i)}{\partial t} \end{aligned} \quad (4)$$

where  $C_j$ ,  $S_j$ ,  $P_j$ , and  $\bar{P}_j$  are the total dissolved, total sorbed, total precipitated, and modified total precipitated concentrations of the  $j$ -th aqueous component;  $\theta$  is moisture content;  $q$  is Darcy velocity;  $\mathbf{v}$  is source/sink of water; and  $C_j^*$  is the total dissolved concentration of the  $j$ -th aqueous component of source/sink. Eq. (4) can be further written in the Lagrangian-Eulerian form as follows.

$$\begin{aligned} \theta \frac{DC_j}{Dt} + \theta \frac{\partial (S_j + \bar{P}_j)}{\partial t} - \nabla \cdot (\theta D \cdot \nabla T_j) + q T_j + \frac{\partial \theta}{\partial t} T_j & \quad j = 1, \dots, N_a \\ = -\nabla \cdot (\theta D \cdot \nabla (S_j + \bar{P}_j)) + q (S_j + \bar{P}_j) + \frac{\partial \theta}{\partial t} C_j + q C_j^* - \sum_{i=1}^{ndps} a_{ij}^p \frac{\partial (\theta p_i)}{\partial t} \end{aligned} \quad (5)$$

## EXAMPLES

In this section, two examples are used to verify the approach presented in this paper. The first example is to demonstrate how significantly the approach eliminates the problem of non-mass conservation due to the existence of dominating precipitated species. The second example is to demonstrate how properly the approach works for a clean-up problem.

### Example 1: chemical equilibrium under complexation and precipitation

In this example, two components, namely  $\text{Ca}^{2+}$  and  $\text{CO}_3^{2-}$ , are considered. The given total analytical concentrations of  $\text{Ca}^{2+}$  and  $\text{CO}_3^{2-}$  are  $10^{20} \text{ M}$  and  $10^{20} \text{ M}$ , respectively. In addition to these two aqueous component species, one complexed species,  $\text{CaCO}_3$ , and one dominating precipitated species,  $\text{CaCO}_{3(s)}$ , are included for chemical equilibrium simulations. The associated equilibrium constants of  $\text{CaCO}_3$  and  $\text{CaCO}_{3(s)}$  are  $10^3 \text{ M}^{-1}$  and  $10^{8.3} \text{ M}^{-2}$ , respectively. If we directly use the total analytical concentrations of aqueous components to solve for chemical equilibrium and use  $10^{-6}$  as the relative error tolerance, then we will obtain the following answer:  $[\text{Ca}^{2+}] = 1.784 \times 10^{-12} \text{ M}$ ,  $[\text{CO}_3^{2-}] = 2.809 \times 10^3 \text{ M}$ ,  $[\text{CaCO}_3] = 5.012 \times 10^{-6} \text{ M}$ ,  $[\text{CaCO}_{3(s)}] = 10^{20} \text{ M}$ . It is true that this convergent result is not mass-conservative for both components, and more obvious for  $\text{CO}_3^{2-}$ . This result will introduce either a wrong solution or nonconvergency if it is applied to solve for chemical transport. In the approach, however, the modified total analytical concentrations, which are set to be  $0.0 \text{ M}$  for both aqueous components before chemical equilibrium, are used to solve for equilibrium. The dominating precipitated species,  $\text{CaCO}_{3(s)}$ , has a concentration of  $10^{20} \text{ M}$  before equilibrium. In other words, we initially put all the concentrations into the dominating precipitated species rather than the component species. With the same

relative error tolerance,  $10^{-6}$ , the following answer can be obtained by using the approach:  $[Ca^{2+}] = [CO_3^{2-}] = 7.079 \times 10^{-5} M$ ,  $[CaCO_3] = 5.012 \times 10^{-6} M$ ,  $[CaCO_3(s)] = 10^{20} - 7.580 \times 10^{-5} M$ . It is mass-conservative for both aqueous components. In the approach, the concentration of the dominating precipitated species,  $CaCO_3(s)$ , is recorded with two variables: one is to store the dominating amount,  $10^{20} M$ , and the other one is to store the variable amount,  $-7.580 \times 10^{-5} M$ , which is the amount of dissolution (if it is negative) or precipitation (if it is positive) relative to the situation before chemical equilibrium. With this recording, the difference of the concentration of a dominating precipitated species between two successive time steps can be correctly calculated in the transport process. In other words, the contribution from the change of a dominating precipitated species can be accurately computed, which cannot be appropriately calculated with the former approach.

### Example 2: one-dimensional clean-up problem

This example considers the clean-up of a precipitated species in a one-dimensional horizontal column. The chemical system involves two aqueous components, A and B, and one precipitated species, D, which is composed of one component A and one component B and has  $K_{sp} = 10^{10} M^{-2}$ . The simulation is conducted for 40 days with a time step size of 1.0 day. The region is made up of 100 elements of size  $1 \text{ dm} \times 1 \text{ dm} \times 1 \text{ dm}$ . In order to see how aptly the approach works, five different initial conditions are set up. They all have the same modified total analytical concentration,  $1 \times 10^{-5} M$ , for both components at every node. But they are given different amounts of precipitated species:  $0.0 M$ ,  $1 \times 10^{-5} M$ ,  $2 \times 10^{-5} M$ ,  $5 \times 10^{-5} M$ , and  $1 \times 10^{-4} M$ . As the simulation starts, clean water comes into the column through the left boundary plane. The flow velocity is  $0.4 \text{ dm/day}$ , the effective porosity is  $0.4$ , and the dispersivity is assumed negligible. Fig. 1 shows the schematic description of this example.

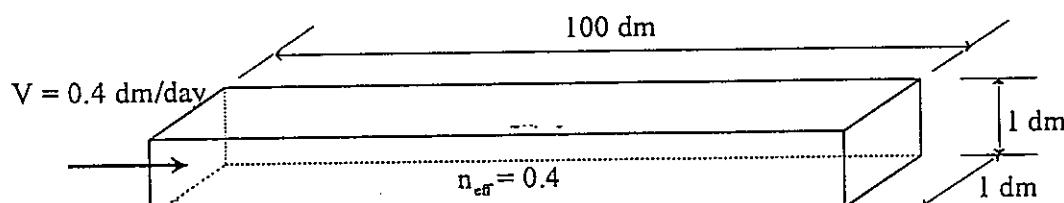


Figure 1 Schematic description of the clean-up example

Figures 2 through 6 illustrate the results of transient simulation for the five cases with initial precipitated species concentrations  $0.0 M$ ,  $1 \times 10^{-5} M$ ,  $2 \times 10^{-5} M$ ,  $5 \times 10^{-5} M$ , and  $1 \times 10^{-4} M$ , respectively. The concentrations of the precipitated species (i.e., the "Background" in Figures 2 through 6) for the five cases, varying from 0 up to 10 times of the designed modified total analytical concentration,  $1 \times 10^{-5} M$ , are not really dominant because this example is mainly designed for testing if the approach (i.e., solving Eq. (5)) has been correctly implemented. The computational results have been checked to be exactly the same as those from the former approach (i.e., solving Eq. (3) with the Lagrangian-Eulerian approach). Figures 7 and 8 display the difference among the five cases at time = 20 and 40 days, respectively. Since there is no precipitation during the simulation for case 1, both components can be thought as conservative components [Yeh and Tripathi, 1990]. Therefore, it is easy to determine the location of the clean water front.

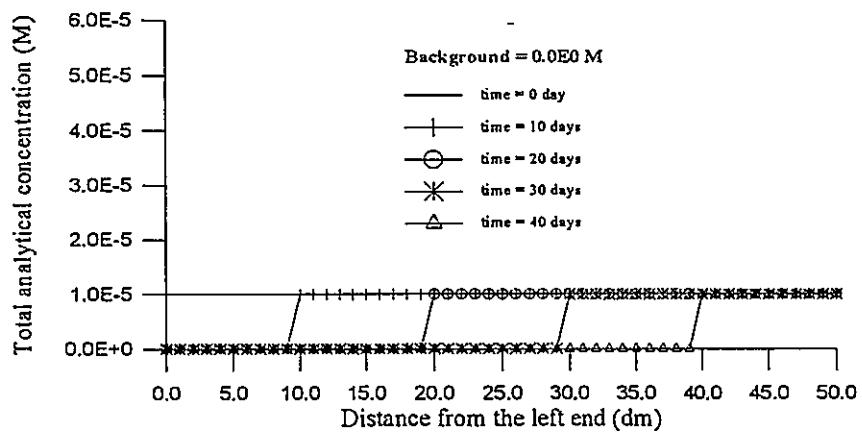


Figure 2 The transient simulation result of case 1

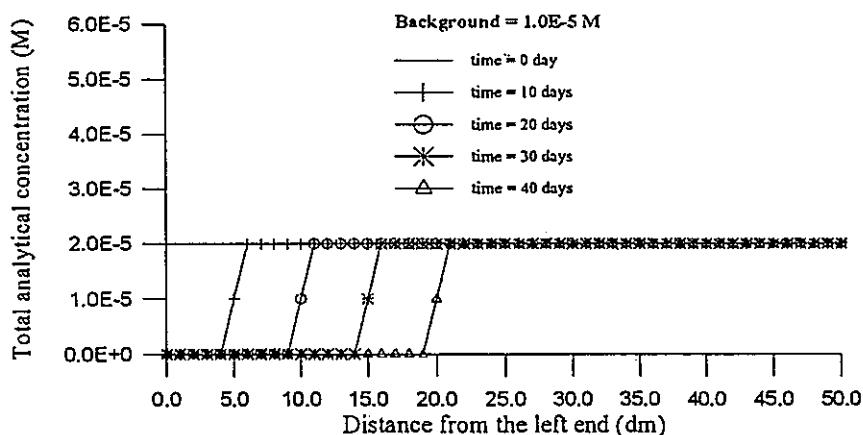


Figure 3 The transient simulation result of case 2

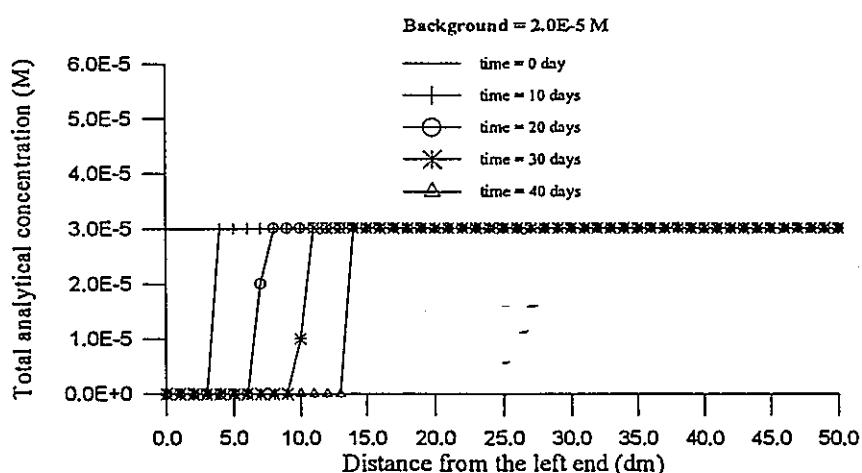


Figure 4 The transient simulation result of case 3

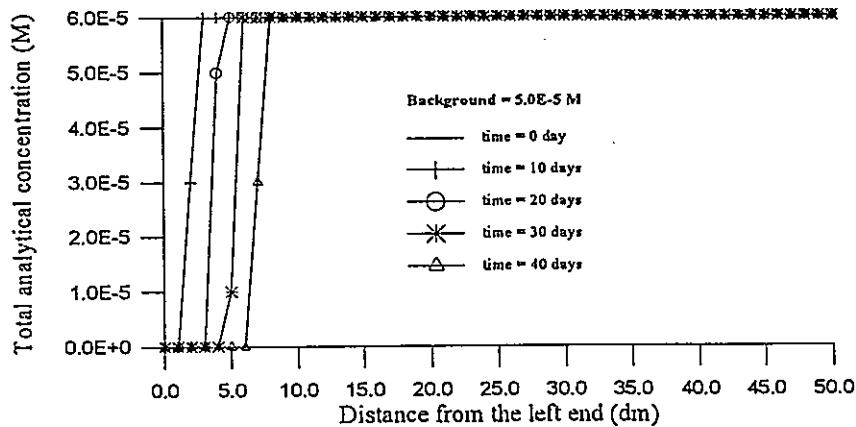


Figure 5 The transient simulation result of case 4

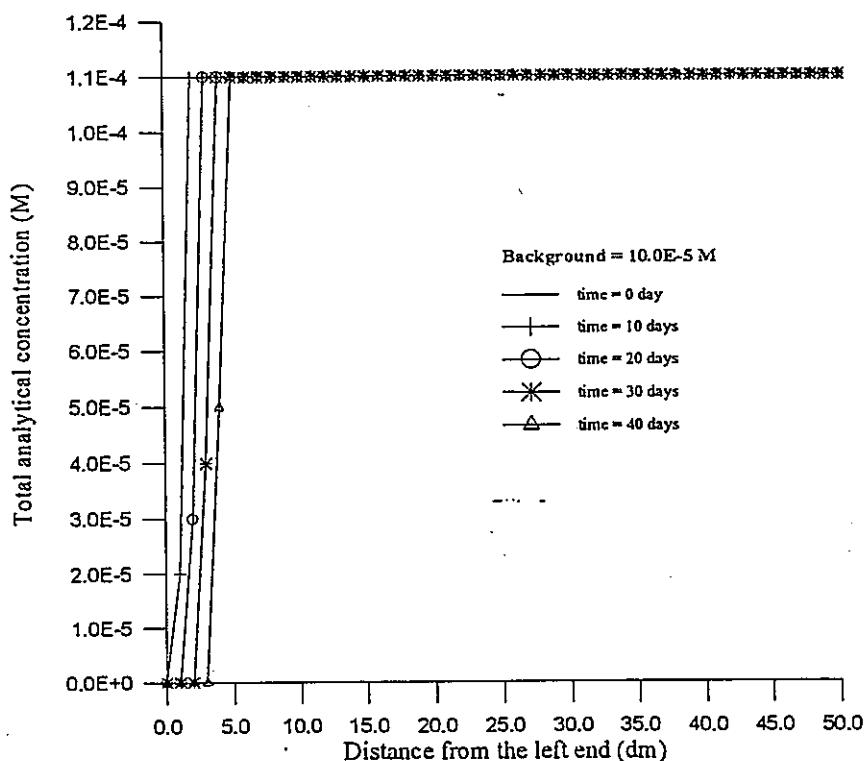


Figure 6 The transient simulation result of case 5

In this example, the mesh Courant number is set up to be 1.0 such that numerical dispersion can be avoided [Yeh, et al., 1992]. Figure 2 shows that the approach provides exactly the same result as expected for case 1. In Figures 7 and 8, the comparison between case 1 and the other four cases confirms that the approach offers reasonably accurate numerical solutions. That is so because the clean-up amounts of both components are  $19.5 \times 10^{-5}$ ,  $20 \times 10^{-5}$ ,  $20.5 \times 10^{-5}$ ,  $22 \times 10^{-5}$ , and  $23 \times 10^{-5}$  moles at time = 20 days and  $39.5 \times 10^{-5}$ ,  $40.0 \times 10^{-5}$ ,  $40.5 \times 10^{-5}$ ,  $42 \times 10^{-5}$ , and  $44.5 \times 10^{-5}$  moles at time = 40 days for cases 1 through 5, respectively. These data agree with the mass

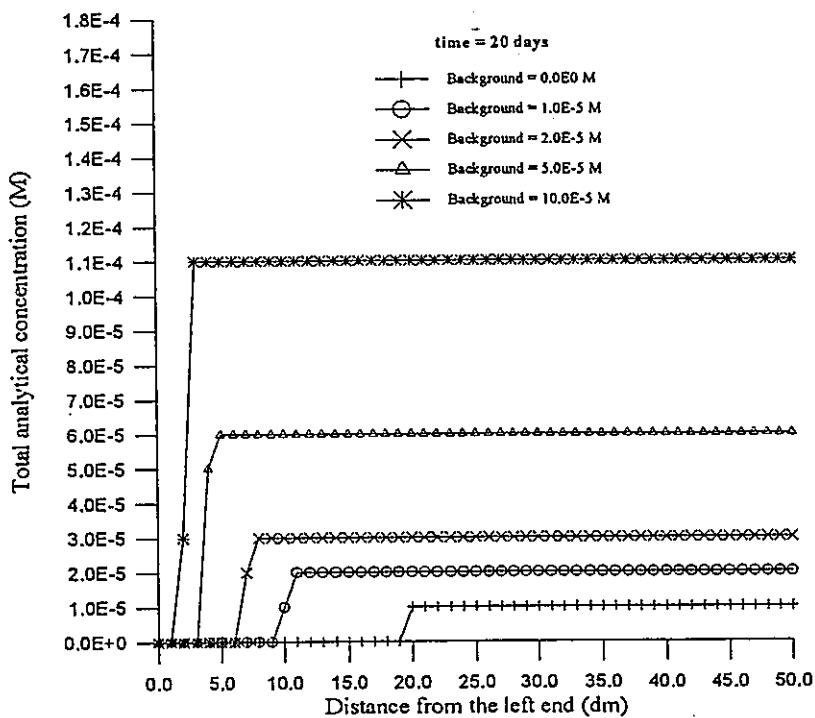


Figure 7 Comparison among the five cases at time = 20 days

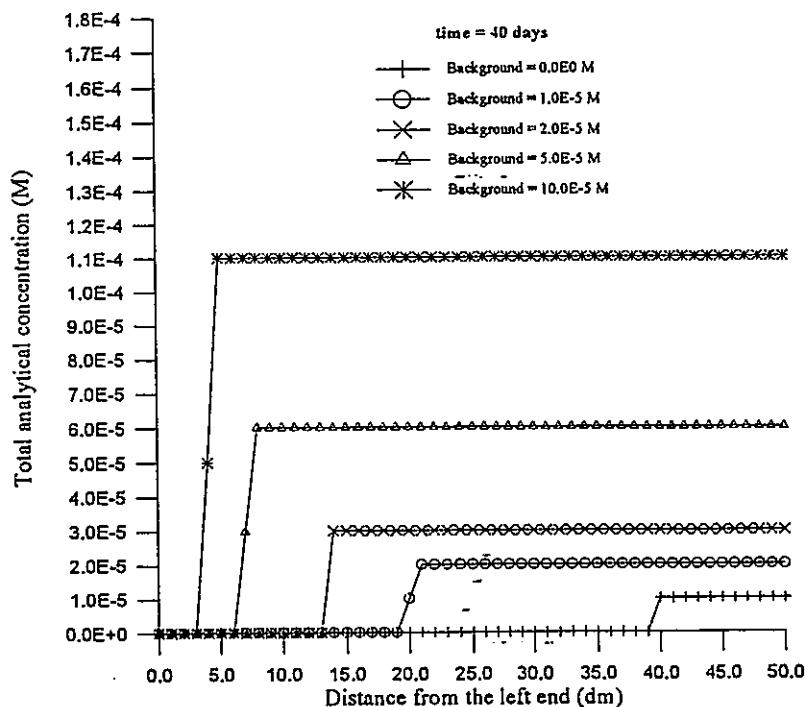


Figure 8 Comparison among the five cases at time = 40 days

conservation of the clean-up amount.

The difference of the clean-up amount between case 1 and any other case does not increase with time, instead, this difference increases with the increment of the concentration of the initial precipitated species (or the "Background" in the figures). In other words, this difference is generated due to the existence of the precipitated species which introduces the nonlinearity to the chemical transport equations. Only when finer grids and smaller mesh Courant numbers are used, more accurate solutions can be obtained if the "Background" is getting larger. In this case, for instance, if the adaptive local grid refinement technique is used to capture the clean water front through the simulation process, the difference mentioned above will be reduced [Yeh, et al., 1992]. The finer the local grid size, the less the difference.

## CONCLUSIONS

This paper presents an approach to compute reactive chemical transport with dominating precipitated species taken into account. In the HYDROGEOCHEM model, the total analytical concentrations of aqueous components are used as the dependent variables in solving chemical transport equations. It helps to gain positive values of the total analytical concentrations of all components through the whole computational process, which is required to solve for chemical equilibrium. However, this approach is not suitable for dealing with a system containing any dominating precipitated species. Because a non-mass conservative solution might be obtained from computing chemical equilibrium, as illustrated in Example 1. Moreover, a non-mass conservative chemical equilibrium solution will introduce either nonconvergency or a wrong answer in solving transport equations. To overcome this problem, the approach presented in this paper uses the modified total analytical concentrations of aqueous components, which exclude the concentrations of dominating precipitated species, as the dependent variables in solving for chemical transport. Example 1 demonstrates that the approach provides a mass-conservative solution in computing chemical equilibrium under the existence of a dominating precipitated species. In addition, Example 2 shows that the approach offers reasonably accurate solutions for chemical transport if an appropriate spatial and temporal domain discretization is given, which is needed because of the nonlinearity precipitation reactions contribute to chemical transport equations.

## ACKNOWLEDGEMENT

This research is supported by the Office of Health and Environmental Research, U. S. Department of Energy, Grant No. DE-FG02-91ER61197.

## REFERENCES

- Yeh, G. T., J. R. Chang, and T. E. Short (1992) "An Exact Peak Capturing and Oscillation-Free Scheme to Solve Advection-Dispersion Transport Equations", Water Resources Research, Vol. 28, No. 11, page 2937-2951.  
Yeh, G. T. and V. S. Tripathi (1991)-"A Model for simulating Transport of Reactive Multispecies Components: Model Development and Demonstration", Water Resources Research, Vol. 27, No. 12, page 3075-3094.  
Yeh, G. T. and V. S. Tripathi (1990) "HYDROGEOCHEM: A Coupled Model of HYDROlogical Transport and GEOCHEMical Equilibria in Reactive Multicomponent Systems", ORNL-6371, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tenn. 37831.

## 付録 B

HYDROGEOCHEM調査により著者より入手した化学モジュールの主要変数リスト

```

C ----- USE CONCENTRAIONS AS MASTER VARIABLES com 005
C ----- ONLY ONE ION-EXCHANGE SITE IS CONSIDERED com 010
C ----- com 015
C ----- com 020
C ----- com 025
C **** com 030
C * *com 035
C * com 040
C * *com 045
C **** com 050
C * *com 055
C * *com 060
C * Adsorption, Ion-exchange, Precipitaiton/Dissolution, Redox, and *com 065
C * Acid-base Reactions. Technical Report No. XXXX, Department of *com 070
C * Civil Engineering, The Pennsylvania State University, University *com 075
C * Park, PA 16802 *com 080
C **** com 085
C * *com 090
C * For Any Question, Call DR. G. T. Yeh at (814) 863-2931 *com 095
C *
C **** com 105
C * *com 110
C * *com 115
C * *com 120
C * DEFINITION OF VARIABLES * com 125
C * *com 130
C **** com 135
C * *com 140
C * COMMON /DIM/ MAXN,MAXM,MAXMZ,MAXMP,MAXPD,MAXEQ *com 145
C * COMMON /NUM/ NON,NONA,NONS,NOM,NOMX,NOMY,NOMP,NOPD,NOEQ *com 150
C * COMMON /HEI/ SICOR,ICOR,LNH,LNE *com 155
C * COMMON /SBT/ CEC,CAP1,CAP2,SREA,TEMP,PRESU,IADS,LNO,LNB,LNI *com 160
C * COMMON /REI/ EPSILON,OMEGA,EPS,KPR,KAU,NITER,NPCYL,cnstrn *com 165
C * COMMON /REH/ PEMN,PEMX,PHMN,PHMX,EAMN,EAMX,HAMN,HAMX *com 170
C *
C * MAXN = MAXIMUM NO. OF COMPONENTS = MAXNA + MAXNS *com 175
C * MAXM = MAXIMUM NO. OF SPECIES *com 180
C * MAXMZ = MAXIMUM NO. OF ION-EXCHANGED SPECIES *com 185
C * MAXMP = MAXIMUM NO. OF PRECIPITATED SPECIES *com 190
C * MAXPD = MAXIMUM NO. OF PRODUCT SPECIES *com 195
C * MAXEQ = MAXIMUM NO. OF EQUATIONS *com 200
C *
C * NON = NO. OF COMPONENTS = NONA + NONS *com 205
C * NONA = NO. OF AQUEOUS COMPONENTS *com 210
C * NONS = NO. OF ADSORBENT COMPONENTS *com 215
C * NOM = NO. OF SPECIES = NONA + NONS + NOMX + NOMY + NOMZ + NOMP *com 220
C * NOMX = NO. OF COMPLEXED SPECIES *com 225
C * NOMY = NO. OF ADSORBED SPECIES *com 230
C * NOMZ = NO. OF ION-EXCHANGED SPECIES *com 235
C * NOMP = NO. OF PRECIPITATED SPECIES *com 240
C * NOPD = NO. OF PRODUCT SPECIES = NOMX + NOMY + NOMZ + NOMP *com 245
C * NOEQ = NO. OF EQUATIONS *com 250
C *
C * SICOR = IONIC STRENGTH USED FOR COMPUTING ACTIVITY COEFFICIENTS *com 255
C * com 260
C * com 265
C * com 270

```

C * ICOR = IS IONIC STRENGTH USED TO CORRECT ACTIVITY COEFFICIENTS?	*com	275
C *	*com	280
C *       0 = NO	*com	285
C *       1 = CONSTANT IONIC STRENGTH IS USED	*com	290
C *       2 = VARIABLE IONIC STRENGTH IS USED	*com	295
C * LNH = LOCATION OF THE COMPONENT H	*com	300
C * LNE = LOCATION OF THE COMPONENT E	*com	305
C *	*com	310
C * CEC = CATION EXCHANGE CAPACITY	*com	315
C * CAP1 = CAPACITANCE BETWEEN SURFACE PLANE AND BETA PLANE	*com	320
C * CAP2 = CAPACITANCE BETWEEN BETA PLANE AND DIFFUSIVE LAYER	*com	325
C * SREA = SURFACE AREA OF THE ADSORPTION SITES	*com	330
C * TEMP = ABSOLUTE TEMPERATURE IN KELVIN	*com	335
C * PRESU = PRESSURE	*com	340
C * IADS = ADSORPTION MODEL INDEX,	*com	345
C *       0 = SIMPLE SURFACE COMPLEXATION,	*com	350
C *       1 = CONSTANT CAPACITANCE MODEL,	*com	355
C *       2 = DOUBLE LAYER MODEL	*com	360
C * LNO = LOCATION OF THE EXP(-E*PSIO/KT) COMPONENT IN THE COMPONENT LIST (OR IN THE SPECIES LIST)	*com	365
C * LNB = LOCATION OF THE EXP(-E*PSIB/KT) COMPONENT IN THE COMPONENT LIST (OR IN THE SPECIES LIST)	*com	370
C * LNI = LOCATION OF THE REFERENCED ION-EXCHANGING SPECIES (OR ION-EXCHANGED SPECIES) IN THE ION-EXCHANGING SPECIES LIST (OR IN THE ION-EXCHANGED SPECIES LIST)	*com	375
C *	*com	380
C * EPSILON= MACHINE EPSILON	*com	385
C * OMEGA = NONLINEAR ITERATION PARAMETER	*com	390
C * EPS = TOLERANCE OF ERROR FOR NEWTON-RALPHSON ITERATION	*com	395
C * KPR = PRINTER CONTROL FOR THE STATIC SOLUTION	*com	400
C * KAU = AUXILIARY OUTPUT CONTROL FOR THE STATIC SOLUTION	*com	405
C * NITER = NO. OF ITERATIONS ALLOWED FOR SOLVING NONLINEAR EQUATIONS	*com	410
C * NPCYL = NO. OF PRECIPITATION ITERATION CYCLES	*com	415
C *	*com	420
C * PEMN = EXPECTED MINIMUM PE	*com	425
C * PEMX = EXPECTED MAXIMUM PE	*com	430
C * PHMN = EXPECTED MINIMUM PH	*com	435
C * PHMX = EXPECTED MAXIMUM PH	*com	440
C * EAMN = EXPECTED MINIMUM ELECTRON ACTIVITY	*com	445
C * EAMX = EXPECTED MAXIMUM ELECTRON ACTIVITY	*com	450
C * HAMN = EXPECTED MINIMUM HYDROGEN ACTIVITY	*com	455
C * HAMX = EXPECTED MAXIMUM HYDROGEN ACTIVITY	*com	460
C *       DIMENSION CNAM(MAXN),TOTAC(MAXN),GXW(MAXN),ICELI(MAXN)	*com	465
C *       DIMENSION TOTDC(MAXN),TOTSC(MAXN),TOPC(MAXN)	*com	470
C *	*com	475
C * CNAM(J) = COMPONENT NAME OF THE J-TH COMPONENT	*com	480
C * TOTAC(J) = TOTAL ANALYTICAL CONCENTRATION OF THE J-TH COMPONENT	*com	485
C * GXW(J) = LOG10 OF CW(J)	*com	490
C * ICELI(J) = INDICATOR OF THE J-TH COMPONENT LEGITIMATABLE FOR	*com	495
C *       FOR ELIMINATION IN DETERMINING THE NUMBER OF SPECIES	*com	500
C *       ALLOWED FOR PRECIPITATION;	*com	505
C *       0 = NOT LEGITIMATE, 1 = LEGITIMATE	*com	510
C *	*com	515
C *	*com	520
C *	*com	525
C *	*com	530
C *	*com	535
C * TOTDC(J) = TOTAL DISSOLVED CONCENTRATION OF THE J-TH COMPONENT	*com	540

C \* TOTSC(J) = TOTAL ADSORBED CONCENTRATION OF THE J-TH COMPONENT \*com 545  
 C \* TOTPC(J) = TOTAL PRECIPITATED CONCENTRATION OF THE J-TH COMPONENT \*com 550  
 C \* \*com 555  
 C \* \*com 560  
 C \* DIMENSION ZM(MAXEQ,MAXEQ),RE(MAXEQ),RR(MAXEQ),IPVT(MAXEQ) \*com 565  
 C \* DIMENSION SPECN(MAXM),CN(MAXM),CW(MAXM),ISCN(MAXM) \*com 570  
 C \* DIMENSION GAMA(MAXM),VJ(MAXM) \*com 575  
 C \* \*com 580  
 C \* \*com 585  
 C \* ZM(I,J) = JACOBIAN MATRIX = PARTIAL RE(I)/PARTIAL CW(J) \*com 590  
 C \* RE(I) = RESIDUE OF THE I-TH EQUATION \*com 595  
 C \* RR(I) = RESIDUE OF THE I-TH EQUATION \*com 600  
 C \* IPVT(I) = INDEX OF THE I-TH PIVOT \*com 605  
 C \* \*com 610  
 C \* SPECN(I) = SPECIES NAME OF THE I-TH SPECIES \*com 615  
 C \* CN(I) = CONCENTRATION OF THE I-TH SPECIES \*com 620  
 C \* CW(I) = CONCENTRATION OF THE ITERATE OF THE I-TH SPECIES \*com 625  
 C \* ISCN(I) = INDICATOR OF SPECIES CONCENTRATION OF THE I-TH SPECIES \*com 630  
 C \* 3 = CONCENTRATION IS SPECIFIED FOR DISSOLVED SPECIES \*com 635  
 C \* ACTIVITY IS SPECIFIED FOR SOLID SPECIES \*com 640  
 C \* 2 = I-TH COMPOUNET SPECIES APPEAR AS A FICTITIOUS \*com 645  
 C \* COMPLEXED SPECIES IN THE MOLE BALANCE EQUATION \*com 650  
 C \* OTHER THAN THE I-TH MOLE BALANCE EQUATION ITSELF \*com 655  
 C \* \*com 660  
 C \* GAMA(I) = ACTIVITY OF THE I-TH SPECIES \*com 665  
 C \* VJ(I) = CHARGE OF THE I-TH SPECIES \*com 670  
 C \* \*com 675  
 C \* ----- EQUATIONS (RESIDUES) ARE ARRANGED IN THE FOLLOWING ORDER \*com 680  
 C \* 1. NA AQUEOUS COMPONENT BALANCE EQUATIONS, \*com 685  
 C \* 2. NS ADSORBENT COMPONENT BALANCE EQUATIONS, \*com 690  
 C \* 3. ONE CEC CONSTRAINT EQUATION AND (MZ - 1) ION-EXCHANGE \*com 695  
 C \* REACTION EQUATIONS, AND \*com 700  
 C \* 4. MP PRECIPITATION EQUATIONS. \*com 705  
 C \* ----- UNKNOWNS (SPECIES CONCENTRATIONS) ARE ARRANGED IN THE \*com 710  
 C \* FOLLOWING ORDER \*com 715  
 C \* 1. NA AQUEOUS COMPONENT SPECIES MOLE CONCENTRATIONS, \*com 720  
 C \* 2. NS ADSORBENT COMPONENT SPECIES MOLE CONCENTRATIONS, \*com 725  
 C \* 3. MX COMPLEXED SPECIES MOLE CONCENTRATIONS, \*com 730  
 C \* 4. MY ADSORBED SPECIES MOLE CONCENTRATIONS. \*com 735  
 C \* 5. MZ ION-EXCHANGED SPECIES MOLE CONCENTRATIONS, AND \*com 740  
 C \* 6. MP PRECIPITATED SPECIES MOLE CONCENTRATIONS, \*com 745  
 C \* \*com 750  
 C \* \*com 755  
 C \* \*com 760  
 C \* DIMENSION AXYPD(MAXPD,MAXN),BXYZP(MAXPD,MAXN) \*com 765  
 C \* DIMENSION EQK(MAXPD),EQKM(MAXPD),GEK(MAXPD) \*com 770  
 C \* DIMENSION LOCZ(MAXMZ),INDPS(MAXMP),ITCPS(MAXMP) \*com 775  
 C \* DIMENSION RIAP(MAXMP),IAP(MAXMP),INDTB(MAXMP) \*com 780  
 C \* \*com 785  
 C \* AXYPD(I,J) = STOCHIOMETRIC COEFFICIENT OF THE J-TH COMPONENT IN \*com 790  
 C \* THE I-TH PRODUCT SPECIES USED IN MASS ACTION EQUATION \*com 795  
 C \* BXYZP(I,J) = STOCHIOMETRIC COEFFICIENT OF THE J-TH COMPONENT IN \*com 800  
 C \* THE I-TH PRODUCT SPECIES USED IN MOLE BALANCE EQUATION \*com 805  
 C \* EQK(I) = EQUILIBRIUM CONSTANT OF THE I-TH PRODUCT SPECIES \*com 810  
 C \* EQKM(I) = MODIFIED EQUILIBRIUM CONSTANT OF EQK(I) \*com 810

C * GEK(I) = LOG10 OF EQKM(I)	*com	815
C * LOCZ(I) = LOCATION OF THE I-TH ION EXCHANGING SPECIES IN THE	*com	820
C * SPECIES LIST	*com	825
C * INDPS(I) = INDEX OF THE I-TH PRECIPITATED SPECIES	*com	830
C * 0 = THE I-TH SPECIES IS NOT ALLOWED TO PRECIPITATE	*com	835
C * 1 = THE I-TH SPECIES IS ALLOWED TO PRECIPITATE	*com	840
C * ITCPS(I) = VALUE OF INDPS(I) OF THE PREVIOUS CYCLE	*com	845
C * RIAP(I) = SATURATION VALUE OF THE I-TH PRECIPITATED SPECIES	*com	850
C * IAP(I) = RANK OF THE SATURATION VALUE OF THE I-TH PRECIPITATED	*com	855
C * SPECIES. THE LARGER THE RANK, THE LARGER THE	*com	860
C * SATURATION VALUE	*com	865
C * INDTB(I) = THE INDTB(I)-TH PRECIPITATED SPECIES HAS THE I-TH LOWEST	*com	870
C * SATURATION VALUE	*com	875
C *	*com	880
C *	*com	885
C * ----- PRODUCT SPECIES ARE ARRANGED IN THE FOLLOWING ORDER:	*com	890
C * 1. COMPLEXED SPECIES,	*com	895
C * 2. ADSORBED SPECIES,	*com	900
C * 3. ION-EXCHANGED SPECIES, AND	*com	905
C * 4. PRECIPITATED SPECIES.	*com	910
C *	*com	915
C *	*com	920

## 付録 C

核種移行試験の入力データリスト

ケース 1 : ベントナイトの変質試験



```

97      0   0   0   0   0           END OF B.C. DUMMY
98 C ***** DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS
99    0.0D0 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5
100   0.0D0 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3
101   1   1   1   1   0
102   3   1   1   2   0
103   0   0   0   0   0           END OF B.C. CA
104   0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3
105   0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3
106   1   1   1   1   0
107   3   1   1   2   0
108   0   0   0   0   0           END OF B. C. CO3
109   0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09
110   0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12
111   1   1   1   1   0
112   3   1   1   2   0
113   0   0   0   0   0           END OF B. C. H
114   0.0D0 1.0D-01 1.0D38 1.0D-01
115   0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20
116   1   1   1   1   0
117   3   1   1   2   0
118   0   0   0   0   0           END OF B. C. Z-
119   0.0D0 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3
120   0.0D0 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2
121   1   1   1   1   0
122   3   1   1   2   0
123   0   0   0   0   0           END OF B. C. NA
124   1   1   1   1   1
125   3   1   1   21  1
126   0   0   0   0   0           END OF NPDB
127 C ***** DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES
128   1 21  1  0.0  0.0  0.0  0.0
129   0   0   0   0.0  0.0  0.0  0.0           END OF VELOCITY
130   1  9  1  0.33 0.0  0.0
131   0   0   0.0  0.0  0.0           END OF TH
132 C ***** DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES
133   5 0 10 0 0 1 800 50 1.0 1.0D-5 nona,nons,nomx,nomy,nomz,nomp,niterc,npyl,omega
134 C ***** DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION
135   0.004 2 3 0
136   298.0 1.0 0 0 0 0
137   -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX
138 C ***** DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX
139 CA++      0
140 1.0D-9  2 0
141 CO3--     0
142 1.0D-9 -2 0
143 H+        0
144 1.0D-7  1 0
145 Z-        0
146 1.0D-7 -1 0
147 NA+       0
148 1.0D-9  1 0
149 C ***** DATA SET 20:
150 OH-       0
151 1.0D-7 -14.0 0 0 -1 0 0 0 0 0 -1 0 0
152 HC03-     0
153 1.0D-9  10.33 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0
154 H2CO3     0
155 1.0D-10 16.681 0 1 2 0 0 0 0 0 1 2 0 0
156 CAOH+     0
157 1.0D-9  -12.598 1 0 -1 0 0 0 0 1 0 -1 0 0
158 CACO3     0
159 1.0D-9  3.225 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0
160 CAHC03+   0
161 1.0D-9  11.435 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 0
162 ZNA       0
163 1.0D-9  20.0  0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1
164 Z2CA      0
165 1.0D-9  41.8  1 0 0 2 0 0 0 1 0 0 2 0
166 NAHC03   0
167 1.0D-9  10.08 0 1 1 0 1 0 0 0 1 1 0 1
168 NACO3-    0
169 1.0D-9  1.268 0 1 0 0 1 0 0 0 1 0 0 1
170 C ***** DATA SET 22:
171 CALCITE   0
172 1.0D-4  8.48  1 1 0 0 0 1 1 0 0 0 0
173                                     END OF JOB

```

## 付録 D

核種移行試験の入力データリスト

ケース : Cs-135 セメント固化体系



97 0 0 0 0 0 END OF B.C. NA  
 98 0.0D0 1.00D-20 1.0D38 1.00D-20  
 99 1 9 1 1 0  
 100 0 0 0 0 0 END OF B.C. CS  
 101 0.0D0 1.00D-20 1.0D38 1.00D-20  
 102 1 9 1 1 0  
 103 0 0 0 0 0 END OF B.C. DUMMY  
 104 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 105 0.0D0 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5  
 106 0.0D0 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3  
 107 1 1 1 1 0  
 108 3 1 1 2 0  
 109 0 0 0 0 0 END OF B.C. CA  
 110 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 111 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 112 1 1 1 1 0  
 113 3 1 1 2 0  
 114 0 0 0 0 0 END OF B.C. CO3  
 115 0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09  
 116 0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12  
 117 1 1 1 1 0  
 118 3 1 1 2 0  
 119 0 0 0 0 0 END OF B.C. H  
 120 0.0D0 1.0D-01 1.0D38 1.0D-01  
 121 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 122 1 1 1 1 0  
 123 3 1 1 2 0  
 124 0 0 0 0 0 END OF B.C. Z-  
 125 0.0D0 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3  
 126 0.0D0 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2  
 127 1 1 1 1 0  
 128 3 1 1 2 0  
 129 0 0 0 0 0 END OF B.C. NA  
 130 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 131 0.0D0 1.5D-05 1.0D38 1.0D-05  
 132 1 1 1 1 0  
 133 3 1 1 2 0  
 134 0 0 0 0 0 END OF B.C. CS  
 135 1 1 1 1 1  
 136 3 1 1 21 1  
 137 0 0 0 0 0 END OF NPDB  
 138 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 139 1 21 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 140 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF VELOCITY  
 141 1 9 1 0.33 0.0 0.0  
 142 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF TH  
 143 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 144 6 0 11 0 0 1 800 50 1.0 1.0D-5 nona,nons,nonx,nony,nonz,nonp,niterc,npyl,omega  
 145 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 146 0.004 2 3 0  
 147 298.0 1.0 0 0 0 0  
 148 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX  
 149 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 150 CA++ 0  
 151 1.0D-9 2 0  
 152 CO3-- 0  
 153 1.0D-9 -2 0  
 154 H+ 0  
 155 1.0D-7 1 0  
 156 Z- 0  
 157 1.0D-7 -1 0  
 158 NA+ 0  
 159 1.0D-9 1 0  
 160 CS+ 0  
 161 1.0D-9 1 0  
 162 C \*\*\*\*\* DATA SET 20:  
 163 OH- 0  
 164 1.0D-7 -14.0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0  
 165 HCO3- 0  
 166 1.0D-9 10.33 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0  
 167 H2CO3 0  
 168 1.0D-10 16.681 0 1 2 0 0 0 0 0 1 2 0 0 0 0  
 169 CAOH+ 0  
 170 1.0D-9 -12.598 1 0 -1 0 0 0 0 1 0 -1 0 0 0 0  
 171 CACO3 0  
 172 1.0D-9 3.225 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0  
 173 CAHC03+ 0  
 174 1.0D-9 11.435 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0  
 175 ZNA 0  
 176 1.0D-9 20.0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0  
 177 Z2CA 0  
 178 1.0D-9 41.8 1 0 0 2 0 0 0 1 0 0 2 0 0 0  
 179 NAHC03 0  
 180 1.0D-9 10.08 0 1 1 0 1 0 0 0 1 1 0 1 0 0  
 181 NACO3- 0  
 182 1.0D-9 1.268 0 1 0 0 1 0 0 0 1 0 0 1 0 0  
 183 ZCS 0  
 184 1.0D-9 20.83 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 1 0 1  
 185 C \*\*\*\*\* DATA SET 22:  
 186 CALCITE 0  
 187 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0  
 188 END OF JOB

## 付録 E

核種移行試験の入力データリスト

ケース : Cs-135 アスファルト固化体系



97 0 0 0 0 0 END OF B.C. NA  
 98 0.0D0 1.00D-20 1.0D38 1.00D-20  
 99 1 9 1 1 0  
 100 0 0 0 0 0 END OF B.C. CS  
 101 0.0D0 1.00D-20 1.0D38 1.00D-20  
 102 1 9 1 1 0  
 103 0 0 0 0 0 END OF B.C. DUMMY  
 104 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 105 0.0D0 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5  
 106 0.0D0 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3  
 107 1 1 1 1 0  
 108 3 1 1 2 0  
 109 0 0 0 0 0 END OF B.C. CA  
 110 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 111 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 112 1 1 1 1 0  
 113 3 1 1 2 0  
 114 0 0 0 0 0 END OF B.C. CO3  
 115 0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09  
 116 0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12  
 117 1 1 1 1 0  
 118 3 1 1 2 0  
 119 0 0 0 0 0 END OF B.C. H  
 120 0.0D0 1.0D-01 1.0D38 1.0D-01  
 121 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 122 1 1 1 1 0  
 123 3 1 1 2 0  
 124 0 0 0 0 0 END OF B.C. Z-  
 125 0.0D0 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3  
 126 0.0D0 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2  
 127 1 1 1 1 0  
 128 3 1 1 2 0  
 129 0 0 0 0 0 END OF B.C. NA  
 130 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 131 0.0D0 1.3D-07 1.0D38 1.3D-07  
 132 1 1 1 1 0  
 133 3 1 1 2 0  
 134 0 0 0 0 0 END OF B.C. CS  
 135 1 1 1 1 1  
 136 3 1 1 21 1  
 137 0 0 0 0 0 END OF NPDB  
 138 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 139 1 21 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 140 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF VELOCITY  
 141 1 9 1 0.33 0.0 0.0  
 142 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF TH  
 143 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 144 6 0 11 0 0.1 800 50 1.0 1.0D-5 nona, nons, nomx, nomy, nomz, nomp, niterc, npyl, omega  
 145 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 146 0.004 2 3 0  
 147 298.0 1.0 0 0 0 0  
 148 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PENN PEMX PHMN PHMX  
 149 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 150 CA++ 0  
 151 1.0D-9 2 0  
 152 CO3- 0  
 153 1.0D-9 -2 0  
 154 H+ 0  
 155 1.0D-7 1 0  
 156 Z- 0  
 157 1.0D-7 -1 0  
 158 NA+ 0  
 159 1.0D-9 1 0  
 160 CS+ 0  
 161 1.0D-9 1 0  
 162 C \*\*\*\*\* DATA SET 20:  
 163 OH- 0  
 164 1.0D-7 -14.0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0  
 165 HC03- 0  
 166 1.0D-9 10.33 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0  
 167 H2CO3 0  
 168 1.0D-10 16.681 0 1 2 0 0 0 0 0 1 2 0 0 0 0  
 169 CAOH+ 0  
 170 1.0D-9 -12.598 1 0 -1 0 0 0 0 1 0 -1 0 0 0 0  
 171 CACO3 0  
 172 1.0D-9 3.225 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0  
 173 CAHCO3+ 0  
 174 1.0D-9 11.435 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0  
 175 ZNA 0  
 176 1.0D-9 20.0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 1 1 0  
 177 Z2CA 0  
 178 1.0D-9 41.8 1 0 0 2 0 0 0 1 0 0 2 0 0 0  
 179 NAHCO3 0  
 180 1.0D-9 10.08 0 1 1 0 1 0 0 0 1 1 0 1 0 0  
 181 NACO3- 0  
 182 1.0D-9 1.268 0 1 0 0 1 0 0 0 1 0 0 1 0 0  
 183 ZCS 0  
 184 1.0D-9 20.83 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 1 0 1  
 185 C \*\*\*\* DATA SET 22:  
 186 CALCITE 0  
 187 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0  
 188 END OF JOB

## 付録 F

核種移行試解析の入力データリスト

ケース : I-129 セメント固化体系



```

97      0   0   0   0   0           END OF B.C.  NA
98      0.0D0 1.00D-20  1.0D38 1.00D-20
99      1   9   1   1   0
100     0   0   0   0   0           END OF B.C.  CS
101     0.0D0 1.00D-20  1.0D38 1.00D-20
102     1   9   1   1   0
103     0   0   0   0   0           END OF B.C.  DUMMY
104 C ***** DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS
105     0.0D0 4.6D-5  1.0D38 4.6D-5
106     0.0D0 3.0D-3  1.0D38 3.0D-3
107     1   1   1   1   0
108     3   1   1   2   0
109     0   0   0   0   0           END OF B.C.  CA
110    0.0D0 1.9D-3  1.0D38 1.9D-3
111    0.0D0 1.9D-3  1.0D38 1.9D-3
112     1   1   1   1   0
113     3   1   1   2   0
114     0   0   0   0   0           END OF B.C.  CO3
115    0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09
116    0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12
117     1   1   1   1   0
118     3   1   1   2   0
119     0   0   0   0   0           END OF B.C.  H
120    0.0D0 1.0D-01  1.0D38 1.0D-01
121    0.0D0 1.0D-20  1.0D38 1.0D-20
122     1   1   1   1   0
123     3   1   1   2   0
124     0   0   0   0   0           END OF B.C.  Z-
125    0.0D0 2.7D-3  1.0D38 2.7D-3
126    0.0D0 6.0D-2  1.0D38 6.0D-2
127     1   1   1   1   0
128     3   1   1   2   0
129     0   0   0   0   0           END OF B.C.  NA
130    0.0D0 1.0D-20  1.0D38 1.0D-20
131    0.0D0 8.6D-06 1.0D38 8.6D-06
132     1   1   1   1   0
133     3   1   1   2   0
134     0   0   0   0   0           END OF B.C.  I
135     1   1   1   1   1
136     3   1   1   2   1
137     0   0   0   0   0           END OF NPDB
138 C ***** DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES
139     1 21 1 0.0  0.0  0.0  0.0
140     0 00 0.0  0.0  0.0  0.0           END OF VELOCITY
141     1 91 0.33 0.0  0.0
142     0 00 0.0  0.0  0.0           END OF TH
143 C ***** DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES
144 6 0 10 1 0.1 800 50 1.0 1.0D-5 nona,nons,nomx,nomy,nomz,nomp,niterc,npyl,omega
145 C ***** DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION
146 0.004 2 3 0
147 298.0 1.0 0 0 0 0
148 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX
149 C ***** DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX
150 CA++ 0
151 1.0D-9 2 0
152 CO3-- 0
153 1.0D-9 -2 0
154 H+ 0
155 1.0D-7 1 0
156 Z- 0
157 1.0D-7 -1 0
158 NA+ 0
159 1.0D-9 1 0
160 I- 0
161 0.000 0 0
162 C ***** DATA SET 20:
163 OH- 0
164 1.0D-7 -14.0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0
165 HCO3- 0
166 1.0D-9 10.33 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0
167 H2CO3 0
168 1.0D-10 16.681 0 1 2 0 0 0 0 0 1 2 0 0 0 0
169 CAOH+ 0
170 1.0D-9 -12.598 1 0 -1 0 0 0 0 1 0 -1 0 0 0 0
171 CACO3 0
172 1.0D-9 3.225 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0
173 CAHC03+ 0
174 1.0D-9 11.435 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0
175 ZNA 0
176 1.0D-9 20.0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 1 1 0
177 Z2CA 0
178 1.0D-9 41.8 1 0 0 2 0 0 0 1 0 0 2 0 0 0
179 NAHC03 0
180 1.0D-9 10.08 0 1 1 0 1 0 0 0 1 1 0 1 0 0
181 NACO3- 0
182 1.0D-9 1.268 0 1 0 0 1 0 0 0 1 0 0 1 0 0
183 C ***** DATA SET 21:
184 I SORBED 0
185 0.000 0.73667 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1
186 C ***** DATA SET 22:
187 CALCITE 0
188 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0
189           END OF JOB

```

## 付録 G

核種移行試験解析の入力データリスト

ケース : I-129 アスファルト固化体系



97 0 0 0 0 0 END OF B.C. NA  
 98 0.0D0 1.00D-20 1.0D38 1.00D-20  
 99 1 9 1 1 0  
 100 0 0 0 0 0 END OF B.C. CS  
 101 0.0D0 1.00D-20 1.0D38 1.00D-20  
 102 1 9 1 1 0  
 103 0 0 0 0 0 END OF B.C. DUMMY  
 104 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 105 0.0D0 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5  
 106 0.0D0 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3  
 107 1 1 1 1 0  
 108 3 1 1 2 0  
 109 0 0 0 0 0 END OF B.C. CA  
 110 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 111 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 112 1 1 1 1 0  
 113 3 1 1 2 0  
 114 0 0 0 0 0 END OF B.C. CO3  
 115 0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09  
 116 0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12  
 117 1 1 1 1 0  
 118 3 1 1 2 0  
 119 0 0 0 0 0 END OF B.C. H  
 120 0.0D0 1.0D-01 1.0D38 1.0D-01  
 121 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 122 1 1 1 1 0  
 123 3 1 1 2 0  
 124 0 0 0 0 0 END OF B.C. Z-  
 125 0.0D0 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3  
 126 0.0D0 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2  
 127 1 1 1 1 0  
 128 3 1 1 2 0  
 129 0 0 0 0 0 END OF B.C. NA  
 130 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 131 0.0D0 3.8D-04 1.0D38 3.8D-04  
 132 1 1 1 1 0  
 133 3 1 1 2 0  
 134 0 0 0 0 0 END OF B.C. I  
 135 1 1 1 1 1  
 136 3 1 1 21 1  
 137 0 0 0 0 0 END OF NPDB  
 138 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 139 1 21 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 140 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF VELOCITY  
 141 1 9 1 0.33 0.0 0.0  
 142 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF TH  
 143 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 144 6 0 10 1 0 1 800 50 1.0 1.0D-5 noma,noms,nomx,nomy,nomz,nomp,niterc,npyl,omega  
 145 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 146 0.004 2 3 0  
 147 298.0 1.0 0 0 0 0  
 148 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX  
 149 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 150 CA++ 0  
 151 1.0D-9 2 0  
 152 CO3-- 0  
 153 1.0D-9 -2 0  
 154 H+ 0  
 155 1.0D-7 1 0  
 156 Z- 0  
 157 1.0D-7 -1 0  
 158 NA+ 0  
 159 1.0D-9 1 0  
 160 I- 0  
 161 0.000 0 0  
 162 C \*\*\*\*\* DATA SET 20:  
 163 OH- 0  
 164 1.0D-7 -14.0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0  
 165 HCO3- 0  
 166 1.0D-9 10.33 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0  
 167 H2CO3 0  
 168 1.0D-10 16.681 0 1 2 0 0 0 0 0 1 2 0 0 0 0  
 169 CAOH+ 0  
 170 1.0D-9 -12.598 1 0 -1 0 0 0 0 1 0 -1 0 0 0 0  
 171 CACO3 0  
 172 1.0D-9 3.225 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0  
 173 CAHCO3+ 0  
 174 1.0D-9 11.435 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0  
 175 ZNA 0  
 176 1.0D-9 20.0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0  
 177 Z2CA 0  
 178 1.0D-9 41.8 1 0 0 2 0 0 0 1 0 0 2 0 0 0  
 179 NAHCO3 0  
 180 1.0D-9 10.08 0 1 1 0 1 0 0 0 1 1 0 1 0 0  
 181 NACO3- 0  
 182 1.0D-9 1.268 0 1 0 0 1 0 0 0 1 0 0 1 0 0  
 183 C \*\*\*\*\* DATA SET 21:  
 184 I SORBED 0  
 185 0.000 0.73667 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1  
 186 C \*\*\*\*\* DATA SET 22:  
 187 CALCITE 0  
 188 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0  
 189 END OF JOB

## 付録 H

核種移行試験解析の入力データリスト

ケース : Tc-99 酸化物系



97 0.000 1.00D-50 1.0D38 1.00D-50  
 98 1 9 1 1 0  
 99 0 0 0 0 0 END OF B.C. TC  
 100 0.000 2.9403 1.0D38 2.9403  
 101 1 9 1 1 0  
 102 0 0 0 0 0 END OF B.C. SODIUM  
 103 0.000 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 104 1 9 1 1 0  
 105 0 0 0 0 0 END OF B.C. WATER  
 106 0.000 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 107 1 9 1 1 0  
 108 0 0 0 0 0 END OF B.C. ELECTRON  
 109 0.000 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 110 1 9 1 1 0  
 111 0 0 0 0 0 END OF B.C. HYDROGEN  
 112 0.000 3.1897 1.0D38 3.1897  
 113 1 9 1 1 0  
 114 0 0 0 0 0 END OF B.C. Z-  
 115 0.000 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 116 1 9 1 1 0  
 117 0 0 0 0 0 END OF B.C. SOH  
 118 0.000 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 119 1 9 1 1 0  
 120 0 0 0 0 0 END OF B.C. DUMMY  
 121 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 122 0.000 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5  
 123 0.000 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3  
 124 1 1 1 1 0  
 125 3 1 1 2 0  
 126 0 0 0 0 0 END OF B.C. CA  
 127 0.000 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 128 0.000 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 129 1 1 1 1 0  
 130 3 1 1 2 0  
 131 0 0 0 0 0 END OF B.C. CO3  
 132 0.000 1.00D-50 1.0D38 1.00D-50  
 133 0.000 7.10D-24 1.0D38 7.10D-24  
 134 1 1 1 1 0  
 135 3 1 1 2 0  
 136 0 0 0 0 0 END OF B.C. TECHNETIUM  
 137 0.000 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3  
 138 0.000 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2  
 139 1 1 1 1 0  
 140 3 1 1 2 0  
 141 0 0 0 0 0 SODIUM  
 142 0.000 1.0D-00 1.0D38 1.0D-00  
 143 0.000 1.0D-00 1.0D38 1.0D-11  
 144 1 1 1 1 0  
 145 3 1 1 2 0  
 146 0 0 0 0 0 WATER  
 147 0.000 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 148 0.000 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 149 1 1 1 1 0  
 150 3 1 1 2 0  
 151 0 0 0 0 0 ELECTRON  
 152 0.000 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09  
 153 0.000 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12  
 154 1 1 1 1 0  
 155 3 1 1 2 0  
 156 0 0 0 0 0 HYDROGEN  
 157 0.000 1.0D-1 1.0D38 1.0D-1  
 158 0.000 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 159 1 1 1 1 0  
 160 3 1 1 2 0  
 161 0 0 0 0 0 Z-  
 162 0.000 1.0D-30 1.0D38 1.0D-30  
 163 0.000 1.0D-30 1.0D38 1.0D-30  
 164 1 1 1 1 0  
 165 3 1 1 2 0  
 166 0 0 0 0 0 SOH  
 167 1 1 1 1 1  
 168 3 1 1 21 1  
 169 0 0 0 0 0 END OF NPDB  
 170 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 171 1 21 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 172 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF VELOCITY  
 173 1 9 1 0.33 0.0 0.0  
 174 0 0 0 0.0 0.0 0.0 END OF TH  
 175 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 176 8 1 12 4 0 1 200 5 1.0 1.0D-6 nona,nons,nonx,nony,nonz,nonp,niterc,npyl  
 177 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 178 0.0 0 7 0  
 179 298.0 1.0 0 0 0 0 0  
 180 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX  
 181 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 182 CA++ 0  
 183 1.0D-9 2 0  
 184 CO3-- 0  
 185 1.0D-9 -2 0  
 186 TCO+2 0  
 187 1.0D-7 2 0  
 188 NA+ 0  
 189 1.0D-9 1 0  
 190 H2O 0  
 191 1.0D-20 0 0  
 192 E- 0

193 1.0D0 -1 0  
194 H+ 0  
195 1.0D00 1 0  
196 Z- 0  
197 1.0D-5 -1 0  
198 SOH 3  
199 1.0D-3 0 0  
200 C \*\*\*\*\* DATA SET 20: COMPLEXED SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGED SPECIES  
201 OH- 0  
202 5.75D-7 -13.99 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 -1 0 0  
203 CACO3 0  
204 4.19D-8 3.22 1 1 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0  
205 HCACO3 0  
206 1.21D-7 11.43 1 1 0 0 0 0 1 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0 0  
207 CAOH 0  
208 7.77D-10 -12.85 1 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 1 0 0 0 0 -1 0 0  
209 HC03 0  
210 9.58D-5 10.32 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0  
211 H2C03 0  
212 3.81D-6 16.67 0 1 0 0 0 0 2 0 0 0 0 1 0 0 0 0 2 0 0  
213 ZNA 0  
214 1.0D-20 20.00 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0  
215 Z2CA 0  
216 1.0D-20 41.80 1 0 0 0 0 0 0 2 0 0 1 0 0 0 0 0 0 2 0  
217 NAHC03 0  
218 1.0D-20 10.08 0 1 0 1 0 0 1 0 0 0 0 1 0 1 0 0 1 0 0  
219 NACO3- 0  
220 1.0D-20 1.27 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0  
221 TCO(OH)2 0  
222 1.0D-20 -3.325 0 0 1 0 0 0 -2 0 0 0 0 0 1 0 0 0 -2 0 0  
223 TC04- 0  
224 1.0D-20 -32.99 0 0 1 0 3 -3 -6 0 0 0 0 0 1 0 3 -3 -6 0 0  
225 C \*\*\*\*\* DATA SET 21: ADSORBED SPECIES  
226 SO- 0  
227 2.80D-7 -9.52 0 0 0 0 0 0 -1 0 1 0 0 0 0 0 0 -1 0 1  
228 SOH2+ 0  
229 4.43D-7 5.58 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1  
230 SOH2TC0(OH)2+ 0  
231 1.00D-20 10.40 0 0 1 0 2 0 -1 0 1 0 0 1 0 2 0 -1 0 1  
232 SOH2TC04 0  
233 1.00D-20 -18.90 0 0 1 0 3 -3 -5 0 1 0 0 1 0 3 -3 -5 0 1  
234 C \*\*\*\*\* DATA SET 22:  
235 CALCITE 0  
236 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0  
237 END OF JOB

## 付録 I

核種移行試験解析の入力データリスト

ケース : Tc-99 水酸化物系



97 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 98 1 9 1 1 0  
 99 0 0 0 0 0 END OF B.C. TC  
 100 0.0D0 2.9403 1.0D38 2.9403  
 101 1 9 1 1 0  
 102 0 0 0 0 0 END OF B.C. SODIUM  
 103 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 104 1 9 1 1 0  
 105 0 0 0 0 0 END OF B.C. WATER  
 106 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 107 1 9 1 1 0  
 108 0 0 0 0 0 END OF B.C. ELECTRON  
 109 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 110 1 9 1 1 0  
 111 0 0 0 0 0 END OF B.C. HYDROGEN  
 112 0.0D0 3.1897 1.0D38 3.1897  
 113 1 9 1 1 0  
 114 0 0 0 0 0 END OF B.C. Z-  
 115 0.0D0 1.00D-04 1.0D38 1.00D-04  
 116 1 9 1 1 0  
 117 0 0 0 0 0 END OF B.C. SOH  
 118 0.0D0 1.00D-04 1.0D38 1.00D-04  
 119 1 9 1 1 0  
 120 0 0 0 0 0 END OF B.C. DUMMY  
 121 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 122 0.0D0 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5  
 123 0.0D0 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3  
 124 1 1 1 1 0  
 125 3 1 1 2 0  
 126 0 0 0 0 0 END OF B.C. CA  
 127 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 128 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 129 1 1 1 1 0  
 130 3 1 1 2 0  
 131 0 0 0 0 0 END OF B.C. CO3  
 132 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 133 0.0D0 3.30D-08 1.0D38 3.30D-08  
 134 1 1 1 1 0  
 135 3 1 1 2 0  
 136 0 0 0 0 0 END OF B.C. TECHNETIUM  
 137 0.0D0 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3  
 138 0.0D0 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2  
 139 1 1 1 1 0  
 140 3 1 1 2 0  
 141 0 0 0 0 0 SODIUM  
 142 0.0D0 1.0D-00 1.0D38 1.0D-00  
 143 0.0D0 1.0D-00 1.0D38 1.0D-11  
 144 1 1 1 1 0  
 145 3 1 1 2 0  
 146 0 0 0 0 0 WATER  
 147 0.0D0 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 148 0.0D0 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 149 1 1 1 1 0  
 150 3 1 1 2 0  
 151 0 0 0 0 0 ELECTRON  
 152 0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09  
 153 0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12  
 154 1 1 1 1 0  
 155 3 1 1 2 0  
 156 0 0 0 0 0 HYDROGEN  
 157 0.0D0 1.0D-1 1.0D38 1.0D-1  
 158 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 159 1 1 1 1 0  
 160 3 1 1 2 0  
 161 0 0 0 0 0 Z-  
 162 0.0D0 1.0D-04 1.0D38 1.0D-04  
 163 0.0D0 1.0D-04 1.0D38 1.0D-04  
 164 1 1 1 1 0  
 165 3 1 1 2 0  
 166 0 0 0 0 0 SOH  
 167 1 1 1 1 1  
 168 3 1 1 21 1  
 169 0 0 0 0 0 END OF NPDB  
 170 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 171 1 21 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 172 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF VELOCITY  
 173 1 9 1 0.33 0.0 0.0  
 174 0 0 0 0.0 0.0 0.0 END OF TH  
 175 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 176 8 1 12 4 0 1 200 5 1.0 1.0D-6 nona,nons,nomx,nomy,nomz,nomp,niterc,npyl  
 177 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 178 0.0 0 7 0  
 179 298.0 1.0 0 0 0 0  
 180 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX  
 181 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 182 CA++ 0  
 183 1.0D-9 2 0  
 184 CO3-- 0  
 185 1.0D-9 -2 0  
 186 TCO+2 0  
 187 1.0D-7 2 0  
 188 NA+ 0  
 189 1.0D-9 1 0  
 190 H2O 0  
 191 1.0D-20 0 0  
 192 E- 0

193 1.0D0 -1 0  
194 H+ 0  
195 1.0D00 1 0  
196 Z- 0  
197 1.0D-5 -1 0  
198 SOH 3  
199 1.0D-3 0 0  
200 C \*\*\*\*\* DATA SET 20: COMPLEXED SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGED SPECIES  
201 OH- 0  
202 5.75D-7 -13.99 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 -1 0 0  
203 CAC03 0  
204 4.19D-8 3.22 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0  
205 HCAC03 0  
206 1.21D-7 11.43 1 1 0 0 0 0 1 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0 0  
207 CAOH 0  
208 7.77D-10 -12.85 1 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 1 0 0 0 0 -1 0 0  
209 HC03 0  
210 9.58D-5 10.32 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0  
211 H2C03 0  
212 3.81D-6 16.67 0 1 0 0 0 0 2 0 0 0 0 1 0 0 0 0 2 0 0  
213 ZNA 0  
214 1.0D-20 20.00 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0  
215 Z2CA 0  
216 1.0D-20 41.80 1 0 0 0 0 0 2 0 0 0 1 0 0 0 0 0 2 0 0  
217 NAHC03 0  
218 1.0D-20 10.08 0 1 0 1 0 0 1 0 0 0 0 1 0 1 0 0 1 0 0  
219 NAC03- 0  
220 1.0D-20 1.27 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0  
221 TCO(OH)2 0  
222 1.0D-20 -3.325 0 0 1 0 0 0 -2 0 0 0 0 0 1 0 0 0 -2 0 0  
223 TCO4- 0  
224 1.0D-20 -32.99 0 0 1 0 3 -3 -6 0 0 0 0 0 1 0 3 -3 -6 0 0  
225 C \*\*\*\*\* DATA SET 21: ABSORBED SPECIES  
226 SO- 0  
227 2.80D-7 -9.52 0 0 0 0 0 0 -1 0 1 0 0 0 0 0 0 -1 0 1  
228 SOH2+ 0  
229 4.43D-7 5.58 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1  
230 SOH2TCO(OH)2+ 0  
231 1.00D-20 10.40 0 0 1 0 2 0 -1 0 1 0 0 1 0 2 0 -1 0 1  
232 SOH2TCO4 0  
233 1.00D-20 -18.90 0 0 1 0 3 -3 -5 0 1 0 0 1 0 3 -3 -5 0 1  
234 C \*\*\*\*\* DATA SET 22:  
235 CALCITE 0  
236 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0  
237 END OF JOB

## 付録 J

核種移行試解析の入力データリスト

ケース : U-234 酸化物系



97 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 98 1 9 1 1 0  
 99 0 0 0 0 0 END OF B.C. U  
 100 0.0D0 2.9403 1.0D38 2.9403  
 101 1 9 1 1 0  
 102 0 0 0 0 0 END OF B.C. SODIUM  
 103 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 104 1 9 1 1 0  
 105 0 0 0 0 0 END OF B.C. WATER  
 106 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 107 1 9 1 1 0  
 108 0 0 0 0 0 END OF B.C. ELECTRON  
 109 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 110 1 9 1 1 0  
 111 0 0 0 0 0 END OF B.C. HYDROGEN  
 112 0.0D0 3.1897 1.0D38 3.1897  
 113 1 9 1 1 0  
 114 0 0 0 0 0 END OF B.C. Z-  
 115 0.0D0 1.00D-02 1.0D38 1.00D-02  
 116 1 9 1 1 0  
 117 0 0 0 0 0 END OF B.C. SOH  
 118 0.0D0 1.00D-02 1.0D38 1.00D-02  
 119 1 9 1 1 0  
 120 0 0 0 0 0 END OF B.C. DUMMY  
 121 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 122 0.0D0 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5  
 123 0.0D0 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3  
 124 1 1 1 1 0  
 125 3 1 1 2 0  
 126 0 0 0 0 0 END OF B.C. CA  
 127 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 128 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 129 1 1 1 1 0  
 130 3 1 1 2 0  
 131 0 0 0 0 0 END OF B.C. CO3  
 132 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 133 0.0D0 3.40D-10 1.0D38 3.40D-10  
 134 1 1 1 1 0  
 135 3 1 1 2 0  
 136 0 0 0 0 0 END OF B.C. URANIUM  
 137 0.0D0 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3  
 138 0.0D0 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2  
 139 1 1 1 1 0  
 140 3 1 1 2 0  
 141 0 0 0 0 0 SODIUM  
 142 0.0D0 1.0D-00 1.0D38 1.0D-00  
 143 0.0D0 1.0D-00 1.0D38 1.0D-11  
 144 1 1 1 1 0  
 145 3 1 1 2 0  
 146 0 0 0 0 0 WATER  
 147 0.0D0 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 148 0.0D0 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 149 1 1 1 1 0  
 150 3 1 1 2 0  
 151 0 0 0 0 0 ELECTRON  
 152 0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09  
 153 0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12  
 154 1 1 1 1 0  
 155 3 1 1 2 0  
 156 0 0 0 0 0 HYDROGEN  
 157 0.0D0 1.0D-1 1.0D38 1.0D-1  
 158 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 159 1 1 1 1 0  
 160 3 1 1 2 0  
 161 0 0 0 0 0 Z-  
 162 0.0D0 1.0D-02 1.0D38 1.0D-02  
 163 0.0D0 1.0D-02 1.0D38 1.0D-02  
 164 1 1 1 1 0  
 165 3 1 1 2 0  
 166 0 0 0 0 0 SOH  
 167 1 1 1 1 1  
 168 3 1 1 21 1  
 169 0 0 0 0 0 END OF NPDB  
 170 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 171 1 21 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 172 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF VELOCITY  
 173 1 9 1 0.33 0.0 0.0  
 174 0 0 0 0.0 0.0 0.0 END OF TH  
 175 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 176 8 1 11 8 0 1 200 5 1.0 1.0D-6 none,nons,nonx,nony,nonz,nonp,niterc,npyl  
 177 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 178 0.0 0 7 0  
 179 298.0 1.0 0 0 0 0  
 180 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX  
 181 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 182 CA++ 0  
 183 1.0D-9 2 0  
 184 CO3-- 0  
 185 1.0D-9 -2 0  
 186 UO2+2 0  
 187 1.0D-7 2 0  
 188 NA+ 0  
 189 1.0D-9 1 0  
 190 H2O 0  
 191 1.0D-20 0 0  
 192 E- 0

193 1.0D0 -1 0  
194 H+ 0  
195 1.0D00 1 0  
196 Z- 0  
197 1.0D-5 -1 0  
198 SOH 0  
199 1.0D-3 0 0  
200 C \*\*\*\*\* DATA SET 20: COMPLEXED SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGED SPECIES  
201 OH- 0  
202 5.75D-7 -13.99 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1 0 0  
203 CACO3 0  
204 4.19D-8 3.22 1 1 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0  
205 HCACO3 0  
206 1.21D-7 11.43 1 1 0 0 0 0 1 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0 0  
207 CAOH 0  
208 7.77D-10 -12.85 1 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 -1 0 0  
209 HC03 0  
210 9.58D-5 10.32 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0  
211 H2CO3 0  
212 3.81D-6 16.67 0 1 0 0 0 0 2 0 0 0 0 1 0 0 0 0 2 0 0  
213 ZNA 0  
214 1.0D-20 20.00 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0  
215 Z2CA 0  
216 1.0D-20 41.80 1 0 0 0 0 0 0 2 0 0 1 0 0 0 0 0 0 2 0  
217 NAHC03 0  
218 1.0D-20 10.08 0 1 0 1 0 0 1 0 0 0 0 1 0 1 0 0 1 0 0  
219 NAC03- 0  
220 1.0D-20 1.27 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0  
221 U(OH)4 0  
222 1.0D-20 4.500 0 0 1 0 2 2 0 0 0 0 0 0 1 0 2 2 0 0 0  
223 C \*\*\*\*\* DATA SET 21: ADSORBED SPECIES  
224 SO- 0  
225 2.80D-7 -9.52 0 0 0 0 0 0 -1 0 1 0 0 0 0 0 0 -1 0 1  
226 SOH2+ 0  
227 4.43D-7 5.58 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 1  
228 SOHU(OH)4 0  
229 1.00D-20 4.99 0 0 1 0 2 2 0 0 1 0 0 1 0 2 2 0 0 1  
230 SOCAOHU(OH)4 0  
231 1.00D-20 -9.51 1 0 1 0 3 2 -2 0 1 1 0 1 0 3 2 -2 0 1  
232 SOU02(OH) 0  
233 1.00D-20 -8.05 0 0 1 0 1 0 -2 0 1 0 0 1 0 1 0 -2 0 1  
234 SO(UO2)3(OH)5 0  
235 1.00D-20 -15.14 0 0 3 0 5 0 -6 0 1 0 0 3 0 5 0 -6 0 1  
236 (UO2)(OH)2(SOH) 0  
237 1.00D-20 -7.10 0 0 1 0 0 0 -2 0 1 0 0 1 0 0 0 -2 0 1  
238 (UO2)3(OH)8(SOH) 0  
239 1.00D-20 -31.00 0 0 3 0 0 0 -8 0 1 0 0 3 0 0 0 -8 0 1  
240 C \*\*\*\* DATA SET 22:  
241 CALCITE 0  
242 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0  
243 END OF JOB

## 付録 K

核種移行試解析の入力データリスト

ケース : U-234 水酸化物系



97 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 98 1 9 1 1 0  
 99 0 0 0 0 0 END OF B.C. U  
 100 0.0D0 2.9403 1.0D38 2.9403  
 101 1 9 1 1 0  
 102 0 0 0 0 0 END OF B.C. SODIUM  
 103 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 104 1 9 1 1 0  
 105 0 0 0 0 0 END OF B.C. WATER  
 106 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 107 1 9 1 1 0  
 108 0 0 0 0 0 END OF B.C. ELECTRON  
 109 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 110 1 9 1 1 0  
 111 0 0 0 0 0 END OF B.C. HYDROGEN  
 112 0.0D0 3.1897 1.0D38 3.1897  
 113 1 9 1 1 0  
 114 0 0 0 0 0 END OF B.C. Z-  
 115 0.0D0 1.00D-04 1.0D38 1.00D-04  
 116 1 9 1 1 0  
 117 0 0 0 0 0 END OF B.C. SOH  
 118 0.0D0 1.00D-04 1.0D38 1.00D-04  
 119 1 9 1 1 0  
 120 0 0 0 0 0 END OF B.C. DUMMY  
 121 C \*\*\*\*\* DATA SET 15: DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS  
 122 0.0D0 4.6D-5 1.0D38 4.6D-5  
 123 0.0D0 3.0D-3 1.0D38 3.0D-3  
 124 1 1 1 1 0  
 125 3 1 1 2 0  
 126 0 0 0 0 0 END OF B.C. CA  
 127 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 128 0.0D0 1.9D-3 1.0D38 1.9D-3  
 129 1 1 1 1 0  
 130 3 1 1 2 0  
 131 0 0 0 0 0 END OF B.C. CO3  
 132 0.0D0 1.00D-30 1.0D38 1.00D-30  
 133 0.0D0 3.40D-05 1.0D38 3.40D-05  
 134 1 1 1 1 0  
 135 3 1 1 2 0  
 136 0 0 0 0 0 END OF B.C. URANIUM  
 137 0.0D0 2.7D-3 1.0D38 2.7D-3  
 138 0.0D0 6.0D-2 1.0D38 6.0D-2  
 139 1 1 1 1 0  
 140 3 1 1 2 0  
 141 0 0 0 0 0 SODIUM  
 142 0.0D0 1.0D-00 1.0D38 1.0D-00  
 143 0.0D0 1.0D-00 1.0D38 1.0D-11  
 144 1 1 1 1 0  
 145 3 1 1 2 0  
 146 0 0 0 0 0 WATER  
 147 0.0D0 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 148 0.0D0 1.0D+05 1.0D38 1.0D+05  
 149 1 1 1 1 0  
 150 3 1 1 2 0  
 151 0 0 0 0 0 ELECTRON  
 152 0.0D0 1.00D-09 1.0D38 1.00D-09  
 153 0.0D0 3.16D-12 1.0D38 3.16D-12  
 154 1 1 1 1 0  
 155 3 1 1 2 0  
 156 0 0 0 0 0 HYDROGEN  
 157 0.0D0 1.0D-1 1.0D38 1.0D-1  
 158 0.0D0 1.0D-20 1.0D38 1.0D-20  
 159 1 1 1 1 0  
 160 3 1 1 2 0  
 161 0 0 0 0 0 Z-  
 162 0.0D0 1.0D-04 1.0D38 1.0D-04  
 163 0.0D0 1.0D-04 1.0D38 1.0D-04  
 164 1 1 1 1 0  
 165 3 1 1 2 0  
 166 0 0 0 0 0 SOH  
 167 1 1 1 1 1  
 168 3 1 1 21 1  
 169 0 0 0 0 0 END OF NPDB  
 170 C \*\*\*\*\* DATA SET 16: HYDROLOGICAL VARIABLES  
 171 1 21 1 0.0 0.0 0.0 0.0  
 172 0 0 0 0.0 0.0 0.0 0.0 END OF VELOCITY  
 173 1 9 1 0.33 0.0 0.0  
 174 0 0 0 0.0 0.0 0.0 END OF TH  
 175 C \*\*\*\*\* DATA SET 17: NUMBER OF COMPONENTS AND PRODUCT SPECIES  
 176 8 1 11 8 0 1 200 5 1.0 1.0D-6 nona,nons,nomx,nomy,nomz,nomp,niterc,npyl  
 177 C \*\*\*\*\* DATA SET 18: H+, E-, IONIC STRENGTH AND SORPTION INFORMATION  
 178 0.0 0 7 0  
 179 298.0 1.0 0 0 0 0 0  
 180 -20.0 20.0 -20.0 20.0 PEMN PEMX PHMN PHMX  
 181 C \*\*\*\*\* DATA SET 19: COMPONENT SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGE INDEX  
 182 CA++ 0  
 183 1.0D-9 2 0  
 184 CO3-- 0  
 185 1.0D-9 -2 0  
 186 UO2+2 0  
 187 1.0D-7 2 0  
 188 NA+ 0  
 189 1.0D-9 1 0  
 190 H2O 0  
 191 1.0D-20 0 0  
 192 E- 0

193 1.0D0 -1 0  
194 H+ 0  
195 1.0D00 1 0  
196 Z- 0  
197 1.0D-5 -1 0  
198 SOH 0  
199 1.0D-3 0 0  
200 C \*\*\*\*\* DATA SET 20: COMPLEXED SPECIES AND THEIR ION-EXCHANGED SPECIES  
201 OH- 0  
202 5.75D-7 -13.99 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1 0 0  
203 CACO3 0  
204 4.19D-8 3.22 1 1 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0  
205 HCACO3 0  
206 1.21D-7 11.43 1 1 0 0 0 0 1 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0 0  
207 CAOH 0  
208 7.77D-10 -12.85 1 0 0 0 0 0 -1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 -1 0 0  
209 HC03 0  
210 9.58D-5 10.32 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0  
211 H2C03 0  
212 3.81D-6 16.67 0 1 0 0 0 0 2 0 0 0 0 1 0 0 0 0 2 0 0  
213 ZNA 0  
214 1.0D-20 20.00 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 1 0  
215 Z2CA 0  
216 1.0D-20 41.80 1 0 0 0 0 0 0 2 0 0 1 0 0 0 0 0 0 2 0 0  
217 NAHC03 0  
218 1.0D-20 10.08 0 1 0 1 0 0 1 0 0 0 0 1 0 1 0 0 1 0 0  
219 NACO3- 0  
220 1.0D-20 1.27 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0  
221 U(OH)4 0  
222 1.0D-20 4.500 0 0 1 0 2 2 0 0 0 0 0 0 1 0 2 2 0 0 0  
223 C \*\*\*\*\* DATA SET 21: ADSORBED SPECIES  
224 SO- 0  
225 2.80D-7 -9.52 0 0 0 0 0 0 -1 0 1 0 0 0 0 0 0 -1 0 1  
226 SOH2+ 0  
227 4.43D-7 5.58 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 1  
228 SOHU(OH)4 0  
229 1.00D-20 4.99 0 0 1 0 2 2 0 0 1 0 0 1 0 2 2 0 0 1  
230 SOCAOHU(OH)4 0  
231 1.00D-20 -9.51 1 0 1 0 3 2 -2 0 1 1 0 1 0 3 2 -2 0 1  
232 SOUO2(OH) 0  
233 1.00D-20 -8.05 0 0 1 0 1 0 -2 0 1 0 0 1 0 1 0 -2 0 1  
234 SO(UO2)3(OH)5 0  
235 1.00D-20 -15.14 0 0 3 0 5 0 -6 0 1 0 0 3 0 5 0 -6 0 1  
236 (UO2)(OH)2(SOH) 0  
237 1.00D-20 -7.10 0 0 1 0 0 0 -2 0 1 0 0 1 0 0 0 -2 0 1  
238 (UO2)3(OH)8(SOH) 0  
239 1.00D-20 -31.00 0 0 3 0 0 0 -8 0 1 0 0 3 0 0 0 -8 0 1  
240 C \*\*\*\* DATA SET 22:  
241 CALCITE 0  
242 1.0D-4 8.48 1 1 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0  
243 END OF JOB