

JNC TJ6270 96-001

~~JNC PJ6270 96-001~~

~~社内資料~~

本資料はノア年 9月20日付けて登録区分  
変更する。

人形原環境技術センター  
環境保全技術開発部 管理課

## 鉱化モデル(URAFRM)のインストールと解析

(動力炉・核燃料開発事業団 委託研究成果報告書)

1996年3月

株式会社C R C総合研究所

1996年3月

## 鉱化モデル(URAFRM)のインストールと解析

千田 正宣<sup>\*)</sup>, 小野 達弘<sup>\*\*)</sup>

### 要 旨

鉱化モデル(UMRAF)は、米国バージニア大学のRaffenspergerが開発した不整合関連型鉱床の数値計算シミュレーションを行うプログラムである。このプログラムを利用する事により、定量的な解析を実施し、効率的なウラン探査を行うことが可能であると考えられる。

本件では、この鉱化モデル(RST2Dコード(不整合関連型鉱床数値計算シミュレーションプログラム)およびHETEQLコード(溶液濃度解析プログラム))を動力炉・核燃料開発事業団所有のEWS(SUN SS20)にインストールし、プログラムの解析とサンプルデータを用いた試験解析結果を行った。

RST2DコードおよびHETEQLコードのインストールでは、EWS上に適当にディレクトリを作成してファイルを配置し、コンパイルおよび実行が正常に行われる事を確認した。ここでは、インストールファイル、コンパイル方法、実行方法をまとめる。

プログラム解析では、入出ファイルの構成、入出力ファイルの概要、プログラムの実行フローおよび各サブルーチンの機能を調査した。

サンプルデータを用いた試験解析では、unconformity-typeのウラン鉱床のシミュレーション計算を行った。解析結果は膨大なものであるため、本報告では温度分布、pH値及びH<sub>2</sub>O濃度の解析結果のみを示した。

現状の問題点として、解析結果の出力方法が挙げられる。解析結果は数値リストで出力されるため、膨大な解析結果の把握には多大な労力と時間を要する場合がある。今後はこの点を改良し、解析結果を2次元あるいは3次元のグラフとしてEWS(SUN SS20)上に表示する機能を実現する事が望まれる。これにより解析結果を短時間で容易に把握し、種々のシミュレーション結果の検討を効率的に進める事が可能になると考えられる。

---

本報告書は、(株)CRC総合研究所が動力炉・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: 07C1406

事業団担当部課室および担当者: 人形嶋事業所 環境資源開発課 (山名 智)

\*) (株)CRC総合研究所 千田 正宣, 小野 達弘

1996.3

## The installation and analysis of mineralization model (URAFRM)

M. Senda\*, T. Ono\*

### Abstract

The computer code URAFRM, developed by Raffensperger, University of Virginia, evaluate the hydrologic and geochemical process involved in the formation of unconformity-type uranium deposits.

By using this program, we will be able to make the quantitative evaluation and effective uranium investigation.

This time we installed the RST2D code (unconformity-type uranium deposits simulation code) and the HETEQL code (the distribution of mass amongst aqueous species simulation code) in EWS (Engineering WorkStation) of PNC, analyzed the codes, and run the codes using the example data files.

We installed the RST2D code and the HETEQL code in the adequate directories in the EWS, compiled the codes, and found that the calculation result is all right.

In this document we will present the installed files and how to use these files. Then we analyzed the computer programs. A description about input files and output files, program flow chart, and function of each subroutines are provided in the document.

The example simulation about the formation of unconformity-type uranium deposits was executed. In this report we present the temperature, pH and density of H<sub>2</sub>O distributions.

The calculation result file have many informations. Then it is difficult to understand all the result. In future, we want to install the graphical program to show simulation result.

---

Work performed by CRC Research Inst. under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation  
PNC Liaison : Ningyo-Toge Works

Waste Isolation and Ore Processing Division (S. Yamana)

\*:CRC Research Institute, Inc. Engineering Division.

## 目 次

1. はじめに	.....	1
2. 実施内容	.....	1
3. 鉱化モデル(URAFRM)のインストール	.....	2
3. 1 インストール	.....	2
3. 2 コンパイル方法	.....	3
3. 3 実行方法	.....	4
4. 鉱化モデル(URAFRM)の解析	.....	5
4. 1 入出力ファイル	.....	5
4. 2 計算フロー	.....	8
4. 3 プログラム説明	.....	9
4. 4 サンプル解析	.....	12
5. まとめ	.....	13
6. 今後の課題	.....	13
付録	.....	
付録1 RST2Dコードサンプル解析入力データ	.....	24
付録2 HETEQLコードサンプル解析入力データ	.....	25
		31

## 1. はじめに

鉱化モデル（URAFRM）は、米国バージニア大学のRaffenspergerが開発した不整合関連型鉱床の数値計算シュミレーションを行うプログラムである。このプログラムを利用する事により、定量的な解析を実施し、効率的なウラン探査を行うことが可能であると考えられる。

本件では、この鉱化モデル（URAFRM）を動力炉・核燃料開発事業団所有のEWS（SUN SS20）にインストールし、プログラムの解析とサンプルデータを用いた試験解析結果を行った。

## 2. 実施内容

### (1) 鉱化モデル（URAFRM）のインストール

Raffensperger より RST2D コード（不整合関連型鉱床数値計算シュミレーションプログラム）及び HETEQL コード（溶液濃度解析プログラム）のソースプログラムを入手し、EWS（SUN SS20）にてコンパイルを行い実行モジュールを作成した。

また、実行モジュールが正常に動作する事を確認するため、入手したソースコードパッケージに付属するサンプル入力データを用いて動作確認を行った。

### (2) 鉱化モデル（URAFRM）の解析

RST2D コード及び HETEQL コードのプログラム解析、サンプル入力データを用いた試験解析を実施した。

プログラム解析では、

- ① 入出力ファイル構成の調査と各ファイル内容の調査
- ② 計算フローの調査
- ③ 各サブルーチンの機能の概要の調査

を行い、本報告書にまとめた。

RST2D コードの試験解析では、サンプル入力データを用いて unconformity-type のウラン鉱床のシュミレーション計算を行った。解析結果として解析地層内の温度、pH 値、 $H_2O$  濃度の変化の様子を示す。

また HETEQL コードの試験解析では、サンプル入力データを用いて水溶液の濃度変化のシュミレーション計算を行った。複数種類の分子（イオン）を含む水溶液の 80 °C における濃度変化の様子を解析した。

### 3. 鉱化モデル(URAFRM)のインストール

#### 3. 1 インストール

アプリケーションインストール用ディレクトリ[/export/home/app1]下に[rst2d]ディレクトリを作成し、下記内容のファイルをインストールした。

```
/export/home/app1/rst2d
|--GRAPHICS
| |--cwrap.fc
| |--cwrap.s
| |--fntools.c
| |--makefnt
|
|--HETEQL
| |--chemdat          => Chemical DataBase File
| |--total.concs      => HETEQL用サンプル入力データ
| |--output           => HETEQL計算結果（サンプル入力データ[total.concs]を使ってCRCで実行した結果）
|
|--src
|   |--Makefile        => HETEQLコンパイル用Makeファイル（CRCで作成）
|   |--makefile.org     => HETEQLコンパイル用Makeファイル
|   |--heteql.f         => HETEQLソースプログラム
|   |--grafix.f
|   |--hetgl.f
|   |--hetsubs.f
|   |--window1.f
|   |--window2.f
|
|--RST2D
| |--chemdat          => Chemical DataBase File
| |--rst2d.in          => rst2D用サンプル入力データ
| |--rst2d.con
| |--rst2d.dbg
| |--rst2d.out
| |--rst2d.pst
| |--rst2d.sav
|
|--src
|   |--Makefile        => rst2Dコンパイル用Makeファイル（CRCで作成）
|   |--makefile.org     => rst2Dコンパイル用Makeファイル
|   |--rst2d.f
|   |--pretec.f
|   |--rstplot.f
|
|--readme             => 内容説明ファイル
```

#### 3. 2 コンパイル方法

RST2DおよびHETEQLの各ディレクトリにあるMakefileを利用してコンパイルを行う。

##### ① RST2Dのコンパイル

1) カレントディレクトリをRST2Dのソースプログラムがあるディレクトリへ移動する。

```
% cd /export/home/app1/rst2d/HETEQL/src
```

2) Makefileを用いてコンパイルする。

```
% make
```

3) [rst2D]という名前の実行ファイルが作成される。

##### ② HETEQLのコンパイル

1) カレントディレクトリを、HETEQLのソースプログラムがあるディレクトリへ移動する。

```
% cd /export/home/app1/rst2d/HETEQL/src
```

2) Makefileを用いてコンパイルする。

```
% make
```

3) <heteql>という名前の実行ファイルが作成される。

### 3. 3 実行方法

#### ① R S T 2 D の実行

`<rst2d>` 実行プログラムがパスの通ったディレクトリにあることを確認してから、次の通り実行する。

1) カレントディレクトリに、`<chemdat>` ファイルをコピーする。

```
% cp /export/home/app1/rst2d/RST2D/chemdat .
```

2) 入力データを、`<rst2D.in>` というファイル名で作成する。

(\* カレントディレクトリにある `<rst2D.in>` という名前のファイルが入力データとして読み込まれる。)

3) R S T 2 D を実行する。

```
% rst2d
```

4) 実行終了後、計算結果は `<rst2D.out>`, `<rst2D.pst>`, `<rst2D.dbg>` および `<rst2D.con>` というファイル名で出力される。

#### ② H E T E Q L の実行

`<heteq1>` 実行プログラムがパスの通ったディレクトリにあることを確認してから、次の通り実行する。

1) カレントディレクトリに、`<chemdat>` ファイルをコピーする。

```
% cp /export/home/app1/rst2d/HETEQL/chemdat .
```

2) 入力データを、`<total.concs>` というファイル名で作成する。

(\* カレントディレクトリにある `<total.concs>` という名前のファイルが入力データとして読み込まれる。)

3) H E T E Q L を実行する。

```
% heteq1
```

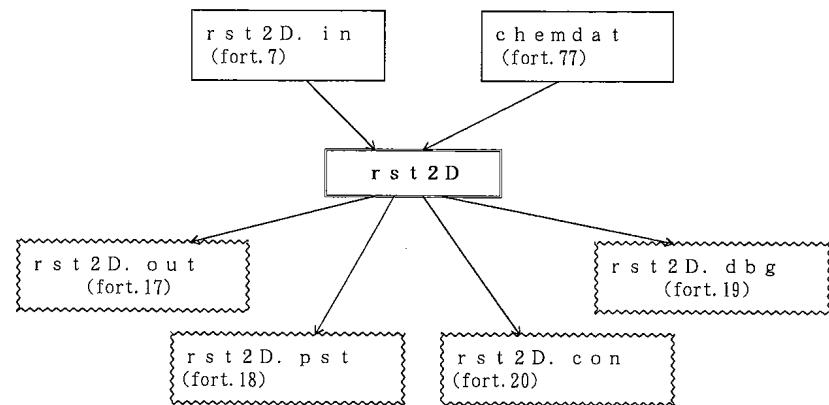
4) 実行終了後、計算結果は `<output>` というファイル名で出力される。

### 4. 鉱化モデル (URAFRM) の解析

#### 4. 1 入出力ファイル

##### ① R S T 2 D コード

R S T 2 D コードは、`<rst2d.in>` と `<chemdat>` の 2 つのファイルを読み込み、`<rst2d.out>`, `<rst2d.pst>`, `<rst2d.dbg>`, `<rst2d.sav>` および `<rst2d.con>` の 5 つのファイルを書き出す。



各ファイルの概要は次の通りである。

#### 入力ファイル

##### `<rst2d.in>`

シミュレーション計算の入力条件を与えるファイル

##### `<chemdat>`

化学データベースファイル。構成元素、分子、鉱物等の番号と名前、電荷量、分子量、構成式の定数等の情報を含む。

#### 出力ファイル

##### `<rst2d.out>`

このファイルには、入力ファイルで指定したタイムステップにおける計算結果と共に、入力情報とシミュレーションオプションの概要が含まれる。計算の内容を説明するヘッダ情報が含まれ、ファイル自身の内容を説明するものとなる。各値には、節点番号順に番号が振られる。

##### `<rst2d.pst>`

このファイルにも計算結果が書き込まれ、ポストプロセッサである `r s t p l o t f` に読み

込まれる。ヘッダは含まれない。また、Tecplotフォーマットのデータファイルを作成するポストプロセッサpreciseにも使用される。

#### *<rst2D.dbg>*

異常終了したシミュレーション計算のデバッグ情報がこのファイルに書き込まれる。シミュレーション計算が正常に終了した場合は、このファイルには何も書かれないと。

#### *<rst2D.sav>*

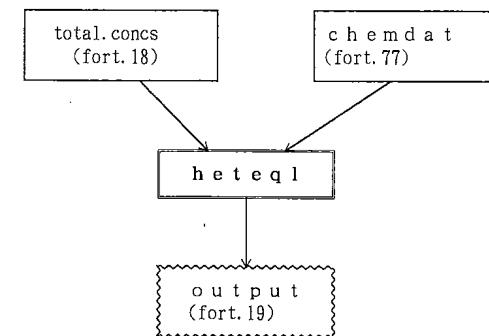
このファイルには、前回のシミュレーション計算の最後のタイムステップにおける計算結果が入力ファイルのフォーマットで書き込まれる。rst2D.inにファイル名を変更すれば、シミュレーション計算の続行に利用する事ができる。また、シミュレーション計算の途中で境界条件やその他のパラメータを変更したい場合にも利用する事ができる。

#### *<rst2D.con>*

このファイルには、PROPTパラメータで指定したタイムステップにおける各節点の鉱物のVolume fractionが書き込まれる。プロット用のプログラムで読み込む事ができる単純なデータ羅列ファイルである。このファイルは、領域内のある点で起こる鉱物学的な変化をグラフにする場合等に利用できる。

#### ② HETEQ Lコード

HETEQ Lは、*<total.concs>*と*<chemdat>*の2つのファイルを読み込み、*<OUTPUT>*という名前のファイルに計算結果を出力する。



各ファイルの概要は次の通りである。

#### 入力ファイル

##### *<total.concs>*

温度、全ての構成物質の合計解析濃度および収束パラメータを与える。

##### *<chemdat>*

化学データベースファイル。構成元素、2次生成物（合成物質）、鉱物等の番号と名前、電荷量、分子量、構成式の係数等の情報を含む。

#### 出力ファイル

##### *<output>*

計算結果が書き込まれるファイル。このファイルにはラベルが書き込まれ、計算内容を説明するものとなる。

- このファイルに含まれる内容の概略は次の通りである。
- ・計算方法。反復計算回数や最終的な電荷量の不均衡状態等。
  - ・流体の物性値。pH、EH、イオン濃度等。
  - ・入力した合計解析濃度の要約。
  - ・全ての水溶性分子の濃度とactivitiesの詳細リスト。
  - ・存在する鉱物のVolume Fractionの要約。

#### 4. 2 計算フロー

##### ① R S T 2 D コード

R S T 2 D コードは、圧縮性地下水水流動、熱伝達、および反応性の溶液の移動を支配する方程式の解法に有限要素法を用いている(図4. 1参照)。境界条件と初期条件を定義する物性値が必要である。入力データを読み込んだ後、予測子修正法を用いて、まず流動と温度場を計算し、次に初期の流体と固体の特性を計算し、最後に溶液の移動と反応を計算する(図4. 2)。

次に、局所平衡の仮定に基づいた数値解析が行われる。反応性の多成分溶液の移動は、simultaneous, partial differential equation で記述される。直接解法は、現在のところ2、3個以上の要素を含む2次元の問題に適用するのは困難である。この問題をさけるため、移動を支配するpartial differential equation はfield equationのみであると考える。平衡状態(質量バランス)を定義する非線形代数方程式がその方程式である。このことは、物質の移動と化学的性質の間には相関性が無い事を示している。この解法は、質量移動の関係式に質量バランスと質量activationの表現が含まれる直接解法と対立するものである。直接解法を適用すると必要な記憶領域が不足するため、この解法を用いる。

##### ② H E T E Q L コード

H E T E Q L コードは、要素物質の既知の合計解析濃度に基づいて、水に解けた物質、合成物および鉱物の質量の分布を定義するコードである。このコード(サブルーチン)はR S T 2 D 中でも反応性溶液の移動計算に使われている。

この化学モデルは、多種成分の平衡を仮定しており、水溶性物質の濃度や温度の関数として表される鉱物の比体積の計算に、Newton-Rapson の反復解法を用いている(図4. 3)。

#### 4. 3 プログラム説明

##### ① R S T 2 D コード

各サブルーチンの機能の概要は次の通りである。

MAIN	: MAIN PROGRAM
MMULTS	: MULTIPLIES A REDUCED SYMMETRIC MATRIX AND ARRAY 縮小対称行列に配列を掛ける。
MMULTN	: MULTIPLIES A REDUCED NONSYMM. MATRIX AND ARRAY 縮小非対称行列に配列を掛ける
SHAPE	: CALCULATES COEFFICIENTS OF SHAPE FUNCTIONS 全ての要素のSHAPE FUNCTION 係数を計算する。
SOLVES	: USES GAUSSIAN ELIMINATION TO SOLVE THE PROBLEM 対称行列に対してガウスの消去法を適用する。対角行列に対してのみ適用できる。
SOLVEN	: SAME FOR NONSYMMETRIC MATRICES 非対称行列に対してガウスの消去法を適用する。対角行列に対してのみ適用できる。
FLUID	: RETURNS FLUID PROPERTIES AS F(C, T, P) 温度の関数として、流体の物性値(密度、粘性)、圧力、および溶液の濃度を計算する。
INDICE	: SETS UP MATRIX OF NODAL INDICES 各要素の節点番号のマトリクスを作成する。 節点番号は、反時計回りで指定する。
LOCFLO	: CONSTRUCTS LOCAL [A] AND [C] MATRICES 流動に関するマトリクス
LOCSOL	: CONSTRUCTS LOCAL [E] AND [F] MATRICES 溶媒の移動に関するマトリクス
LOCTEM	: CONSTRUCTS LOCAL [O] AND [P] MATRICES 熱伝達に関するマトリクス
LOCSTM	: CONSTRUCTS LOCAL [R] MATRIX STREAM Functionに関するマトリクス
GLOSYM	: ASSEMBLES GLOBAL MATRICES (SYMMETRIC) グローバルマトリクスを作成する(対称行列)
GLONON	: ASSEMBLES GLOBAL MATRICES (NON-SYMMETRIC) グローバルマトリクスを作成する(非対称行列)
FLUX	: ASSEMBLES GLOBAL WATER FLUX [Q] MATRIX 流束に関するマトリクス
FOURFL	: ASSEMBLES GLOBAL HEAT FLUX [U] MATRIX 熱伝達に関するマトリクス
SFLUX	: ASSEMBLES GLOBAL STREAM FLUX [T] MATRIX STREAM FLUXに関するマトリクス
CONSHD	: IMPOSES CONSTANT HEAD BOUNDARIES マトリクスや配列を修正して圧力の境界条件を与える。
CONSCT	: IMPOSES CONSTANT CONC. / TEMP. BOUNDARIES 濃度と温度の境界条件を与える。
CONSTM	: IMPOSES CONSTANT STREAM FUNCTION BOUNDARIES 流量の境界条件を与える。
LINVEL	: CALCULATES LINEAR VELOCITIES (HEAD BASIS) 圧力の値から平均速度を計算する。
STMVEL	: CALCULATES VELOCITIES (STREAM FUNCTION BASIS) STREAM FUNCTIONから平均速度を計算する。
WRTSAV	: WRITES A FILE WHICH MAY BE USED AS INPUT

中間結果ファイルを作成する。作成されたファイルは、シミュレーションの続きを行う場合や、異常終了時のリストア等に使用する。

HETEQL : CALCULATES EQUILIBRIUM SPECIATION FOR A NODE  
H E T E Q L の計算ルーチン

KCALC : CALCULATES EQUILIBRIUM CONSTANTS=f(TEMPERATURE)  
2次の多項式近似により、与えられた温度における平衡定数を求める

GUESS : DETERMINES OPTIMUM INITIAL GUESSES  
水溶液濃度の最適な初期値を定義する。W A L S H のDIRECT SEARCH OPTIMIZATION ALGORITHM を使用する。

NRHOM : PERFORMS NEWTON-RAPHSON ITERATION TO DETERMINE HOMOGENEOUS SPECIATION  
非線形方程式に対してNewton-Rapsonの反復解法を適用する。

NRHET : PERFORMS NEWTON-RAPHSON ITERATION TO DETERMINE HETEROGENEOUS SPECIATION  
非線形方程式に対してNewton-Rapsonの反復解法を適用する。

BALCAL : CALCULATES MASS BALANCE FUNCTION RESIDUALS  
質量バランスの残差を計算する。

FNCAQ : SUPPLIES MATRIX COEFFICIENTS TO NRHOM  
FNCSOL : SUPPLIES MATRIX COEFFICIENTS TO NRHET

COEFF : PERFORMS ALGEBRAIC MANIPULATION OF THE EQUATIONS FOR HETEROGENEOUS SYSTEMS  
不均一平衡の場合のマトリクスと配列の修正係数を計算する。  
W A L S H のTHE ALGEBRAIC MANIPULATIONを使用する。

SOLIND : SUPPLIES MATRIX OF SOLID AFFINITIES  
全ての鉱物の PRECIPITATION AFFINITIES 2.303RTLOG(Q/K) を計算する。  
(R=1.98719 cal/mole K)

SOLUB : DETERMINES MOST SUPERSATURATED SOLIDS  
過飽和鉱物相をチェックする。

SPCALC : CALCULATES CONCENTRATIONS OF SECONDARY SPECIES  
全ての2次生成物の濃度を計算する。

SOLCAL : CALCULATES CONCENTRATIONS OF SOLID SPECIES  
全ての固体の濃度を計算する。

ACTIV : CALCULATES ACTIVITY COEFFICIENTS  
全ての物質のイオン強度とACTIVITY係数を計算する。  
現在、2つのオプションがある。  
(1) DAVIES 式、 $I \leq 0.5$  m の時有効  
(2) 拡張 DEBYE-HUCKEL 式、NaCl BRINES  $\leq 5.0$  m,  $T \leq 350^{\circ}\text{C}$ ,  $P=P(\text{sat})$  のとき有効。

GAUSSJ : SOLVES LINEAR MATRIX EQUATIONS  
GAUSS-JORDAN法を用いた線形方程式のソルバー

VOLUME : CALCULATES VOLUME FRACTIONS/POROSITY  
鉱物の比体積と空孔率を計算する。

STATE : CALCULATES pH, Eh, f(O<sub>2</sub>)  
pH, Eh, pe, およびOXYGEN FUGACITYを計算する。

② H E T E Q L コード  
各サブルーチンの機能の概要は次の通りである。

MAIN : MAIN PROGRAM

KCALC : CALCULATES EQUILIBRIUM CONSTANTS=f(TEMPERATURE)  
2次の多項式近似により、与えられた温度における平衡定数を求める

GUESS : DETERMINES OPTIMUM INITIAL GUESSES  
水溶液濃度の最適な初期値を定義する。W A L S H のDIRECT SEARCH OPTIMIZATION ALGORITHM を使用する。

NRHOM : PERFORMS NEWTON-RAPHSON ITERATION TO DETERMINE HOMOGENEOUS SPECIATION  
非線形方程式に対してNewton-Rapsonの反復解法を適用する。

NRHET : PERFORMS NEWTON-RAPHSON ITERATION TO DETERMINE HETEROGENEOUS SPECIATION  
非線形方程式に対してNewton-Rapsonの反復解法を適用する。

BALCAL : CALCULATES MASS BALANCE FUNCTION RESIDUALS  
質量バランスの残差を計算する。

FNCAQ : SUPPLIES MATRIX COEFFICIENTS TO NRHOM  
FNCSOL : SUPPLIES MATRIX COEFFICIENTS TO NRHET

COEFF : PERFORMS ALGEBRAIC MANIPULATION OF THE EQUATIONS FOR HETEROGENEOUS SYSTEMS  
不均一平衡の場合のマトリクスと配列の修正係数を計算する。  
W A L S H のTHE ALGEBRAIC MANIPULATIONを使用する。

SOLIND : SUPPLIES MATRIX OF SOLID AFFINITIES  
全ての鉱物の PRECIPITATION AFFINITIES 2.303RTLOG(Q/K) を計算する。  
(R=1.98719 cal/mole K)

SOLUB : DETERMINES MOST SUPERSATURATED SOLIDS  
過飽和鉱物相をチェックする。

SPCALC : CALCULATES CONCENTRATIONS OF SECONDARY SPECIES  
全ての2次生成物の濃度を計算する。

SOLCAL : CALCULATES CONCENTRATIONS OF SOLID SPECIES  
全ての固体の濃度を計算する。

ACTIV : CALCULATES ACTIVITY COEFFICIENTS  
全ての物質のイオン強度とACTIVITY係数を計算する。  
現在、2つのオプションがある。  
(1) DAVIES 式、 $I \leq 0.5$  m の時有効  
(2) 拡張 DEBYE-HUCKEL 式、NaCl BRINES  $\leq 5.0$  m,  $T \leq 350^{\circ}\text{C}$ ,  $P=P(\text{sat})$  のとき有効。

GAUSSJ : SOLVES LINEAR MATRIX EQUATIONS  
GAUSS-JORDAN法を用いた線形方程式のソルバー

VOLUME : CALCULATES VOLUME FRACTIONS/POROSITY  
鉱物の比体積と空孔率を計算する。

STATE : CALCULATES pH, Eh, f(O<sub>2</sub>)  
pH, Eh, pe, およびOXYGEN FUGACITYを計算する。

RESULT : WRITES OUTPUT FILE  
計算結果を出力する。

#### 4. 4 サンプル解析

##### ① R S T 2 D コード

R S T 2 D コードパッケージに付属するサンプル入力データを用いて、unconformity-typeのウラン鉱床のシミュレーション計算を行った。

付録 1 に、入力データを添付する。入力データの説明は入力説明書を参照のこと。

図 4. 4 に、解析モデルのHydrostratigraphy (A図) と要素分割 (B図) を示す。

解析モデルは、Confining Unit、砂岩、グラファイトおよびBasementの4つのユニットから構成される。各ユニットの物性値は図 4. 4 (A図) に示す通りである。ここで、 $\phi$  は空隙率 (porosity)、 $\lambda_s$  は溶融固体の熱伝導率、 $K_z$ 、 $K_x$  はそれぞれ  $z$  方向、 $x$  方向のhydraulic conductivityである。図 4. 4 (B図) に有限要素メッシュ分割を示す。砂岩とBasementの境界部分でメッシュ分割を細かくしてある。

図 4. 5 に、各ユニットの構成物質の初期濃度を示す。

図 4. 6 に、解析開始500年後と25,000年後の各節点の温度を示す。節点番号は、解析モデルの左下端より列方向に順に増加するように設定している。定常熱伝達解析であるため、節点の温度に変化は見られない。

図 4. 7 に、解析開始500年後と25,000年後の各節点の pH 値を示す。砂岩層内 (節点番号 8, 1 9, 118 等) で pH の低下が見られる。

図 4. 8 に、解析開始500年後と25,000年後の各節点の H<sub>2</sub>O 濃度(moles/liter)を示す。confining unit 内では H<sub>2</sub>O 濃度の変化はほとんど見られない。これに対して、砂岩層内では濃度が上昇し、Basement 層内では濃度が減少する傾向が見られる。

##### ② H E T E Q L コード

R S T 2 D コードパッケージに付属するサンプル入力データを用いて、濃度変化のシミュレーション計算を行った。

付録 2 に、入力データを添付する。入力データの説明は入力説明書を参照のこと。

図 4. 9 に、各構成物質の初期濃度を示す。H<sub>2</sub>O, OH<sup>-</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Ca<sup>++</sup>, Mg<sup>++</sup>, UO<sub>2</sub><sup>++</sup>, Al<sup>+++</sup>, Fe<sup>+++</sup>, Cl<sup>-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>--</sup>, SO<sub>4</sub><sup>--</sup>, SiO<sub>2</sub>(0), CH<sub>4</sub>(0)から成る水溶液であり、H<sub>2</sub>O および SiO<sub>2</sub>(0)の初期濃度が高く設定されている。解析温度は、80°Cに設定した。

図 4. 10 に、濃度分布の解析結果を示す。初期濃度を定義した物質のうち、H<sub>2</sub>Oのみ濃度が上昇する。その他のOH<sup>-</sup>, Na<sup>+</sup>等のイオン濃度は大きく減少する。一方、化学反応により多くの分子が生成される。生成される分子(イオン)の中では、CaCl<sub>2</sub>, NaCl, MgCl<sub>2</sub>, CaCl<sub>4</sub><sup>+</sup>の濃度が高い事がわかる。

#### 5. まとめ

鉱化モデル (URAFRM) のインストールと解析作業として、R S T 2 D コードおよびHETEQL コードのインストールを行い EWS 上で実行できる環境を整えた。

また、両コードの入出力ファイルの構成と概略、プログラム中の各サブルーチンの機能の調査を行った。

更に、インストールした解析コードを利用して試験解析を行い、シミュレーション計算が正常に行われる事を確認した。

#### 6. 今後の課題

現状では、解析結果は数値リストで出力される。

出力される解析結果は膨大なものであり、解析内容の把握には多大な労力と時間を要する場合がある。幸いな事に、インストールした解析コードパッケージ (R S T 2 D) には解析結果をグラフィック表示するプログラムが付属する。しかし、このプログラムはSilconGraphics社製のEWS を対象としたものであり、SUN SS20 では表示する事ができない。

今後はこの点を改良し、解析結果を2次元あるいは3次元のグラフとしてEWS (SUN SS20) 上に表示する機能を実現する事が望まれる。この機能を利用する事により解析結果を短時間で容易に把握できるようになり、種々のシミュレーション結果の検討を効率的に進める事が可能になると考えられる。

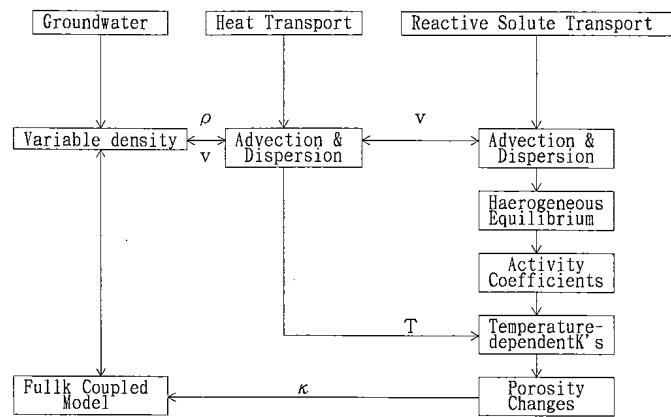


図4: 1 RST 2Dコードのシミュレーション手順の概要

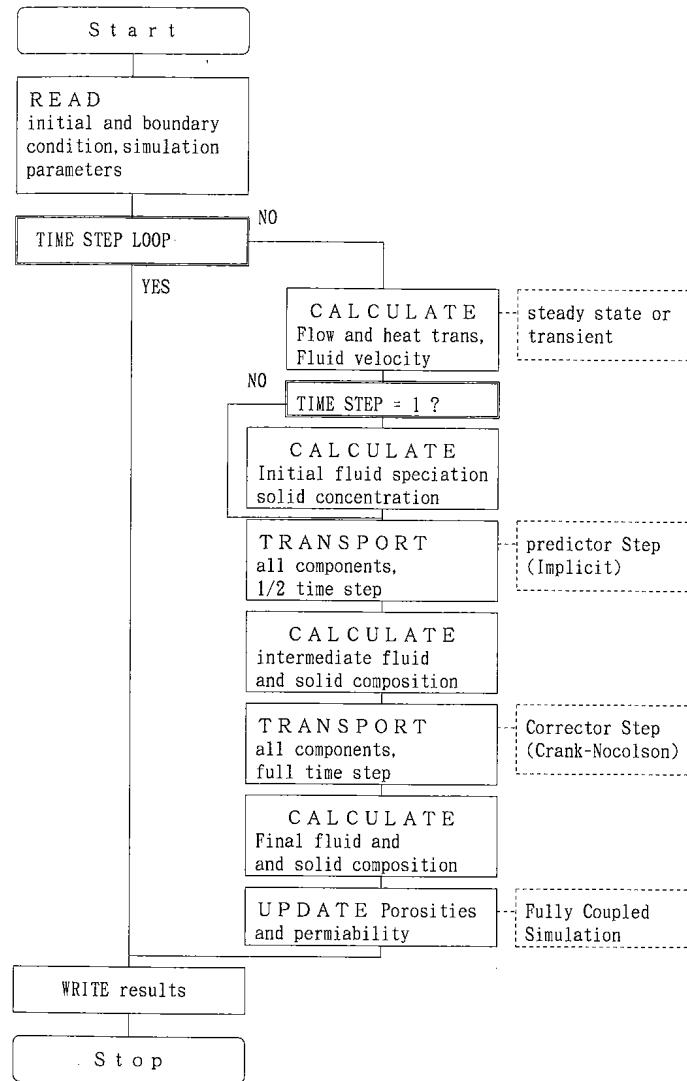


図4. 2 RST 2Dコードのフローチャート

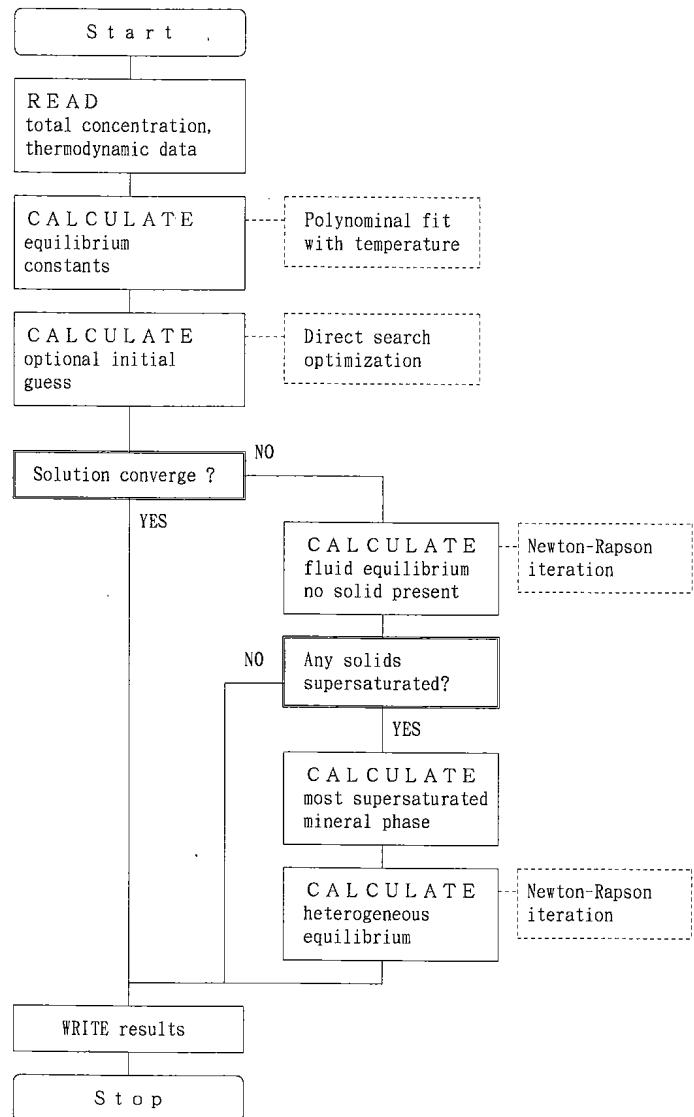


図4. 3 HETEQ Lコードのフローチャート

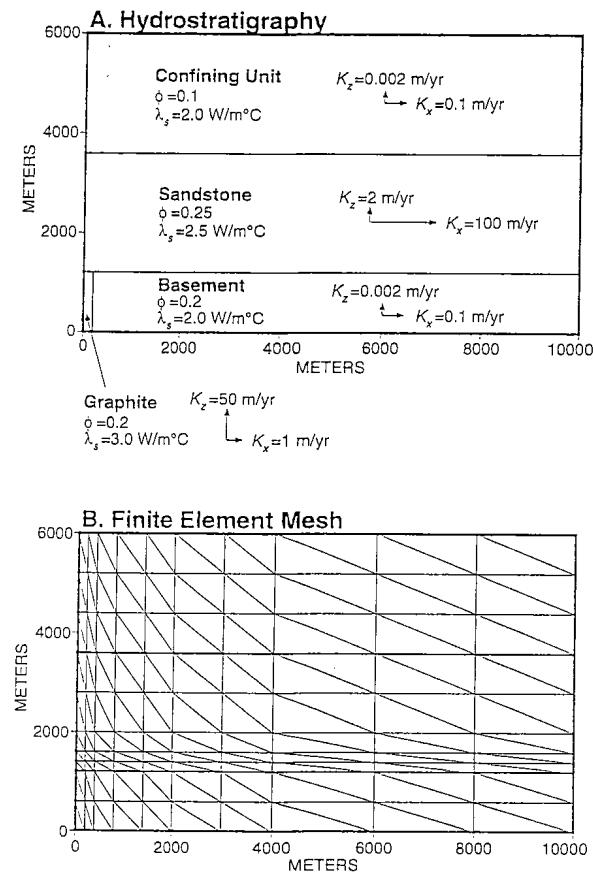


図4. 4 解析モデルのHydrostratigraphy (A図) と要素分割 (B図)

(単位: moles/liter)	
H2O	100.0000000000000D+00
OH-	127.2000000000000D+00
Na+	0.100000000000000D+00
K+	14.0000000000000D+00
Ca++	1.20000000000000D+00
Mg++	1.00000000000000D+00
UO2++	0.000010000000000D+00
Al+++	37.2000000000000D+00
Fe+++	0.200000000000000D+00
C1-	2.70000000000000D+00
C03--	0.000010000000000D+00
SO4--	0.400000000000000D+00
SiO2(O)	135.4000000000000D+00
CH4(CO)	0.050000000000000D+00
Graphite	
H2O	100.0000000000000D+00
OH-	72.0000000000000D+00
Na+	1.00000000000000D+00
K+	15.0000000000000D+00
Ca++	0.100000000000000D+00
Mg++	1.00000000000000D+00
UO2++	0.000010000000000D+00
Al+++	45.0000000000000D+00
Fe+++	0.200000000000000D+00
C1-	3.00000000000000D+00
C03--	39.00001000000000D+00
SO4--	0.400000000000000D+00
SiO2(O)	108.9000000000000D+00
CH4(CO)	40.0000000000000D+00
Sandstone	
H2O	100.0000000000000D+00
OH-	32.0000000000000D+00
Na+	1.00000000000000D+00
K+	5.00000000000000D+00
Ca++	2.00000000000000D+00
Mg++	0.500000000000000D+00
UO2++	0.000100000000000D+00
Al+++	6.00000000000000D+00
Fe+++	3.00000000000000D+00
C1-	5.00000000000000D+00
C03--	0.000100000000000D+00
SO4--	0.500000000000000D+00
SiO2(O)	119.7000000000000D+00
CH4(CO)	0.100000000000000D-10
Confining Unit	
H2O	100.0000000000000D+00
OH-	180.0000000000000D+00
Na+	0.100000000000000D+00
K+	0.100000000000000D+00
Ca++	135.6500000000000D+00
Mg++	2.00000000000000D+00
UO2++	0.000010000000000D+00
Al+++	60.0200000000000D+00
Fe+++	0.200000000000000D+00
C1-	0.100000000000000D+00
C03--	137.5000000000000D+00
SO4--	0.530010000000000D+00
SiO2(O)	102.0000000000000D+00
CH4(CO)	0.100000000000000D-20

図 4. 5 各ユニットの構成物質の初期濃度

NODEWISE TEMPERATURES (500 年後)							
1	80.00000	2	75.39638	3	71.05454	4	69.63774
5	68.30794	6	65.58777	7	58.99619	8	50.08853
9	39.82691	10	29.85495	11	20.00000	12	80.00000
13	75.38080	14	70.97100	15	69.58457	16	68.27031
17	65.56483	18	58.96842	19	50.04189	20	38.81765
21	29.85120	22	20.00000	23	80.00000	24	75.33060
25	70.78748	26	69.44938	27	68.15087	28	65.47254
29	58.91593	30	49.99016	31	39.79195	32	29.84011
33	20.00000	34	80.00000	35	75.18829	36	70.45209
37	69.11860	38	67.81409	39	65.15394	40	58.70787
41	49.79375	42	39.69318	43	29.79647	44	20.00000
45	80.00000	46	74.91241	47	69.87543	48	68.50074
49	67.16080	50	64.45543	51	58.16392	52	49.35929
53	39.44670	54	29.88285	55	20.00000	56	80.00000
57	74.56877	58	69.19700	59	67.74774	60	65.34890
61	63.54627	62	57.37801	63	48.84568	64	38.11364
65	29.52248	66	20.00000	67	80.00000	68	73.99415
69	67.99342	70	64.41796	71	64.91130	72	61.95061
73	55.74072	74	47.67488	75	38.37646	76	29.16655
77	20.00000	78	80.00000	79	73.39113	80	66.76788
81	65.02739	82	63.38275	83	60.16132	84	53.74587
85	46.27415	86	37.49551	87	28.74060	88	20.00000
89	80.00000	90	72.31885	91	64.61932	92	62.57394
93	60.60245	94	56.80908	95	50.24557	96	43.36037
97	35.61265	98	27.81838	99	20.00000	100	80.00000
101	71.47813	102	62.92452	103	60.54233	104	58.23476
105	54.05113	106	47.24497	107	40.83303	108	34.01954
109	27.04783	110	20.00000	111	80.00000	112	71.02550
113	61.97714	114	59.42828	115	57.05913	116	52.87737
117	46.17649	118	39.90426	119	33.42562	120	26.75865
121	20.00000						

NODEWISE TEMPERATURES (25,000 年後)							
1	80.00000	2	75.39638	3	71.05454	4	69.63774
5	68.30794	6	65.58777	7	58.99619	8	50.08853
9	39.82691	10	29.85495	11	20.00000	12	80.00000
13	75.38080	14	70.97100	15	69.58457	16	68.27031
17	65.56483	18	58.96842	19	50.04189	20	38.81765
21	29.85120	22	20.00000	23	80.00000	24	75.33060
25	70.78748	26	69.44938	27	68.15087	28	65.47254
29	58.91593	30	49.99016	31	39.79195	32	29.84011
33	20.00000	34	80.00000	35	75.18829	36	70.45209
37	69.11860	38	67.81409	39	65.15394	40	58.70787
41	49.79375	42	39.69318	43	29.79647	44	20.00000
45	80.00000	46	74.91241	47	69.87543	48	68.50074
49	67.16080	50	64.45543	51	58.16392	52	49.35929
53	39.44670	54	29.88285	55	20.00000	56	80.00000
57	74.56877	58	69.19700	59	67.74774	60	66.34890
61	63.54927	62	57.37801	63	48.84568	64	38.11364
65	29.52243	66	20.00000	67	80.00000	68	73.99415
69	67.99342	70	64.41796	71	64.91130	72	61.95061
73	55.74072	74	47.67488	75	38.37646	76	29.16655
77	20.00000	78	80.00000	79	73.39113	80	66.76788
81	65.02739	82	63.38275	83	60.16132	84	53.74587
85	46.27415	86	37.49551	87	28.74060	88	20.00000
89	80.00000	90	72.31885	91	64.61932	92	62.57394
93	60.60245	94	56.80908	95	50.24557	96	43.36037
97	35.61265	98	27.81838	99	20.00000	100	80.00000
101	71.47813	102	62.92452	103	60.54233	104	58.23476
105	54.05113	106	47.24497	107	40.83303	108	34.01954
109	27.04783	110	20.00000	111	80.00000	112	71.02550
113	61.97714	114	59.42828	115	57.05913	116	52.87737
117	46.17649	118	39.90426	119	33.42562	120	26.75865
121	20.00000						

図 4. 6 500 年後と 25,000 年後の温度解析結果の比較 (RST2D コード解析結果)

## NODEWISE pH (500年後)

1	0.5251D+01	2	0.5330D+01	3	0.5568D+01	4	0.5591D+01
5	0.5612D+01	6	0.5658D+01	7	0.5770D+01	8	0.5927D+01
9	0.5328D+01	10	0.5372D+01	11	0.5418D+01	12	0.5424D+01
13	0.5497D+01	14	0.5569D+01	15	0.5591D+01	16	0.5613D+01
17	0.5658D+01	18	0.5770D+01	19	0.5828D+01	20	0.5828D+01
21	0.5372D+01	22	0.5418D+01	23	0.5424D+01	24	0.5498D+01
25	0.5572D+01	26	0.5594D+01	27	0.5615D+01	28	0.5660D+01
29	0.5771D+01	30	0.5829D+01	31	0.5832D+01	32	0.5872D+01
33	0.5418D+01	34	0.5424D+01	35	0.5500D+01	36	0.5577D+01
37	0.5599D+01	38	0.5621D+01	39	0.5665D+01	40	0.5775D+01
41	0.5833D+01	42	0.5828D+01	43	0.5872D+01	44	0.5848D+01
45	0.5424D+01	46	0.5505D+01	47	0.5587D+01	48	0.5609D+01
49	0.5681D+01	50	0.5677D+01	51	0.5784D+01	52	0.5941D+01
53	0.5330D+01	54	0.5373D+01	55	0.5418D+01	56	0.5424D+01
57	0.5510D+01	58	0.5598D+01	59	0.5622D+01	60	0.5645D+01
61	0.5692D+01	62	0.5793D+01	63	0.5950D+01	64	0.5931D+01
65	0.5373D+01	66	0.5418D+01	67	0.5424D+01	68	0.5519D+01
69	0.5818D+01	70	0.5844D+01	71	0.5669D+01	72	0.5719D+01
73	0.5827D+01	74	0.5971D+01	75	0.5333D+01	76	0.5375D+01
77	0.5418D+01	78	0.5424D+01	79	0.5529D+01	80	0.5638D+01
81	0.5687D+01	82	0.5695D+01	83	0.5750D+01	84	0.5862D+01
85	0.5897D+01	86	0.5833D+01	87	0.5377D+01	88	0.5418D+01
89	0.5424D+01	90	0.5547D+01	91	0.5674D+01	92	0.5709D+01
93	0.5742D+01	94	0.5806D+01	95	0.5925D+01	96	0.8051D+01
97	0.5347D+01	98	0.5381D+01	99	0.5418D+01	100	0.5424D+01
101	0.5560D+01	102	0.5703D+01	103	0.5743D+01	104	0.5783D+01
105	0.5657D+01	106	0.5679D+01	107	0.6098D+01	108	0.5353D+01
109	0.5385D+01	110	0.5418D+01	111	0.5424D+01	112	0.5568D+01
113	0.5719D+01	114	0.5762D+01	115	0.5804D+01	116	0.5877D+01
117	0.5899D+01	118	0.6116D+01	119	0.5356D+01	120	0.5386D+01
121	0.5418D+01						

## NODEWISE pH (25,000年後)

1	0.5212D+01	2	0.5447D+01	3	0.5556D+01	4	0.5584D+01
5	0.5581D+01	6	0.5598D+01	7	0.5631D+01	8	0.5677D+01
9	0.5094D+01	10	0.5485D+01	11	0.5418D+01	12	0.5414D+01
13	0.5485D+01	14	0.5558D+01	15	0.5591D+01	16	0.5586D+01
17	0.5606D+01	18	0.5638D+01	19	0.5679D+01	20	0.5142D+01
21	0.5430D+01	22	0.5418D+01	23	0.5424D+01	24	0.5498D+01
25	0.5572D+01	26	0.5594D+01	27	0.5803D+01	28	0.5618D+01
29	0.5643D+01	30	0.5680D+01	31	0.5115D+01	32	0.5462D+01
33	0.5418D+01	34	0.5424D+01	35	0.5500D+01	36	0.5577D+01
37	0.5599D+01	38	0.5621D+01	39	0.5638D+01	40	0.5664D+01
41	0.5869D+01	42	0.5128D+01	43	0.5437D+01	44	0.5418D+01
45	0.5423D+01	46	0.5605D+01	47	0.5587D+01	48	0.5699D+01
49	0.5832D+01	50	0.5677D+01	51	0.5691D+01	52	0.5699D+01
53	0.5164D+01	54	0.5420D+01	55	0.5418D+01	56	0.5424D+01
57	0.5510D+01	58	0.5522D+01	59	0.5622D+01	60	0.5645D+01
61	0.5692D+01	62	0.5707D+01	63	0.5711D+01	64	0.5175D+01
65	0.5419D+01	66	0.5418D+01	67	0.5424D+01	68	0.5519D+01
69	0.5618D+01	70	0.5644D+01	71	0.5669D+01	72	0.5719D+01
73	0.5726D+01	74	0.5732D+01	75	0.5228D+01	76	0.5395D+01
77	0.5418D+01	78	0.5424D+01	79	0.5528D+01	80	0.5638D+01
81	0.5667D+01	82	0.5695D+01	83	0.5750D+01	84	0.5739D+01
85	0.5717D+01	86	0.5283D+01	87	0.5383D+01	88	0.5418D+01
89	0.5424D+01	90	0.5547D+01	91	0.5674D+01	92	0.5709D+01
93	0.5742D+01	94	0.5809D+01	95	0.5913D+01	96	0.5871D+01
97	0.5359D+01	98	0.5372D+01	99	0.5418D+01	100	0.5424D+01
101	0.5561D+01	102	0.5703D+01	103	0.5743D+01	104	0.5783D+01
105	0.5857D+01	106	0.5879D+01	107	0.5934D+01	108	0.5393D+01
109	0.5388D+01	110	0.5418D+01	111	0.5423D+01	112	0.5568D+01
113	0.5719D+01	114	0.5763D+01	115	0.5804D+01	116	0.5878D+01
117	0.5899D+01	118	0.5855D+01	119	0.5296D+01	120	0.5395D+01
121	0.5418D+01						

図4.7 500年後と25,000年後のpH解析結果の比較（RST2Dコード解析結果）

NODEWISE SOLUTE CONCENTRATIONS (moles/liter): H<sub>2</sub>O (500年後)

1	0.2005D+03	2	0.2002D+03	3	0.1157D+03	4	0.1155D+03
5	0.1155D+03	6	0.1155D+03	7	0.1155D+03	8	0.1155D+03
9	0.1301D+03	10	0.1301D+03	11	0.1301D+03	12	0.1518D+03
13	0.1518D+03	14	0.155D+03	15	0.1155D+03	16	0.1155D+03
17	0.1155D+03	18	0.1155D+03	19	0.1155D+03	20	0.1301D+03
21	0.1301D+03	22	0.1301D+03	23	0.1518D+03	24	0.1518D+03
25	0.1155D+03	26	0.1155D+03	27	0.1155D+03	28	0.1155D+03
29	0.1155D+03	30	0.1155D+03	31	0.1301D+03	32	0.1301D+03
33	0.1301D+03	34	0.1301D+03	35	0.1518D+03	36	0.1155D+03
37	0.1518D+03	38	0.1155D+03	39	0.1155D+03	40	0.1155D+03
41	0.1155D+03	42	0.1293D+03	43	0.1303D+03	44	0.1301D+03
45	0.1520D+03	46	0.1515D+03	47	0.1155D+03	48	0.1155D+03
53	0.1175D+03	54	0.1168D+03	55	0.1163D+03	56	0.1162D+03
59	0.1290D+03	60	0.1304D+03	61	0.1301D+03	62	0.1562D+03
63	0.1555D+03	64	0.1178D+03	65	0.1164D+03	66	0.1162D+03
67	0.1161D+03	68	0.1161D+03	69	0.1161D+03	70	0.1294D+03
71	0.1301D+03	72	0.1301D+03	73	0.1523D+03	74	0.1520D+03
75	0.1163D+03	76	0.1158D+03	77	0.1157D+03	78	0.1157D+03
79	0.1158D+03	80	0.1161D+03	81	0.1292D+03	82	0.1303D+03
83	0.1301D+03	84	0.1517D+03	85	0.1513D+03	86	0.1157D+03
87	0.1156D+03	88	0.1156D+03	89	0.1156D+03	90	0.1156D+03
91	0.1159D+03	92	0.1293D+03	93	0.1303D+03	94	0.1301D+03
95	0.1155D+03	96	0.1155D+03	97	0.1155D+03	98	0.1155D+03
99	0.1301D+03	100	0.1301D+03	101	0.1518D+03	102	0.1518D+03
105	0.1155D+03	106	0.1155D+03	107	0.1155D+03	108	0.1302D+03
109	0.1301D+03	110	0.1301D+03	111	0.1524D+03	112	0.1502D+03
113	0.1156D+03	114	0.1156D+03	115	0.1156D+03	116	0.1156D+03
117	0.1155D+03	118	0.1160D+03	119	0.1300D+03	120	0.1301D+03
121	0.1301D+03						

図4.8 500年後と25,000年後のH<sub>2</sub>O濃度解析結果の比較（RST2Dコード解析結果）

(単位: moles/liter)

H2O	100.0000000000000D+00
OH-	32.0000000000000D+00
Na+	1.00000000000000D+00
K+	5.00000000000000D+00
Ca++	2.00000000000000D+00
Mg++	0.50000000000000D+00
UO2++	0.00010000000000D+00
Al1++	6.00000000000000D+00
Fe+++	3.00000000000000D+00
Cl-	5.00000000000000D+00
CO3--	0.00010000000000D+00
SO4--	0.50000000000000D+00
SiO2(0)	119.7000000000000D+00
CH4(0)	0.10000000000000D-10
NaCl(s)	0.00000000000000D+00
NaAlSi308(s)	0.00000000000000D+00
KCl(s)	0.00000000000000D+00
KAlSi308(s)	0.00000000000000D+00
KA12(AlSi3010)(OH)2(s)	0.00000000000000D+00
CaCO3(s)	0.00000000000000D+00
CaMg(CO3)2(s)	0.00000000000000D+00
CaSO4(s)	0.00000000000000D+00
CaAl2Si208(s)	0.00000000000000D+00
MgCO3(s)	0.00000000000000D+00
Mg2Al4Si5O18(s)	0.00000000000000D+00
Mg5Al(AlSi3010)(OH)8(s)	0.00000000000000D+00
UO2(s)	0.00000000000000D+00
UO2CO3(s)	0.00000000000000D+00
A12Si205(OH)4(s)	0.00000000000000D+00
Fe203(s)	0.00000000000000D+00
Fe304(s)	0.00000000000000D+00
FeCO3(s)	0.00000000000000D+00
FeS2(s)	0.00000000000000D+00
SiO2(s)	0.00000000000000D+00
C(s)	0.00000000000000D+00

図 4. 9 各構成物質の初期濃度 (H E T E Q L コード入力データ)

SPECIES	CONCENTRATION: moles/l	moles/l b.p.m.
H2O	0.11547992D+03	0.28868890D+02
OH-	0.47617551D-07	0.11903938D-07
Na+	0.51181261D+00	0.12794832D+00
K+	0.22892913D-01	0.57230121D-02
Ca++	0.79579265D+00	0.19884065D+00
Mg++	0.28894489D+00	0.72223495D-01
UO2++	0.16784396D-04	0.41959405D-05
Al1++	0.68764729D-11	0.17196583D-11
Fe+++	0.18839863D-15	0.47097878D-16
Cl-	0.30614183D+01	0.76532568D+00
CO3-	0.65698769D-09	0.17174051D-09
SO4--	0.31713911D-03	0.79281783D-04
SiO2(0)	0.48609222D-03	0.12166846D-03
CH4(0)	0.11577880D-82	0.28943608D-83
H+	0.34815965D-05	0.87031700D-06
O2(0)	0.47720283D-24	0.11998620D-24
HC1(0)	0.28501978D-09	0.55752727D-06
CO2(0)	0.60570880D-09	0.15142148D-04
HC3(0)	0.64918271D-09	0.16228955D-05
HSO4-	0.12070587D-09	0.30175528D-07
HS-	0.72509143D-76	0.18126501D-76
H2SC(0)	0.13090048D-74	0.32723884D-75
HS103-	0.58323752D-07	0.14589387D-07
HFeO2-	0.38942463D-25	0.97352456D-28
NaOH(0)	0.32485527D-07	0.81210752D-08
NaCl(0)	0.48818175D+00	0.12204083D+00
NaHCO3(0)	0.48016942D-05	0.12004382D-05
NaHSi103(0)	0.80873590D-09	0.20217834D-06
KOH(0)	0.76555374D-09	0.19183121D-09
KC1(0)	0.21043386D-02	0.52606478D-03
KSO4-	0.16638877D-04	0.41595122D-05
KHSO4(0)	0.14925181D-09	0.37311418D-10
CaCl+	0.15882380D+00	0.38829472D-01
CaC12(0)	0.54520057D+00	0.13822950D+00
CaCO3(0)	0.13998849D-06	0.34998301D-07
CaHCO3+	0.17816550D-04	0.44547192D-05
CaSO4(0)	0.20484511D-02	0.51209344D-03
MgOH+	0.81268008D-09	0.20316235D-06
MgO(0)	0.18911630D-11	0.47272290D-12
MgCl+	0.19845657D+00	0.49613018D-01
MgCO3(0)	0.14801306D-07	0.37001868D-08
MgHCO3+	0.70111087D-05	0.17527110D-05
U1++	0.24023027D-45	0.60355299D-46
U1++	0.25786584D-30	0.64464027D-31
UC11++	0.23488760D-29	0.58719657D-30
UC12++	0.67814070D-09	0.16827866D-26
UHC031++	0.592676568D-32	0.148116355D-32
UHC032++	0.36305583D-31	0.90781149D-32
UQ2+	0.71514388D-13	0.17877922D-13
UQ2C1(0)	0.46649900D-10	0.11662035D-10
UQ2C12-	0.26236228D-10	0.65558089D-11
UQ2HCO3(0)	0.79228837D-15	0.18806411D-15
UQ2HCO32-	0.80117820D-21	0.20228699D-21
UQ2C1+	0.49181542D-04	0.12233393D-04
UQ2C12(0)	0.29751803D-09	0.74376599D-05
UQ2C03(0)	0.30908387D-05	0.77268049D-06
UQ2HCO3+	0.58142030D-07	0.14534955D-07
UQ2(HCO3)2(0)	0.12146015D-09	0.30363839D-10
UQ2S04(0)	0.11789609D-05	0.28477909D-06
UQ2HSO4+	0.23881981D-09	0.56702723D-10
AlOH++	0.19201735D-10	0.48002524D-11
AlCL++	0.19461174D-10	0.38651477D-11
AlCL2+	0.40197542D-10	0.10049006D-10
FeCl++	0.54017301D-15	0.13853815D-15
Fe++	0.42304553D-11	0.10575735D-11
FeOH+	0.56764932D-16	0.14190710D-16
FeO(0)	0.30347872D-19	0.75586815D-20
FeCl+	0.27482746D-11	0.68734271D-12
FeCl2(0)	0.62730307D-13	0.15682055D-13
FeHCO3+	0.48093086D-16	0.12007262D-16

図 4. 10 濃度分布解析結果 (H E T E Q L コード解析結果)

## 付録

### 付録1 R S T 2 D コードサンプル解析入力データ

Unconformity-type Uranium Deposits  
Jeff P. Raffensperger, 12/17/95  
121 200 11 11 4  
100 200 300 400 500 500 1  
10 5 6 30 60 90 120  
0 2 2 3 2 0  
0.500D+04 0.100D-03  
0.010D+00 500  
0.000D+00 500.00 500 1.000 1.000  
1111111111111110  
1000 0.10D-09 0.10D-05  
1.00000 1.00000  
1 0.00000 0.00000 331  
2 0.00000 600.00000 322  
3 0.00000 1200.00000 322  
4 0.00000 1400.00000 322  
5 0.00000 1600.00000 322  
6 0.00000 2000.00000 322  
7 0.00000 2800.00000 322  
8 0.00000 3600.00000 322  
9 0.00000 4400.00000 322  
10 0.00000 5200.00000 322  
11 0.00000 6000.00000 311  
12 200.00000 0.00000 331  
13 200.00000 600.00000 000  
14 200.00000 1200.00000 000  
15 200.00000 1400.00000 000  
16 200.00000 1600.00000 000  
17 200.00000 2000.00000 000  
18 200.00000 2800.00000 000  
19 200.00000 3600.00000 000  
20 200.00000 4400.00000 000  
21 200.00000 5200.00000 000  
22 200.00000 6000.00000 211  
23 400.00000 0.00000 331  
24 400.00000 600.00000 000  
25 400.00000 1200.00000 000  
26 400.00000 1400.00000 000  
27 400.00000 1600.00000 000  
28 400.00000 2000.00000 000  
29 400.00000 2800.00000 000  
30 400.00000 3600.00000 000  
31 400.00000 4400.00000 000  
32 400.00000 5200.00000 000  
33 400.00000 6000.00000 211  
34 800.00000 0.00000 331  
35 800.00000 600.00000 000  
36 800.00000 1200.00000 000  
37 800.00000 1400.00000 000  
38 800.00000 1600.00000 000  
39 800.00000 2000.00000 000  
40 800.00000 2800.00000 000  
41 800.00000 3600.00000 000  
42 800.00000 4400.00000 000  
43 800.00000 5200.00000 000  
44 800.00000 6000.00000 211  
45 1400.00000 0.00000 331  
46 1400.00000 600.00000 000  
47 1400.00000 1200.00000 000  
48 1400.00000 1400.00000 000  
49 1400.00000 1600.00000 000  
50 1400.00000 2000.00000 000  
51 1400.00000 2800.00000 000  
52 1400.00000 3600.00000 000  
53 1400.00000 4400.00000 000  
54 1400.00000 5200.00000 000  
55 1400.00000 6000.00000 211  
56 2000.00000 0.00000 331  
57 2000.00000 600.00000 000  
58 2000.00000 1200.00000 000  
59 2000.00000 1400.00000 000  
60 2000.00000 1600.00000 000  
61 2000.00000 2000.00000 000  
62 2000.00000 2800.00000 000  
63 2000.00000 3600.00000 000  
64 2000.00000 4400.00000 000  
65 2000.00000 5200.00000 000

66	2000. 00000	6000. 00000	211
67	3000. 00000	0. 00000	331
68	3000. 00000	600. 00000	000
69	3000. 00000	1200. 00000	000
70	3000. 00000	1400. 00000	000
71	3000. 00000	1600. 00000	000
72	3000. 00000	2000. 00000	000
73	3000. 00000	2800. 00000	000
74	3000. 00000	3600. 00000	000
75	3000. 00000	4400. 00000	000
76	3000. 00000	5200. 00000	000
77	3000. 00000	6000. 00000	211
78	4000. 00000	0. 00000	331
79	4000. 00000	600. 00000	000
80	4000. 00000	1200. 00000	000
81	4000. 00000	1400. 00000	000
82	4000. 00000	1600. 00000	000
83	4000. 00000	2000. 00000	000
84	4000. 00000	2800. 00000	000
85	4000. 00000	3600. 00000	000
86	4000. 00000	4400. 00000	000
87	4000. 00000	5200. 00000	000
88	4000. 00000	6000. 00000	211
89	6000. 00000	0. 00000	331
90	6000. 00000	600. 00000	000
91	6000. 00000	1200. 00000	000
92	6000. 00000	1400. 00000	000
93	6000. 00000	1600. 00000	000
94	6000. 00000	2000. 00000	000
95	6000. 00000	2800. 00000	000
96	6000. 00000	3600. 00000	000
97	6000. 00000	4400. 00000	000
98	6000. 00000	5200. 00000	000
99	6000. 00000	6000. 00000	211
100	8000. 00000	0. 00000	331
101	8000. 00000	600. 00000	000
102	8000. 00000	1200. 00000	000
103	8000. 00000	1400. 00000	000
104	8000. 00000	1600. 00000	000
105	8000. 00000	2000. 00000	000
106	8000. 00000	2800. 00000	000
107	8000. 00000	3600. 00000	000
108	8000. 00000	4400. 00000	000
109	8000. 00000	5200. 00000	000
110	8000. 00000	6000. 00000	211
111	10000. 00000	0. 00000	331
112	10000. 00000	600. 00000	322
113	10000. 00000	1200. 00000	322
114	10000. 00000	1400. 00000	322
115	10000. 00000	1600. 00000	322
116	10000. 00000	2000. 00000	322
117	10000. 00000	2800. 00000	322
118	10000. 00000	3600. 00000	322
119	10000. 00000	4400. 00000	322
120	10000. 00000	5200. 00000	322
121	10000. 00000	6000. 00000	311
1	0. 00000	0. 800D+02	
2	0. 00000	0. 000D+00	
3	0. 00000	0. 000D+00	
4	0. 00000	0. 000D+00	
5	0. 00000	0. 000D+00	
6	0. 00000	0. 000D+00	
7	0. 00000	0. 000D+00	
8	0. 00000	0. 000D+00	
9	0. 00000	0. 000D+00	
10	0. 00000	0. 000D+00	
11	0. 00000	0. 200D+02	
12	0. 00000	0. 800D+02	
13	0. 00000	0. 000D+00	
14	0. 00000	0. 000D+00	
15	0. 00000	0. 000D+00	
16	0. 00000	0. 000D+00	
17	0. 00000	0. 000D+00	
18	0. 00000	0. 000D+00	
19	0. 00000	0. 000D+00	
20	0. 00000	0. 000D+00	
21	0. 00000	0. 000D+00	
22	0. 00000	0. 200D+02	
23	0. 00000	0. 800D+02	
24	0. 00000	0. 000D+00	
25	0. 00000	0. 000D+00	
26	0. 00000	0. 000D+00	

27	0. 00000	0. 000D+00
28	0. 00000	0. 000D+00
29	0. 00000	0. 000D+00
30	0. 00000	0. 000D+00
31	0. 00000	0. 000D+00
32	0. 00000	0. 000D+00
33	0. 00000	0. 200D+02
34	0. 00000	0. 800D+02
35	0. 00000	0. 000D+00
36	0. 00000	0. 000D+00
37	0. 00000	0. 000D+00
38	0. 00000	0. 000D+00
39	0. 00000	0. 000D+00
40	0. 00000	0. 000D+00
41	0. 00000	0. 000D+00
42	0. 00000	0. 000D+00
43	0. 00000	0. 000D+00
44	0. 00000	0. 200D+02
45	0. 00000	0. 800D+02
46	0. 00000	0. 000D+00
47	0. 00000	0. 000D+00
48	0. 00000	0. 000D+00
49	0. 00000	0. 000D+00
50	0. 00000	0. 000D+00
51	0. 00000	0. 000D+00
52	0. 00000	0. 000D+00
53	0. 00000	0. 000D+00
54	0. 00000	0. 000D+00
55	0. 00000	0. 200D+02
56	0. 00000	0. 800D+02
57	0. 00000	0. 000D+00
58	0. 00000	0. 000D+00
59	0. 00000	0. 000D+00
60	0. 00000	0. 000D+00
61	0. 00000	0. 000D+00
62	0. 00000	0. 000D+00
63	0. 00000	0. 000D+00
64	0. 00000	0. 000D+00
65	0. 00000	0. 000D+00
66	0. 00000	0. 200D+02
67	0. 00000	0. 800D+02
68	0. 00000	0. 000D+00
69	0. 00000	0. 000D+00
70	0. 00000	0. 000D+00
71	0. 00000	0. 000D+00
72	0. 00000	0. 000D+00
73	0. 00000	0. 000D+00
74	0. 00000	0. 000D+00
75	0. 00000	0. 000D+00
76	0. 00000	0. 000D+00
77	0. 00000	0. 200D+02
78	0. 00000	0. 800D+02
79	0. 00000	0. 000D+00
80	0. 00000	0. 000D+00
81	0. 00000	0. 000D+00
82	0. 00000	0. 000D+00
83	0. 00000	0. 000D+00
84	0. 00000	0. 000D+00
85	0. 00000	0. 000D+00
86	0. 00000	0. 000D+00
87	0. 00000	0. 000D+00
88	0. 00000	0. 200D+02
89	0. 00000	0. 800D+02
90	0. 00000	0. 000D+00
91	0. 00000	0. 000D+00
92	0. 00000	0. 000D+00
93	0. 00000	0. 000D+00
94	0. 00000	0. 000D+00
95	0. 00000	0. 000D+00
96	0. 00000	0. 000D+00
97	0. 00000	0. 000D+00
98	0. 00000	0. 000D+00
99	0. 00000	0. 200D+02
100	0. 00000	0. 800D+02
101	0. 00000	0. 000D+00
102	0. 00000	0. 000D+00
103	0. 00000	0. 000D+00
104	0. 00000	0. 000D+00
105	0. 00000	0. 000D+00
106	0. 00000	0. 000D+00
107	0. 00000	0. 000D+00
108	0. 00000	0. 000D+00

109	0. 00000	0. 000D+00					
110	0. 00000	0. 200D+02					
111	0. 00000	0. 800D+02					
112	0. 00000	0. 000D+00					
113	0. 00000	0. 000D+00					
114	0. 00000	0. 000D+00					
115	0. 00000	0. 000D+00					
116	0. 00000	0. 000D+00					
117	0. 00000	0. 000D+00					
118	0. 00000	0. 000D+00					
119	0. 00000	0. 000D+00					
120	0. 00000	0. 000D+00					
121	0. 00000	0. 200D+02					
2000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
1000000004							
4							
Basement							
H2O	100. 00000000000000D+00						
OH-	127. 20000000000000D+00						
Na+	0. 10000000000000D+00						
K+	14. 00000000000000D+00						
Ca++	1. 20000000000000D+00						
Mg++	1. 00000000000000D+00						
UO2++	0. 00001000000000D+00						
Al+++	37. 20000000000000D+00						
Fe+++	0. 20000000000000D+00						
C1-	2. 70000000000000D+00						
CO3--	0. 00001000000000D+00						
SO4--	0. 40000000000000D+00						
SiO2(O)	133. 40000000000000D+00						
CH4(O)	0. 05000000000000D+00						
Graphite							
H2O	100. 00000000000000D+00						
OH-	72. 00000000000000D+00						
Na+	1. 00000000000000D+00						
K+	15. 00000000000000D+00						
Ca++	0. 10000000000000D+00						
Mg++	1. 00000000000000D+00						
UO2++	0. 00001000000000D+00						
Al+++	45. 00000000000000D+00						
Fe+++	0. 20000000000000D+00						
C1-	3. 00000000000000D+00						
CO3--	39. 00001000000000D+00						
SO4--	0. 40000000000000D+00						
SiO2(O)	108. 90000000000000D+00						
CH4(O)	40. 00000000000000D+00						
Sandstone							
H2O	100. 00000000000000D+00						
OH-	32. 00000000000000D+00						
Na+	1. 00000000000000D+00						
K+	5. 00000000000000D+00						
Ca++	2. 00000000000000D+00						
Mg++	0. 50000000000000D+00						
UO2++	0. 00010000000000D+00						
Al+++	6. 00000000000000D+00						
Fe+++	3. 00000000000000D+00						
C1-	5. 00000000000000D+00						
CO3--	0. 00010000000000D+00						
SO4--	0. 50000000000000D+00						
SiO2(O)	119. 70000000000000D+00						
CH4(O)	0. 10000000000000D-10						
Confining Unit							
H2O	100. 00000000000000D+00						
OH-	180. 00000000000000D+00						
Na+	0. 10000000000000D+00						
K+	0. 10000000000000D+00						
Ca++	135. 65000000000000D+00						
Mg++	2. 00000000000000D+00						
UO2++	0. 00001000000000D+00						
Al+++	80. 02000000000000D+00						
Fe+++	0. 20000000000000D+00						
C1-	0. 10000000000000D+00						
CO3--	137. 50000000000000D+00						

```

Fe+++
Cl-
CO3--
SO4--
SiO2(O)
CH4(D)
Confining Unit
H2O
OH-
Na+
K+
Ca++
Mg++
CO2+
Al+++
Fe+++
Cl-
CO3--
SO4--
SiO2(O)
CH4(D)
    3.00000000000000D+00
    5.00000000000000D+00
    0.00010000000000D+00
    0.50000000000000D+00
    119.7000000000000D+00
    0.10000000000000D-10
    100.0000000000000D+00
    180.0000000000000D+00
    0.10000000000000D+00
    0.10000000000000D+00
    135.6500000000000D+00
    2.00000000000000D+00
    0.00010000000000D+00
    60.0200000000000D+00
    0.20000000000000D+00
    0.10000000000000D+00
    137.5000000000000D+00
    0.53001000000000D+00
    102.0000000000000D+00
    0.10000000000000D-20

```

## 付録2 H E T E Q L コードサンプル解析入力データ

```

1000 1.00D-10 1.00D-06
80.0000
H2O      100.0000000000000D+00
OH-      32.0000000000000D+00
Na+      1.00000000000000D+00
K+      5.00000000000000D+00
Ca++     2.00000000000000D+00
Mg++     0.50000000000000D+00
Mg+i     0.00010000000000D+00
UO2++    0.00010000000000D+00
Al+++   6.00000000000000D+00
Fe+++   3.00000000000000D+00
Cl-      5.00000000000000D+00
CO3--   0.00010000000000D+00
SO4--   0.50000000000000D+00
SiO2(O)  119.7000000000000D+00
CH4(D)  0.10000000000000D-10
NaCl(s)  0.00000000000000D+00
NaAlSi3O8(s) 0.00000000000000D+00
KCl(s)   0.00000000000000D+00
KA15Si3O8(s) 0.00000000000000D+00
KA12<(Al1Si3O10)(OH)2>(s) 0.00000000000000D+00
CaCO3(s) 0.00000000000000D+00
CaMg(CO3)2(s) 0.00000000000000D+00
CaSO4(s) 0.00000000000000D+00
CaAl12Si2O8(s) 0.00000000000000D+00
MgCO3(s) 0.00000000000000D+00
Mg2Al14Si15O18(s) 0.00000000000000D+00
Mg5Al1(A1Si3O10)(OH)8(s) 0.00000000000000D+00
UO2(s)   0.00000000000000D+00
UO2CO3(s) 0.00000000000000D+00
Al12Si2O5(OH)4(s) 0.00000000000000D+00
Fe2O3(s) 0.00000000000000D+00
Fe3O4(s) 0.00000000000000D+00
FeCO3(s) 0.00000000000000D+00
FeS2(s)  0.00000000000000D+00
SiO2(s)  0.00000000000000D+00
C(s)    0.00000000000000D+00

```