

非線形連成現象に関するシナリオ不確実性シミュレーション手法の開発

久米田正邦* 加藤和之* 青山裕司** 高瀬博康**

地層処分システムの安全評価は、我々の経験や歴史をはるかに超えた時間スケールに対する安全性を検討するとともに、天然の地層が有する不均質な空間領域を取り扱うという特徴がある。近年の国際的な経験の蓄積により、地層処分に対する知識や長期的な将来予測に対する信頼性は著しく向上しているものの、現状は必ずしも知見が十分ではなく、システムの将来予測には、シナリオ、モデルおよびデータに不確実性が内在する。安全評価の観点からは、これらの不確実性を考慮しても十分な安全裕度が確保されていることを示すことが重要であり、そのためには、現実的に予想されるシナリオや考慮すべき不確実性を含んだシナリオを明らかにする必要がある。また、安全性が担保される範囲内で合理的な設計を行うためには、好ましいシナリオに至るパラメータの範囲を明らかにし、シナリオ分岐に影響を与える因子を把握することが重要となる。

本研究では、ニアフィールド過渡期に生じ得る現象を効率的に解析する手法として、複数の解析手法（セルラーオートマタ、大規模数値解析およびニューラルネットワーク）を組み合わせた複合解析システムを検討した。これらを例題演習に適用し、セルラーオートマタにより生じ得る複数のシナリオを抽出し、大規模数値解析により代表的なケースでの詳細な解析を実施、さらには詳細解析の結果をもとにニューラルネットワークを用いた包括的な感度解析を行った。これにより、システム全体挙動を効率的に評価でき、シナリオ分岐に関する情報が得られる可能性が確認できた。これらは人工バリア仕様の合理的かつロバストな設計への寄与が期待される。

Keywords: 地層処分, ニアフィールド, 連成現象, セルラーオートマタ, 並列解析, ニューラルネットワーク

Characteristics of safety assessment for geological disposal of radioactive waste are as follows.

- Considering long-term safety that far exceeds our experience and history
- Treating spatial heterogeneity of natural strata.

International experiences accumulated until recently have significantly improved our knowledge and confidence. However, our knowledge is not necessarily complete in the present, prediction of phenomena in disposal system inheres uncertainties associated with scenarios, models, and parameters. From the view point of safety assessment, it is important that the disposal system has enough safety, even though considering above uncertainties. Therefore it is necessary to identify the realistic scenario and the scenarios including uncertainties that should be considered. On the other hand, for rational design, it is essential to identify the range of parameters that conducts favorable scenario and factors that have influence on bifurcation of scenarios.

This paper presents a hybrid simulation system that consists of cellular automata, large-scale numerical analysis, and neural networks to simulate evolution of the near field after closure of the repository efficiently. This system was applied to a test case. As a result, several qualitatively different scenarios were identified by cellular automata, and for a number of representative cases were solved by large-scale numerical analysis using PC clusters. In addition, a comprehensive parametric study using neural networks, which “learned” mappings obtained by accurate numerical simulations. Therefore, it is possible that near-field performance is confirmed efficiently, and information about bifurcation of scenarios is presented. This hybrid simulation system could be applied to define the specifications for engineered barrier system rationally and robustly.

Keywords: geological disposal system, near field, coupling phenomenon, cellular automata, parallel analysis, neural networks

1 はじめに

地層処分システムの安全評価は、我々の経験や歴史をはるかに超えた時間スケールに対する安全性を検討するとともに、天然の地層が有する不均質な空間領域を取り扱うという特徴がある。このような長期的な安全評価の方法として、以下に示す方法論が、国際的な研究開発の結果に基づいて一般的に認められている[1]。

- まず、地層処分システムの場の特徴や特質と安全性に影響を及ぼすと考えられる種々の事象およびプロセスを考慮して、システムの将来の挙動に関するシナリオを描く
- 次に、シナリオにしたがってシステムの長期的な現象を表現するため、物理・化学的な法則に基づいた数学モデルの開発と必要なデータ整備を行う

- 最後に、モデルとデータを用いた影響解析を行ってシステムの性能を推定した後、これを安全規制のために定められた指針や基準と比較してシステムの安全性を判断する

近年の国際的な経験の蓄積により、地層処分に対する知識や長期的な将来予測に対する信頼性は著しく向上しているものの、上述した安全評価の特徴により、システムの将来予測にはシナリオ、モデルおよびデータに不確実性が内在する。現状の安全評価では、建設・操業あるいは廃棄体の発熱等による擾乱の後、処分場閉鎖後のニアフィールドにおいては、緩衝材の飽和、未変質等の状態が成立するものと仮定されている。これらの仮定は適切な処分場の選定や設計により成立すると考えられるものの、その妥当性は長期の原位置試験や数値解析等によって十分な確認までは至っておらず、今後の地下研究施設等における研究開発によって立証すべき安全確保上の論点を明確化することが重要となっていく。また、システムの安全性の判断や安全性が担保される範囲内で合理的な設計を行うためには、シナリオ分岐に影響を与える因子やその範囲を把握することが重要であり、このためには多くのシミュレーションを実施することが不可避となることから、効率的な解析手法の開

Development of Bifurcation Analysis Methods for Nonlinear Coupled Processes by Masakuni Kumeda (kumeda.masakuni@tepcoco.jp), Kazuyuki Kato, Yuji Aoyama, Hiroyasu Takase

* 東京電力(株) 技術開発研究所 R&D Center, Tokyo Electric Power Company
〒230-8510 神奈川県横浜市鶴見区江ヶ崎 4-1

** (株)クインテッサジャパン Quintessa Japan
〒220-6007 神奈川県横浜市西区みなとみらい 2-3-1

発が期待されている。

本報では、ニアフィールド過渡期に生じ得る現象を効率的に解析し、シナリオ分岐に関する情報を把握する手法として、複数の解析手法（セルラーオートマタ、大規模数値解析およびニューラルネットワーク）を組み合わせた複合解析システム[2,3,4]の例題への適用例を報告する。

2 複合解析システム

2.1 複合解析システムの構成

ニアフィールド過渡期における現象を解析によって求める場合、現象のプロセスを微分代数方程式として数学的にモデル化し数値的に解き、不確実性を有するパラメータに関して感度解析を行うことが一般的な方法として用いられている。しかし、パラメータに不確実性が存在する中、競合プロセスが複数存在する場合、支配的となるプロセスの影響によって複数の定性的に異なる挙動（以下「シナリオ」）が生じ得ると考えられ、現象の非線形性によりパラメータのシナリオ分岐への影響を把握するためには膨大な解析が必要であり、大規模な詳細解析のみによって解析を行うことは計算時間および労力の観点から不可能な作業である。そこで、ニアフィールド過渡期における変遷について、全体像を合理的かつ効率的に理解するために複数の解析手法を相補的に活用する複合解析システムを検討した。

Fig.1 に複合解析システム概念図を示す。解析システムは「シナリオ解析システム」および「詳細解析システム」にて構成される。シナリオ解析システムでは、まず始めに不確実性を有するパラメータがシナリオ分岐に影響を与え得るか否かの定性的な把握を行う。ここでは計算負荷が小さく達成現象も解析可能な手法として「セルラーオートマタ」を選定した。次に、着目すべきと判断されたパラメータに対してシナリオ分岐への影響を定量的に把握するための解析を行う。ここで用いる「大規模数値解析」（達成現

象を微分代数方程式をとしてモデル化した解析手法）では、計算精度よりも計算負荷低減を重視した演算手法として陽解法や差分法等間隔メッシュ分割を適用する等、高速化に適した手法を選定する。また、パラメータスタディに用いる材料定数等を適切にモデル化（ローカルルール）に組み込むことで両者の解析条件の対応を図るものとする。

詳細解析システムでは、シナリオ解析システムにおいて得られたシナリオ分岐条件（分岐をもたらすパラメータとその範囲）に関する情報を活用し、シナリオの分岐点の詳細な把握等、性能評価上検討すべき条件に対する解析を行う。ここでは高精度の解析を行うことを目的とするため、大規模数値解析には陽解法や有限要素法詳細メッシュ分割を適用する等、高精度化に適した手法を選定する。さらに、処分システムの全体像を把握するという観点から、非常に多くのパラメータの組み合わせに対する評価を行うため、大規模数値解析によって得られた代表的なケースに対する入出力関係（解析条件と解析結果）を「ニューラルネットワーク」により内挿することで、効率的に広範囲の感度解析を行うこととした。なお、本概念図では大規模数値解析による解析結果を互いに検証し、境界条件等の解析条件について整合を図るものとしているが、シナリオ解析システムにおける大規模数値解析が精度上問題のない場合には、この工程は不要となる。

本複合解析システムにより、

- 生じ得るシナリオの抽出
- 代表的ケースにおける処分システム挙動の定量的な把握
- シナリオ分岐に影響を与えるパラメータの不確実性を考慮した挙動の全体像の把握

を達成することが可能となり、不確実性を内在した複雑な現象に対して効率的な解析が可能となる。

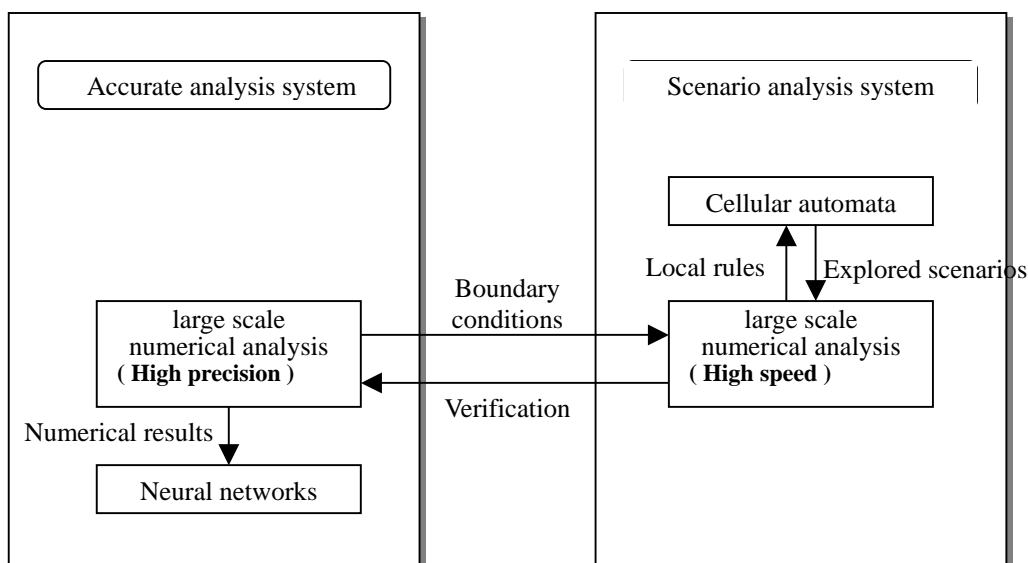


Fig.1 Schematic diagram of hybrid simulation system

上記3つのアプローチに対応する手法として選定したセルラーオートマタ、PC クラスタを使用した並列解析による大規模数値解析、およびニューラルネットワークの概要は以下の通りである。

2.2 セルラーオートマタ

一般的なセルラーオートマタでは、空間をセルに分割し、個々のセルにおいて k 種類の離散的な状態 (k は任意の正数) をとることによりシステムの状態を表現する。セルの次の状態は、現在の状態と隣接するセルの状態だけの局所的な規則 (ローカルルール) に従って決定され、局所的な相互作用からシステム全体の動的な挙動を表現することが可能となる。

以上の基本原理からなるセルラーオートマタを連成現象に拡張するために、本研究では以下のアルゴリズムを導入する。

- 現象をより詳細に表現するために、実数値を用いる (最小値0, 最大値1)
- 複数の状態変数を表現するために、各状態変数に対応する複数のセルグループを用いる
- 連成現象を表現するために、同一セルグループ内の変遷を表現するローカルルールに加え、異なるセルグループ間の影響を表現するグループ間ルールを定義する

2.3 PC クラスタを使用した並列解析による大規模数値解析

連成現象を微分代数方程式としてモデル化し解析を行う場合、大規模な方程式系を解く必要がある。このような数値解析に有効な計算方法として、ネットワークにより接続された複数のプロセッサで計算処理を行う並列解析が挙げられる。本研究では、市販のPCに用いられるCPUで構成されるPCクラスタを利用した並列解析を行い、計算速度の向上をはかった。

2.4 ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークは、神経細胞 (ニューロン) の数学モデルであるユニットを複数配置し、出力処理を行うユニットが、システム全体としての出力誤差を小さくするよう調整するという基本原理に基づくものである。Fig.2 はニューラルネットワークの典型的なユニットの例を示している。学習の基本は、一組の入力および結果を与え、その入力からネットワークの出力を計算し、それを与えられた結果と比較し、それぞれの出力値の二乗誤差の総和を小さくするように重みを調整することである。これは、個別のデータの組に対する学習であり、全体的なデータセットの学習は、この基本的な学習を何組ものデータについて行い、さらに、そのデータセットについて何度も反復学習を

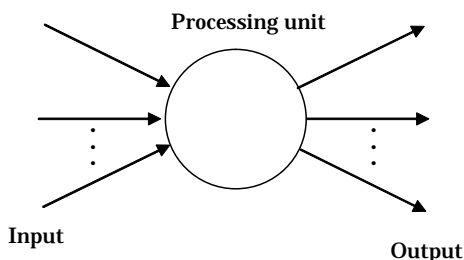


Fig.2 Typical processing unit for neural networks

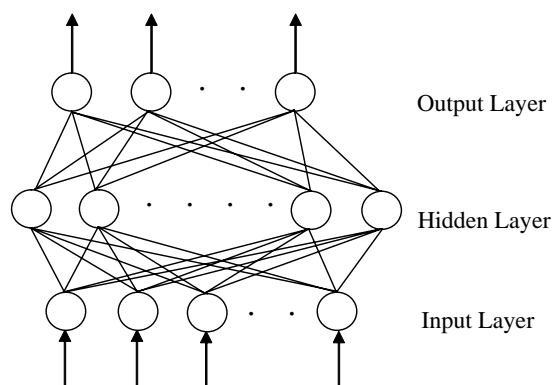


Fig.3 Organization of the MLP

行うことによってなされる。典型的なニューラルネットワークの1つであるMLP (Multi-Layered Perceptron) は Fig. 3 のように構成される。

3. 例題への適用

3.1 解析対象の選定

想定するプロセスおよび相互作用を Fig.4 に示す。この例では、廃棄体の発熱に起因する「高温・乾燥化」に向かうフィードバックループと、母岩からの地下水供給に起因する「低温・膨潤化」に向かうフィードバックループが存在している。パラメータに不確実性が存在する中、競合するフィードバック機構が存在する場合、支配的となるプロセスの影響により複数のシナリオが生起し得る。

本来は想定するプロセスとその相互作用を網羅し、全ての競合プロセスに対する検討を行う必要があるが、本研究では検討する解析システムの適用可能性を確認することを主眼とするため、緩衝材の再冠水挙動による緩衝材温度への影響に関する競合プロセスのみを解析対象とする。Fig.4 中には、「3.2(1)モデル化」にて説明する、今回想定したプロセス ~ との対応をあわせて示している。

3.2 セルラーオートマタによるシナリオ解析

(1)モデル化

安全性確保の観点から、廃棄体の発熱に起因する過渡期終了後の緩衝材は「水分飽和状態、亀裂なし、還元性の環境状態、有意な変質なし」という状態であることが期待さ

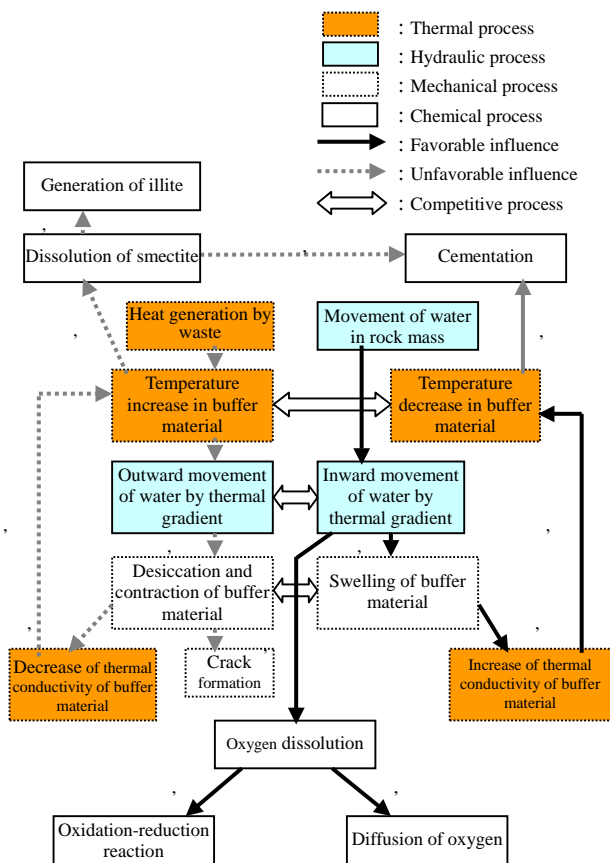


Fig.4 Non-linear feedback system on re-saturation behavior of buffer

られている。評価期間後の緩衝材がこのような状態となるか否かを確認するため、解析には、水分飽和度(S)、温度(T)、亀裂状態(F)、溶存酸素濃度(O)、固相(Sol)および液相中(Aq)のシリカ濃度を表す6個の状態変数を用いる。

拡散現象

セルラーオートマタでは、拡散現象はセル近傍での平均値でモデル化でき、時刻 n における位置 (i, j) の着目パラメータの値を $X_{(i,j)}^n$ とすると、熱や液相化学種の拡散現象に関するローカルルールは次式で定義される。

$$X_{(i,j)}^{n+1} = \frac{1}{9} \sum_{k=-1}^1 \sum_{k'=-1}^1 X_{(i+k, j+k')}^n \quad (1)$$

温度勾配による水分の外側への散逸、内側の緩衝材乾燥高温領域において緩衝材空隙水が蒸発することにより水分飽和度が低下するプロセスである。そこで、あるしきい値 ($T=1$) 以上の温度にあるセルでは、一定割合 λ_1 で水分が蒸発し、緩衝材が乾燥するというローカルルールを適用する。

含水に伴う緩衝材伝導率の上昇、乾燥に伴う緩衝材熱伝導率の低下

水分飽和度が初期値 $S_{(i,j)}^0$ 以下となった場合に、式(1)で計算される次回タイムステップまでの温度変化のうち、 λ_2 (1) だけ実際に生じるものとして、熱伝導率が水分飽和

度に依存し、その値は緩衝材の含水に伴い上昇、乾燥に伴い低下するという現象を表現した。

亀裂の生成

水分飽和度が初期値 $S_{(i,j)}^0$ 以下で可塑性および膨潤性が喪失し、かつ、高温 ($T=1$) での熱応力の発生により緩衝材に亀裂が形成されるとする。なお、亀裂がひとたび形成されると消滅しないととした。

酸素溶解および酸化還元反応

式(1)に従い拡散する溶存酸素は、不飽和部分 ($S_{(i,j)}^n < \lambda_3$) において供給され、同時に、還元性の鉱物との反応によって一定の割合 λ_4 にて消費されるとした。

スメクタイト溶解、セメンテーションあるいはイライト生成

式(1)に従い拡散する液相中シリカ濃度は、さらに高温部 ($T=1$) では固相 (スメクタイト) の溶解によって一定の割合 λ_5 にて増加し、低温部 ($T < 0.5$) では二次鉱物 (アモルファスシリカあるいはイライト等) の生成によって一定の割合 λ_6 にて減少するとした。同様な考えで、固相中シリカは高温部で減少し、低温部で増加するとした。

上記 ~ の考えに基づいたグループ間ルールを Table 1 に示す。式中の上添え字「*」は拡散現象を式(1)にて計算した後に、他の状態変数との相互作用を考慮した値であることを示している。本ルールにより計算された各状態変数は、その計算の結果が0より小さい場合あるいは1より大きい場合には、それぞれ値を0あるいは1に変換し、次の時間ステップに進行する。

解析モデルを Fig.5 に示す。各セルグループを構成するセル数は 10×10 個とし、解析領域中央付近に放射性廃

Table 1 Inter-groups local rules

local rule	
$S_{(i,j)}^{n+1*}$	$\begin{cases} S_{(i,j)}^{n+1} - \lambda_1 & : T_{(i,j)}^n \geq 1 \\ S_{(i,j)}^{n+1} & : T_{(i,j)}^n < 1 \end{cases}$
$T_{(i,j)}^{n+1*}$	$\begin{cases} T_{(i,j)}^{n+1} & : S_{(i,j)}^n \geq S_{(i,j)}^0 \\ (1 - \lambda_2) T_{(i,j)}^{n+1} + \lambda_2 T_{(i,j)}^n & : S_{(i,j)}^n < S_{(i,j)}^0 \end{cases}$
$F_{(i,j)}^{n+1}$	$\begin{cases} F_{(i,j)}^n & : S_{(i,j)}^n \geq S_{(i,j)}^0 \text{ or } T_{(i,j)}^n \leq 1 \\ 1 & : S_{(i,j)}^n < S_{(i,j)}^0 \text{ and } T_{(i,j)}^n > 1 \end{cases}$
$O_{(i,j)}^{n+1*}$	$(1 - \lambda_4) \hat{O}_{(i,j)}^{n+1}$
$\hat{O}_{(i,j)}^{n+1}$	$\begin{cases} O_{(i,j)}^{n+1} & : S_{(i,j)}^n \geq \lambda_3 \\ 1 & : S_{(i,j)}^n < \lambda_3 \end{cases}$
$Sol_{(i,j)}^{n+1}$	$\begin{cases} Sol_{(i,j)}^n - \lambda_5 S_{(i,j)}^n Sol_{(i,j)}^n & : T_{(i,j)}^n \geq 1 \text{ and } S_{(i,j)}^n, Sol_{(i,j)}^n > 0 \\ Sol_{(i,j)}^n + \lambda_6 S_{(i,j)}^n Aq_{(i,j)}^n & : T_{(i,j)}^n < 0.5 \text{ and } S_{(i,j)}^n, Aq_{(i,j)}^n > 0 \\ Sol_{(i,j)}^n & : \text{else} \end{cases}$
$Aq_{(i,j)}^{n+1*}$	$\begin{cases} Aq_{(i,j)}^{n+1} + \lambda_5 S_{(i,j)}^n Sol_{(i,j)}^n & : T_{(i,j)}^n \geq 1 \text{ and } S_{(i,j)}^n, Sol_{(i,j)}^n > 0 \\ Aq_{(i,j)}^{n+1} - \lambda_6 S_{(i,j)}^n Aq_{(i,j)}^n & : T_{(i,j)}^n < 0.5 \text{ and } S_{(i,j)}^n, Aq_{(i,j)}^n > 0 \\ Aq_{(i,j)}^{n+1} & : \text{else} \end{cases}$

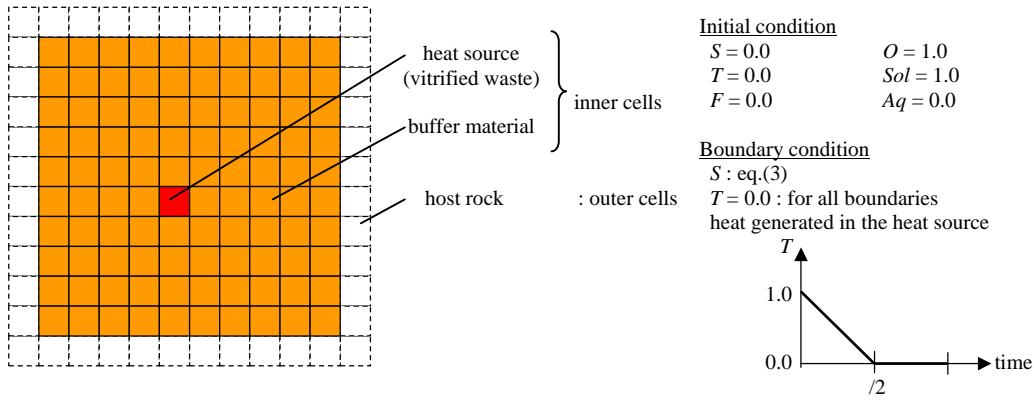


Fig.5 Analysis model by cellular automata

棄物（熱源）を配置し、周辺を母岩とした人工バリア（緩衝材）領域を設定した。

緩衝材に関する初期条件として、不飽和状態、亀裂なし、主要元素であるシリカは固相中に存在するものとし、地下深部には酸素がもたらされていることを仮定した。また、外側境界において低温一定境界条件とし、熱源強度の時間依存性は、次式で定義した（ t ：評価時間）。

$$\begin{cases} 1 - \frac{2t}{T} & : t < \frac{T}{2} \\ 0 & : t \geq \frac{T}{2} \end{cases} \quad (2)$$

緩衝材の周囲にある母岩の透水性は、解析領域周辺に設けた外部セルを用いて飽和および不透水の2種類の境界条件を空間的にランダムに配置することにより場の不均質性を表現した。

$$S_{\partial+}^n = \begin{cases} 1 & : P(\text{Dirichlet}) = \lambda_7 \\ S_{\partial-}^n & : P(\text{Neuman}) = 1 - \lambda_7 \end{cases} \quad (3)$$

ここで、

$\partial+, \partial-$: 境界直近の外部セルおよび内部セル

$P(\text{Dirichlet})$: 境界上のセルが飽和している確立

$P(\text{Neuman})$: 境界上のセルが飽和している確立

(2)解析結果

シナリオ抽出の一例として、“乾燥が進み緩衝材の温度が上昇する”フィードバックループと、“再冠水して緩衝材の温度が上昇しない”フィードバックループという相反するプロセスが競合する場合を考え、それぞれの程度を与える「熱による乾燥の程度 γ_1 」および「乾燥による熱伝導率低下の程度 γ_2 」を 0.0~0.1 の範囲で変化させた。さらに、母岩に関するパラメータとして「母岩の透水性 λ_7 」を加えた3パラメータについて、シナリオに対する影響を検討した。Fig.6 にパラメータ空間を示す。なお、Table 1 にて定義したローカルルールに対するその他のパラメータに関しては一定（ $\gamma_3 = \gamma_4 = 0.5$, $\gamma_5 = \gamma_6 = 1.0$ ）としている。

例題演習では、

- ケース1：母岩全体が透水性の場合（断面1），
- ケース2：母岩全体が不透水性の場合（断面2），

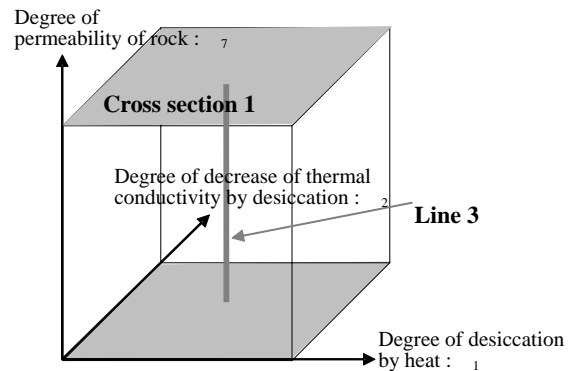


Fig.6 Parameter space used in the cellular automata

- ケース3：岩の透水性に対する影響を調べるため、「熱による乾燥の程度」および「熱伝導率低下の程度」が中程度の場合（測線3）

について、パラメータを変更させた各々100 ケースの解析を行い、シナリオの分岐に関する評価を実施した。

解析結果を乾燥、亀裂、溶解および沈殿の状態により「no」、「whole」、「partial」に区分した。これらは各状態を表す変数（水分飽和度 S 、亀裂状態 F 、固相中シリカ濃度 Sol 、液相中シリカ濃度 Aq ）の値が、評価期間中に全領域で 0（最小値）となった場合、全領域で 1（最大値）となった場合、および、それ以外の場合にそれぞれ対応している。このように区分された状態の組み合わせから、Table 2 に示す 6 種類のシナリオに分類し、パラメータセットとシナリオの関係を整理した。

母岩全体が透水性の場合（ケース1）はシナリオ $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_7$ および $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_7$ が、母岩全体が不透水性の場合（ケース2）はシナリオ $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_7$ および $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_7$ が出現した。シナリオ $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_7$ は変遷の過程で一部領域において乾燥状態が生じている点でシナリ

Table 2 Obtained scenarios

Scenario	Desiccation	Crack	Solution	Precipitation
	no	no	no	no
	partial	no	no	no
	partial	no	partial	partial
	partial	partial	partial	partial
	whole	no	no	no
	whole	partial	no	no

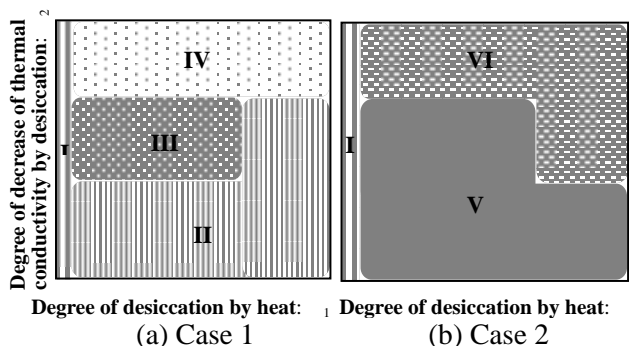


Fig.7 Scenario bifurcation by parameters

オ と区別しているが、最終的には水分飽和状態となっており、シナリオ とともに安全確保上好ましいシナリオである。なお、本例題演習では評価期間内で溶存酸素はすべて消費され全領域で還元環境に回復しており、シナリオ分類の際に溶存酸素濃度の状態は考慮していない。

パラメータ空間において、シナリオ毎の出現領域を Fig.7 に示す。このように本手法を用いることにより、シナリオの分岐をもたらすパラメータ範囲を明示することができた。

また、ケース 3 では、解析結果は母岩の透水性の境界条件の配置により異なったものとなる可能性があるため、母岩の透水性の割合 γ を 0.0 ~ 1.0 の範囲で 0.1 刻みで変化させ、各 γ に対して境界条件の配置を変えた 10 回の統計的解析を行った。Table 3 に母岩の透水性の割合を種々に変化させた場合に出現したシナリオを示す。これは、測線 3 上を断面 2 から断面 1 に移動した結果であり、表中の左から右に移るにしたがい、母岩の透水性が高くなるとともに出現するシナリオが変遷していることがわかる。

以上のように、今回着目した「熱による乾燥の程度」、「乾燥による熱伝導率低下の程度」および「母岩の透水性」という因子が緩衝材の状態変化に関するシナリオ分岐に影響を与えることが確認されたことから、以降ではこれらに着目した定量的な解析を実施することとする。

3.3 大規模数値解析による定量的解析(熱-水-応力連成解析)

(1) 支配方程式

連成解析では地下水の連続式、エネルギー保存則および応力の釣り合い式を考慮する[5]。

Table 3 Obtained scenarios for each diffusivity

Scenario	Degree of permeability of rock: γ										
	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0

地下水の連続式は以下のとおりである。

$$\left\{ \xi \rho_l D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial \psi} (h_i - z_i) + (1 - \xi) \frac{\rho_l^2 g K}{\mu_l} h_i \right\}_i + \{ \rho_l D_T T_i \}_i \quad (3)$$

$$- \rho_{l0} n S_r \rho_l g \beta_p \frac{\partial h}{\partial t} - \rho_l \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \frac{\partial h}{\partial t} - \rho_l S_r \frac{\partial u_{i,j}}{\partial t} + \rho_{l0} n S_r \beta_T \frac{\partial T}{\partial t} = 0$$

ここで、 D は水分拡散係数、 ξ は体積含水率、 θ は圧力水頭(水分ポテンシャル)、 ψ は固有透過度、 θ は不飽和パラメータ(飽和領域で 0、不飽和領域で 1)、 μ_l は水の動粘性係数、 ρ_{l0} は初期状態の地下水の密度、 ρ_l は地下水の密度、 g は重力加速度、 D_T は温度勾配による水分移動に関する係数、 n は間隙率、 S_r は飽和度、 β_p は水の圧縮係数、 β_T は水の熱膨張係数、 z は位置水頭である。未知パラメータは、変位ベクトル u_i 、温度 θ 、および全水頭 h である。

エネルギー保存則は以下の通りである。

$$(\rho C_v)_m \frac{\partial T}{\partial t} + n S_r \rho_l C_{vi} V_i T_i - K_{Tm} T_{,ii} + L \left\{ D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial \psi} (h_i - z_i) \right\}_i \quad (4)$$

$$+ n S_r T \frac{\beta_T}{\beta_p} \left\{ \xi D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial \psi} (h_i - z_i) + (1 - \xi) \frac{\rho_l g K}{\mu_l} h_i + D_T T_i \right\}_i$$

$$+ \frac{1}{2} (1 - n) \beta T \frac{\partial}{\partial t} (u_{i,j} + u_{j,i}) \delta_{ij} = 0$$

ここで、 L は単位体積あたりの水蒸気の潜熱、 D_θ は水蒸気拡散係数、 $(C_v)_m$ は水と骨格粒子からなる場の比熱、 C_{vi} は水の比熱、 V_i は水の速度ベクトル、 K_{Tm} は水と骨格粒子からなる場の熱伝導率、 δ_{ij} はクロネッカーデルタである。未知パラメータは、変位ベクトル u_i 、温度 θ 、および全水頭 h である。

応力の釣り合いの式は以下の通りである。

$$\left[\frac{1}{2} C_{ijkl} (u_{k,i} + u_{i,k}) - F \pi \delta_{ij} - \beta \delta_{ij} (T - T_0) + \chi \delta_{ij} \rho_l g h \right] + \rho b_i = 0 \quad (5)$$

ここで、 C_{ijkl} は弾性係数マトリクス、 θ は不飽和パラメータ(飽和領域で 1、不飽和領域で 0)、 ρ は密度、 b_i は物体力、 π は膨潤圧、 F は膨潤応力に寄与する係数である。未知パラメータは、変位ベクトル u_i および温度 θ である。

は温度変化によって生じる応力を求めるときの係数で、 $\beta = (3\lambda + 2\mu)\alpha_s$ (6)

および μ はラメの定数であり、次式で求まる。

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \quad \mu = G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (7)$$

ここで、 E はヤング率、 α_s は固相の線膨張係数、 ν はポアソン比である。

膨潤圧 π は、次式で定義する。

$$\pi(\theta_1) = \rho_l g (\Delta \psi) = \rho_l g (\psi(\theta_1) - \psi(\theta_0)) = \rho_l g \int_{\theta_0}^{\theta_1} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} d\theta \quad (8)$$

ここで、 θ_0 は初期の体積含水率である。

(2) 解析モデルおよび境界条件

解析体系を Fig.8 に示す。解析領域は母岩、緩衝材、オーバーパックおよびガラス固化体で構成され、本解析では、2次元円筒形状で近似した。初期条件は、地表面に地下水面のある静水圧状態、地表面を 15 の温度一定とした深度

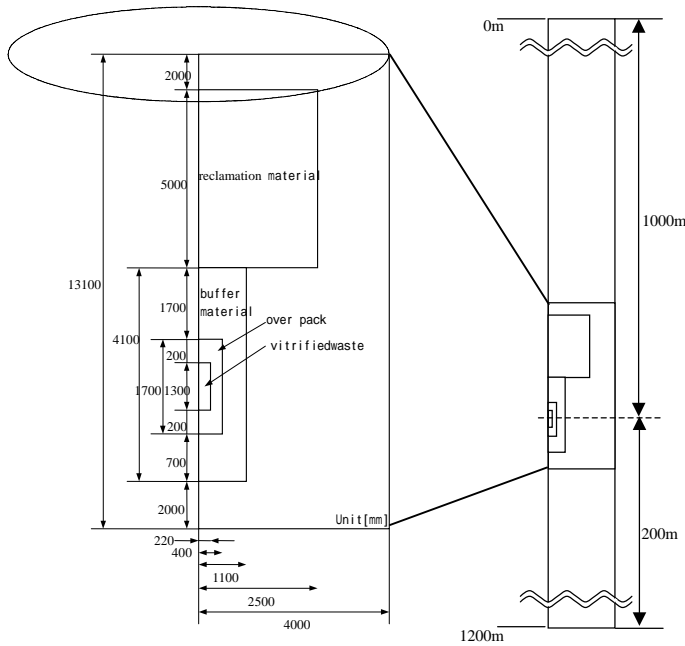


Fig.8 Schematic view of the analytical model

方向 3 /100m の温度勾配をもつものとした。また境界条件は、岩の側面、底面およびオーバーパック外面を不透水境界、岩の側面は断熱境界、地表および底面は温度一定境界とした。

(3)物性値の設定

解析用の物性値の設定は、主に核燃料サイクル開発機構による第 2 次とりまとめ[5]を参考とした。

主な設定値を以下に示す。

緩衝材の物性値の設定

水分拡散係数 D は、水蒸気による拡散係数 D_a と液状水による拡散係数 D_l の和として次式で表される。

$$D_\theta(\theta) = \frac{D_{a_1}(\theta) + D_{a_2}(\theta)}{(1.76 \times 10^{-8} T - 3.04 \times 10^{-7})(\theta - \theta_s)} + \frac{\theta - 1.48 \times 10^{-7} T - 2.98 \times 10^{-6}}{(\theta - b_1)(b_1 - \theta_s)} + \frac{5.22 \times 10^{-3} T + 2.68 \times 10^{-1}}{(\theta - (5.22 \times 10^{-3} T + 2.68 \times 10^{-1}))} \quad (9)$$

ここで、 T は温度[]、 θ は体積含水率[-]である。

水分特性曲線（水分ポテンシャル ψ [cm]と体積含水率 [-]の関係）は、有効飽和度 S_e および比水分容量 C を用い、次式で表される。

$$S_e = \left\{ 1 + |\alpha \psi|^n \right\}^{-m}, \quad m = 1 - \frac{1}{n} \quad (\alpha > 0, 0 < m < 1, n > 1) \quad (10)$$

$$C(\theta) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi} = \alpha(n-1)(\theta_s - \theta_r) S_e^{1/m} (1 - S_e^{1/m})^m \quad (11)$$

ここで、 s は飽和体積含水率、 θ_r は最小含水量である。各パラメータは以下のように設定した。

$$s = 0.403, \quad \theta_r = 0.000, \quad \alpha = 8.0 \times 10^{-5} [\text{cm}^{-1}], \quad n = 1.6 \quad (12)$$

温度勾配による水分移動に関する係数 D_T は次式で設定した。

$$D_T = D_{T0} \exp\left(\alpha_T \frac{T - T_0}{T_0}\right) \quad (13)$$

各パラメータは、 $D_{T0} = 7.0 \times 10^{-8} [\text{cm}^2 \text{s}^{-1}]$, $\alpha_T = 0.0$, $T_0 = 10.0$ []とした。

その他の物性値

解析に用いた主な物性値を Table 4 に示す。

水と骨格粒子からなる場の比熱 $(\rho C_v)_m$ は次式で設定した。

$$(\rho C_v)_m = n S_r \rho_r C_{vr} + (1-n) \rho_s C_{vs} \quad (14)$$

ここで C_{vr} は水の比熱である。 C_{vs} は固相の比熱であり、緩衝材および埋め戻し材では、含水比 ω [%]の依存性を考慮し次式で設定した。

$$C_{vs} = \frac{34.1 + 4.18\omega}{100 + \omega} \quad (15)$$

水と骨格粒子からなる場の熱伝導率 K_{Tm} は次式で設定した。

$$K_{Tm} = n S_r K_{Tr} + (1-n) K_{Ts} \quad (16)$$

ここで、 K_{Tr} は水の熱伝導率である。 K_{Ts} は固相の熱伝導率であり、緩衝材および埋め戻し材では、含水比 ω [%]の依存性を考慮し次式で設定した。

$$K_{Ts} = 4.44 \times 10^1 + 1.38 \times 10^2 \omega + 6.14 \times 10^3 \omega^2 - 1.69 \times 10^4 \omega^3 \quad (17)$$

また、本解析では、不飽和パラメータ（飽和領域で 0、不飽和領域で 1）は滑らかな関数とするため、

Table 4 Values using for large scale numerical analysis

Properties of matter	Vitrified waste	Over pack	Buffer material	Reclamation material	rock mass
Elastic modulus: E [MPa]	8.2×10^4	2.0×10^5	58.74-1.87	3.0×10^0	3.7×10^4
Poisson's ratio: ν [-]	0.3	0.3	0.3	0.4	0.25
Dry density: ρ [Mg m ⁻³]	2.80	7.80	1.60	1.80	2.67
Intrinsic permeability: K [m ⁻²]	1.0×10^{-30}	1.0×10^{-30}	4.0×10^{-20}	6.0×10^{-19}	$1.0 \times 10^{-15} / 1.0 \times 10^{-20}$
Thermal conductivity: K_{Ts} [W m ⁻¹ K ⁻¹]	1.2	53.0	eq.(17)	eq.(17)	2.8
Specific heat: C_{vs} [kJ kg ⁻¹ K ⁻¹]	0.96	0.46	eq.(15)	eq.(15)	1.0
Thermal expansion coefficient: α_s [K ⁻¹]	1.0×10^{-6}	1.64×10^{-6}	1.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}

$\xi = (\tanh(-100 \times (S_e - 0.95)) + 1) / 2$ としており、水の速度ベクトル V_i は以下で定義している。

$$V_i = - \left\{ \xi D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial \psi} (h_i - z_i) + (1 - \xi) \frac{\rho_i g K}{\mu_i} h_i + D_T T_i \right\} \quad (18)$$

本解析の支配方程式を空間的に離散化するにあたって、精度と速度を考慮して等間隔差分メッシュを採用した。時間的離散化については、比較的大きな時間ステップでも十分な収束性が得られることが確認できたため、計算コストの小さい Forward-Euler 法を採用した。並列化手法については、一般に領域分割法、行列分割法およびパラメータ並列法があるが、本解析では各時間ステップの計算時間が極めて短く、かつパラメータスタディを行うという目的を有するため、パラメータ並列法を採用し、異なるパラメータの計算を並列に実行することにした。なお、母岩の固有透過度を $1.0 \times 10^{-15} \text{m}^2$ とする解析では、母岩から緩衝材への水の浸入に比べ解析領域外から母岩への水の浸入は速いため、時間ステップを極端に短くすることが必要であり、このため全体の計算時間が極端に長くなる。母岩から緩衝材への水の浸入に合わせた長い時間ステップでは、解析領域外から母岩への水の浸入は平衡状態に達するので、母岩の固有透過度を $1.0 \times 10^{-15} \text{m}^2$ とする解析でも、同様に長い時間ステップを用い、解析領域外から母岩への水の浸入は各時間ステップで平衡状態を求めた。以上のように、問題および目的に適した定式化、メッシュ、解法を選択することによって、汎用有限要素法ソフトウェア FEMLAB を使用した解析と比較し、約 1000 倍の高速化を達成した。以上の解析モデルおよび物性値に基づき、今回構築したシステムを用いて解析を行った。

(3)解析結果

「3.2 セルラーオートマタによるシナリオ解析」により、「熱による乾燥の程度」と「乾燥による熱伝導率低下の程度」をパラメータとした場合の乾燥状態および亀裂生成状態を定性的に把握できたことから、両パラメータと緩衝材

最高温度の関係を求め、緩衝材機能に有意な影響を及ぼすような変質が起こらないとされるパラメータの組み合わせを定量的に求めることとした。

シナリオ解析では、母岩が透水性の場合(ケース1)と不透水性の場合(ケース2)に対するパラメータ空間 (Fig.6) について生起し得るシナリオを抽出した。ここでも同様に母岩が透水性の高い場合として固有透過度を $1.0 \times 10^{-15} \text{m}^2$ (ケース4)、透水性の低い場合として $1.0 \times 10^{-20} \text{m}^2$ (ケース5)と設定し、各ケースに対して解析を行った。固有透過度以外のパラメータの設定については「3.3(3)物性値の設定」にて述べた通りである。

ケース4およびケース5に対し、「熱による乾燥の程度」および「乾燥による熱伝導率低下の程度」を変化させるパラメータスタディを行った。「熱による乾燥の程度」は、温度勾配による水分移動に関する係数 D_T を1倍から10倍まで変化させ、「乾燥による熱伝導率低下の程度」は飽和度 S_r が初期飽和度 S_{r0} より低下した場合に熱伝導率が $|q \times (S_r - S_{r0})|$ だけ小さくするとし、係数 q を0から10まで変化させた。

各々のパラメータの組み合わせに対する緩衝材の最小含水比を Fig.9 に、再冠水時間を Fig.10 に、最高温度を Fig.11 に示す。なお、最小含水比は計算上圧力水頭が負に発散するため下限を設けており、また再冠水時間は100年で、最高温度は110 で計算を打ち切っている。

ケース4,5ともに「熱による乾燥の程度」の減少とともに最小含水比が増加し再冠水時間および最高温度が減少する傾向があり、安全確保上好ましい状態となる(シナリオ)。母岩の透水性が高いケース4においても「乾燥による熱伝導率低下の程度」の減少とともに同様の傾向が見られる(シナリオ)。これとは逆に、ケース4,5ともに「乾燥による熱伝導率低下の程度」の増加とともに、最小含水比が減少し再冠水時間および最高温度が増大する傾向があり、亀裂の生じやすい状態(シナリオ)となり、母岩が不透水性であるケース5では、ケース4に比

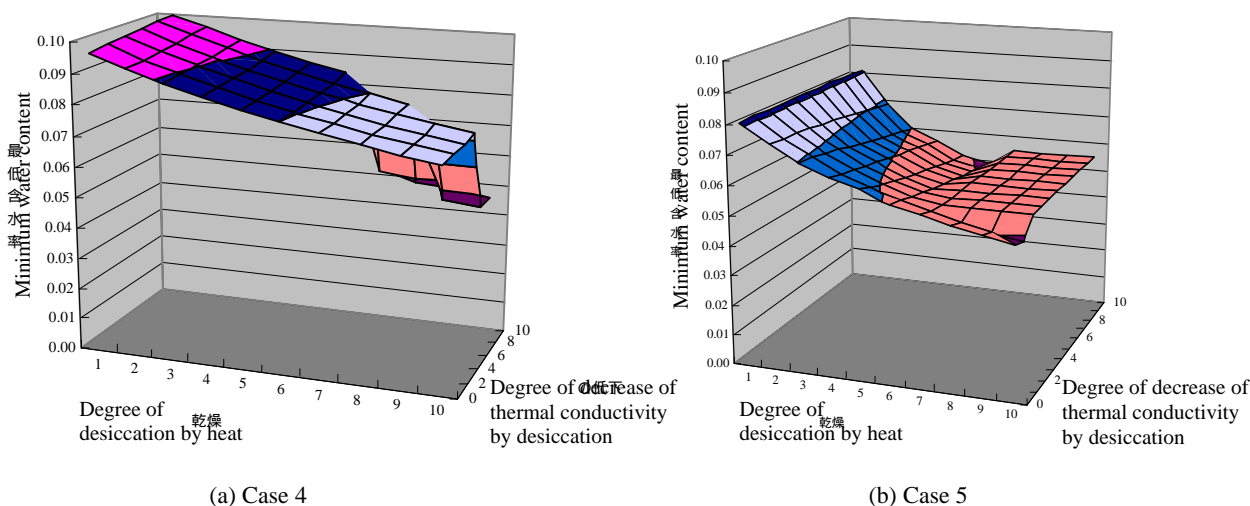


Fig.9 Minimum water content of buffer for various parameter sets

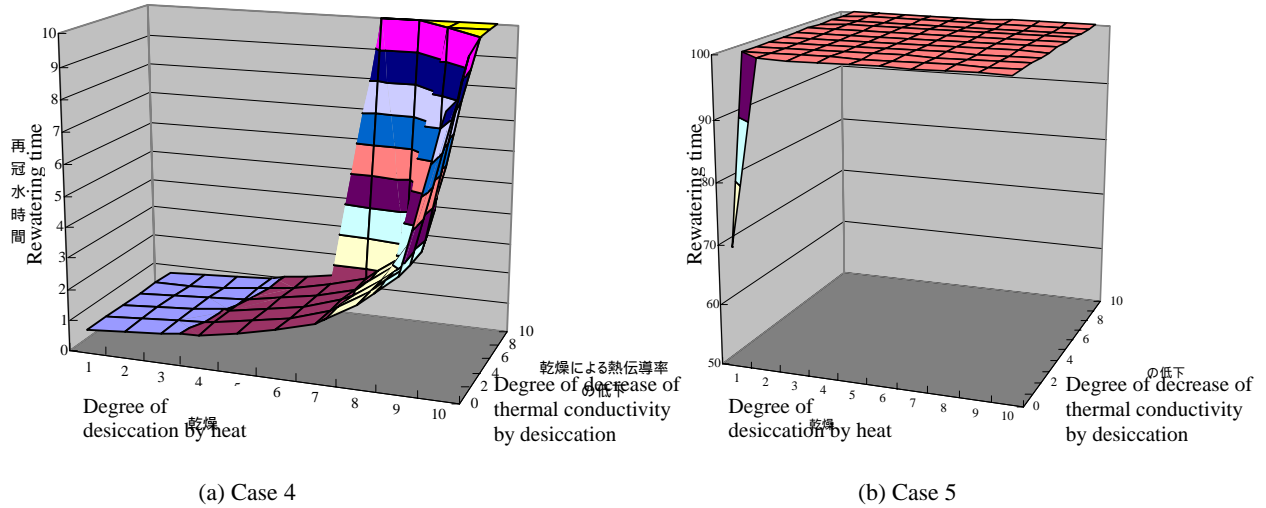


Fig.10 Rewatering time of buffer for various parameter sets

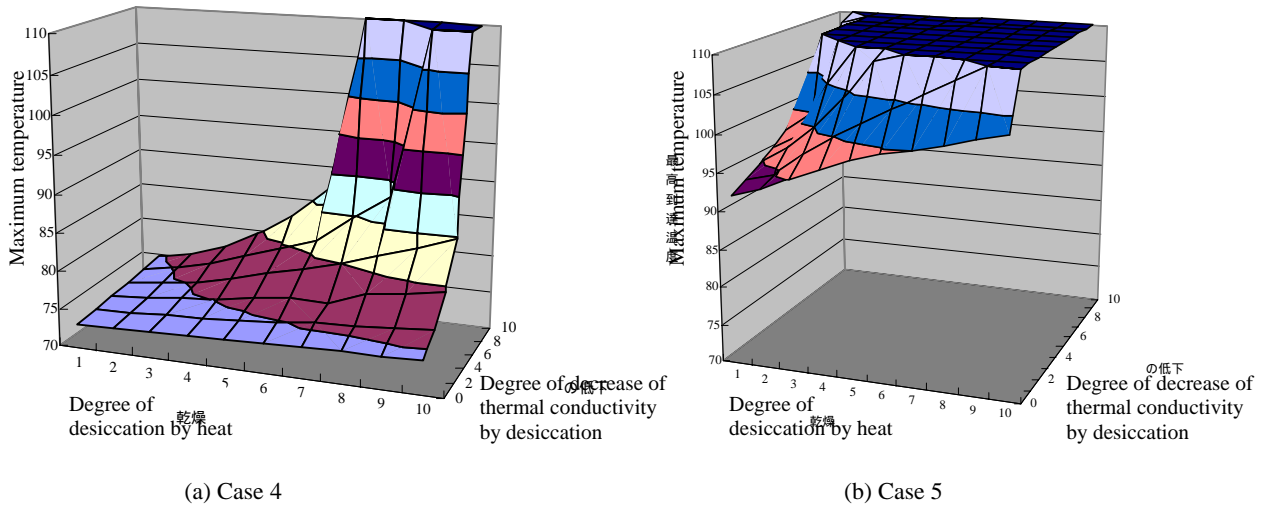


Fig.11 Maximum temperature of buffer for various parameter sets

乾燥状態が長期化する傾向にある（シナリオ , ）。これらの結果はセルラーオートマによるシナリオ解析の定性的な妥当性を示すものである。

3.4 ニューラルネットワークによる感度分析

(1)ニューラルネットワークによる学習

ニューラルネットワークは Fig.3 のように構成され、図中のニューロン間を結ぶ実線は信号を伝達する神経繊維を示している。ニューロン i の状態は、ジグモイド関数 $o_i = 1/[1 + \exp \{- (net_i + \theta_i)\}]$ で表されるものとした。ここで、 net_i はニューロン i への入力信号の総和である。ニューロン j からニューロン i への神経繊維には、重み w_{ji} が割り当てられ、神経繊維によって伝達される信号は、発信元のニューロン j の状態 o_j と伝達する神経繊維の重み w_{ji} の積となる。したがって、 net_i は、ニューロン i に対する全ての発信元ニューロンの状態を表すベクトル \vec{o}_i と重みベクトル \vec{w}_{ji} の内積になる。

$$net_i = \sum_j \vec{o}_i \cdot \vec{w}_{ji}$$

ニューラルネットワークでは非線形性を有する入出力データに対する反復学習を行うことで重み \vec{w}_{ji} およびパラメータ θ_i を調整し、入出力関係をネットワーク内の結合係数として構築する。本研究では大規模数値解析による詳細解析で得られたデータセットを学習データとし、Back-Propagation 法による学習アルゴリズムを適用した。

(2)解析結果

学習データには、詳細解析におけるケース 4 に対するデータセットを用いた。詳細解析は全 60 ケース行われており、このうち 48 ケースを学習用に、残り 12 ケースを検証用にランダムに選出し、「熱による乾燥の程度」と「乾燥による熱伝導率低下の程度」の各パラメータをニューラルネットワークへの入力、詳細解析により得られた緩衝材最高温度をニューラルネットワークへの出力とした。

本ケースは、セルラーオートマによるシナリオ解析の

ケース1に相当し、パラメータの組み合わせによっては緩衝材の熱変質が生じることが予想される。緩衝材機能に有意な影響を及ぼすような変質が起こらないとされる許容温度100を下回るパラメータの組み合わせをニューラルネットワークにより求めた結果を Fig.12 に示す。学習を30万回繰り返した場合の最大偏差が約5であることを考慮し、判定条件は95以下としている。これは、シナリオ解析でのケース1において変質が生じないシナリオおよびに相当するシナリオが生起するパラメータの範囲に相当する。

今回ニューラルネットワークの出力データとした「最高温度」は入力データである「熱による乾燥の程度」や「乾燥による熱伝導率低下の程度」に対して非線形性を有している。ニューラルネットワークは、このような非線形な入出力関係でも、いったん学習すれば未学習の入力に対しても迅速に出力が得られるという特徴をもっており、本例題では最大偏差5程度で解析結果の推定が可能であることを確認した。この手法を用いることにより、詳細解析を行った解析条件より多くの情報（解析結果の推測値）が精度良く得られ、同一モデルに対する広範囲なパラメータスタディには大きな利便性を発揮すると言える。

なお、ニューラルネットワークによる結果（Fig.12）と対応するシナリオ解析結果（Fig.7(a)）はともに、横軸は温度勾配による水分移動の効果に、縦軸は乾燥時の熱伝導率低下による温度上昇の効果に影響を与えるパラメータである。シナリオ解析では、変動させたパラメータ β_1, β_2 の値が計算結果に直接的に影響を与えるローカルルールとなっている。このため、パラメータの値が大きくなるとともに上述した効果が過大となって好ましくないシナリオ（シナリオ β_1, β_2 ）が広範囲にわたり現れており、今回のシナリオ解析のパラメータ変動範囲はニューラルネットワーク

によるそれと比べて定量的に広い範囲を取っているものと考えられる。シナリオ解析との整合を図るためには、セルラーオートマタにおける各種パラメータ値の最適化、ローカルルールの修正、シナリオ分類のための判断基準の最適化等に対する検討が今後必要である。

(3)合理的かつロバストな設計への寄与

シナリオ分岐に影響を及ぼす因子として、「熱による乾燥の程度」および「乾燥による熱伝導率低下の程度」に着目し、ニューラルネットワークによる感度解析を行った。具体的には、前述のとおり、温度勾配による水分移動に関する係数 D_T を1倍から10倍までの範囲、および飽和度 S_r が初期飽和度 S_{r0} より低下した場合に熱伝導率が $|q \times (S_r - S_{r0})|$ だけ小さくなるとし、係数 q を0から10までの範囲を対象として、ニアフィールドが安全確保上好ましい状態に至るシナリオの分岐条件をFig.12のように定量的に示した。同図では x 軸を「乾燥の程度」、 y 軸を「熱伝導率低下の程度」としたパラメータ空間となっている。

緩衝材の設計要件としては、熱変質等の好ましくない状態に至るシナリオに対するパラメータの領域に対して大きな裕度をもっている図中の座標(0,0)が安全確保上の観点からは最も望ましい。しかし、安全性が担保される範囲で製작성や経済性等の諸条件を考慮した合理的な設計が望ましく、そのためには同一シナリオに至るパラメータの領域を把握し、その上で設計仕様の検討を行うことが合理的な設計につながるものと考えられる。変化させた2つのパラメータはケイ砂混合比に対する依存性をもつことから、ケイ砂混合比に対するパラメータの特性を十分に把握し、安全性が担保される範囲で緩衝材としての適用性を検討することが、よりロバストな設計への対策となる可能性がある。

4 まとめ

地層処分システムのニアフィールド過渡期において、生起し得る現象を効率的に解析する手法として、セルラーオートマタ、大規模数値解析による熱-水-応力連成解析、およびニューラルネットワークで構成する複合解析システムを検討し、緩衝材が安全確保上好ましいシナリオに至るパラメータ範囲の把握を目的とした例題演習を実施した。なお、本例題演習ではFig.1に示した高精度化を目的とした「詳細解析システム」と高速化を目的とした「シナリオ解析システム」とに区別する工程は省略している。

セルラーオートマタによるシナリオ解析では、緩衝材の再冠水挙動による緩衝材温度への影響に関する競合プロセスに着目し、生起し得るシナリオの抽出とその分岐条件を定量的に求めた。シナリオ解析にて着目したパラメータがシナリオ分岐に影響を与えることが確認されたことから、PCクラスタを使用した熱-水-応力連成解析にて、このシナリオ分岐条件に相当する条件で求めた緩衝材最高温度から

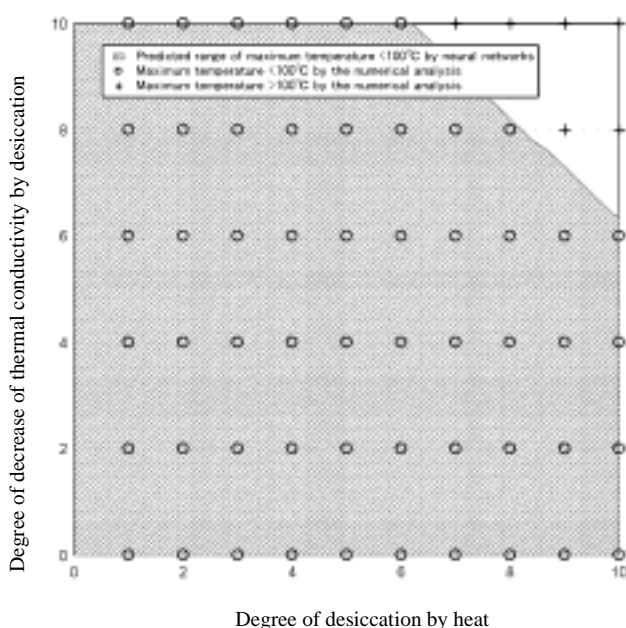


Fig.12 Favorable parameter range predicted by neural networks

有意な機能低下が起こらないとされるパラメータの組み合わせを定量的に求め、この連成解析の結果を学習させたニューラルネットワークを用いたパラメータスタディを実施することにより、好ましいシナリオに至るパラメータ範囲を把握した。

本手法によって、安全確保上好ましいシナリオに至るパラメータ領域を効率的に把握することが可能となり、同一シナリオに至る範囲内で種々の候補材料等の適用性を検討することでロバストな設計へ合理的に寄与することが期待される。

5 今後の課題

今回のセルラーオートマタにおけるローカルルールでは、ニアフィールド過渡現象における種々のプロセスが網羅されてはならず、シナリオ解析ツールとしての信頼性向上が課題である。今後、ローカルルールのモデル化方法や簡便な設定方法等を検討し、ツールとしての信頼性および適用性を向上させる必要がある。本手法は、今回対象とした処分システムに限らず、複雑なプロセスが存在するために全体挙動の将来予測が困難である現象全般に対して応用が可能であると考え、このような一般的な応用を考えた場合にも、上記課題に対する検討は重要と考えている。

また、今回は特定のパラメータに対するシナリオ分岐の有無の検討を行ったが、シナリオの分岐をもたらすパラメータを効率的かつ定量的に探査する方法の検討も今後の課題として挙げられる。

参考文献

- [1] OECD/NEA : Review of Safety Assessment Methods, A Report of the Performance Assessment Advisory Group of the Radioactive Waste Management Committee, OECD Nuclear Energy Agency (1991).
- [2] Aoyama, Y., et al. : Hybrid Simulation System for Performance Assessment of a Geological Disposal System, Preprints of contributions to the Workshop on Clay Microstructure and its Importance to Soil Behavior Lund, Sweden, October 15-17, 2002, pp. 23-31 (2002).
- [3] 久米田正邦 他 : 非線形連成現象に関するシナリオ不確実性シミュレーション手法の開発 (その 1) 解析システムの構築. 日本原子力学会 2003年春の年会, 長崎, 3月27~29日, P36 (2003).
- [4] 青山裕司 他 : 非線形連成現象に関するシナリオ不確実性シミュレーション手法の開発 (その 2) 解析システムの適用例. 日本原子力学会 2003年春の年会, 長崎, 3月27~29日, P37 (2003).
- [5] 核燃料サイクル開発機構 : わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性 - 地層処分研究開発第2次取りまとめ - . JNC TN1400 99-022 (1999).

