

動力技術 No. 76 1990.12

6.2 個別現象コードの開発

本節では、地下水移行シナリオに沿って発生すると考えられる核種移行に関連する個別現象を解析するために開発されたコードについて説明する。

(1) ニアフィールド*核種移行コード「RELEASE」

本コードは、ガラス固化体から浸出した放射性核種が、ガラス固化体と周辺岩盤との間で緩衝材として使用されると考えられる粘土（ベントナイト）中を、崩壊、遅延を伴いながら移流分散により移行する現象をシミュレートすることができる。

基本方程式を (6.1) に示す。これは、円筒座標系半径方向 1 次元の多孔質媒体中の移流分散方程式であり、核種の崩壊、遅延を考慮したものである。解はこの方程式を有限差分法により定式化して求められる。ここで、遅延効果については平衡分配係数 K_{dBi} により式 (6.2) のように表されると仮定している。

$$R_{dBi} \frac{\partial c_i}{\partial t} = D_{Bi} \left(\frac{\partial c_i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 c_i}{\partial r^2} \right) - V_B \frac{\partial c_i}{\partial r} - R_{dBi} \lambda_i c_i + R_{d(i-1)} \lambda_{i-1} c_{i-1} \quad (6.1)$$

$$R_{dBi} = 1 + \frac{(1 - \epsilon_B)}{\epsilon_B} \rho_B K_{dBi} \quad (6.2)$$

ここに、

- ϵ_B : 緩衝材の空隙率 (—)
- ρ_B : 緩衝材の密度 (M/L^3)
- K_{dBi} : 緩衝材中の核種 i の分配係数 (L^3/M)
- D_{Bi} : 緩衝材中の核種 i の拡散係数 (L^2/T)
- V_B : 緩衝材中の地下水速度 (L/T)
- R_{dBi} : 緩衝材中の核種 i の遅延係数 (—)
- c_i : 核種 i の濃度 (M/L^3)
- λ_i : 核種 i の崩壊定数 ($1/T$)

ガラスからの核種の浸出は内側境界条件として与えられ、核種の浸出メカニズムに対応して、

- ① 溶解限度モデル
- ② 浸出率一定モデル
- ③ ガラス溶解の一次反応モデル

の 3 つのモードを扱うことができる。また、外側境界条件は周辺母岩での地下水流動条件に対応して、

- ① 濃度 = 0
- ② 緩衝材からの移行率一定
- ③ 均一混合セル

を扱うことができる。

* 地層処分性能評価を行う上で、解析の対象となる領域は大きくニアフィールドとファーフールドに分けられる。ニアフィールドは工学バリアで構成される処分場とその周辺地層の領域であり、ファーフールドは処分場の位置を中心とした、天然バリア機能を有する地層が広がる広域的な領域である。

(2) ファーフールド*水圏核種移行コード「FEMWATER/EFMWASTE-PNC」

「FEMWATER/EFMWASTE」は、米国オークリッジ国立研究所で開発、公開されている計算コードであり飽和および不飽和状態にある多孔質媒体とみなされる岩盤中の水理および核種の移動現象をシミュレートすることができる。

このコードをベースとして、地層処分システムの全体評価コード体系へのモジュール化を行うため、物質移動に関するコード「FEMWASTE」をソースタームおよび崩壊連鎖を考慮できるように改良し、「FEMWASTE-PNC」を開発した⁽¹⁾。これにより「RELEASE」のようなニアフィールド核種移行コードとの接続が可能となった。

地下水流動に関するコード「FEMWATER」は、多孔質媒体とみなされる岩盤中の飽和および不飽和部分において同時に成り立つ直交座標系鉛直二次元の地下水流動方程式 (6.3)、(6.4) により与えられる。解はこの方程式を有限要素法により定式化して求められる。

$$F \frac{\partial h}{\partial t} = K_{xx} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + K_{zz} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (h + z) \quad (6.3)$$

$$F = \frac{\theta}{n} \alpha + \beta \theta + \frac{d\theta}{dh} \quad (6.4)$$

ここに、

- h : 圧力水頭 (L)
- K_{xx}, K_{zz} : 不飽和透水係数 (L/T)
- θ : 体積含水率 (—)
- n : 岩体の空隙率 (—)
- α : 岩体の圧縮率 ($1/L$)
- β : 水の圧縮率 ($1/L$)

一方「FEMWASTE-PNC」では、放射性核種が多孔質媒体とみなされる飽和および不飽和状態にある岩盤中を崩壊、遅延を伴いながら移流分散により移行する現象をシミュレートすることができ、その基本方程式は (6.5) ~ (6.10) で与えられる。解法は有限要素法によっている。

$$R_{di} \frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xxi} \frac{\partial c_i}{\partial x} + D_{xzi} \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{xzi} \frac{\partial c_i}{\partial x} + D_{zzi} \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) - V_x \frac{\partial c_i}{\partial x} - V_z \frac{\partial c_i}{\partial z} - R_{di} \lambda_i c_i + R_{d(i-1)} \lambda_{i-1} c_{i-1} + Q_i \quad (6.5)$$

ここに、

- R_{di} : 岩盤中の核種 i の遅延係数 (—)
- D_{xxi}, D_{xzi} : 岩盤中の核種 i の分散係数 (L^2/T)
- D_{xzi}, D_{zzi} : 岩盤中の核種 i の分散係数 (L^2/T)

- V_x, V_z : 岩盤中の地下水流速 (L/T)
 c_i : 核種 i の濃度 (M/L³)
 λ_i : 核種 i の崩壊定数 (1/T)
 Q_i : 核種 i の湧き出し (M/L³T)

式 (6.5) 中の分散係数および遅延係数は式 (6.6) ~ (6.10) で表現される。

$$D_{xx1} = a_T V + \frac{(a_L - a_T) V_x^2}{V} + D_{m1} T \quad (6.6)$$

$$D_{xx1} = D_{xx1} = \frac{(a_L - a_T) V_x V_z}{V} \quad (6.7)$$

$$D_{zz1} = a_T V + \frac{(a_L - a_T) V_z^2}{V} + D_{m1} T \quad (6.8)$$

$$V = (V_x^2 + V_z^2)^{1/2} \quad (6.9)$$

$$R_{di} = 1 + \frac{(1 - \varepsilon_R)}{\varepsilon_R} \rho_R K_{di} \quad (6.10)$$

ここに、

- a_L : 岩盤の縦方向分散率 (L)
 a_T : 岩盤の横方向分散率 (L)
 D_{m1} : 岩盤中の核種 i の分子拡散係数 (L²/T)
 T : 岩盤の屈曲率 (-)
 ε_R : 岩盤の空隙率 (-)
 ρ_R : 岩盤の密度 (M/L³)
 K_{di} : 岩盤中の核種 i の分配係数 (L³/M)
 V : 岩盤中の地下水流速の大きさ (L/T)

(3) ニアフィールド総合性能評価コード「AREST-PNC」

「AREST-PNC」⁽⁴⁾ は米国 Battelle PNL と共同開発しているニアフィールド総合性能評価コードであり緩衝材中の核種の移行モデルを中心としてオーバーバックの腐食モデル、ガラス固化体の浸出モデルが組み込まれている。「AREST-PNC」では、「RELEASE」で扱えない熱の影響や地球化学反応の影響を考慮するため、熱解析コード「TEMPER」や地球化学計算コード「EQ3/6」がサポートコードとして利用できるようになっているのが特徴である。

緩衝材中を移行する核種の挙動を記述する基本方程式は核種の崩壊、遅延を考慮に入れた球座標系半径方向 1 次元の多孔質媒体中の移流分散方程式である。この基本方程式には適切な初期条件、境界条件のもとに解析解が与えられている。

(4) トレーサ試験解析コード「DIPOLE」

本コードは、注水井と揚水井の 2 孔間で行われるトレーサ試験のシミュレーション用に開発され、移流分散パラメータの最適値の推定を行うことができる。

基本方程式は「FEMWASTE-PNC」同様、通常の直交座標系平面 2 次元の多孔質媒体中の移流分

散方程式であり、解析の精度をあげるため、2 つの井戸を中心とした曲線座標系において、有限差分法により解析される。

6.3 地層処分システム全体評価のためのコード体系

地下水移行シナリオに沿って、地層処分システム全体の評価を行うためには、以下の手順で一連の核種移行計算が行えるように計算体系を整備することが必要である。この体系では、6.2 で述べた個別現象モデルをモジュールとして組み合わせ、

- ① ガラス固化体のインベントリ計算
- ② ファーフィールドの水理計算
- ③ ニアフィールドの核種移行計算
- ④ ファーフィールドの核種移行計算
- ⑤ 線量当量率計算

を図 6-1 に示すようなフローで計算する。

ニアフィールドの核種移行計算に「RELEASE」を用いる場合について説明すると、まず「ORIGEN-2」により計算されたガラス固化体の初期インベントリを「RELEASE」の内側（ガラス固化体側）境界に与え、地下水流動解析コード「FEMWATER」により決定した処分場近傍の地下水流速を外側境界条件である均一混合セルに与える。これにより、「RELEASE」を実行し、緩衝材中での核種の濃度分布、緩衝材から周辺岩盤への核種の移行率を計算することができる。「RELEASE」により計算された移行率をソースタームとし、「FEMWA

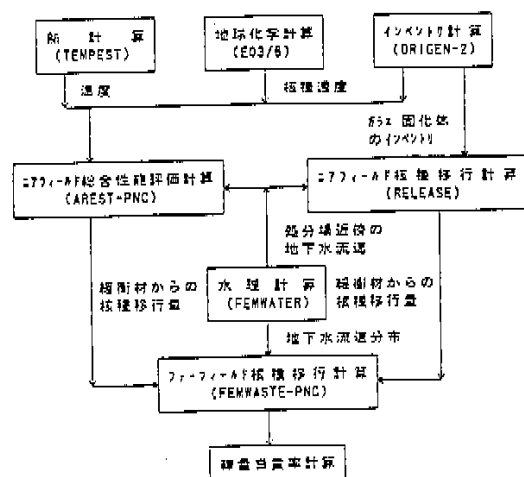


図 6-1 統合化モデルによる計算の流れ
() 内はコード名

TER」により計算されたファーフールド全体の流速分布を用いてファーフールドの核種移行計算を行なう。

「FEMWASTE-PNC」により体系内の核種濃度分布の時間変化が計算され、地表面への核種移行率から、例えば、(6.11)で示すような河川水摂取による線量当量率を計算することができる。

$$D_{ing} = \frac{T_{OUTi} M_{dr} DCF}{V} \quad (6.11)$$

ここに、

D_{ing} : 各種 i の年間線量当量率 (Sv/y)

T_{OUTi} : 各種 i の生物圏への年間移行率 (Bq/y)

V : 希釈水量 (m^3/y)

M_{dr} : 年摂取量 (m^3/y)

DCF : 換算係数 (Sv/Bq)

6.4 計算例

(1) 統合化モデルによる予備的性能解析^{1), 2), 3)}

本解析では、地下水移行シナリオに基づく核種移行を計算し、地層処分システム性能を概括的に評価した。評価対象とした核種は崩壊系列をなすAm-241, Np-237, U-233の3核種である。計算は以下の流れに沿って実施した。

① インベントリ計算 (ORIGEN-2)

② 水理計算 (FEMWATER)

表6-1 ニアフィールドの計算に必要なパラメータ (計算対象、数学モデル、計算条件)

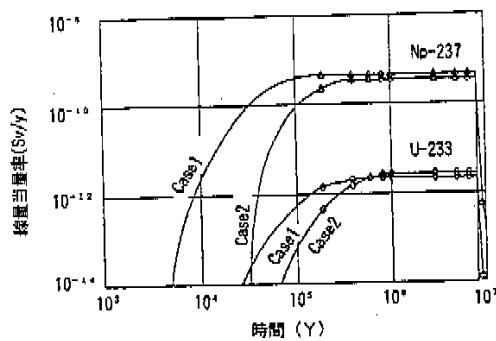
パラメータ	
計算対象	R_a : ガラス固化体の半径
	H_a : ガラス固化体の高さ
	W_D : オーバーバックの厚さ
	W_B : ベントナイト厚さ
	W_M : 均一混合セルの厚さ
数学モデル	K_{dB} : ベントナイト中の核種の分配係数
	ϵ_B : ベントナイトの空隙率
	ρ_B : ベントナイトの真密度
	V_B : ベントナイト中の地下水流速
	D_B : ベントナイト中の核種の拡散係数
計算条件	λ : 核種の崩壊定数
	R_1 : ガラス固化体中心からベントナイト内壁までの距離
	R_2 : ガラス固化体中心からベントナイト外壁までの距離
	S_{NB} : ベントナイト外側の表面積
	ϵ_R : 均一混合セルの空隙率
	ρ_R : 均一混合セルの密度
	K_{dR} : 均一混合セルの核種の分配係数
	V_M : 均一混合セルの容積
	S_N : 均一混合セルの外側の表面積
	V_R : 均一混合セル中の地下水流速
	T_D : オーバーバックの寿命
	C_0 : 核種の溶解度
	J_d : 核種の浸出率

表6-2 ファーフールドの計算に必要なパラメータ (計算対象)

パラメータ	
計算対象	・岩種
	・地 形
	・斜面の長さ
	・地層の厚さ (風化岩盤)
	(未風化岩盤)
	・処分場の深度
	・処分場の位置
	・処分場の面積
	・処分固化体本数

表6-3 ファーフールドの計算に必要なパラメータ (数学モデル、計算条件)

パラメータ	
水理計算	h : 圧力水頭
	K_{11} : 岩体の不飽和透水係数
	θ : 岩体の体積含水率
	n : 岩体の空隙率
	α : 岩体の圧縮率
	β : 地下水の圧縮率
	ρ : 地下水の密度
	μ : 地下水の粘性係数
	g : 重力加速度
計算条件	・ $\theta \sim h$: 体積含水率と圧力水頭の関係
	・ $K \sim h$: 透水係数と圧力水頭の関係
	・ 圧力水頭固定境界面
	・ 不透水境界面
核種移行計算	c : 核種濃度
	V_i : 地下水流速
	α_L : 岩体の縦方向分散率
	α_T : 岩体の横方向分散率
	T : 岩体のねじれ度
	ϵ_R : 岩体の空隙率
	ρ_R : 岩体の真密度
	D_m : 核種の分子拡散係数
	K_d : 岩体中の核種の分配係数
	λ : 核種の崩壊定数
	α : 岩体の圧縮率
計算条件	・ 核種濃度固定境界面
	・ 核種濃度勾配0境界面
	・ 核種流入流出フラックス0境界面
	・ ニアフィールドからファーフールドへの年間核種放出量の経時変化
被ばく線量計算	T_{OUT} : 核種の生物圏への放出量
	V : 希釈水量
	M_{dr} : 年摂取量
	DCF : 換算係数
	D_{ing} : 核種の年間個人線量当量率
計算条件	・ ファーフールドから生物圏への年間核種放出量の経時変化



Case1:処分場が動水勾配の大きい位置にある場合

Case2:処分場が動水勾配の小さい位置にある場合

縦方向分散率(m):200, 横方向分散率(m):15
透水係数(m/s): 1.0×10^{-7} (表層部), 1.0×10^{-8} (岩盤部)

図6-2 線量当量率の経時変化の計算例

- ③ 緩衝材中の核種移行計算 (RELEASE)
- ④ 地層中の核種移行計算 (FEMWASTE-PNC)
- ⑤ 線量当量率計算

表6-1～表6-3は、それぞれニアフィールドおよびファーフールドの計算に必要なパラメータの一覧である。これらのパラメータを適切に設定することにより、計算対象が設定でき、性能評価計算を行うことができる。図6-2は予備的性能評価計算から得られた、地表面に移行した核種の年間移行量から求めた線量当量率の経時変化である。これによると、Np, Uによる線量当量率は、ともに10万年程度になると定常状態に達し、それぞれ、 1.0×10^{-10} Sv/y, 1.0×10^{-12} Sv/y ときわめて小さい。

- (2) 地球化学的条件を考慮したニアフィールド核種移行に関する予備的解析¹⁾

ガラス固化体 (ホウケイ酸ガラス)、オーバーバック (低炭素鋼)、緩衝材 (Na-ベントナイト) および周辺岩盤から構成されるニアフィールドのバリア機能を地球化学的条件を考慮して評価するために、ニアフィールド総合性能評価コード「AREST-PNC」を用いた予備的解析を行った。地球化学的条件がガラスの溶解に及ぼす影響を評価するため、長半減期の核種であり、溶解度の大きいCs-135と溶解度の小さいU-238を対象として計算を実施した。これらの核種はガラス主成分であるとSiとコングメントに溶解すると考えてモデル化されている。

併せて、ガラスの成分であり、溶解度の大きいB-11の移行を評価した。オーバーバックの破損につ

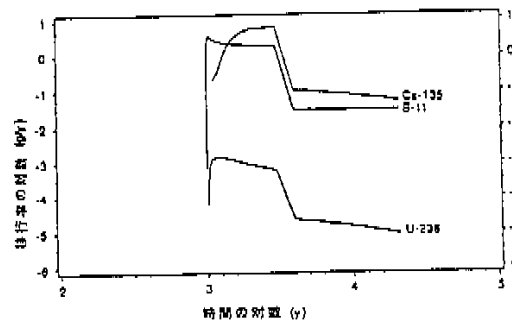


図6-3 AREST-PNCによる移行率の経時変化の計算例

いては、①1,000年後瞬時破損 ②1,000年を中心とした0年から2,000年までの破損を三角形の確立密度関数で近似 ③5,000年を中心とした0年から10,000年までの破損を三角形の確立密度関数で近似した3種類の形態を考えた。

例として、①の破損形態を考えた場合の緩衝材からのCs-135, U-238, B-11の移行率の経時変化を図6-3に示す。これを見ると、Cs-135, B-11は溶解度が大きいために、U-238に比べ、移行率は3桁程度高めになっている。また、オーバーバック破損後約2,000年の時期に、移行率が急激に低下しているのは、オーバーバックの腐食に伴って生成される鉄とSiの沈澱が、オーバーバックの腐食の完了に伴い生成されなくなり、その結果、ガラスの溶解速度が減少するためである。

この試計算では、主にガラス溶解メカニズムに関して、地球化学的な検討を行った。今後は、鉄-Siの反応に関する実験的研究の成果を持ってより詳細なモデル化を行うとともに、緩衝材中での地球化学的反応も考慮できるようモデルの改良を進める予定である。

- (3) 国際確証研究プロジェクトINTRAVAL** Case 3の解析^{5), 6)}

動燃事業団は、地層中の水理・核種移行モデルに関する国際確証研究プロジェクトINTRAVALに参加しており、分散モデルの確証研究に取り組んでいる。その一環として、Hanford Site DC-7/8のボーリング孔で実施された原位置試験 (ダイボール試験) のデータ (INTRAVAL Case 3) を使用し

** INTRAVALは放射性廃棄物処分場の性能評価を行うために、地下水と核種移行の概念モデルや数値モデルの妥当性を評価する目的で行われている国際確証研究プロジェクトである。

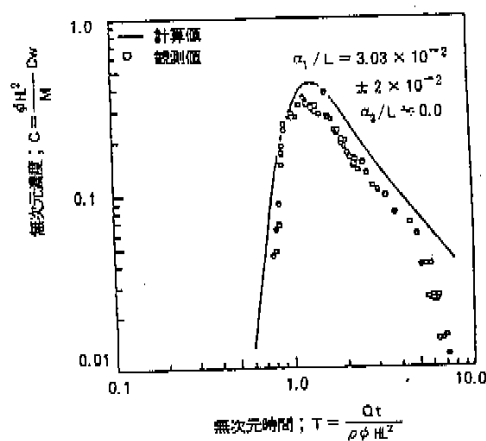


図6-4 計算値と実測値の比較

で、特に横方向の分散率の影響に着目して、上記の分散モデルの妥当性を検討した。「DIPOLE」を用い、縦方向及び横方向の分散率を推定した。

図6-4に「DIPOLE」の計算値と実測値との比較を示す。計算値は α_1/L が0.0303、 α_2/L が0の時最も実測値と一致した。ここで、 α_1 は縦方向分散率、 α_2 は横方向分散率、 L はトレーサ試験に使用したボーリング孔間距離である。本試験に関してはGelhar^{(7), (8)}は、横方向の分散率を無視して導出した解析解に基づいて、 α_1/L は、0.02~0.05の間にあると推定しており、本研究のモデルから得られた値と良く一致した。 α_2/L に関しては、この試験においては有意な値を示さなかった。

(4) カナダAECL 原位置試験データに基づく水理・核種移行計算モデルの適合性の検討

動燃とAECL (Atomic Energy of Canada Limited) とは、共同研究によりカナダホワイトシエル原子力研究サイトにおける花崗岩盤中の割れ目帯を対象とした原位置の水理・トレーサ試験(ダイポール試験)を実施している。これまでに得られた原位置試験観測データをもとに、「FEMWATER」、「FEMWASTE-PNC」、「DIPOLE」を用いて、透水量係数、帯水層幅、縦方向・横方向の分散率を推定し、各コードに使用されている水理・核種移行モデルの適合性について検討を行うとともに、AECLで開発した有限要素法による水理・核種移行計算コード「MOTIF」とのベンチマークを実施した。

パラメータの推定は以下のようにして行われた。

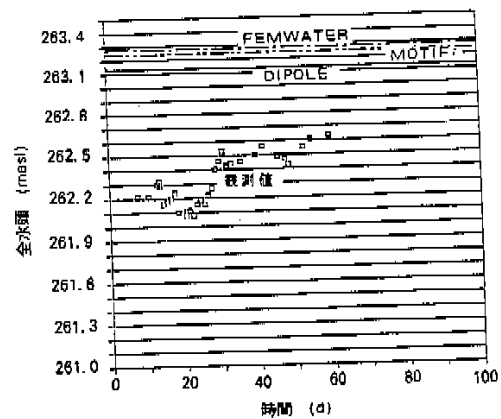


図6-5 WN12における全水頭の計算値と観測値の比較

まず、5本のボーリング孔(WN1, WN4, WN8, WN10, WN12)から得られた全水頭、ボーリング孔近傍の透水量係数及び亀裂情報から計算領域全体の透水量係数分布の推定を行う。次に、この空間分布をもとに2孔間(WN8:注水井、WN12:揚水井)で行われたトレーサ試験(ダイポール試験)を解析し、縦方向・横方向の分散率を推定する。これをパラメータの最適値を得るまで繰り返す。

透水量係数の空間分布の推定は「MOTIF」を用いて行われ、 1.6×10^{-2} 、 9.0×10^{-2} 、 1.3×10^{-2} (m/s)の3領域に分けられた。図6-5に「FEMWATER」、「DIPOLE」、「MOTIF」により得られた、WN12における定常状態での全水頭の計算値と観測値の比較を一例として示す。3つのコードはお互いに良く一致した結果が得られているが、観測値と計算

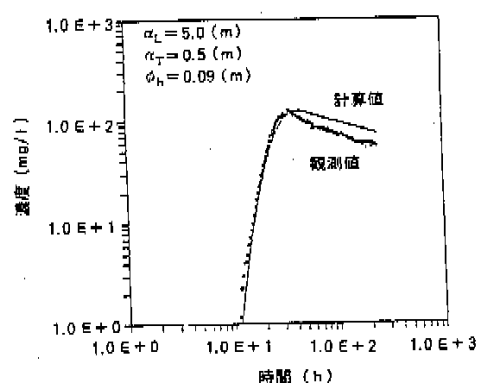


図6-6 WN12における破過曲線の計算値と観測値の比較

値の差は1 m—2 m程度ある。この理由として、水位がまだ定常に達していないと考えられること、水位の季節変動パターンが考慮されていないこと、透水量係数の推定方法に改良の余地があること、水の密度変化等が考慮されていないこと等が挙げられる。図6—6は「DIPOLE」によるWN12における破過曲線の計算値と観測値との比較を示している。この時の縦方向・横方向の分散率の値はそれぞれ5.0、0.5(m)である。この図より破過曲線の立ち上がりの部分は良く一致しているがテールの部分があまり一致していないことがわかる。今後、他の原位置試験データについても解析を行い、モデルの妥当性を引き続き検討する予定である。

6.5 あとがき

以上、地層処分システムの性能評価を行うために開発を行ってきたモデル、コードについて説明した。これらのモデルにより扱われている現象は、今後実験的研究からの成果を組み入れながら、詳細化を図って行く予定である。個別現象のより詳細なモデル化とともに、それに併せて、これらを統合した全体評価モデルの開発を進めて行く考えである。こ

の一端として、既に熱・水理・核種移行および応力・熱・水理の連成現象を扱う3次元のコードの開発に着手している。

参考文献

- 1) 堀中、梅木他、ニアフィールドおよびファールフィールドにおける水理・核種移行評価モデルの統合化、日本原子力学会放射線廃棄物研究連絡会報, pp.112—144, (1990)
- 2) S.MASUDA, H.UMEKI et al, OUTLINE OF PERFORMANCE ASSESSMENT STUDY ON GEOLOGICAL ISOLATION SYSTEM IN JAPAN, Proceedings of 1990 International High-Level Radioactive Waste Management Conference, Vol.1, pp.339—347, (1990)
- 3) S.MASUDA, N.SASAKI et al, AN OVERVIEW OF PERFORMANCE ASSESSMENT STUDY BY PNC FOR THE GEOLOGICAL ISOLATION OF HLW, Proceedings of the Symposium on SAFETY ASSESSMENT OF RADIOACTIVE WASTE REPOSITORIES, pp.842—848, (1989)
- 4) A.M.Liebertau, D.W.Engel et al, PRELIMINARY RADIO-NUCLIDE RELEASE CALCULATIONS USING THE AREST-PNC CODE, PROCEEDINGS OF THE 1989 JOINT INTERNATIONAL WASTE MANAGEMENT CONFERENCE, Vol. 2, pp.565—571, (1989)
- 5) 大井、出光他、フィールド試験用水理・核種移行評価モデルの開発、日本原子力学会放射線廃棄物研究連絡会報, pp.71—81, (1989)
- 6) T.Ohi, K.Idemitsu et al, CODE DEVELOPMENT FOR ANALYZING FIELD TRACER TEST DATA, PROCEEDINGS OF THE 1989 JOINT INTERNATIONAL WASTE MANAGEMENT CONFERENCE, Vol. 2, pp.335—338, (1989)
- 7) Gelhar, L.W., Collins, M. A., General Analysis of Longitudinal Dispersion in Non uniform Flow, Water Resour. Res.7(6), pp.1511—1521, (1971)
- 8) Gelhar, L.W., Analysis of Two-Well Tracer Test with a Pulse Input, Rockwell Hanford Operations, RHO-BW-BIP, Richland, W. A. (1982)