

拡散問題における均質化法の適用に関する研究

名古屋大学大学院工学研究科	学生員	藤井 直樹
名古屋大学大学院工学研究科	正会員	市川 康明
宇都宮大学工学部建設学科	正会員	清木 隆文

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物の地層処分の安全性を評価する際、放射性核種などの汚染物質の拡散現象を把握することが重要である。本研究では緩衝材として用いられるベントナイトが微視的レベルにおいて確率的に周期構造を持つとして、その微視的構造と巨視的な挙動を結びつけることができる均質化理論を導入して拡散問題の数値解析を試みる。

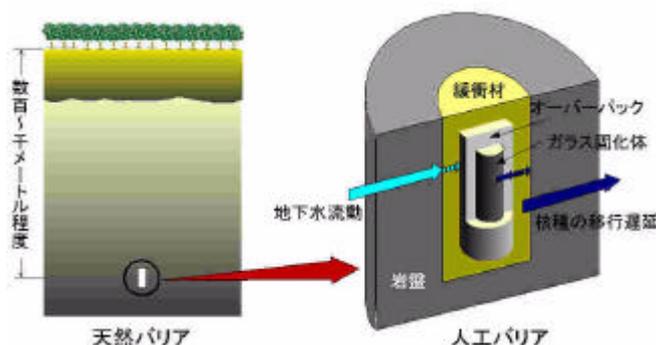


図1 地層処分の概念図

2. 拡散問題への均質化法の適用

均質化法はマイクロレベルで非均質な構造が周期的かつ規則的に配列された物体に対して、その構造を反映したマクロレベルの材料定数を求め、さらにマクロな解析解からマイクロな解を求めることができる理論である。

地盤中の溶質の移動は移流、物理的分散・拡散のフラックス、吸着・脱着の和となり、以下の微分方程式と境界条件、初期条件で与えられる。

支配方程式

$$\frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} + V_j^\varepsilon \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x_j} \right) - f^\varepsilon = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

ここで、変数 c^ε は溶質の濃度であり空間および時間の関数となる。 D_{ij}^ε は拡散係数、 V_j^ε は移流の平均流速、 f^ε は単位体積当りの吸着である。

上式の拡散問題の支配方程式に対し均質化理論を導入するとユニットセルにおける微視問題と、全体構造物における巨視問題についてそれぞれつぎの微分方程式が得られる。

微視問題 (ユニットセル)

$$\int_Y D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \chi_1^k}{\partial y_j} \frac{\partial W_k}{\partial y_i} dy = \int_Y D_{ik}^\varepsilon \frac{\partial W_k}{\partial y_i} dy \quad (2)$$

ここで $\chi_1^k(\mathbf{y})$ は局所座標における大域濃度 $c^0(\mathbf{x})$ の変化を表す特性関数、 $W_k(\mathbf{y})$ は Y-periodic な任意ベクトル関数である。したがって、ユニットセルにおける微視問題は式 (2) を周期条件の下で解くことにより χ_1^k を求める問題に帰着されることがわかる。

巨視問題 (全体構造物)

$$\int \frac{\partial c^0}{\partial t} W d\mathbf{x} + \int V_j^H \frac{\partial c^0}{\partial x_j} W d\mathbf{x} + \int D_{ij}^H \frac{\partial c^0}{\partial x_j} \frac{\partial W}{\partial x_i} d\mathbf{x} - \int f^H W d\mathbf{x} = \int_{\partial \Omega} \hat{q} W dS \quad (3)$$

ここで $W(\mathbf{x})$ は $W = 0$ on $\partial \Omega_c$ となる任意ベクトル関数であり、 D_{ij}^H 、 V_j^H 、 f^H はそれぞれ

$$D_{ij}^H \equiv \frac{1}{|Y|} \int_Y D_{ik}^\varepsilon \left(\delta_{kj} - \frac{\partial \chi_1^j}{\partial y_k} \right) dy; \quad V_j^H \equiv \frac{1}{|Y|} \int_Y V_k^\varepsilon \left(\delta_{kj} - \frac{\partial \chi_1^j}{\partial y_k} \right) dy; \quad f^H \equiv \frac{1}{|Y|} \int_Y f^\varepsilon dy \quad (4)$$

と表される均質化された拡散係数、流速、吸着である。

キーワード：均質化法、拡散、地層処分

連絡先：〒464-0814 名古屋市千種区不老町

tel 052-789-5415

FAX 052-789-3837

3. 数値解析

オーバーパックおよび緩衝材に関する製作、施工性も含めた仕様検討の結果、合理的な人工バリアの例として図2のような形が提案されている。この形で地層処分された後、オーバーパックの腐食により漏れ出た放射性核種の拡散挙動について数値シミュレーションを行うことにする。

緩衝材の用いられるベントナイトは層状構造を持つモンモリロナイトを主構成鉱物とし、その他水、マクロ粒子（石英、長石等の微粉末）から構成されている。今回はユニットセルとして純粋にモンモリロナイトからなるベントナイトを仮定し、固体（モンモリロナイト鉱物）部分とモンモリロナイト鉱物表面に吸着された水、普通の水から構成されていると仮定した。モンモリロナイトはモンモリロナイト鉱物と層間水との積層構造であるが、等方性を考慮して図3のようなモデルに単純化した。

なお、本解析では地下水などによる移流の影響はないものとし（ $V_j^e = 0$ ）自己拡散状態について考察することにした。

以上のモデルを用いて、オーバーパックの境界面から同じ濃度の放射性核種が同時に漏れ出たと想定して、境界条件としてオーバーパックに接する点の濃度を100%とし相対的な濃度分布を有限要素解析により求めた。

ベントナイト内の拡散係数は放射性核種の種類によって大きく異なるため、放射性核種としてPuを選びその拡散係数を表1で示した核燃料サイクル開発機構のデータ¹⁾から図3で示したユニットセル内の水の部分の体積相当分に割り増した値を用いた。

図4に解析結果（マクロ場の濃度）を示す。これらの解析を通じて、均質化法により微視構造を考慮した核種の各時間ステップごとの拡散挙動が表現できることが判った。

10年後の濃度分布について見てみると、オーバーパックから400mm以遠では濃度が0であり、ベントナイトが放射性核種を吸着し核種の拡散を十分抑制していることがよくわかる。このことから、吸着の物理化学的メカニズムをさらに詳細に究明することが重要であることが判る。

表1 ベントナイトの特性値 (Pu)

拡散係数 (cm ² /year)	94.6
分配係数 (m ³ /kg)	10.0
粘土の平均密度 (Mg/m ³)	1.60

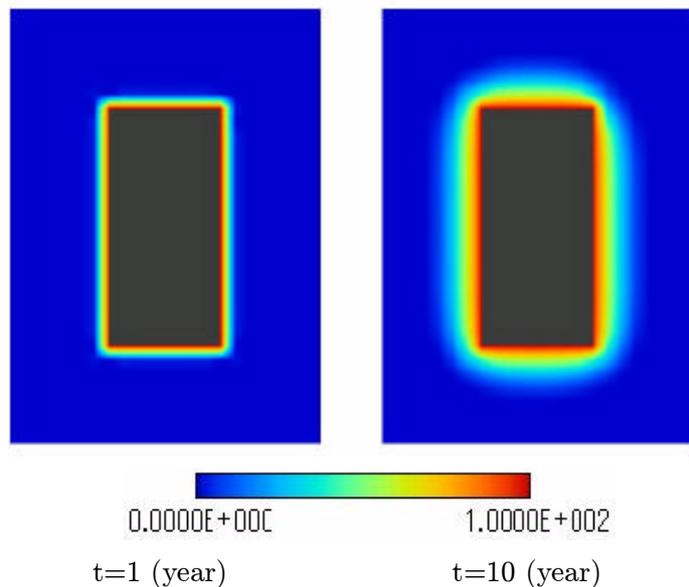


図4 放射性核種の濃度分布

4. おわりに

本研究では均質化法を拡散方程式に導入し数値解析できることを示したが、ベントナイトの変形や膨潤による影響も考える必要があることを今後の課題として挙げておく。

参考文献

- 1) 核燃料サイクル開発機構 (1999): 地層処分開発研究第2次とりまとめ第1次ドラフト

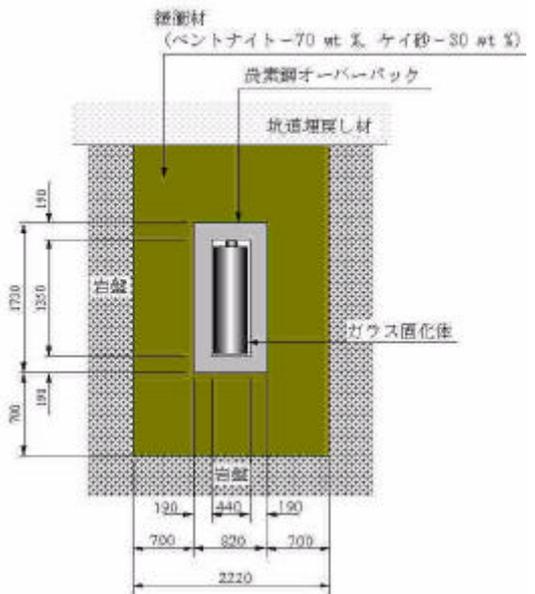


図2 人工バリアの仕様

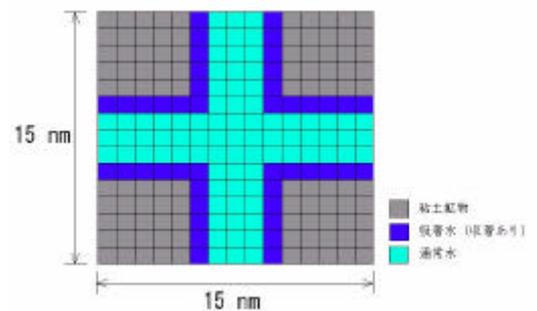


図3 ユニットセル