

熱-水-応力-化学連成解析モデルの開発(2)

- 連成解析モデルによるニアフィールド事例解析 -

日本原子力研究開発機構 正会員 ○鈴木 英明, 藤崎 淳, 藤田 朝雄
 非会員 内藤 守正, 油井 三和

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物の地層処分におけるオーバーパックの腐食や核種移行の環境条件の評価を行うため、人工バリア定置後のニアフィールドの挙動については、熱的、水理的、力学的および化学的プロセスが相互に影響を及ぼし合う連成挙動として扱うことが肝要である。「第2次取りまとめ」¹⁾以降、地球化学変遷を考慮した人工バリアの長期挙動のより現実的な理解と予測を目的とする熱-水-応力-化学連成モデル/コードの開発を進めている^{2), 3)}。本研究の一環として、連成解析モデル/コードの検証を目的に、熱-水-応力連成試験設備(以下、COUPLE)により工学規模での人工バリア試験を実施しており、これまでに、本解析モデルが試験結果を再現できることを確認している³⁾。本稿では、連成解析モデル/コードについて COUPLE を用いた検証、および、人工バリア定置後のニアフィールドの連成挙動に関する事例解析として、「第2次取りまとめ」で示した人工バリア仕様に対する熱-水-化学連成解析を実施したのでその結果について述べる。

2. 人工バリア試験の検証解析

熱-水-応力-化学連成モデル/コードは、熱-水-応力連成解析コード THAMES, 物質移行解析コード Dtransu, 地球化学解析コード PHREEQC を母体とし、各解析コード間の連成対象変数の受け渡しにより連成解析を行なうものである²⁾。

本解析モデル/コードの検証を目的に、COUPLE を用いて人工バリア試験を実施している。試験は、モルタルブロックの中心部に、緩衝材(70wt%クニゲル V1 と 30wt%ケイ砂の混合体、乾燥密度 1600kg/m³, 初期含水比約 13%)と廃棄体を模擬したヒーターを設置し、ヒーターの表面温度を 90°C, モルタル周辺温度を 70°C に設定して行った³⁾。

検証解析は、現時点で地球化学特性と力学特性の相互作用を考慮できていないため、表1の連成マトリクスに基づき熱-水-化学連成解析とした。そして、緩衝材とモルタルの2領域を一次元でモデル化し、大気系の試験であることから、緩衝材の不飽和領域には酸素(分圧 10^{-0.7}atm)および炭酸ガス(分圧 10^{-3.5}atm)を考慮した。緩衝材の平衡反応を考慮する鉱物は、玉髄、方解石とし、緩衝材中の酸素の挙動を把握するため黄鉄鉱の酸化については速度論で考慮した。また、スメクタイトのイオン交換反応、表面錯体反応を考慮した。モルタルの構成鉱物は、普通ポルトランドセメントに含まれる酸化物が全量セメント水和生成物になると仮定し、割付計算によって求めたハイδροガーネット、ブルーサイト、エトリンガイド、ポルトランドアイトおよび Ca/Si 比が 1.8 のカルシウムケイ酸塩水和物(以下、CSH ゲル)とした。初期間隙水は、これら水和生成物と純水の平衡反応溶液とし、二次鉱物として方解石および Ca/Si 比が 1.8 以下の CSH ゲルを考慮した。その結果、試験体中の温度分布、緩衝材の再冠水時間、180日後の緩衝材間隙水 pH の分布(図1)など、熱-水-化学連成解析結果は、試験結果を再現していることを確認した。

表1 解析で考慮した連成相関マトリクス

1-1) 熱 (フーリエ則)	1-2) 熱→水 ①温度勾配による水分移動 ②水分移動パラメータ変化 ③流体密度変化	1-3) 熱→化学 ①平衡定数変化 ②気相ガス分圧変化
2-1) 水→熱 ①熱輸送 ②熱物性変化	2-2) 水 (連続の式, ダルシー則)	2-3) 水→化学 ①溶液組成変化 ②気相ガス分圧変化
3-1) 化学→熱 考慮していない	3-2) 化学→水 ①溶液組成変化に伴う水分移動パラメータの変化(緩衝材)	3-3) 物質移行・地球化学 (質量保存の式・熱力学)

(色付けした各現象間での影響の伝播に関するプロセスを対角要素間の交点となる非対角要素に配置)

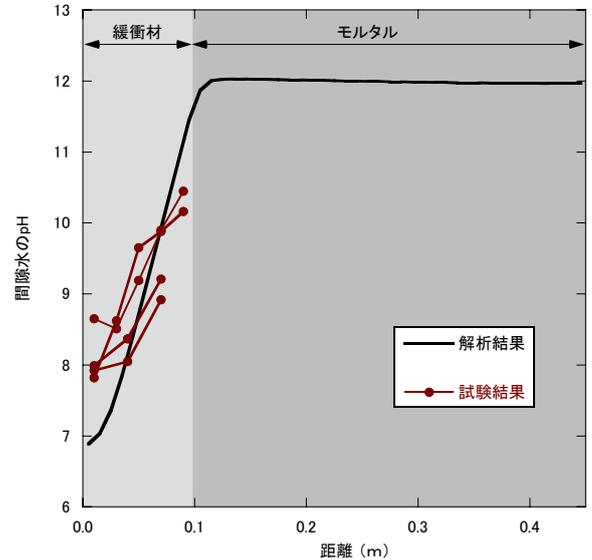


図1 180日後の間隙水 pH の試験結果と解析結果の比較

3. ニアフィールド事例解析

人工バリア定置後のニアフィールドの連成挙動に関する事例解析として、本解析モデル/コードにより熱-水-化学連成解析を実施した。解析領域は、「第2次取りまとめ」で対象とした軟岩系岩盤、処分深度 500m とし、緩衝材、支保工、岩盤の3つの領域を一次元でモデル化した。本解析は、緩衝材再冠水段階の過渡的な環境下における化学的な変遷に着目することとし 100 年後までを解析の対象とした。解析幾何学形状および解析条件を図2に示す。軟岩系岩盤(間隙率 0.02, 熱伝導率 2.2W/mK, 比熱 1.4kJ/kg/K, 固有透過度 1.0×10⁻¹⁵m²)において平衡反応を考慮する鉱物は、「第2次取りまとめ」のレファレンスケースで設定されている鉱物のうちの玉髄および方解石

とし、初期溶液組成は、同じくレファレンスケースの降水系地下水組成とした。緩衝材および支保工の設定鉱物および解析パラメータは、COUPLE の検証解析と同様の設定とした。境界条件としては、緩衝材内側の境界温度を 90℃、岩体外側境界の温度を 45℃の規定境界、それ以外は断熱境界とした。水分移動については、岩盤外側境界の全水頭を 500m の規定境界とし、それ以外は閉境界とした。物質移行については、岩盤外側境界を降水系地下水組成の規定境界とし、それ以外は閉境界とした。熱力学データは、「第2次取りまとめ」の溶解度計算で用いた熱力学データベース 991231c0.tdb(<http://migrationdb.jaea.go.jp/>)を採用した。

図3は、支保工周辺の間隙水 pH の時間・空間分布、図4は、100 年後の鉱物の変化量に関する解析結果であり、正が沈殿、負が溶解を表す。支保工領域に設定した CSH ゲルは、時間の経過とともに骨格内の Ca/Si 比が小さくなり、100 年後は Ca/Si 比 1.0 が支配的な CSH ゲルとなっている。これにともない、支保工の間隙水 pH が低下した。緩衝材中では、スメクタイトの表面錯体反応によって、また、岩盤中では、玉髄の溶解反応によって pH が低く保たれた。なお、緩衝材中には、約 0.1℃/cm の温度勾配が形成され、緩衝材の再冠水時間は約 6 年となった。

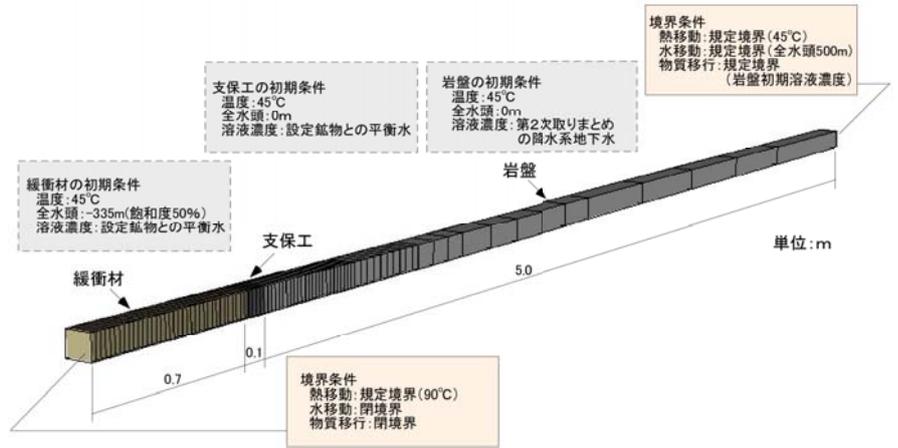


図2 事例解析の解析幾何形状と解析条件

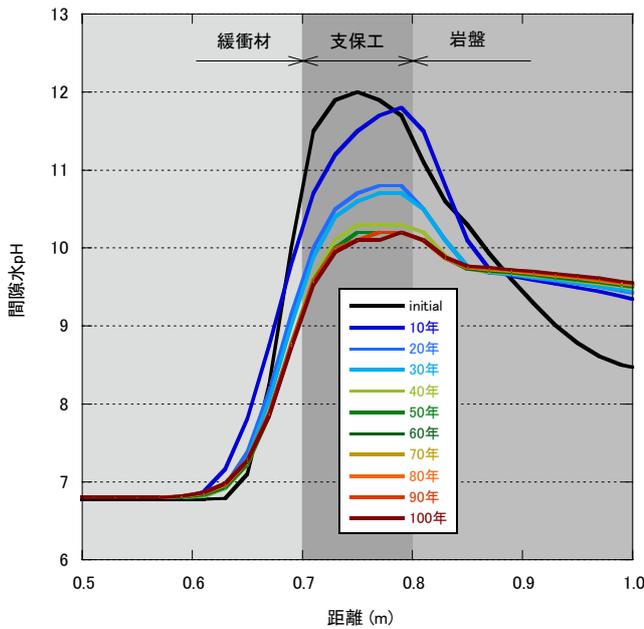


図3 間隙水 pH の変化

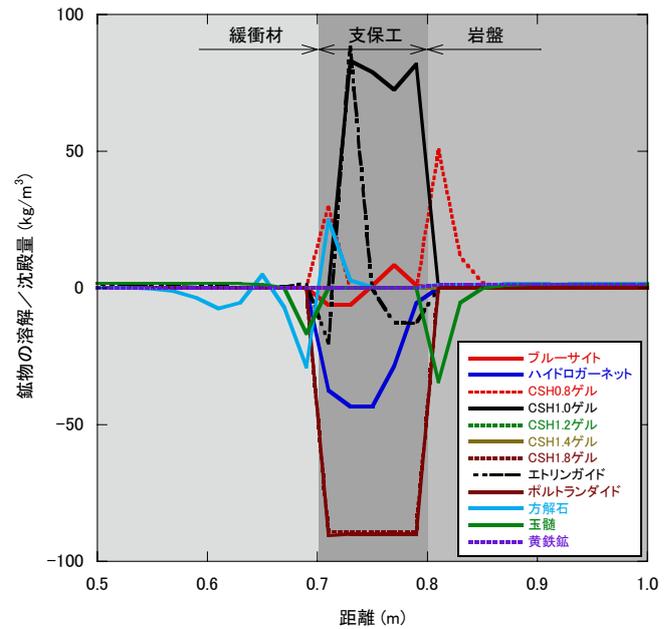


図4 100 年後の鉱物の沈殿溶解量

4. おわりに

熱-水-応力-化学連成モデル/コードの検証を目的に、工学規模での人工バリア試験の熱-水-化学連成解析を実施し、解析モデルにより試験結果を再現できることを確認した。さらに、人工バリア定置後のニアフィールドの連成挙動に関する事例解析を実施し、緩衝材再冠水段階における過渡的な環境下において、セメント材料支保工を中心とする化学的な変遷について把握した。

今後は、アルカリ性環境でのスメクタイトの変質にともなう緩衝材性能の変化や、地球化学特性と力学特性の相互作用に関するモデル化を進め、より現実的な解析評価を目指す。

【参考文献】

- 1) 核燃料サイクル開発機構(1999): 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—分冊2地層処分の工学技術, サイクル機構技術資料, JNC TN1400 99-022.
- 2) 伊藤彰, 川上進, 油井三和(2004): 高レベル放射性廃棄物地層処分におけるニアフィールドの熱-水-応力-化学連成モデル/解析コードの開発, サイクル機構技術資料, JNC TN8400 2003-032.
- 3) 核燃料サイクル開発機構(2005): 高レベル放射性廃棄物の地層処分技術に関する知識基盤の構築—平成17年取りまとめ—, サイクル機構技術資料, JNC TN1400 2005-015.