

# 熱・流体・力学連成解析のValidationに用いる 材料定数のばらつきの定量化検討

Study of quantification for uncertainty of the material parameters  
to use on validation of Thermo – Hydro – Mechanical coupling analysis

佐藤伸<sup>1)</sup>, 森岩寛稀<sup>2)</sup>, 伊藤真一<sup>3)</sup>, 高田雄大<sup>4)</sup>, 酒匂一成<sup>5)</sup>

Shin Sato, Motoki Moriwa, Shinichi Ito, Yudai Takada and Kazunari Sako

1) 博(工) 株式会社大林組原子力本部設計第二部

(〒108-8502 東京都港区港南2-15-2品川インターシティB棟, E-mail:sato.shin.ro@obayashi.co.jp)

2) 株式会社大林組原子力本部原子力環境技術部

(〒108-8502 東京都港区港南2-15-2品川インターシティB棟)

3) 博(工) 立命館大学理工学部 (〒525-8577 滋賀県草津市野路東1-1-1)

4) 鹿児島大学大学院 博士前期課程 海洋土木工学プログラム

(〒890-8580 鹿児島県鹿児島市郡元1-21-24)

5) 博(工) 鹿児島大学学術研究院 (〒890-8580 鹿児島県鹿児島市郡元1-21-24)

One of the validation methods is to quantify the uncertainty using the area difference of the cumulative distribution function. As part of international joint research, an in-situ test was conducted to understand the Thermo-Hydro-Mechanical coupled behavior, and the reproducibility of relative humidity has become a problem. In the Thermo-Hydro-Mechanical coupled analysis, the reproducibility of relative humidity depends on the retention curve. Therefore, the MCMC method was applied to the moisture characteristics obtained by the experiment to calculate the probability distribution and quantify the variation.

**Key Words:** Thermo-Hydro-Mechanical coupled analysis, MCMC method, Validation

## 1. はじめに

放射性廃棄物処分における施設設計や安全評価では、数値解析が多用される。そのため、数値解析の妥当性検証用のデータベース構築のため、国際的な共同研究が欧州の地下研究所を中心に行われている。その中の一つにスイス北西部のジュラ州にモンテリ岩盤試験場がある。ここでは、放射性廃棄物処分やCCSに係る国際共同研究として50種類にも及ぶ原位置試験が行われている<sup>[1]</sup>。そのうちの一つに放射性廃棄物処分施設の人工バリアを1/2スケールで模擬した原位置ヒーター試験の一つであるHE-E試験があり、2011年6月から試験が継続されている。HE-E試験の目的は、熱・流体・力学（以降、THM）連成解析の検証に必要な試験データベースの構築及び要素試験から得られた挙動をフィールドスケールに拡張することの妥当性検証である。図-1<sup>[2]</sup>にHE-E試験の概要図を示す。坑道中央に廃棄体を模擬するヒーターがブロックベントナイト上に設置されており、Heater1区間では砂を65%配合した砂ベントナイト混合土（以下、SB部）、Heater2区間では粒状ベントナイト（以下、B部）で埋戻されており、両区間はコンクリートプラグで分割されている。HE-E試験は埋戻し後、2011年6月4日から加熱試験を開始し、2012年10月7日付近でヒーター温度が設定温度140℃に達し、その後は定常状態となって現在に至る。埋戻し部の乾燥密度はSB部が1.383 Mg/m<sup>3</sup>、B部が1.513 Mg/m<sup>3</sup>である。また、ブロッ

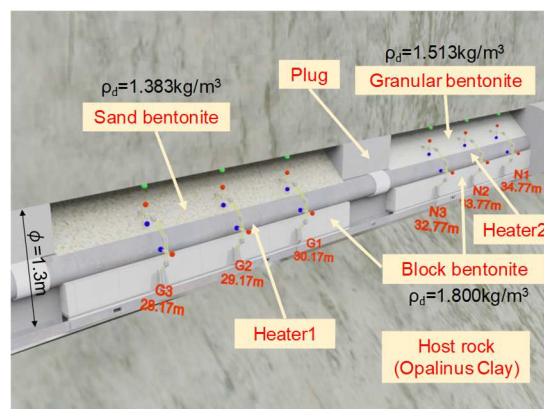


図-1 HE-E 試験の概要<sup>[2]</sup>

クベントナイトは乾燥密度1.8 Mg/m<sup>3</sup>である。

これまでに、DECOVALEXプロジェクト<sup>[3]</sup>などで複数の解析者によって試験の再現解析が実施され、定性的にモデル化の妥当性確認が行われている。一方で、ASME V&V 10.1<sup>[4]</sup>では、不確実性を定量化して、定量的に妥当性確認を行うことが要求される。再現解析における不確実性は、形状、材料、荷重及び境界条件などが考えられるが、本検討では、材料のばらつきに着目する。材料のばらつきは、多くの試験結果から統計処理を行い、正規分布等を用いて確率密度分布を定義することが多い。しかし、THM

連成解析を行う場合に必要となる、二相流特性のうち、水分特性曲線については、統計処理を行うほど多くの試験結果を得られていない場合がある。また、強度、ヤング係数及び透水係数のように、ある一つの値のばらつきを示すのではなく、水分特性曲線のように複数のパラメータで決定される特性に対するばらつきを定量化する必要がある。そこで、本研究では、ベイズ推定手法の一つであるマルコフ連鎖モンテカルロ法（以下、MCMC法）を用いて、保水性試験結果に対して水分特性曲線のモデルパラメータの推定し、ばらつきの幅を定量化する。

## 2. MCMC法の概要<sup>[5]</sup>

MCMC法はマルコフ連鎖とモンテカルロ法を組み合わせたベイズ統計計算手法の一つであり、ベイズの定理を利用して事後分布を推定する際に、マルコフ性を仮定したモンテカルロ法を行うことで事後分布に従う乱数を発生させることができるアルゴリズムである。モンテカルロ法は、乱数を用いて近似計算を行う手法であり、与えられた関数を再現するように点列を抽出し、関数の積分をサンプリングされた点の和に変換するものである。マルコフ連鎖は、確率過程モデルの一つであるマルコフ過程で表現される。これは、現在の状態と過去の状態変化の間にある依存関係を単純化して「未来の状態は現在の状態のみに依存し、過去の情報には影響されない」と仮定しており、式(1)で表される。

$$p(X_{i+1}|X_i, X_{i-1} \cdots X_i) = p(X_{i+1}|X_i) \quad (1)$$

ここで、 $t$ は時間、 $X$ は状態を表している。このマルコフ過程において、時間と状態が離散的な場合をマルコフ連鎖と呼ぶ。マルコフ連鎖は、エルゴード性（既約的かつ非周期的かつ正再起的）を満たす場合に、初期の状態に依存せず、ある定常分布に収束することが知られている。定常部分分布とは、式(2)に示すようにマルコフ連鎖の遷移行列  $\mathbf{P}$  に、状態に関する確率ベクトル  $\pi_i$  を掛けても状態が変化しないベクトル  $\pi_{i+1}$  を指す。

$$\pi_{i+1} = \mathbf{P}\pi_i \quad (2)$$

この定常分布と求めたい事後分布が一致するようなマルコフ連鎖を構築することができれば、そこから得られる状態ベクトル  $\pi_i$  は事後分布からのサンプルとしてみなすことができる。MCMC法とはこのマルコフ連鎖の定常性を生かして事後分布に従う乱数を発生させるアルゴリズムである。

本研究は、MCMC法の代表的なアルゴリズムの一つであるメトロポリス法を用いて分析を行った。図-2はメトロポリス法の計算フローを示す。メトロポリス法では、パラメータ  $\theta_{(t)}$  を用いて計算された尤度  $L(\theta_{(t)})$  と、次の候補点となるパラメータ  $\theta_{(t+1)} = \theta_{(t)} + \varepsilon$  ( $\varepsilon$  は正規乱数より発生) を用いて計算された尤度  $L(\theta'_{(t)})$  を比較することでパラメータの更新の判断を行う。この際、 $r = L(\theta'_{(t)})/L(\theta_{(t)})$  を

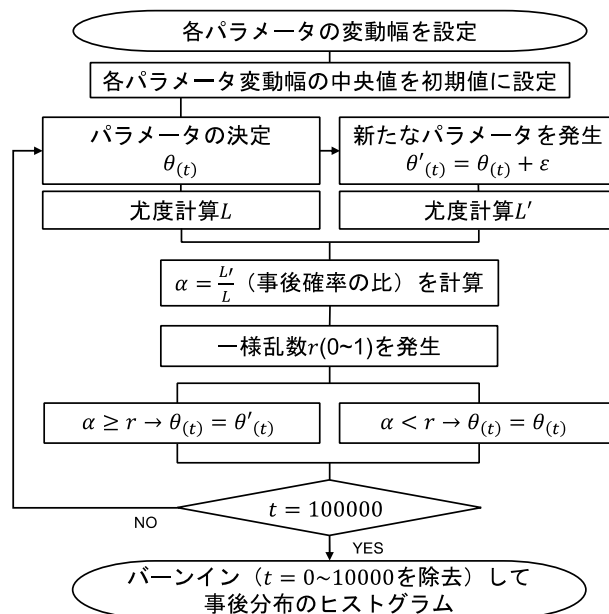


図-2 メトロポリス法の計算フロー図

算出し、 $r \geq 1$ の時、無条件でパラメータの更新を行い、 $r < 1$ の時、確率  $\alpha$  でパラメータの更新を行う。この時、確率  $\alpha$  は  $0 \sim 1$  の一様乱数で与え、 $r \geq \alpha$  の時、パラメータの更新を行い、 $r < \alpha$  の時、パラメータの更新は行わず、次の候補点に移行する。この操作を何万回と繰り返し、各パラメータが定常状態になるまで続ける。定常状態に収束した後、パラメータが収束していない部分を除去(バーンイン)することで、定常状態に収束後のパラメータの事後分布が得られる。なお、本研究では尤度計算に、次式(3)に示す多次元正規分布を仮定している。

$$L(\theta_{(i)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^m |\mathbf{R}|} \exp \left[ -\frac{(y - h(\theta_{(i)}))^T \mathbf{R}^{-1} (y - h(\theta_{(i)}))}{2} \right] \quad (3)$$

ここに、 $\mathbf{R}$  は分散共分散行列、 $m$  は試験データのプロット数、 $y$  は試験データ、 $h(\theta_{(i)})$  は  $i$  回目のパラメータ  $\theta_{(i)}$  を用いた場合の水分特性曲線モデルによって得られた計算値を表している。

## 3. 着目するパラメータ

### (1) 水分特性曲線に着目する意義

HE-E試験の計測は、埋戻し部が、温度、間隙圧力及び相対湿度であり、岩盤内は水圧と温度である。これまでの検討で、温度の再現性については、設定された熱伝導率で、高い再現性が得られることが分かっている<sup>[3]</sup>。一方で、相対湿度の再現性については、解析コード内のモデル化方法に左右される<sup>[3]、[6]</sup>。具体的には、水相が熱せられることによって気化する相変換を構成式で考慮するか否かにより、ヒーター近傍の相対湿度変化の再現性に影響を及ぼすことが分かっている。他方、U. Kuhmann et. al.<sup>[7]</sup>はHE-E試験を対象に逆解析による二相流パラメータの感度解

析を実施している。検討の結果、解析結果に最も影響を及ぼすものの一つに水分特性曲線を表すモデルパラメータを上げている。相対湿度は、サイクロメトリック則<sup>[8]</sup>によって表現されることが多く、式(4)及び式(5)になる。

$$\theta_g^w = (\theta_g^w)_0 \cdot e^{\frac{(p_g - p_l) \cdot M_w}{R \cdot (273.15 + T) \cdot \rho_w}} \tag{4}$$

$$RH(\%) = \frac{\theta_g^w}{(\theta_g^w)_0} \cdot 100 \tag{5}$$

ここで、 $(\theta_g^w)_0$ は飽和状態における空気相中の水蒸気濃度、 $p_l$ は水圧、 $p_g$ は空気圧、 $M_w$ は水のモル質量、 $R$ は気体定数、 $T$ は温度及び $\rho_w$ は水の密度を表す。式(4)にサクション ( $s = p_g - p_l$ ) 項があり、水分特性曲線に依存することが分かる。そこで、水分特性曲線の不確かさを定量化すれば、相対湿度変化の再現性を定量的に示すことが可能になる。なお、本研究で用いる水分特性曲線は、van Genuchtenモデルとし、式(6)による。

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left\{ \frac{1}{1 + (-\alpha \cdot \psi)^n} \right\}^{1-\frac{1}{n}} \tag{6}$$

ここで、 $S_e$ は有効飽和度、 $\theta_s$ は飽和体積含水率、 $\theta_r$ は残留体積含水率、 $\alpha$ 、 $n$ は水分特性曲線の形状に関するパラメータである。

(2) 対象とする試験

実験結果の相対湿度変化に着目し、埋戻し部の水分特性を対象とする。HE-E試験の埋戻し材は図-1に示したように、2種類のベントナイトが用いられている。Gaus I, et. al<sup>[9]</sup>は各々の材料の水分特性として図-3及び図-4に示す結果を得ている。

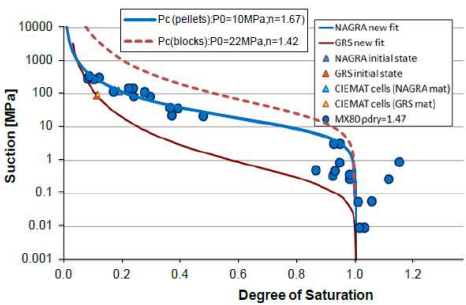


図-3 B部の対象材料の水分特性<sup>[9]</sup>

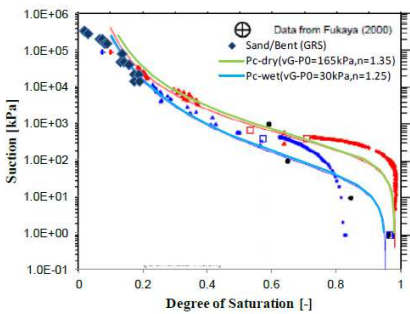


図-4 SB部の対象材料の水分特性<sup>[9]</sup>

ここで、対象とする試験値は、B部については、乾燥密度1.47 Mg/m<sup>3</sup>のMX-80を対象として取得された青丸を対象とし、SB部については、青のひし形のデータを対象とした。これに対して、MCMC法を用いて水分特性曲線の推定を行う。

4. MCMC法による解析結果

解析を実施するにあたり、各パラメータの変動幅を設定する。設定すべきパラメータは、式(6)で示した、 $\theta_s$ 、 $\theta_r$ 、 $\alpha$ 、 $n$ の4つである。パラメータの変動幅は、表-1に示すように設定した。各パラメータの初期値については、それぞれの変動幅の平均値とした。

表-1 各パラメータの変動幅

	$\theta_s$	$\theta_r$	$\alpha$	$n$
SB部	0.40~0.47	0.000~0.001	$10^{-5} \sim 10^{-2}$	1~5
B部	0.42~0.48	0.00~0.05	$10^{-8} \sim 10^{-3}$	1~3

MCMC法の試行回数は全てのパラメータが定常状態に収束した100,000回に設定した。尤度は各サクションに対する体積含水率の実験値と解析値の間に正規分布を仮定して、正規分布の平均値は各プロットの実験値とし、標準偏差は体積含水率の実験値の最大値と最小値の差の0.5%とした。バーンイン後のパラメータのヒストグラムを図-5、図-6に示す。横軸が各パラメータの変動幅で縦軸は相対度数で表している。それぞれのパラメータに対してピーク値を有する事後分布が得られた。このように、MCMC法では唯一の最適解を算出するのではなく、各未知パラメータを確率的に推定することができる。次に、図-5、図-6より得られたパラメータから算出された水分特性曲線を図-7、図-8にそれぞれ示す。ここで、バーンイン後の80,000個のパラメータから等間隔に500個の各パラメータを抽出することで500本の水分特性曲線で表している。

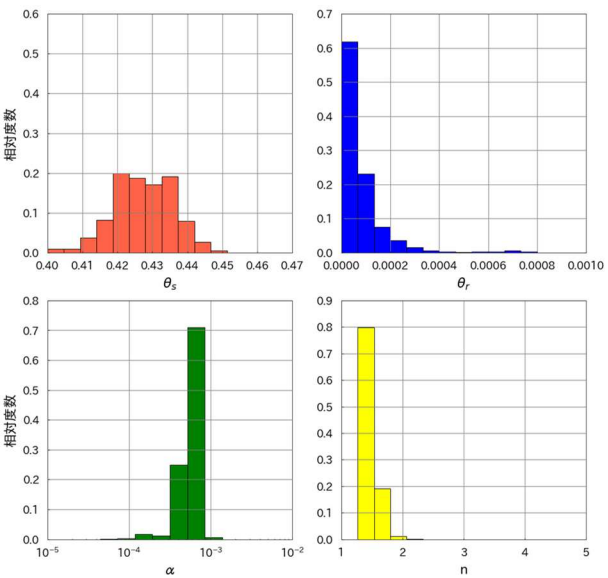


図-5 SB部のパラメータのヒストグラム

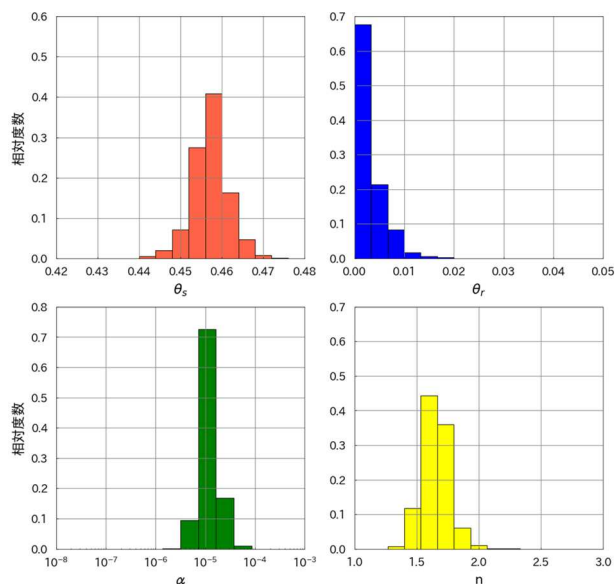


図-6 B部のパラメータのヒストグラム

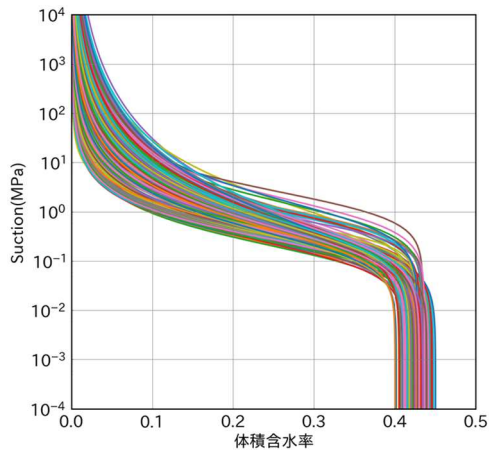


図-7 SB部の推定された水分特性曲線

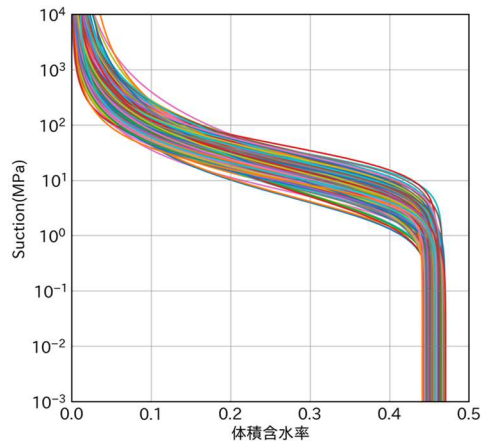


図-8 B部の推定された水分特性曲線

図-9及び図-10に実験結果とMCMC法より得られた水分特性曲線を比較している。同図では、実線が80,000本の水分特性曲線の平均値 $\mu$ であり、破線が $\mu \pm \sigma$ の範囲を示している。図より、ある幅を有する水分特性が得られており、水分特性のばらつきを定量的に示すことができる。

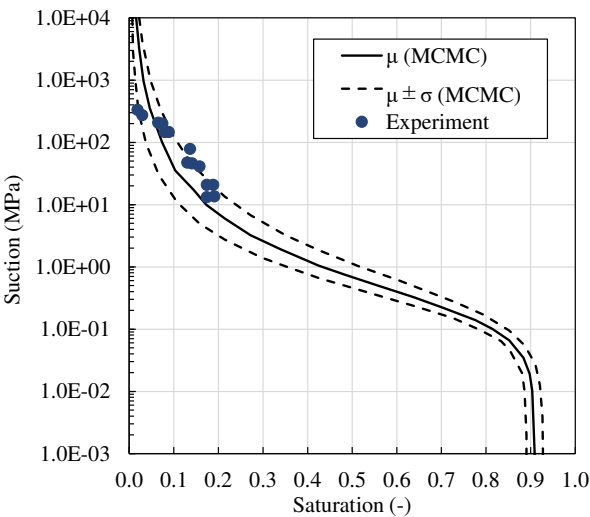


図-9 SB部の幅を有する水分特性曲線

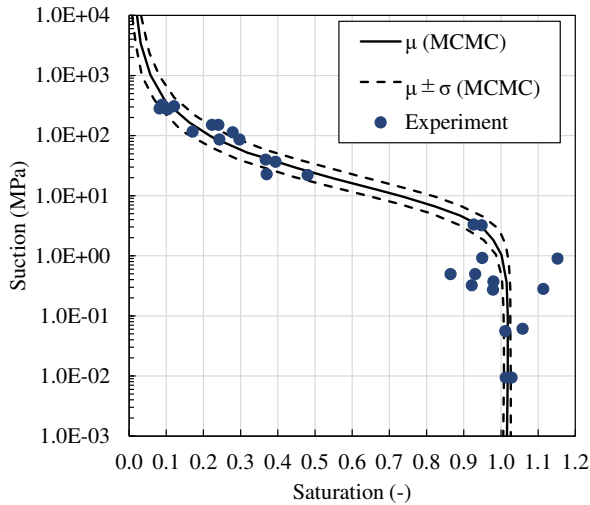


図-10 B部の幅を有する水分特性曲線

表-2 平均値 $\mu$ 及び $\mu \pm \sigma$ のvan Genuhtenパラメータ

		$\mu$	$\mu - \sigma$	$\mu + \sigma$
SB部	$\theta_s$	0.43	0.42	0.44
	$\theta_r$	0.00	0.00	0.00
	$\alpha$	$5.5 \times 10^{-4}$	$6.0 \times 10^{-4}$	$5.3 \times 10^{-4}$
	$n$	1.41	1.50	1.34
B部	$\theta_s$	0.46	0.45	0.46
	$\theta_r$	0.00	0.00	0.00
	$\alpha$	$5.5 \times 10^{-4}$	$5.5 \times 10^{-4}$	$5.5 \times 10^{-4}$
	$n$	1.60	1.66	1.57

図-9及び図-10に示した平均値 $\mu$ 及び $\mu \pm \sigma$ のvan Genuhtenパラメータを表-2に示す。

5. THM解析における利用法

前章で得られた水分特性曲線を用いたTHM連成解析による、相対湿度の再現性の評価を実施した。SB部の相対湿度の再現結果を図-11に示す。

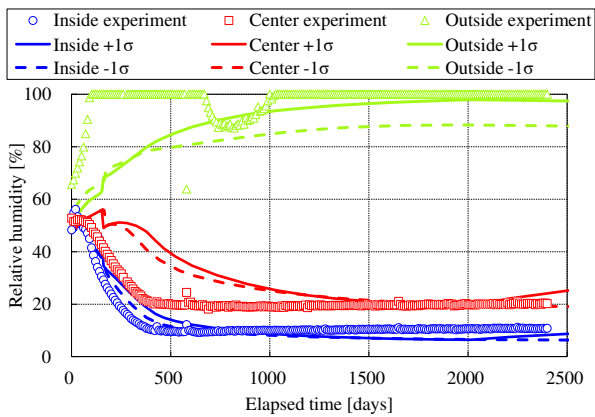


図-11 THM連成解析による相対湿度の再現性（SB部）

ここで、計測結果を点で示し、 $\mu + \sigma$ の結果を実線で示し、 $\mu - \sigma$ の結果を破線で示す。実線と破線の幅がパラメータのばらつきによる応答値の相違になる。ASME V&V 10.1<sup>[4]</sup>による評価を実施するのであれば、解析については、実験結果と解析結果（ $\pm 1\sigma$ ）の差から二点推定法を用いて応答値に関する確率密度分布を算出する。実験結果については、計測誤差等に関する確率密度分布を算出する。解析結果と実験結果から式(7)に示す累積密度分布の面積差を利用してシステム応答の計測基準値 $M^{SRQ}$ を計算し、不確かさの定量化を行う。

$$M^{SRQ} = \frac{1}{|\overline{SRQ}^{exp}|} \int_{-\infty}^{\infty} |F_{SRQ}^{mod}(y) - F_{SRQ}^{exp}(y)| dy \quad (7)$$

ここで、 $|\overline{SRQ}^{exp}|$ は計測値の平均値、 $F_{SRQ}^{mod}(y)$ と $F_{SRQ}^{exp}(y)$ はそれぞれ、解析結果と計測値の累積密度分布である。以上により計算された、各時刻におけるシステム応答の計測基準値 $M^{SRQ}$ から解析結果の妥当性を判断すれば良いことになる。

## 6. おわりに

本研究では、強度、ヤング係数及び透水係数のように、ある一つの値のばらつきを定義するのではなく、水分特性曲線のように複数のパラメータで決定される特性に対するばらつきを定量化する方法を示した。この方法は、多くの実験結果を統計処理するのではなく、いくつかの実験結果があれば、MCMC法を用いることにより、水分特性曲線のばらつきを定義することができることに特徴がある。検討の結果、パラメータの変動幅については、適切な範囲を指定すればある程度の範囲に計算が収束する

ことが分かった。今後は、パラメータの変動幅の妥当性について実験的な検討を実施する予定である。

## 参考文献

- [1] P. Bossart, et. al.: 25 Years Mont Terri Rock Laboratory, 1996 – 2021 commemorative Publication, 2021.
- [2] I. Gaus, et. al.: EBS behaviour immediately after repository closure in clay host rock: HE-E experiment (Mont terri URL), Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, *Geological Society*, 400, 71-91, 2014.
- [3] Garitte, B., et. al.: Evaluation of the predictive capability of coupled thermo-hydro-mechanical models for a heated bentonite/clay system (HE-E) in the Mont Terri Rock Laboratory, *Environmental Earth Sciences*, 76, Article number 64, 2017.
- [4] ASME: An illustration of the Concepts of Verification and Validation in Computational Solid Mechanics, ASME V&V 10.1, 2012.
- [5] 高田雄大ほか：加圧板法とマルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法を組み合わせた水分特性曲線推定方法の提案, *Kansai Geo-Symposium 2022 地下水地盤環境・防災・計測技術に関するシンポジウム論文集*, pp.214-219, .
- [6] Alcolea, A., et. al.: The Full-scale Emplacement (FE) Experiment Modeling Task Force, DECOVALEX Coupled Processes Symposium 2019, Brugg, Switzerland, *The DECOVALEX 2019 Project*, 18, 2019.
- [7] U. Kuhmann, et. al.: Inverse modelling of the HE-E experiment using iTOUGH2, Arbeitsberich, NAB 15-53, NAGRA, Dec. 2015.
- [8] Olivella, S., et. al.: Numerical formulation for a simulator (CODE\_BRIGHT) for the coupled analysis of saline media, *Engineering Computations*, Vol. 13, No. 7, pp.87-112, 1996.
- [9] Gaus I., et. al.: The HE-E experiment: Lay-out, Interpretation and THM modelling, Long-term Performance of Engineered Barrier Systems PEBS, D2.2-11: Final report on the HE-E experiment and D3.2-2: Modelling and Interpretation of the HE-E Experiment of the PEBS project, 2014.