

熱-水-応力-化学連成挙動に関する研究

概要報告書

(核燃料サイクル開発機構 業務委託報告書)

2002年2月

三菱重工業株式会社

株式会社 間組

本資料の全部または一部を複写・複製・転写する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319 - 1184 茨城県那珂郡東海村大字村松4番地49

核燃料サイクル開発機構

技術展開部 技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:

Technical Cooperation Section,

Technology Management Division,

Japan Nuclear Cycle Development Institute

4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1184,

Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)

2002

熱-水-応力-化学連成挙動に関する研究 - 概要報告書 -

(核燃料サイクル開発機構 業務委託報告書)

千々松正和^{*1}, 根山敦史^{*3}, 石原義尚^{*2},
雨宮清^{*1}, 塩崎功^{*1}, 岩田浩^{*3}, 佐川寛^{*2},
中川浩一^{*3}

要 旨

本研究は、地層処分システムのニアフィールドにおける連成解析を実現させるため、熱-水-応力連成解析コードへの物質移行モデルの追加、数値解析コード開発環境ツールを用いた予備的な連成解析について実施した。

- (1) 熱-水-応力-連成解析コードへの物質移行モデルの追加を目的として、機能要求、解析手法について検討し、オイラリアン・ラグランジアン法(EL法)による物質移行機能追加を基本とした改良計画を提示した。
- (2) 改良計画に基づき、既存の熱-水-応力連成解析コード(THAMES)に物質移行モジュールを追加し、検証計算を行った。
- (3) 高レベル放射性廃棄物人工バリアの緩衝材中における熱-水-応力場の塩の挙動を把握するため、改良した解析コード(THAMES-Transport)を用いて連成解析を行った。解析の結果、緩衝材中の塩の移行挙動や濃縮挙動は表現できたが、今回設定した解析条件の下では、塩の蓄積現象は生じなかった。
- (4) 数値解析コード開発環境ツール(Diffpack)上での連成解析の実現性を確認するため、予備的連成解析システムの設計、製作を行った。本予備的連成解析システムでは、既存の物質移行解析コード(HYDROGEOCHE)、地球化学計算コード(phreeqe60)の連成を対象とした。
- (5) 予備的連成解析システムの正確性を確認することを目的として、開発した連成解析コードと既存の物質移行-地球化学連成解析コード(HYDROGEOCHE)のベンチマーク解析を実施した。
- (6) THAMESの改良、予備的連成解析システムの製作を通じて課題を摘出し、短期的な開発計画(案)を作成した。

本報告書は、三菱重工業株式会社、株式会社間組が核燃料サイクル開発機構との契約により実施した研究成果である。

機構担当部課室：東海事業所 環境・保全研究開発センター 処分研究部
処分バリア性能研究グループ

* 1 株式会社間組

* 2 三菱重工業株式会社

* 3 コンピュータソフト開発株式会社

Investigation research on the evaluation of a coupled thermo-hydro-mechanical-chemical phenomena - outline report -

(JNC. Document Prepared by Other Institute, Based on the Trust Contract)

Masakazu Chijimatsu^{*1}, Atsushi Neyama^{*3}, Yoshinao Ishihara^{*2},
Kiyoshi Amemiya^{*1}, Isao Shiozaki^{*2}, Hiroshi Iwata^{*3},
Hiroshi Sagawa^{*2}, Koichi Nakagawa^{*3}

Abstract

In order to realize a coupling analysis in the near field of the geological disposal system, this study has been studied on the addition of the mass transport model to the coupled thermo-hydro-mechanical analysis code (THAMES) and preliminary coupling analysis by using development environmental tool (Diffpack) for numerical analysis.

- (1) In order to prepare the strategy on the addition of the mass transport model to the coupled thermo-hydro-mechanical analysis code (THAMES), we have studied on the requirement of THAMES-Transport and methodology of coupling analysis. . After that we set out modification plan by the Eulerian-Lagrangian (EL) method.
- (2) Based on the document of modification plan, we have done addition of the mass transport model to the coupled thermo-hydro-mechanical analysis code (THAMES) and carried out verification analysis in order to confirm on the accuracy of THAMES-Transport.
- (3) In order to understand on the behavior of NaCl in the porewater under the coupled thermo-hydro-mechanical phenomena in the HLW engineered barrier system, we have calculated coupling phenomenon by using THAMES-Transport. Transportation and concentration phenomena of NaCl are calculated but precipitation of NaCl is not occurred under the analysis conditions in this report.
- (4) In order to confirm about feasibility of coupling analysis under the development environmental tool (Diffpack) for numerical analysis, we have carried out on the design work and **writing program of the preliminary coupling system. In this study, we have adopted existing transport model (HYDROGEOCHEM) and geochemical model (phreeqe60) for preliminary coupling system.**
- (5) **In order to confirm program correctness of preliminary coupling system, we have carried out benchmarking analysis by using existing reactive-transport analysis code (HYDROGEOCHEM).**
- (6) **We have been prepared short-range development plan based on through the modification study of THAMES and writing program of the preliminary coupling system under the Diffpack.**

This work was performed by Hazama Corporation and Mitsubishi Heavy Industries, LTD. under contract with Japan Nuclear Cycle Development Institute.

JNC Liaison : Barrier Performance Group Waste Isolation Research Division
Waste Management and Fuel Cycle Research Center TOKAI WORKS

* 1 Hazama Corporation

* 2 Mitsubishi Heavy Industries, LTD.

* 3 Computer Software Development Co., Ltd.

目 次

1. はじめに	1
2. 物質移行解析モジュールの開発	2
2.1 概要	2
2.2 要求事項	3
2.2.1 水溶性物質移行解析機能追加	3
2.2.2 非水溶性物質移行解析機能追加	4
2.3 物質移行解析手法	6
2.3.1 水溶性物質移行解析手法（単相流）	6
2.3.2 非水溶性物質移行解析手法（多相流）	7
2.3.3 物質移行解析手法の長所・短所	8
2.3.4 物質移行解析手法の現状	11
2.4 オイリアン・ラグランジアン法（EL法）による物質移行機能追加（案）	13
3. 熱-水-応力連成解析コード THAMES への物質移行解析モジュールの組込と検証	14
3.1 概要	14
3.2 熱-水-応力連成場における塩の物質移行解析に必要な浸透流解析の手順	14
3.3 熱-水-応力連成場における塩の物質移行解析の手順	16
3.4 検証計算	16
4. 熱-水-応力連成場での塩の物質移行に関する数値解析の実施	20
4.1 概要	20
4.2 緩衝材内の塩濃度の設定	23
4.3 温度勾配下における緩衝材浸潤時の塩の物質移行に関するケーススタディ	24
4.3.1 ケース設定	24
4.3.2 解析モデル	26
4.3.3 解析結果	27
4.4 まとめ	42
5. 数値解析コード開発環境ツール上での連成解析の実現可能性に関する検討	43
5.1 予備的連成解析システムの設計	43
5.1.1 既存解析コードの分析	43
5.1.2 データ授受および処理フローの検討	45

5.2 製作仕様	46
5.2.1 システム構成	46
5.2.2 入出力仕様	47
5.2.3 既存コードの改良仕様	48
5.2.4 連成制御仕様	49
5.2.5 後処理仕様	51
5.2.6 動作の確認	53
5.3 実現可能性に関する検討	55
5.4 まとめ	56
6. 検証および課題の抽出	57
6.1 検証	57
6.1.1 検証仕様	57
6.1.2 検証結果	57
6.2 課題の抽出	58
6.2.1 短期的な運用を前提とした課題の抽出	58
6.2.2 短期的に連成を実現するための予備検討	60
6.2.3 課題の整理	61
6.3 まとめ	62
7. おわりに	71
8. 謝辞	72
9. 参考文献	73

目 次

図 2-1	熱 - 水 - 応力 - 物質移行 - 地化連成モデルの概念 (案)	2
図 2-2	地下水汚染物質の移動形態の概念図.....	7
図 2-3	EL 法による解析手法概念図.....	13
図 2-4	3次元解析による演算時間比.....	13
図 3-1	Warric ほかの浸透実験概念図.....	18
図 3-2	初期圧力水頭分布.....	18
図 3-3	Warric ほかの不飽和浸透特性曲線	18
図 3-4	深度 - 体積含水率分布図.....	19
図 3-5	深度 - 比濃度分布図.....	19
図 4-1	緩衝材内における塩の蓄積のイメージ.....	21
図 4-2	解析モデル図.....	26
図 4-3	解析メッシュ図.....	26
図 4-4	Case1-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図	29
図 4-5	Case1-2：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図	30
図 4-6	Case1-3：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図	31
図 4-7	Case2-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図	32
図 4-8	Case3-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図	33
図 4-9	Case3-2：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図	34
図 4-10	Case4-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図.....	35
図 4-11	Case5-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図.....	36
図 4-12	Case6-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図.....	37
図 4-13	Case6-2：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図.....	38
図 4-14	Case6-3：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図.....	39
図 4-15	Case6-4：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時変化図.....	40
図.5-1	HYDROGEOCHEM のモジュール間のデータの流れ.....	44
図.5-2	変数の配列位置確認手順.....	44
図.5-3	連成機能構成.....	46
図.5-4	連成制御に関わる関数構成	49
図.5-5	グラフ例 (1) 横軸：節点 (距離)，縦軸：沈澱量，線色：経時変化.....	52
図.5-6	グラフ例 (2) 横軸：節点 (距離)，縦軸：液相濃度，線色：経時変化	52
図.5-7	グラフ例 (3) 横軸：節点 (距離)，縦軸：pH，線色：経時変化.....	52
図.5-8	Diffpack の機能を有効に利用した場合の解析コード体系	55
図 6-1	予備的連成解析システム検証用解析モデル.....	67

図 6-2	カラム内における pH の分布	67
図 6-3	カラム内における方解石の濃度分布	68
図 6-4	カラム内における Ca 溶液トータル濃度分布	68
図 6-5	予備的連成解析システムの比較一覧	69
図 6-6	短期型改善（案）連成解析システム	70

表 目 次

表 2-1	水溶性物質移行解析に必要な解析条件.....	3
表 2-2	非水溶性物質移行解析に必要な解析条件.....	4
表 2-3	物質移行解析コード開発方針の課題.....	5
表 2-4	移流分散方程式の主な解析手法.....	6
表 2-5	主な解析手法の特徴（改訂地下水ハンドブック ²⁻⁵ ）に加筆修正）.....	7
表 2-6	THAMES への物質移行機能追加に対する各解析手法の長所・短所.....	10
表 2-7	物質移行解析コードの機能まとめ.....	12
表 3-1	熱-水-応力連成場における塩の物質移行解析.....	15
表 3-2	不飽和比較解析に用いた入力物性値.....	17
表 4-1	解析ケース.....	25
表 4-2	まとめ.....	41
表.5-1	化学平衡モジュール複数回呼出に関わる改良手法の比較.....	45
表.5-2	ハードウェア・ソフトウェア構成.....	46
表.5-3	入力ファイルに関する仕様・制約条件.....	47
表.5-4	既存解析器の改造箇所 - PHREEQE60 -	48
表.5-5	既存解析器の改造箇所 - HYDROGEOCHEM -	48
表.5-6	連成制御部に持たせる機能一覧.....	50
表.5-7	HGC 出力からのデータ変換一覧.....	51
表.5-8	PHR 出力からのデータ変換一覧.....	51
表.5-9	動作確認.....	53
表 6-1	予備的連成解析システムの検証用入力条件.....	63
表 6-2	予備的連成解析システムの開発を通じて抽出された課題の一覧.....	64
表 6-3	予備的連成解析システムの開発を通じて抽出された問題点に対する改善策の一覧.....	65
表 6-4	短期研究計画（案）.....	66

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物地層処分における処分場閉鎖後のニアフィールドの挙動は、廃棄体からの放熱、地下処分施設の再冠水、緩衝材の膨潤および変質など、熱的、水理的、力学的、化学的なプロセスの複合現象として取り扱う必要がある。

本研究は、高レベル放射性廃棄物の地層処分システムにおいて想定される複雑な現象の時間的・空間的な変遷（例えば、緩衝材中の間隙水組成や緩衝材組成の変化）に関する熱-水-応力-化学連成現象の予測を行うための現象理解に基づく数値解析システムの構築を目的とするものである。

本報告書では、以下の研究成果項目について内容を纏めたものである。

- (1) 熱-水-応力連成解析コードへの物質移行モデルの追加
- (2) 数値解析コード開発環境ツールを用いた予備的な連成解析の実施

2. 物質移行解析モジュールの開発

2.1 概要

処分場閉鎖後の岩盤クリープ、施設の再冠水、オーバーバックの腐食膨張、緩衝材の膨張・流出および緩衝材の変質などについて検討する場合、熱-水理-力学-化学的挙動の連成問題として取り扱う必要がある。現在、熱-水-応力連成問題に関して熱-水-応力連成解析コード THAMES（以下、THAMES と呼ぶ）が開発され、数値実験を通して、様々な検討がなされてきた。

しかし、緩衝材中の地下水組成や緩衝材組成の変化といった時間的、空間的な挙動を検討するためには、THAMES に対して地下水へ溶出した水溶性の物質移行解析機能（単相流）と水溶性物質に対する地球化学的モデル化（以下、地化と呼ぶ）機能を追加する必要がある。また、放射性分解や腐食により発生するガス移行を考慮する場合には、非水溶性の物質移行解析機能（多相流）も必要となる。

本章では、水溶性および非水溶性物質移行機能追加に必要な要求事項を抽出し、現状における物質移行解析手法について取りまとめ、THAMES に機能追加する際の課題を明らかにする。

図 2-1 に各連成項目を記述した熱-水-応力-物質移行-地化連成モデルの概念図（案）を示す。この図では、物質移行および地化解析機能を THAMES に対して別モジュール追加を前提とした概念図であるが、これに対して、全ての項に対して連成したモデルも考えられる。

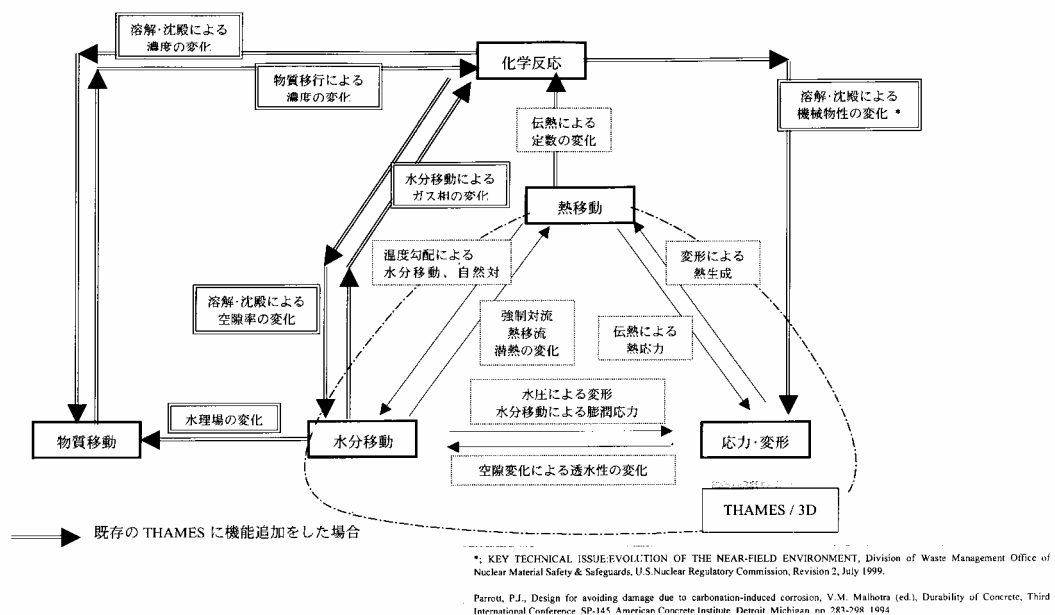


図 2-1 熱 - 水 - 応力 - 物質移行 - 地化連成モデルの概念（案）

2.2 要求事項

取り扱う物質移行現象によって要求される解析手法が異なり、また、解析手法毎に必要な解析条件がある。地下水中の物質移行を対象とする場合は、水溶性物質移行解析手法が必要となる。また、ガス移行を考慮する場合は、非水溶性物質移行解析手法が要求される。

解析手法について検討する際、地下水へ溶出した水溶性の物質移行解析（単相流）とガス移行を扱う非水溶性の物質移行解析（多相流）で解析手法が大きく異なる。このため、水溶性物質移行解析と非水溶性物質移行解析に分けて、二つの解析に必要な要求事項について検討する。

2.2.1 水溶性物質移行解析機能追加

地下水組成などを検討する地化機能を追加するためには、地下水挙動に対する水溶性物質移行解析機能が必要となる。水溶性物質移行機能を追加する場合、地化による化学反応が緩やかな場合、他の連成に対して単独に機能を追加することが可能である。

水溶性物質移行解析に必要なと考えられる解析条件は表 2-1 のとおりである。

表 2-1 水溶性物質移行解析に必要な解析条件

項 目		解析条件
基礎方程式		移流分散方程式
初期条件	地下水流動場（水理場）	熱 - 水 - 応力連成解析結果から設定
	水溶性物質濃度分布（液相濃度）	初期値として設定
移行パラメータ	分散長	設定値
	分子拡散係数（屈曲率を含む）	設定値
	有効間隙率	設定値（地下水流動場および有効間隙率から実流速を設定）
反応項による濃度変化	物質移行解析で反応項を考慮しない	液相濃度分布による地化解析結果から設定
	物質移行解析で反応項を考慮する	物質移行解析と地化解析で反復計算による反応項の修正を行う

一般に、水溶性物質移行解析では、移流分散方程式によってモデル化され、これまで多くの研究がなされてきている²⁻¹⁾。移流分散方程式は、地下水流動場が設定されれば単独に解くことが可能である。また、地下水組成などを対象とした化学反応では、非常にゆっくりとした反応と考えられることから、地化機能についても表 2-1 のように物質移行解析では反応項を考慮しないと考えることで、図 2-1 に示すように、THAMES に別モジュールとして組み込むことが可能である。

ただし、化学反応による濃度変化が短時間に大きく生じる場合は、物質移行過程と化学反応過程による濃度変化を同時に満足させることが必要となる。この場合、一つの解析手法として、物質移行解析で反応項を仮定した液相濃度を計算し、地化解析で液相中と固相上の濃度が対象とする化学反応式を満足しているかを検討し、反応項を修正して得られた

解が化学反応式を満足するまで反復計算を行うような、物質移行解析-地化機能解析間の連成手法が考えられる²⁻²⁾。

2.2.2 非水溶性物質移行解析機能追加

放射性分解や腐食により発生するガス移行を考慮する場合には、不飽和領域に対して、非水溶性の物質移行解析機能（多相流）が必要となる。非水溶性物質移行解析機能を追加する場合、不飽和領域に対して、水相 - 気相の二相流として取り扱う必要があり、熱-水相-気相-応力連成解析を THAMES に組み込む必要がある。また、地下水中の物質移行に関しては水溶性物質移行解析を組み合わせるか、熱-水相-物質相-気相-応力連成解析として THAMES に組み込む手法が考えられる。非水溶性物質移行解析に必要な解析条件は表 2-2 のとおりである。

表 2-2 非水溶性物質移行解析に必要な解析条件

項 目		解析条件
基礎方程式		各相に対して質量保存則およびダルシー則を適用。ただし、液相は非圧縮性、気相は圧縮性 液相間の濃度移動に関しては拡散方程式を適用
初期条件	各相のポテンシャル（もしくは圧力）	初期値として設定
	各相の飽和度	初期値として設定
移行パラメータ	絶対浸透率（固有透過度）	設定値
	各相の密度，粘性，体積圧縮率，熱膨張率，溶存比，溶液体積変化係数，容積係数，飽和率，相対浸透率曲線，毛細管圧力曲線	設定値
	濃度拡散係数	設定値（拡散方程式用）
反応項による濃度変化	物質移行解析で反応項を考慮しない	液相濃度分布による地化解析結果から設定
	物質移行解析で反応項を考慮する	物質移行解析と地化解析で反復計算による反応項の修正を行う

非水溶性物質移行を取り扱う多相流の研究は、石油工学²⁻³⁾や難溶性の地下水汚染解析²⁻⁴⁾で行われてきた。石油工学では、液相として水，油，気相としてガスが、地下水汚染では、液相として水，汚染物質，気相として空気の3成分がその対象とされてきた。非水溶性物質解析では、各相における飽和率 - 毛細管圧力，飽和率-相対浸透率関係が必要であり，実験的に取得する必要がある。また，これらの関係は強い非線形性を有するものであり，数値解析上，何らかの安定化手法が必要とされる。

また，地下水中の物質移行に関しては，以下の2種類の取り扱い手法が考えられる。

水相 - 気相の二相2成分として，熱-水相-気相-応力連成解析として THAMES に組み込み，地下水の流れを求め，物質移行に関しては水溶性物質移行解析と同様に取り扱う。

液相の拡散方程式を同時に解くことで、水相-物質相-気相の三相3成分として、熱-水相-汚染相-気相-応力連成解析として THAMES に組み込む。

水溶性として物質移行解析を実施する場合とガス移行を考慮して解析を行う場合の開発の課題について整理したものを表 2-3 に示す。

表 2-3 物質移行解析コード開発方針の課題

対象現象	地下水中の物質移行解析	ガス移行を含めた物質移行解析
流れ場	<ul style="list-style-type: none"> ・単相流 ・飽和・不飽和（気相：不動，液相：流動） 	<ul style="list-style-type: none"> ・多相流
支配方程式	<ul style="list-style-type: none"> ・液相流れ場： 飽和・不飽和浸透方程式 ・地下水物質移行：移流分散方程式 	<ul style="list-style-type: none"> ・流れ場： 気液二相の質量保存則 ・地下水物質移行：移流分散方程式
解析手法(案)	<ul style="list-style-type: none"> ・飽和・不飽和流：オイラー法 ・地下水物質移行：E L 法 	<ul style="list-style-type: none"> ・気液二相： オイラー法 ・地下水物質移行：E L 法
連成項目	<ul style="list-style-type: none"> ・地下水流動場の設定のみ必要 ・単独評価可能 	<ul style="list-style-type: none"> ・液相および気相流動場に対して 熱 液相 気相 応力 の連成が必要
流動様式	<ul style="list-style-type: none"> ・液相をダルシー流として評価 ・気相は不動空気。飽和度の関数として評価 	<ul style="list-style-type: none"> ・液相，気相の流れを均質な混合流として評価 ・気液二相の流れ形態（気泡流，スラグ流，チャーントービュレント流，環状噴霧流，噴霧流）は修正係数として評価
解析上の制約条件	<ul style="list-style-type: none"> ・制約条件が無い ・数値分散が無い 	<ul style="list-style-type: none"> ・メッシュサイズ，時間刻みの制約有り ・数値分散有り，安定化手法の検討が必要
長所	<ul style="list-style-type: none"> ・既存コード（THAMES 等）との組み合わせで構築可能 ・液相中の物質移行と現象を特定して対処するため，追加機能 / 課題を明確にしやすい ・移流分散方程式の入力パラメータのみ考慮 ・コードの確証を比較的行いやすい ・比較的短期で開発可能（単年度毎に成果が出せる） 	<ul style="list-style-type: none"> ・ガス移行を含めた解析が可能（フル連成）
課題	<ul style="list-style-type: none"> ・ガス移行に関して別途解析手法の検討が必要 ・化学反応との連成手法の検討 	<ul style="list-style-type: none"> ・連成組み込みの検討が必要 ・気相，液相と移動速度の異なる現象を扱うため，適切な解析手法の選択が困難 ・気液二相流に関して入力パラメータの取得が困難（相対浸透率，毛細管圧力等） ・実現象と解析結果の比較検討が困難（入力パラメータの精度と解析手法上の精度） ・解析コードの確証が困難 ・長い開発期間が必要 ・化学反応との連成手法の検討

2.3 物質移行解析手法

代表的な物質移行解析手法として、地下水中に溶け込んだ物質移行を対象とした水溶性物質移行解析手法とガス移行を含めた非水溶性物質移行解析手法がある。水溶性物質移行解析では、一般に移流分散方程式が用いられ、これまで解析手法に関して多くの研究がなされてきている。非水溶性物質移行解析では、質量保存則とダルシー則から流れの支配方程式が構成され、一般に差分法もしくは有限要素法による解析が行われてきている。

2.3.1 水溶性物質移行解析手法（単相流）

(1) 支配方程式

水溶性の物質移動解析では、一般に式(2-1)で示す移流分散方程式によってモデル化される。移流分散方程式では、移流項と分散項という2つの性質の異なる項を含んでいる。地下水の流速が遅い場合は分散支配問題となり、方程式は放物線的な性質を強め、また、流速が速い場合は移流支配問題となり、方程式は双曲線的な性質が支配的となる。

$$R\theta\rho\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(\theta\rho D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}) - \theta\rho V_i\frac{\partial c}{\partial x_i} - R\theta\rho\lambda c - Q_c \quad (2-1)$$

ここで、 R ：遅延係数[-]、 D_{ij} ：分散テンソル[L²T⁻¹]、 V_i ：実流速[LT⁻¹]、 Q_c ：源泉項（解析領域内での湧き出し）[ML³T⁻¹]、 λ ：減衰定数[T⁻¹]、 θ ：体積含水率[-]、 ρ ：流体密度[ML⁻³]、 c ：濃度[-]、 t ：時間[T]。

(2) 解析手法

水溶性物質移行現象は一般に移流分散方程式で表され、移流分散方程式の解析手法には、座標系や離散化の違いから、主に表2-4に示す4種類の解析手法がある。

表 2-4 移流分散方程式の主な解析手法

1) オイラー (Euler) 法
2) ラグランジュ (Lagrange) 法
3) オイリアン・ラグランジアン (Eulerian-Lagrangian) 法
4) LTG (Laplace Transform Galerkin) 法

これらの解析手法の特徴を表2-5に示す。

表 2-5 主な解析手法の特徴（改訂地下水ハンドブック²⁻⁵⁾に加筆修正）

特 徴	オイラー法	ラグランジュ法	オイリアン・ラグランジアン法	LTG 法
数学モデル	移流分散方程式	特性曲線の式 確率微分方程式	移流分散方程式	移流分散方程式
数値計算	FDM,FEM (固定座標系)	モンテカルロ法 (移動座標系)	移流問題は特性曲線法 分散問題は FDM,FEM	ラプラス変換した後 FDM,FEM
誤差	離散化誤差	-	離散化誤差, 補間誤差	離散化誤差 ラプラス逆変換
安定条件の制約	有	無	無	空間的には有 時間的には無
数値分散	有	無	無	やや有
観測データと数値解析結果の対応	普通	やや難	普通	普通
不均質パラメータの扱い	易	難	易 (細分割では難)	易
反応項の扱い	易	やや難	やや難	難
非線形性	モデル化可, 計算難	モデル化難	モデル化可, 計算難	難
3次元の計算	計算機の容量の 制約有	比較的易	計算機の容量の 制約有	比較的易
演算効率	普通	低い	低い(手法により普通)	高い

2.3.2 非水溶性物質移行解析手法（多相流）

非水溶性物質移行解析に関しても色々な研究がなされている。図 2-2 に不飽和帯から飽和帯にかけての汚染物質移行形態の模式図を示す。不飽和帯では、水相-汚染相-気相の移動形態であり、飽和帯では、水相-汚染相の移動形態となり、難溶性の汚染物質の場合は水相とは異なるポテンシャルで勾配に従って流動することが表現できる。また、難溶性汚染物質の移動の特殊な場合として、水溶性物質移行を含んでいると考えることができ、汚染相と水相間の物質移動速度（溶解・混和）を適切に設定することで、複雑な非水溶性物質移行挙動を検討することが出来る。

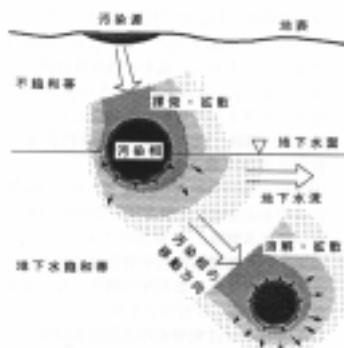


図-1 地下水汚染物質の移動形態の概念図
Fig. 1 An illustration of contaminant movement in subsurface.

図 2-2 地下水汚染物質の移動形態の概念図

2.3.3 物質移行解析手法の長所・短所

THAMES への物質移行機能追加に対する各解析手法の長所・短所を表 2-6 に示す。

(1) 要求事項および解析手法上の大分類での長短

地下水中の物質移行解析を目的とする場合は、物質移行解析を THAMES から独立した形式で導入が可能である。この場合、導入に際して解析手法の検証や作業効率が高く、また計算効率も高いと考えられる。ただし、この場合、ガス移行の評価はできない。

これに対して、ガス移行を含めた物質移行解析では、THAMES の連成の中に多相の連成を組み込む必要がある。このため、組み込み作業量が膨大になる懸念がある。また、解析手法の検証の際、全ての項について再度検討する必要がある。さらに、未知項が増えることから、計算効率が低下し、実用上の問題が発生する可能性がある。

(2) 水溶性物質移行解析での解析手法による長短

(i) オイラー法

オイラー法では、化学反応項の取り扱いがし易く、演算効率も通常である。しかし、移流項に対して数値解析上の安定性を保つためには、メッシュサイズや時間刻みの制約があり、連成解析で用いた要素分割に対して細分割等の検討が必要になる可能性がある。また、解析上の安定化手法の導入による数値分散の課題が残る。

(ii) ラグランジュ法

ラグランジュ法では、数値解析上の安定制約条件や数値分散の懸念は無い。しかし、演算効率が低く、また、不均質地盤への適応性が低く、実用上の課題が残る。また、粒子分布から空間的な濃度分布に置き換える作業が必要となり、局所的な濃度を求めるには適していないと考えられる。

(iii) EL 法

EL 法では、数値解析上の安定制約条件や数値分散の懸念が少なく、連成解析で用いた要素分割をそのまま流用した解析が出来ると考えられる。ただし、化学反応項の取り扱いの組み込みの際には、検討が必要である。オイラー法、ラグランジュ法の長所を兼ね備えており、効率的な解析手法と考えられる。

(iv) LTG 法

LTG 法は演算効率が高い手法であるが、非定常流れ場や非線形の化学反応項への対応が困難であることから、THAMES への導入には適さないと考えられる。

(3) 非水溶性物質移行解析での解析手法による長短

(i) 二相 2 成分

不飽和領域に関して気液二相を考慮し，THAMES に連成項として組み込み，また，地下水中の物質移行に関しては前述の水溶性物質移行解析手法を適用することで，両者の対応を行う。この場合，連成項目が少なくなることから，非水溶性物質移行解析としては若干組み込み作業量が少なくなると考えられる。

(ii) 三相 3 成分

水相，気相，物質相全てに関して THAMES に連成項として組み込み，ガス移行と地下水中の物質移行を同時に取り扱うため，解析手法上厳密な取り扱いとなる。ただし，その組み込み作業量は膨大になると考えられる。また，地下水中の物質移行に関しては，精度上のパラメータ設定の課題があることから，地化解析との連成には別途検討が必要になると考えられる。

表 2-6 THAMES への物質移行機能追加に対する各解析手法の長所・短所

要求事項	解析手法上の大分類		解析手法	解析に必要な連成項目	基礎方程式	化学反応との連成	THAMESへの導入	長所	短所	評価
地下水中の物質移行解析	水溶性物質移行解析	単相流	オイラー法	地下水流動場の設定のみ必要。単独評価可能	移流分散方程式	易	独立可	・化学反応項が扱い易い	・メッシュサイズの制約有 ・時刻刻みの制約有 ・数値分散の問題有	
			ラランジュ法		特性曲線の式 確率微分方程式	やや難	独立可	・安定性の制約が無い ・数値分散が無い	・化学反応項の扱いがやや難しい ・演算効率が低い ・不均質地盤に不向き	×
			EL法		移流分散方程式	やや難	独立可	・安定性の制約が無い ・数値分散が無い (他の連成メッシュ-タとの共有が行い易い)	・化学反応項の扱いがやや難しい	
			LTG法		移流分散方程式	難	不適	・安定した解析が可能 ・演算効率が良い	・定常流れのみ ・非線形項の取り扱いが困難。	×
ガス移行を含めた物質移行解析	非水溶性物質移行解析	多相流	二相 2成分 + 水溶性物質移行	熱水相 気相 応力	気液二相に対して質量保存則およびダルシー則で構成移流分散方程式	やや難	気液二相に対して組み込みが必要	・ガス移行の連成が可能 ・地下水物質移行の取り扱いがし易い。	・連成項，未知項が多く計算が困難。 ・機能追加作業量大	
			三相 3成分	熱水相 気相 物質相 応力	各相に対して質量保存則およびダルシー則で構成液相間は拡散方程式	やや難	組み込みが必要	・ガス移行の連成が可能 ・全ての未知項に関して同時連成が可能。	・地下水物質移行解析に難有り ・連成項，未知項が多く計算が困難。 ・機能追加作業量膨大	

2.3.4 物質移行解析手法の現状

物質移行解析は、表 2-6 に示したように、単相流（飽和-不飽和浸透流解析）+ 移流分散解析と多相流解析+ 移流分散解析の 2 種類に区分される。それ以外には、移流分散解析の代わりにパーティクルトラッキングを用いるラグランジアン的な解析手法も存在するが、現状での適用事例は必ずしも多くは無い。多相流を基にした解析は、地下水流動場を多相流解析によって求める方法と、NAPL 等の難溶性物質の取り扱いまでを目的としたものに分類される。しかしながら、いずれの場合においても地下水に溶解した物質の移行に関しては移流分散解析が用いられている。移流分散方程式の数値解析においては、移流項の取り扱いが問題となる。移流項を通常差分法等で離散化したオイリアンの場合には、例えば中心差分を採用した場合には数値振動、オーバーシュート、風上差分を用いた場合には数値拡散が生じる。通常オイリアンにおいては計算安定性を第一に考え、多少の数値拡散は許容する方向となっている。数値拡散を減少させるために、特に単相流解析を基にした解析コードでは、オイリアン-ラグランジアンを導入している事例が多い。

物質移行解析のコード別機能についての総括表を表 2-7 に示す。

表 2-7 物質移行解析コードの機能まとめ

コード名	基礎方程式	離散化手法	次元	移流項	熱連成	二重空隙	吸着	濃度依存	複数物質	機械的分散	分子拡散	親核種崩壊	娘核種	NAPL	溶解	揮発	地層処 分事例	マシン	公開/ 非公開	開発元
TOUGH2(EOS7R)	2相 + 移流分散	積分型差分	3	E						×				×	×	×		マルチ	購入	LBL
T2R3D	2相 + 移流分散	積分型差分	3	E	×								×	×	×	×		マルチ	非	LBL
T2VOC	3相 + 移流分散	積分型差分	3	E	×				×	×		×	×					マルチ	購入	LBL
GETFLOWS	3相 + 移流分散	積分型差分	3	E	×	×	×		×	×		×	×				×	EWS	非	東京大学
MOC3D	飽和 + 移流分散	積分型差分	3	EL	×			×	×				×	×	×	×	×	PC	公開	USGS
MT3D	飽和 + 移流分散	積分型差分	3	EL	×			×	×				×	×	×	×	×	PC	購入	Waterloo Hydrogeologic
Dtransu-3D-EL	飽和・不飽和 + 移流分散	有限要素法	3	EL	×	×			×				×	×	×	×	×	PC	公開	岡山大学他
CTRAN/W	飽和・不飽和 + 移流分散	有限要素法	2	E	×	×			×			×	×	×	×	×	×	PC	購入	GEOSLOPE
ParFlow	3相流	有限体積法	3		×	×											×	CRAY	非	LLNL
NAMMU	飽和・不飽和 + 移流分散	有限要素法	3	E	×	×						×	×	×	×	×		UNIX/NT	購入	AEA
ECLIPSE	3相流	積分型差分	3			×											×	EWS	購入	Schlumberger Geoquest

2.4 オイラリアン・ラグランジアン法 (EL 法) による物質移行機能追加 (案)

THAMES をベースに熱-水-応力-物質移行解析コードを構築しようとした際には、THAMES が単相流モデルであるため、水溶性物質を対象とした解析コードとなる。水溶性物質移行解析の解析手法としては表 2-6 で示したように、EL 法が有用な解析手法と考えられる。また、表 2-7 に示す既存の物質移行解析コードの現状を鑑みると、公開コードである Dtransu-3D-EL の物質移行解析機能を導入するのが効率的かつ経済的であると考えられる。EL 法を THAMES に導入する際、以下の機能追加が考えられる。

THAMES で実施した連成解析の要素分割を用い、地下水流動場のみを引き継ぐ。

設定された地下水流動場に対して、節点後退粒子追跡法を用いて濃度分布を求める (図 2-3 参照)。

演算効率を向上させるため、ブロック分割探索法を導入する (図 2-4 参照)。

地化解析との連成に際して、反応項の非線形性の組み込みと反復計算手法による連成を考慮する。

計算精度を向上させるため、連続粒子移動法を併用し、要素の自動細分割機能を追加する (図 2-3 参照)。

上記の内、 \square 、 \bullet は必須の項目と考えられる。また、実用上演算効率の向上のため、 \square が次に優先順位が高いと考えられる。 \square については地化解析との検討により選択される。

また、 \square については対象とする物質移行の形態により検討が必要になると考えられるが、この機能追加に関しては組み込み作業量がかかなり多くなると考えられる。

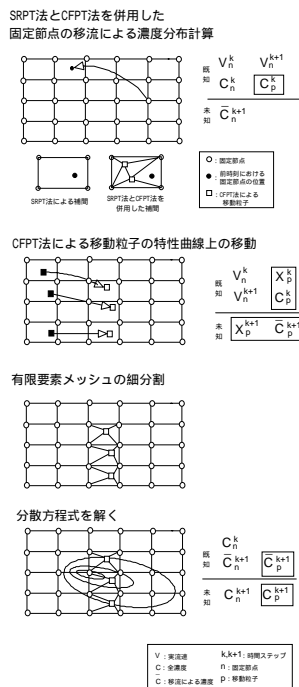


図 2-3 EL 法による解析手法概念図

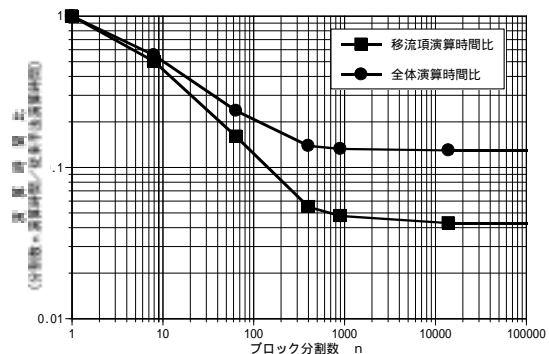


図 2-4 3次元解析における演算時間比

3. 熱-水-応力連成解析コード THAMES への物質移行解析モジュールの組込と検証

3.1 概要

本章では、既存の熱-水-応力連成解析コード THAMES への物質移行解析モジュール、簡易地球化学解析モジュールの組み込みおよびその検証について示す。表 3-1 には熱-水-応力連成解析コード THAMES への物質移行解析モジュールの組み込み手法および解析手順を示す。本連成では、塩の濃縮現象などを含む塩の物質移行を考慮することを前提とする。

3.2 熱-水-応力連成場における塩の物質移行解析に必要な浸透流解析の手順

THAMES を用い熱-水-応力連成場における浸透流解析を行い、その後、水蒸気移動の表現のため、(3-1)式から q_w を液状ダルシー流速 q_l と水蒸気ダルシー流速（液状水換算） q_v に分離する。ここで、水分勾配による水分拡散係数 D_θ および温度勾配に関する水分拡散係数 D_T 、それぞれを、液状水の水分拡散係数と水蒸気的水分拡散係数に分離 ($D_\theta = D_{\theta l} + D_{\theta v}$, $D_T = D_{Tl} + D_{Tv}$) して用いる。水分勾配による水分拡散係数に関しては実測からのフィッティングにより得られた(3-2)式を用いることとした³⁻¹⁾。温度勾配による水分拡散係数に関しては、 D_{Tv} と比較すると D_{Tl} の値は 2 オーダー程度小さいとの検討結果³⁻¹⁾から、 $D_T = D_{Tv}$ とした。 D_T としては、温度勾配水分拡散試験の逆解析により同定された値を用いた。

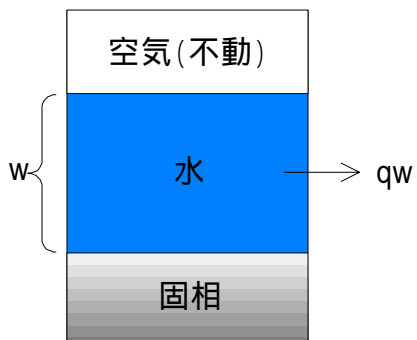
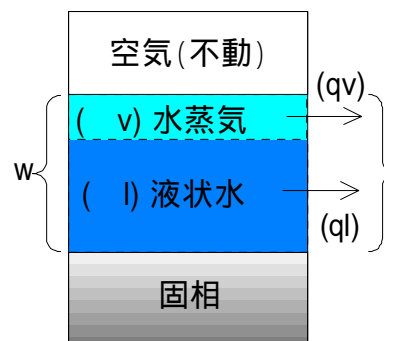
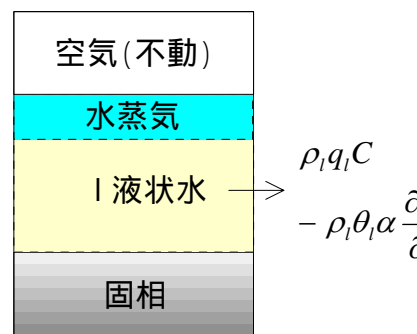
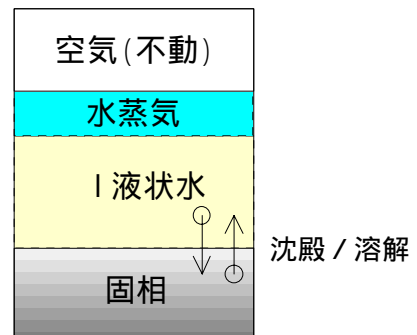
$$\begin{aligned} q_w &= -D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} - D_T \frac{\partial T}{\partial x} \\ q_l &= -D_{\theta l} \frac{\partial \theta}{\partial x} - D_{Tl} \frac{\partial T}{\partial x} \end{aligned} \quad (3-1)$$

$$\begin{aligned} q_v &= -D_{\theta v} \frac{\partial \theta}{\partial x} - D_{Tv} \frac{\partial T}{\partial x} \\ D_\theta &= D_{\theta l} + D_{\theta v} = \frac{a_1(\theta - \theta_s)}{(\theta - b_1)(b_1 - \theta_s)} + \frac{a_2\theta}{b_2(\theta - b_2)} \end{aligned} \quad (3-2)$$

ここで、 a_1 , a_2 , b_1 , b_2 は水分拡散試験より算定された各材料に対するパラメータで、 θ_s は飽和体積含水比率である。

また、psychrometric law（局所相平衡仮定）を用いて水蒸気体積含水率（液状水換算） θ_v を算定し、実測の体積含水率 θ_w から液状水体積含水率 θ_l を求めることとする。

表 3-1 熱-水-応力連成場における塩の物質移行解析

<p>THAMES の飽和・不飽和浸透流モデル 一次元表記</p> 	<p>構成方程式 等温状態下 $q_w = -k_\theta \frac{\partial h}{\partial x} = -D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x}$</p> <p>温度勾配下 $q_w = -D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} - D_T \frac{\partial T}{\partial x}$</p> <p>支配方程式 $\frac{\partial(\rho_w q_w)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_w \theta_w)}{\partial t} = 0$</p> <p>$q$: ダルシー流速, k_θ : 透水係数, h : 全水頭, D : 水分拡散係数, θ : 体積含水率, T : 温度, ρ : 密度, w : 水</p>
<p>熱-水-応力連成場における 塩の物質移行解析に必要な 浸透流解析の手順</p> <p>一次元表記</p> <p>2) q_w, θ_w の分離</p> 	<p>(1) 浸透流解析の手順</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) 浸透流解析の求解 2) q_w, θ_w の分離 <p>水蒸気移動の表現のため, q_w を液状水ダルシー流速 q_l と水蒸気ダルシー流速(液状水換算) q_v に分離する。 θ_w を液状水体積含水率 θ_l と水蒸気体積含水率(液状水換算) θ_v に分離する。</p> $q_w = q_l + q_v, \quad \theta_w = \theta_l + \theta_v \quad (l: \text{液状水}, v: \text{水蒸気})$ <p>q_w の分離</p> <p>構成方程式 (温度勾配下) $q_w = -D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} - D_T \frac{\partial T}{\partial x}$</p> $q_l = -D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} - D_{Tl} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_v = -D_{\theta v} \frac{\partial \theta}{\partial x} - D_{Tv} \frac{\partial T}{\partial x}$ <p>($D_\theta = D_\theta + D_{\theta v}$, $D_T = D_{Tl} + D_{Tv}$)</p> <p>θ_w の分離</p> <p>psychrometric law (局所相平衡仮定) により, θ_v を算定 θ_l を算定</p>
<p>熱-水-応力連成場における 塩の物質移行解析の手順</p> <p>一次元表記</p> <p>2) 移流拡散方程式から C を計算</p>  <p>3) 沈殿 / 溶解の計算 (M_c の計算 C の計算)</p> 	<p>(2) 物質移行解析 (移流拡散 + 瞬時沈殿 / 溶解) の手順</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) 浸透流解析から q_l, θ_l を, 熱移動解析から T を受け取る。 2) 反復計算の初期値設定。(M_c : 媒体単位体積あたりの塩の沈殿量) $M_c = M_c^{(n-1)}$ <ol style="list-style-type: none"> 3) 移流拡散方程式から C を計算 <p>支配方程式 $\frac{\partial(\rho_l q_l C)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_l \theta_l D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial(\rho_l \theta_l C)}{\partial t} + \frac{\partial M_c}{\partial t} = 0$</p> <p>EL 法 $\rho_l \theta_l V_l \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_l \theta_l D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \rho_l \theta_l \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial M_c}{\partial t} = 0$</p> <p>(C : 液状水中の溶質濃度, D_c : 溶質の拡散(分散)係数) 4) 沈殿 / 溶解の計算 (M_c の計算 C の計算) <pre> if (C ≥ C_0) then M_c = M_c + (C - C_0) ρ_l θ_l C = C_0 end if if (C < C_0 and M_c > 0) then if (C + M_c / ρ_l θ_l ≥ C_0) then M_c = M_c - (C_0 - C) ρ_l θ_l C = C_0 else M_c = 0 C = C + M_c / ρ_l θ_l end if end if </pre> <p>(C_0 : 飽和溶解濃度)</p> <p>沈殿量の計算</p> <p>溶解量の計算</p> <ol style="list-style-type: none"> 5) 非線形性の考慮 <p>反復を行わず, この沈殿 / 溶解の計算で濃度を求解。 上記 3) (の内分散のみ), 4) を収束するまで反復計算して求解完了。 M_c による q_l の修正を行い, 実流速を変更して 3), 4) を反復計算。 M_c による θ_l の修正を行い, (1), 2), 3), 4) を反復計算。 6) 塩濃度の濃縮 <p>現状の EL 法をそのまま用いる場合, 貯留項の観点から, 液状水のボリューム減少に伴う濃度補正を簡略化して以下の様に行う。</p> $C' = \rho_l^{(n-1)} \theta_l^{(n-1)} C / \rho_l \theta_l$ </p></p>

3.3 熱-水-応力連成場における塩の物質移行解析の手順

移流拡散方程式を間隙内の液状水量の時間変化を考慮する場合、次式のような支配方程式が必要となる。

$$\frac{\partial(\rho_l q_l C)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_l \theta_l D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial(\rho_l \theta_l C)}{\partial t} + \frac{\partial M_c}{\partial t} = 0 \quad (3-3)$$

しかし、現状の EL 法では次式のように時間項の展開が異なり、貯留項の観点から間隙内の液状水量の時間変化を考慮することが出来ない。

$$\rho_l \theta_l V_l \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_l \theta_l D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \rho_l \theta_l \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial M_c}{\partial t} = 0 \quad (3-4)$$

EL 法の定式化を(3-3)式のように修正することは作業量および時間的に困難であることと、連成の概略検討の位置付けから定式化は(3-4)式のままとし、間隙内の液状水量の時間変化に伴う塩の濃度変化については、後述の濃度補正を行うことで評価することとする。

塩の沈殿 / 溶解については物質移行解析後、飽和濃度を越えた分は沈殿し、沈殿量を補正し、飽和濃度未満であれば、沈殿からの溶解による濃度補正を行うことで評価することとする。また、この非線形性を考慮する場合、沈殿量について反復計算を行い、濃度の収束演算が望ましいが、時間刻みを細かくすることで、沈殿量変化を微小とし、陽解法的に取り扱うことで反復計算を行わず、手順を単純化することとする。

間隙内の液状水量の時間変化に伴う塩濃度の補正については、現状 EL 法の貯留項の観点から、次式のように簡略化して濃度補正を行うこととする。

$$C' = \rho_l^{(n-1)} \theta_l^{(n-1)} C / \rho_l \theta_l \quad (3-5)$$

このように、熱-水-応力連成場における塩の物質移行解析の組み込みは、現状の手法を踏襲し、出来るだけ単純化した手順を用いることとする。ここでは、間隙水内に存在する水溶性の物質は液状水とともに移流拡散する。すなわち、温度勾配による水分の移動（水蒸気の移動）の際には、物質は移動しないと仮定した。なお、現時点では、「熱-水-応力連成解析」「物質移行」「沈殿 / 溶解計算」への一方向の連成として、沈殿 / 溶解計算の結果あるいは濃度の計算結果を熱-水-応力連成解析へフィードバックさせることは行わない。

3.4 検証計算

簡易熱-水-応力-物質移行-地化連成解析コードの検証については、物質移行部分の組み込みが機能しているかについて検証することとし、既存の EL 法で行われた解析結果と本解析手法による物質移行の解析結果を比較することで行うこととする。

Warric ほかは、図 3-1 に示すような 6.1 × 6.1m の浸透域を地表に設定し、浸透域中央部

の初期体積含水率の深度分布を測定した後、物質浸透原位置実験を行った³⁻²⁾。実験は不飽和状態の地表の浸透域に最初に CaCl₂ 溶液を地表から 7.62cm 高さに張り、溶液全てが 2.8 時間で地中に浸透した。その後、真水を地表から 22.9cm 高さに張り、測定開始から真水の全てが 17.5 時間後に地中に浸透するまで飽和度と濃度の深度分布が測定された。

この実験をシミュレートした Dtransu3D・EL (以下、Dtransu と呼ぶ) の解析結果と THAMES + Dtransu3D・EL (以下、Thames と呼ぶ) による解析結果について比較した。

解析条件は以下の通りである。

解析モデル：1cm × 1cm × 1cm の立方体を積み重ねた 1 次元モデル。

鉛直方向：300cm

要素数および節点数：Dtransu ; 300要素, 1204節点 (8 節点モデル)

; Thames ; 300要素, 3608節点 (20 節点モデル)

側面の境界条件：不透水境界

底面の境界条件：水頭固定境界 (-269.11cm)

上面の境界条件：0 ~ 2.8時間は、+7.62cm ~ 0cm 水頭変化境界

; 2.9 ~ 17時間は、+22.9cm ~ 0cm の水頭変化境界

解析時間間隔：0 ~ 1 時間までを 120秒間隔、その後は 360秒間隔で 17時間 (190step)

表 3-2 には解析に用いた水理および物質移行パラメータを示す。また、図 3-2 には初期圧力水頭分布を、図 3-3 には不飽和特性曲線を示す。

図 3-4、3-5 に各時間の深度 - 体積含水率分布図と深度 - 濃度分布図を示す。図の縦軸は地表からの深度を示し、横軸は体積含水率と注入した CaCl₂ 溶液濃度で正規化した濃度を示している。

図 3-4 の体積含水率では、Thames の解析結果の方が Dtransu の結果に比べて若干浸潤する深度が浅い (浸潤速度が遅い) 結果となっている。これは、非線形性の強い不飽和領域の浸透流解析であるため、要素の精度や収束手法の差によるものと考えられる。図 3-5 の濃度分布では、各時間の濃度に関しても Thames の方が Dtransu よりも濃度の移動が若干遅れ、濃度のピークが小さくなる結果となった。これは、浸潤速度の差が解析上のダルシー流速の差となり、濃度分布の差となって表れていると考えられるが、ほとんど同じ結果が得られたことから、THAMES + Dtransu3D・EL での物質移行解析は正しく機能していると考えられる。

表 3-2 不飽和比較解析に用いた入力物性値

透水係数 (m/sec)	3.0 × 10 ⁻⁶
有効間隙率	0.38
縦分散長 (m)	0.008
横分散長 (m)	0.0
拡散係数 (m ² /sec)	0.0

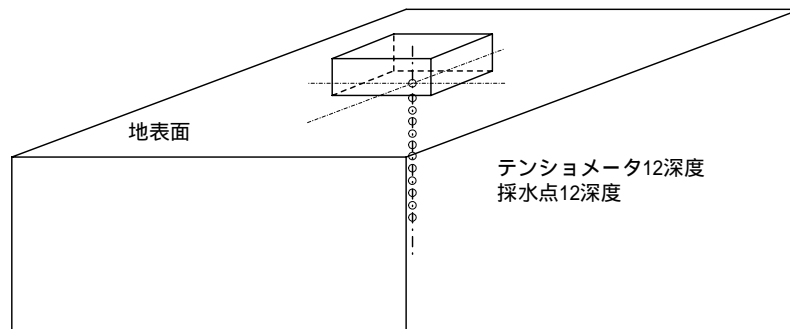
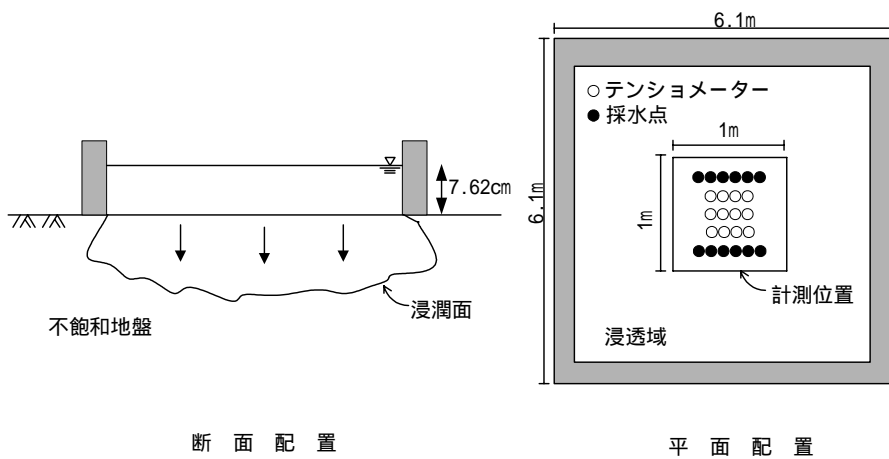


図 3-1 Warric ほかの浸透実験概念図

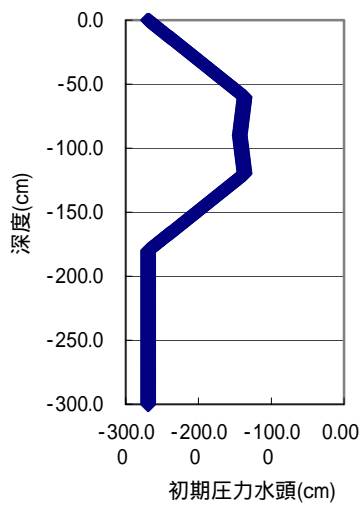


図 3-2 初期圧力水頭分布

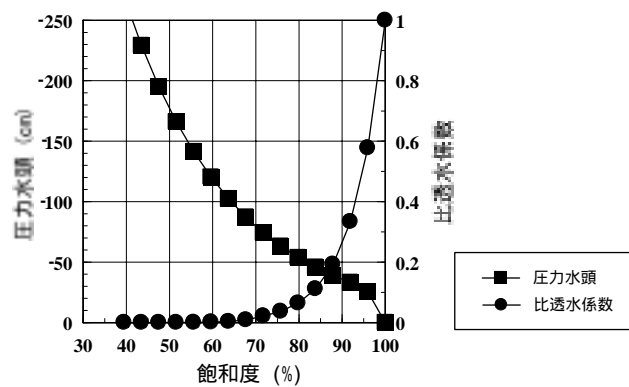


図 3-3 Warric ほかの不飽和浸透特性曲線

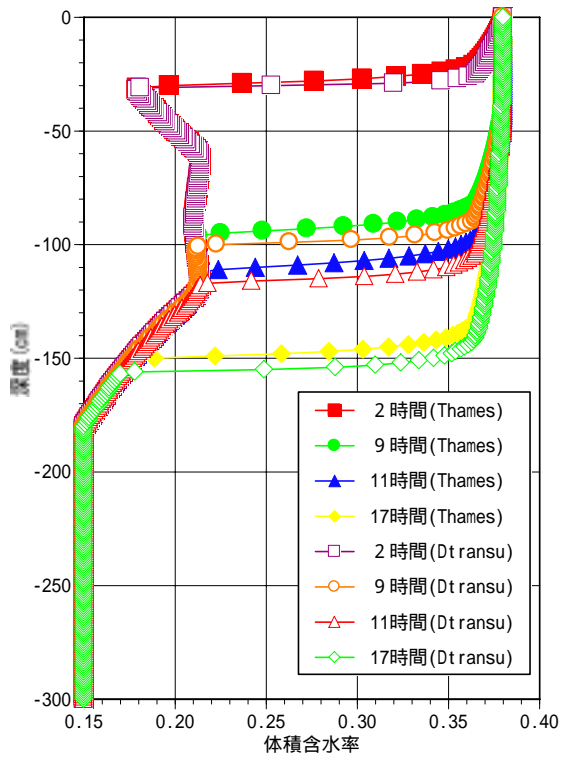


图 3-4 深度 - 体積含水率分布图

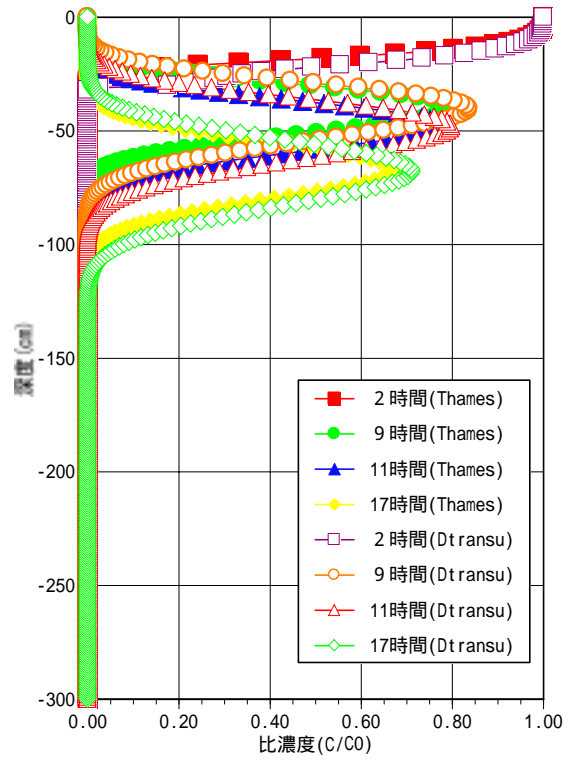
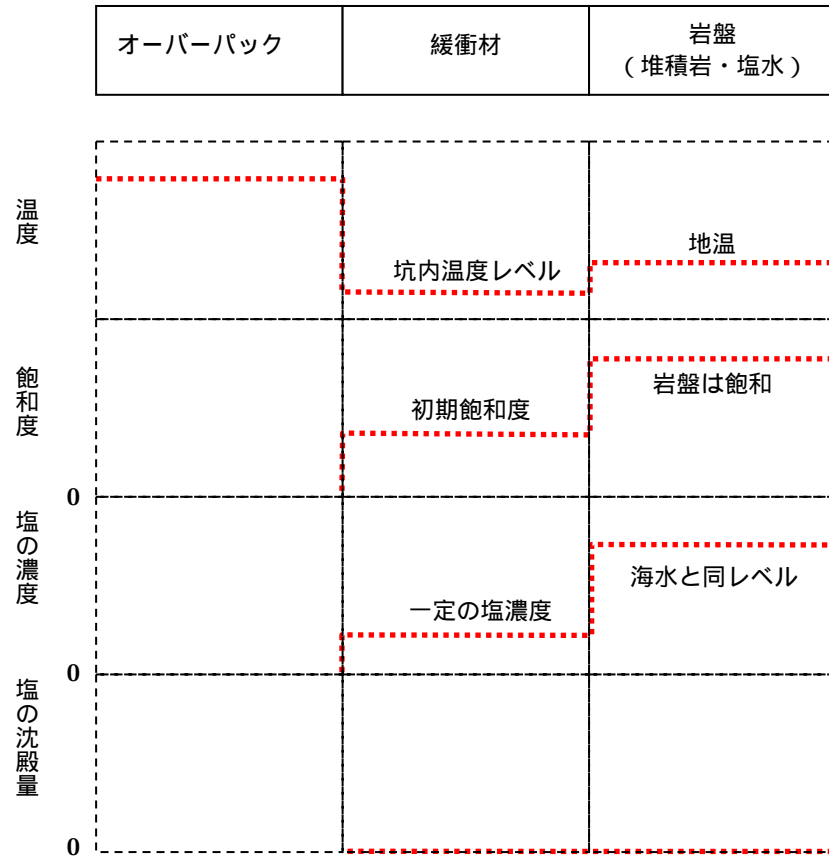


图 3-5 深度 - 比濃度分布图

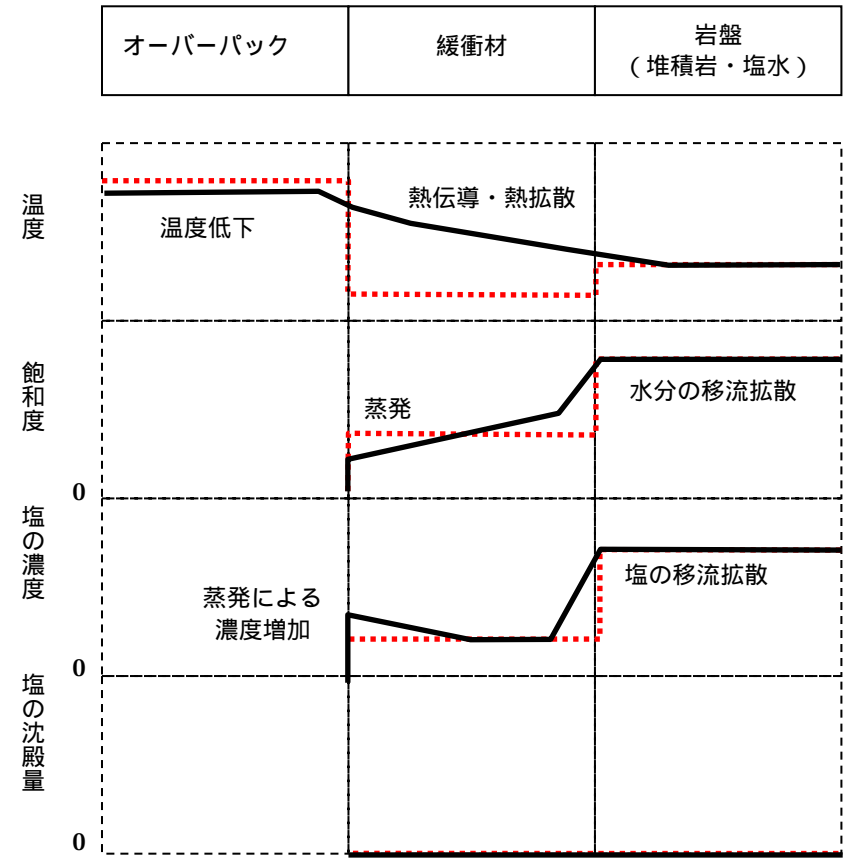
4. 熱-水-応力連成場での塩の物質移行に関する数値解析の実施

4.1 概要

前章において開発された簡易熱-水-応力-物質移行-地化連成解析コードを用い、緩衝材内における塩の物質移行および蓄積に関する数値解析を実施する。緩衝材とオーバーパックを処分孔内に同時に定置した時の温度、飽和度、塩濃度、塩の沈殿量の変化をイメージすると図 4-1 のようになる。ここでは、(a)に示すように、周辺岩盤の地下水は海水に近い組成であると仮定している。(b)における段階では、廃棄体からの放熱により緩衝材内に温度勾配が生じており、その結果、緩衝材のオーバーパックに近い側では飽和度が低下する。温度勾配による水分移動が蒸気状態での移動がメインであると仮定し、蒸気移動の際には溶質は移動しないと仮定するとこの部分の塩の濃度は上昇することとなる。この状態が続き(c)の状態になると、緩衝材の飽和度のさらなる低下および温度低下に伴う溶解度の低下に伴い、塩の濃度はさらに上昇し、飽和塩濃度を超えると溶質の沈殿が生じる可能性がある。また、続いて(d)のような状態になると、緩衝材外側でも温度低下に伴う溶解度の低下に伴い塩の濃度の上昇あるいは沈殿が生じることも考えられる。ここでは、このような過程のもと、実際にどのようなプロセスで塩の沈殿が起きるかについては、開発したコードを用いて確認を行う。



(a)初期状態



(b)第1段階

図 4-1 緩衝材内における塩の蓄積のイメージ

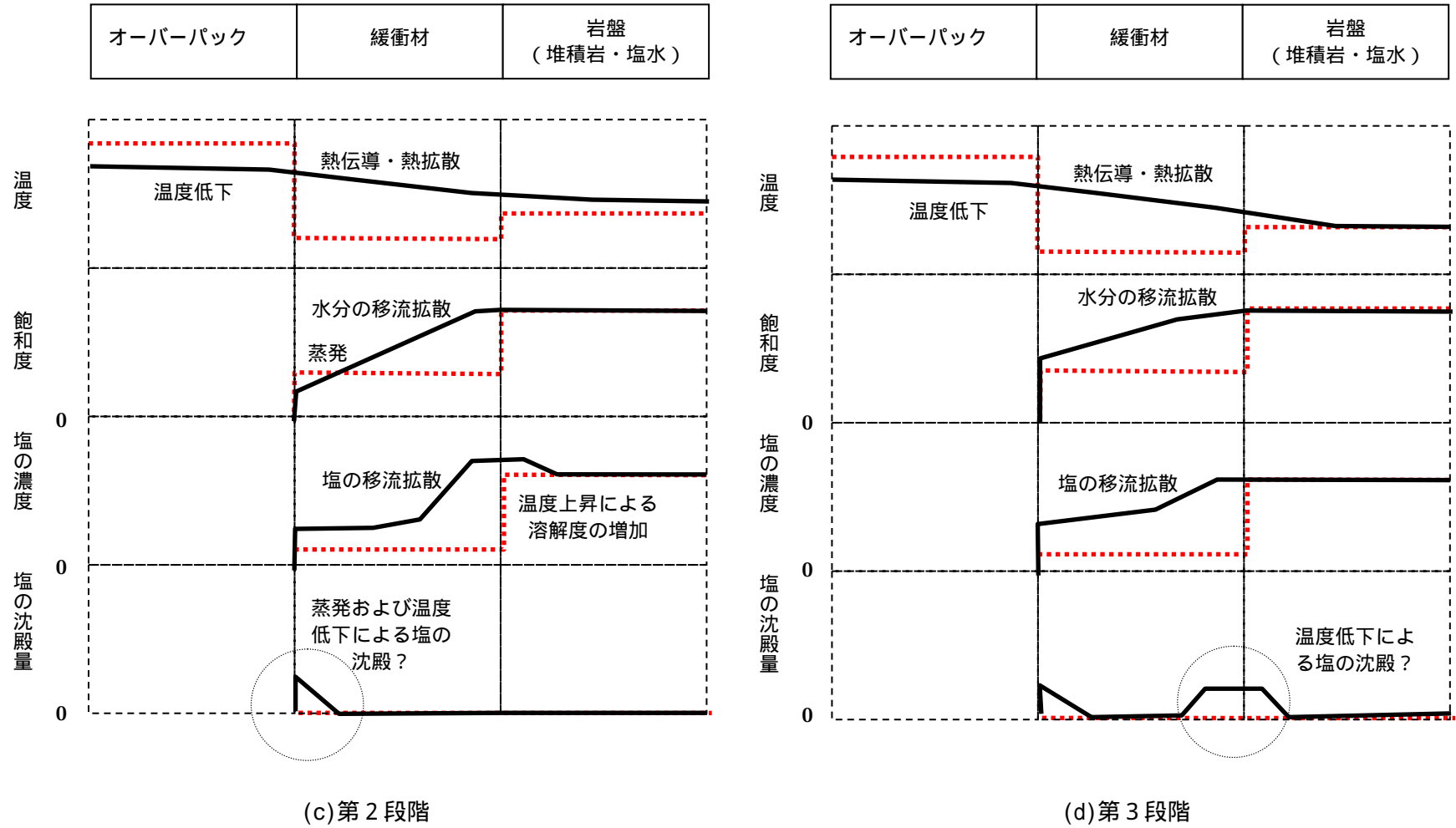


図 4-1 緩衝材内における塩の蓄積のイメージ

4.2 緩衝材内の塩濃度の設定

クニゲル V1 の Cl^- 含有量は、単位固相当たり 0.00435wt%であると仮定する。そこで、緩衝材材の NaCl 濃度を以下のように設定する。

クニゲル V1 にケイ砂を 30wt%混合し乾燥密度が $1.6\text{g}/\text{cm}^3$ であるとする、媒体 1.0cm^3 中の Cl^- 含有量は、以下ようになる。

$$1.6[\text{g}/\text{cm}^3] \times 0.7 \times 0.00435 \div 100 = 4.872 \times 10^{-5}[\text{g}/\text{cm}^3] \quad (4-1)$$

(ケイ砂の含有量はデータがないのでゼロとした。)

間隙率は 0.403 であるので、飽和状態での間隙水は、媒体 1.0cm^3 中に $0.403\text{g}/\text{cm}^3$ となり、 Cl^- 濃度にする、以下ようになる。

$$4.872 \times 10^{-5}[\text{g}/\text{cm}^3] \div 0.403[\text{g}/\text{cm}^3] = 0.0121[\text{wt}\%] \quad (4-2)$$

NaCl 濃度に換算すると、以下ようになる。

$$\begin{aligned} 0.0121[\text{wt}\%] \div 35.45 (\text{Cl の原子量}) \times (35.45 + 22.99 (\text{Na の原子量})) \\ = 0.0199[\text{wt}\%] \end{aligned} \quad (4-3)$$

不飽和状態における NaCl 濃度に関しては以下の 2 通りの考え方がある。

(1) 不飽和状態では、間隙水が接触する固相の Cl^- のみが間隙水に溶解すると考える。飽和度と固相の接触面積が比例関係であると考え間隙水に溶解する Cl^- 濃度は飽和状態と同じと考える。この場合、水分量が増えたときに固相から Cl^- が溶解してくるが、通常の沈殿の式ではこれを取り扱うことが出来ない。これを取り扱うためには、沈殿量と水 - 固相接触面積の新たなモデルが必要となる。

(2) 不飽和状態で、全固相の Cl^- が初期間隙水に溶解すると考える。初期含水比 7%を想定すれば、初期間隙水は $1.6[\text{g}/\text{cm}^3] \times 0.07 = 0.112[\text{g}/\text{cm}^3]$ であるので、 Cl^- 濃度にする、 $4.872 \times 10^{-5}[\text{g}/\text{cm}^3] \div 0.112[\text{g}/\text{cm}^3] \times 100 = 0.0435[\text{wt}\%]$ となる。これを NaCl 濃度に換算すると、 $0.0435[\text{wt}\%] \div 35.45 (\text{Cl の原子量}) \times (35.45 + 22.99 (\text{Na の原子量})) = 0.0717[\text{wt}\%]$

ここでは、(2)の考え方で濃度を設定する。

4.3 温度勾配下における緩衝材浸潤時の塩の物質移行に関するケーススタディ

4.3.1 ケース設定

ここでは、温度勾配下における緩衝材浸潤時の塩の物質移行に関するケーススタディを、今回開発した解析コードを用いて実施した結果を示す。解析は、現在サイクル機構が計画している塩水を用いた温度勾配下における緩衝材浸潤試験を対象に実施する。対象とした材料は、クニゲル V1 とケイ砂の混合材料 (B:S=7:3) で乾燥密度は 1.6g/cm^3 である。また、供試体の寸法は、高さ 100mm、直径 50mm であり、初期含水比は 5.25% とした。

解析ケースを表 4-1 に示す。解析は、供試体両端の温度、供試体の温度勾配水分拡散係数、供試体の初期含水比、供試体低温側からの注水圧、供試体の分散長、供試体の初期塩濃度、注水塩濃度をパラメータとして実施した。THAMES の計算においては、供試体の両端の温度、供試体の温度勾配水分拡散係数、供試体の初期含水比、供試体低温側からの注水圧がパラメータとなるので、全部で 7 ケースの解析を実施した。これに、供試体の分散長、供試体の初期塩濃度、注水塩濃度をパラメータとして物質移行および地球化学計算を実施することにより、総計 12 ケースの解析を実施した。ここで、分子拡散係数は全ケースで同じ値とし、水の分子拡散係数 \times 屈曲率 0.5 として $0.5 \times 10^{-9}\text{m}^2/\text{sec}$ を設定した。また、表 4-1 の Case4-1 における供試体の分散長としては $1 \times 10^{-4}\text{m}$ を設定した。解析の時間刻みは 600 秒 (10 分) に設定し、20 日間の計算を行った。なお、4.2 で仮定した緩衝材内の塩濃度の設定に基づけば、緩衝材の初期含水比の違いにより初期の塩濃度は異なるということになるが、ここでは、全て同じ濃度 (0.0717wt%) で解析を実施した。

飽和溶解度は理科年表を参考にし、NaCl 飽和溶解度と温度の関係で規定することとした。また、高温側境界における蒸気の抜けについては取り扱わず、閉境界で解析を行うこととした。なお、サイクル機構が計画している試験では高温側境界から抜ける蒸気を冷却して計量する予定となっている。

表 4-1 解析ケース

解析ケース	THAMES の計算ケース	温度 [] (高温側 低温側)			温度勾配水分拡散 係数 D_T [cm ² /s/K]		初期含水比 [%]			注水圧 [MPa]		分散長 [m]		初期塩濃度 [wt%]		注水塩濃度 [wt%]				摘要
		100 - 90	100 - 80	100 - 60	D_{T0} *	$3 \times D_{T0}$ *	5.25	10	20	0	1	0	1×10^{-4} **	0	0.0717	0.0	2.0	3.3	5.0	
Case1-1	Case1-1																			基本ケース
Case1-2	Case1-2																			温度勾配の影響
Case1-3	Case1-3																			温度勾配の影響
Case2-1	Case2-1																			D_T の影響
Case3-1	Case3-1																			初期含水比の影響
Case3-2	Case3-2																			初期含水比の影響
Case4-1	Case4-1																			注水圧の影響
Case5-1	Case1-2																			分散長の影響
Case6-1	Case1-2																			初期塩濃度の影響
Case6-2	Case1-2																			注水塩濃度の影響
Case6-3	Case1-2																			注水塩濃度の影響
Case6-4	Case1-2																			注水塩濃度の影響

*実験結果の逆解析より同定された値 ($D_{T0} = 7 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s/K}$)

** D_{transu} 解析事例に基づいて標準的な値を設定。ここでは、 $1 \times 10^{-4} \text{ m}$ と設定

4.3.2 解析モデル

図 4-2 に解析モデルを示す。解析は 1 次元カラムを模擬したモデルである。また、図 4-3 に解析メッシュ図を示す。鉛直方向(Z 方向)に 20 分割し、 $Z=0.005\text{m}$ (5mm) とした。

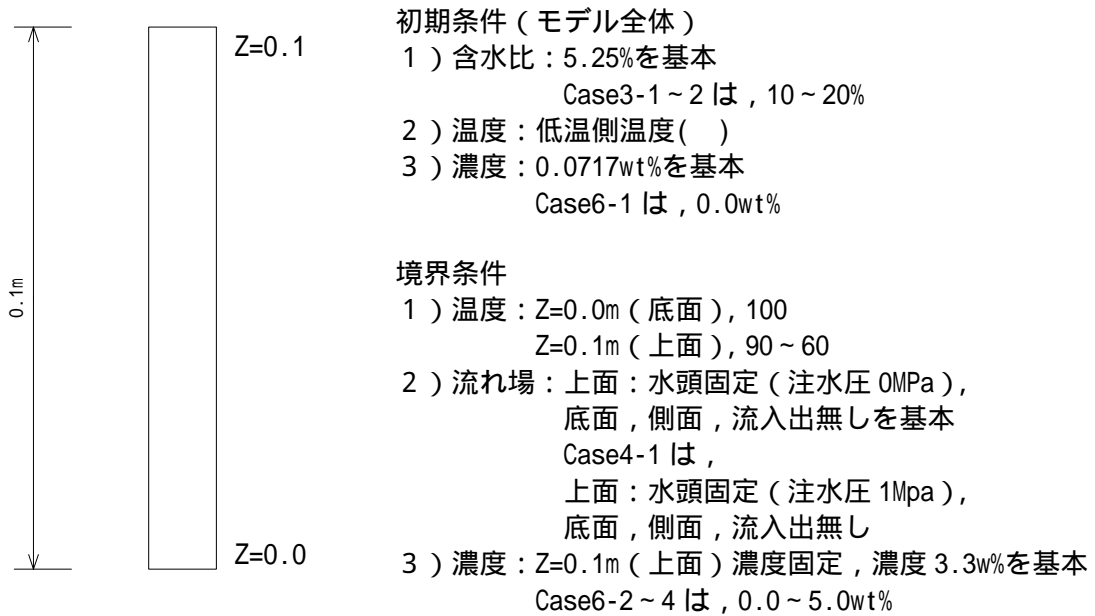


図 4-2 解析モデル図

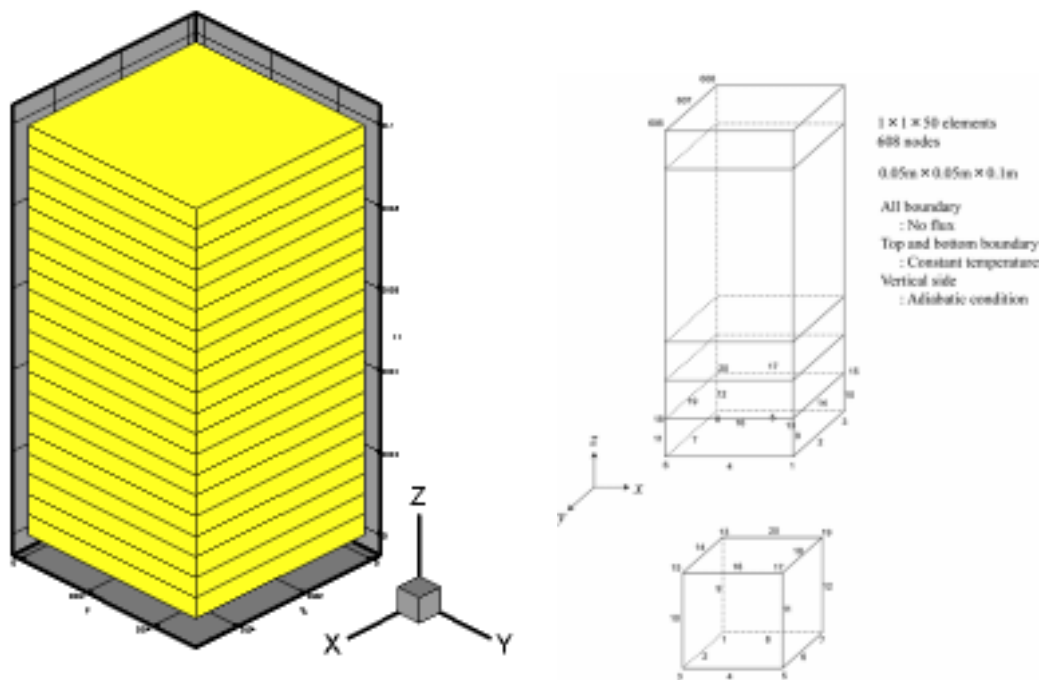


図 4-3 解析メッシュ図

4.3.3 解析結果

図 4-4～図 4-6 に Case1-1～Case1-3 の解析結果を示す。これら 3 ケースは供試体両端の温度条件が異なるケースで、それぞれ、100 - 90（温度勾配 1.0 /cm）、100 - 80（温度勾配 2.0 /cm）、100 - 60（温度勾配 4.0 /cm）となっている。温度勾配が大きくなるにつれて、供試体の高温側での含水量の低下が大きくなっている。含水量の低下に伴い、濃縮により塩濃度は高くなっているものの、注水濃度に比べればその絶対量は小さくグラフ上では見えてこない。図 4-7 には Case2-1 の解析結果を示す。このケースは、温度勾配は Case1-2 と同じであるが、供試体の温度勾配水分拡散係数の値が Case1-2 の場合より 3 倍大きくなったケースである。温度勾配水分拡散係数が大きくなることにより、高温側での含水量の低下が Case1-2 に比べて大きくなっている。また、塩分の濃度は浸潤側ではそれほど違いは見られないが、高温側では、含水量の低下が大きい分濃度が高くなっている。図 4-8～図 4-9 には Case3-1～Case3-2 の解析結果を示す。このケースは温度勾配は Case1-2 と同じであるが、供試体の初期含水比が Case1-2 に比べ大きいケースである。なお、4.2.1 で設定した不飽和緩衝材内の塩濃度の設定方法によれば、供試体の初期含水比が異なることによって塩濃度も異なる（含水比が低いほど塩濃度は高くなる）ことになるが、ここでは全て同じとした。結果として供試体内の濃度変化は各ケースでそれほど違いが見られなかった。これは、今回設定した温度勾配水分拡散係数が一定値であり、水分依存性、温度依存性等を十分に考慮できていないためであると思われる。また図 4-10 には Case4-1 の結果を示す。これは、注入圧を 1.0MPa としたケースである。注入圧が大きくなることにより、注入側での水分の増加速度が速くなっている。しかしながら、濃度の上昇速度は Case1-2 と比べてそれほど違いは見られない。これは、今回の塩の移行計算においては移流ではなく拡散が支配的となっていることによるものである。図 4-11 には Case5-1 の結果を示す。これは分散長を 0.1mm と設定したケースであるが、Case4-1 の結果からも分かるように今回の計算ケースは拡散が卓越したケースであったため、濃度分布に関しては Case1-2 とほとんど同じ結果となった。図 4-12～図 4-15 に Case6-1～Case6-4 の解析結果を示す。図 4-12（Case6-1）は供試体の初期塩濃度が 0wt% のケースであるが、Case1-2（初期塩濃度 0.0717wt%）と比べて大きな違いは見られなかった。また、Case6-2～Case6-4 は注水塩濃度を 0.0、2.0、5.0wt% としたケースである。Case6-2 は Case1-2 と比べると、供試体内を希釈するようなケースであり、この場合、高温側での塩の濃縮よりは注水側からの希釈の影響の方が大きい結果となっている。Case6-3 および Case6-4 のケースは Case1-2 のケースと比べて絶対的に異なっているのみで、全体としての拡散場的な濃度挙動に変化は見られ

なかった。

表 4-2 には、各計算ケースの物質移行挙動をまとめて示す。今回設定した解析ケースは拡散的な挙動が卓越する結果となった。したがって、注入圧、供試体の初期含水比、供試体の分散長等により塩濃度には大きな違いは見られなかった。すなわち、浸潤による濃度変化は分子拡散係数に大きく依存することとなり、濃縮挙動は水分拡散係数に大きく依存することとなる。今回、分子拡散係数、水分拡散係数とも一定値として解析を実施しているが、より詳細な検討のためにはこれらの値が温度や水分量の変化に対してどのように変化していくのか把握していく必要がある。

Case1-1 : 温度100-90 , DT=DT0 , 注入圧=0 , 分散長=0 , 初期濃度0.0717wt% , 注入濃度3.3wt%

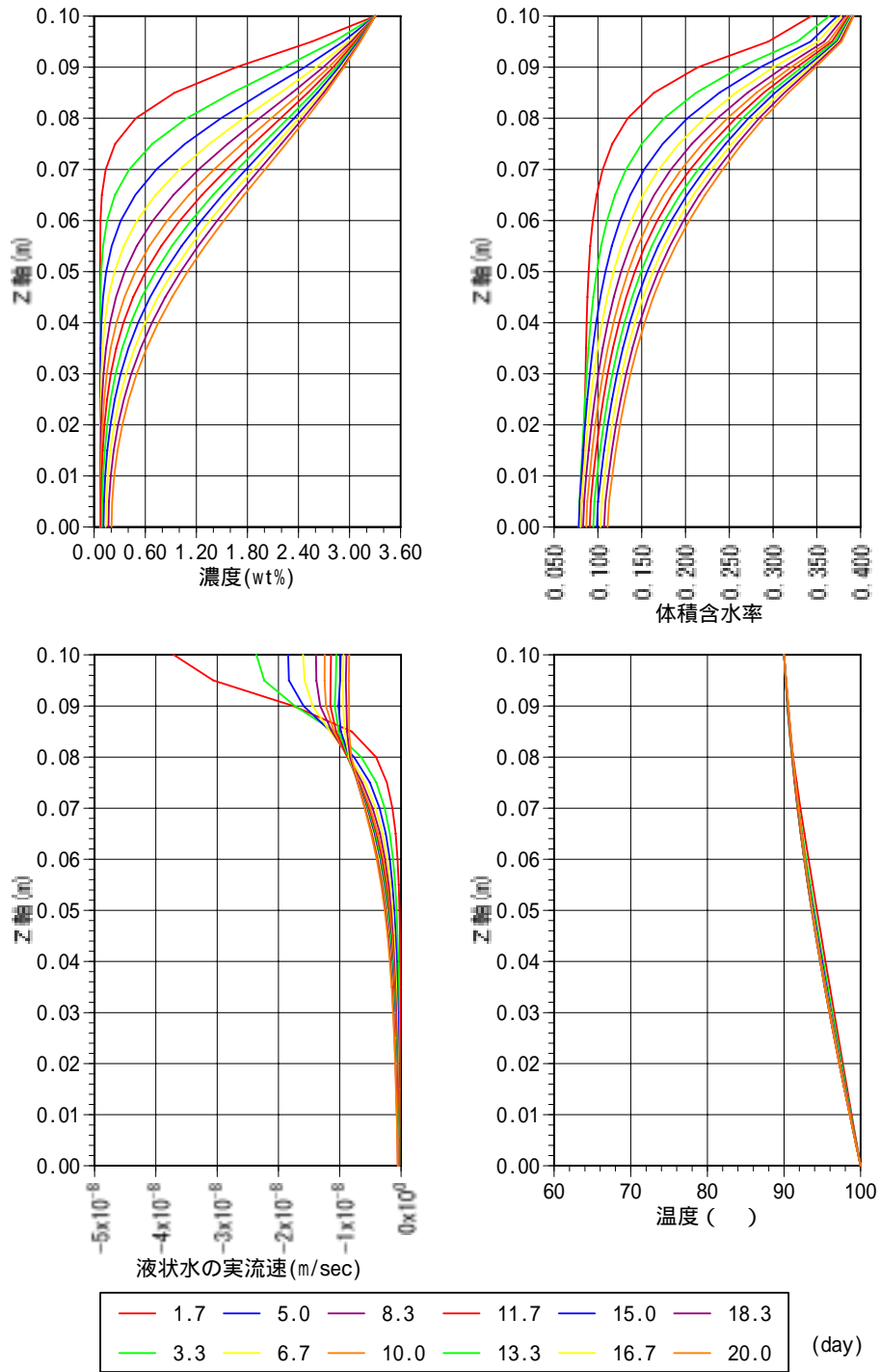


図 4-4 Case1-1 : 濃度 , 体積含水率 , 液状水実流速分布 , 温度経時变化図

Case1-2 : 温度100-80 , DT=DT0 , 注入圧=0 , 分散長=0 , 初期濃度0.0717wt% , 注入濃度3.3wt%

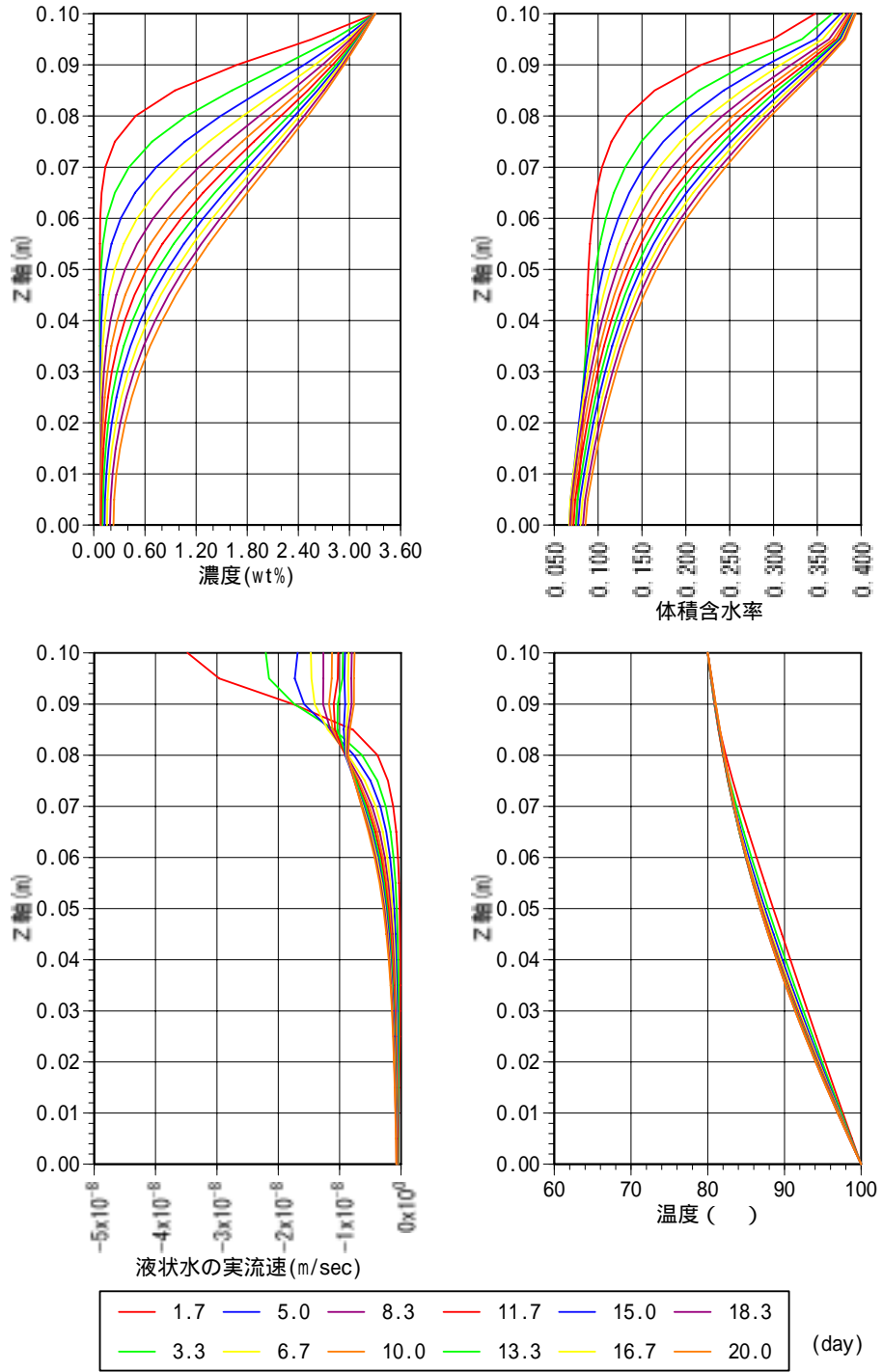


図 4-5 Case1-2 : 濃度 , 体積含水率 , 液状水実流速分布 , 温度経時变化図

Case1-3 : 温度100-60 , DT=DT0 , 注入圧=0 , 分散長=0 , 初期濃度0.0717wt% , 注入濃度3.3wt%

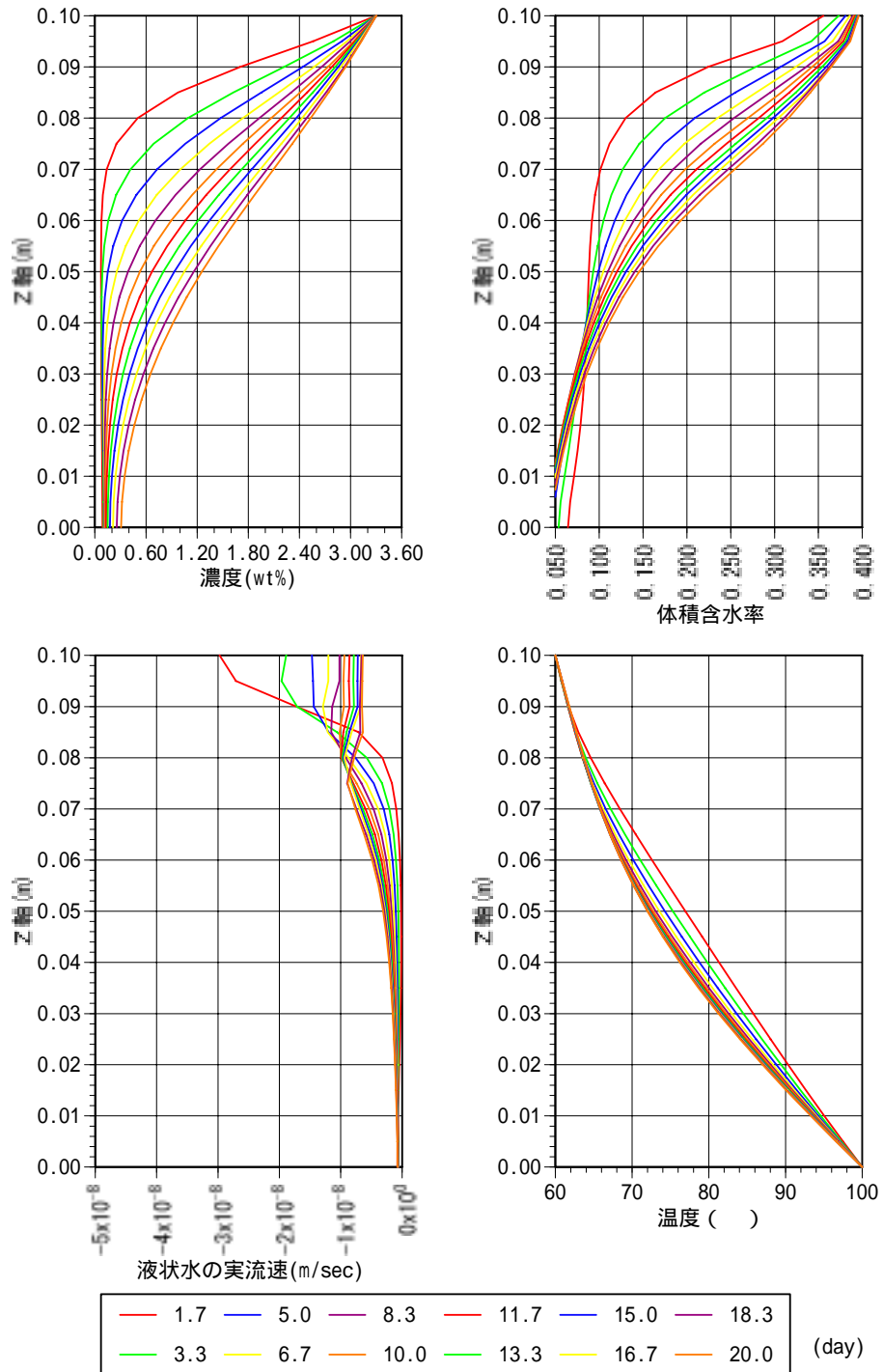


図 4-6 Case1-3 : 濃度 , 体積含水率 , 液状水実流速分布 , 温度経時变化図

Case2-1：温度100-80，DT=3×DT0，注入圧=0，分散長=0，初期濃度0.0717wt%，注入濃度3.3wt%

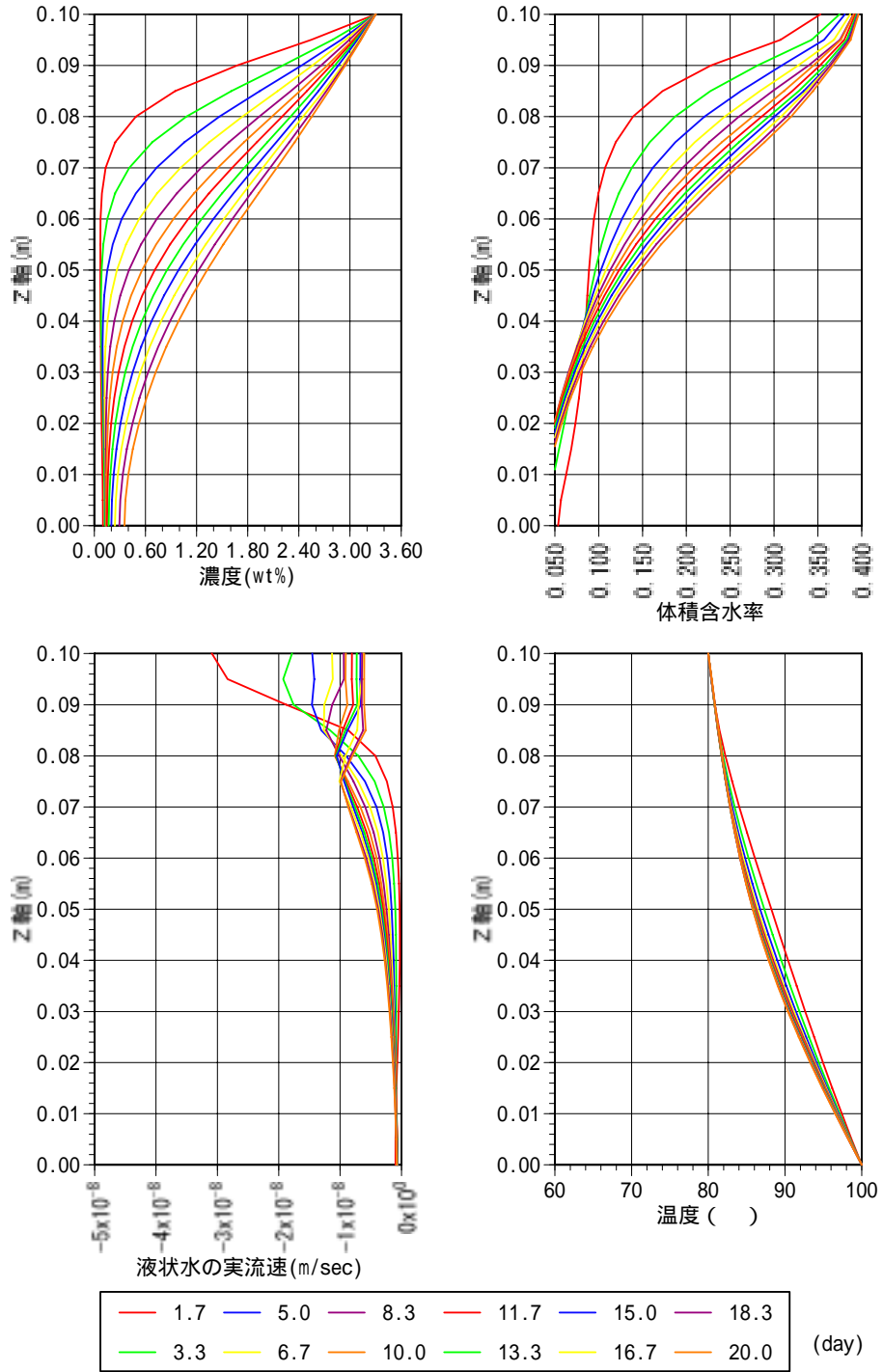


図 4-7 Case2-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時变化図

Case3-1：温度100-80，DT=DT0，注入圧=0，分散長=0，初期含水比10%，
 初期濃度0.0717wt%，注入濃度3.3wt%

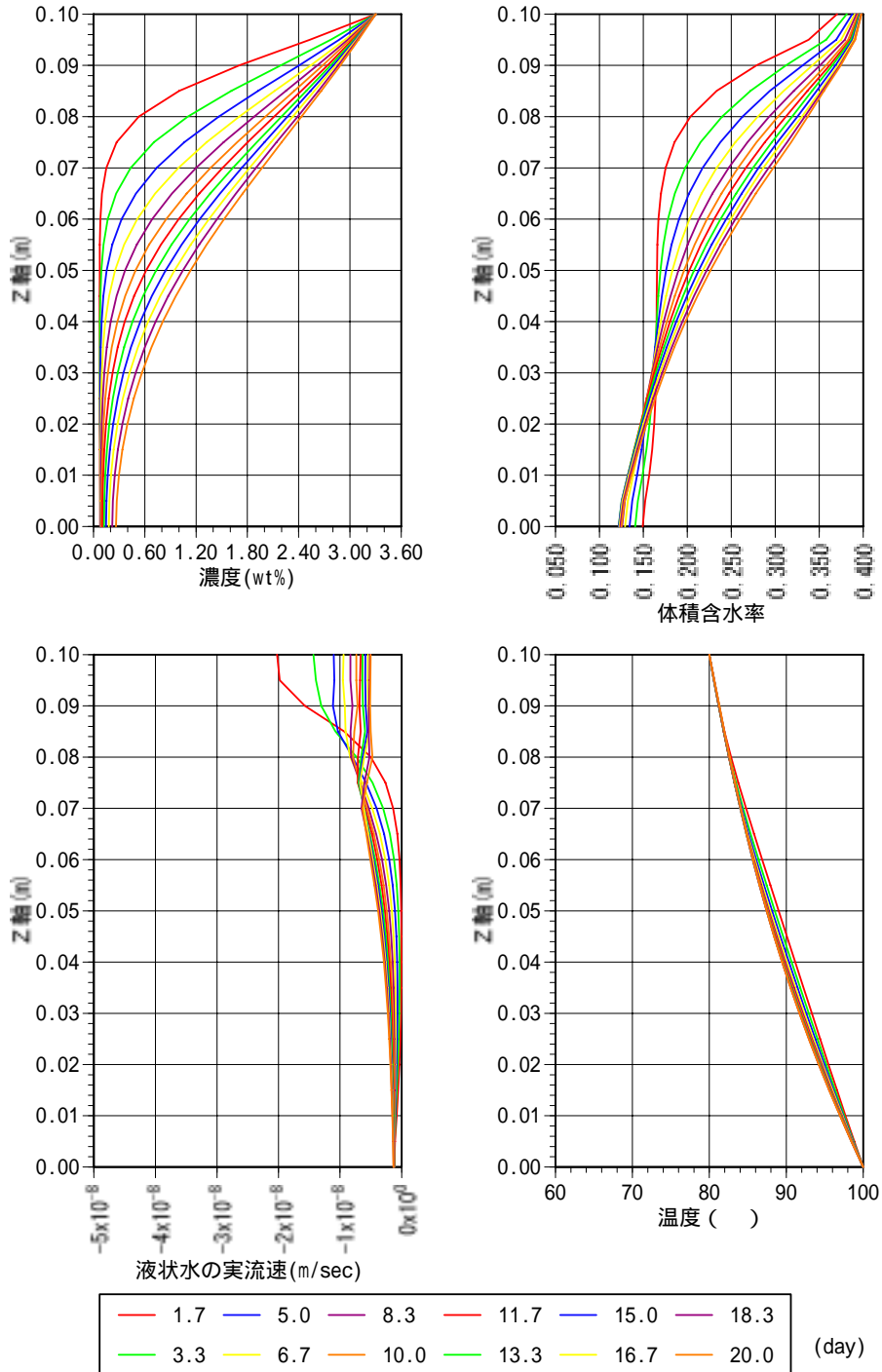


図 4-8 Case3-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時变化図

Case3-2：温度100-80 ，DT=DT0，注入压=0，分散長=0，初期含水比20%，
 初期濃度0.0717wt%，注入濃度3.3wt%

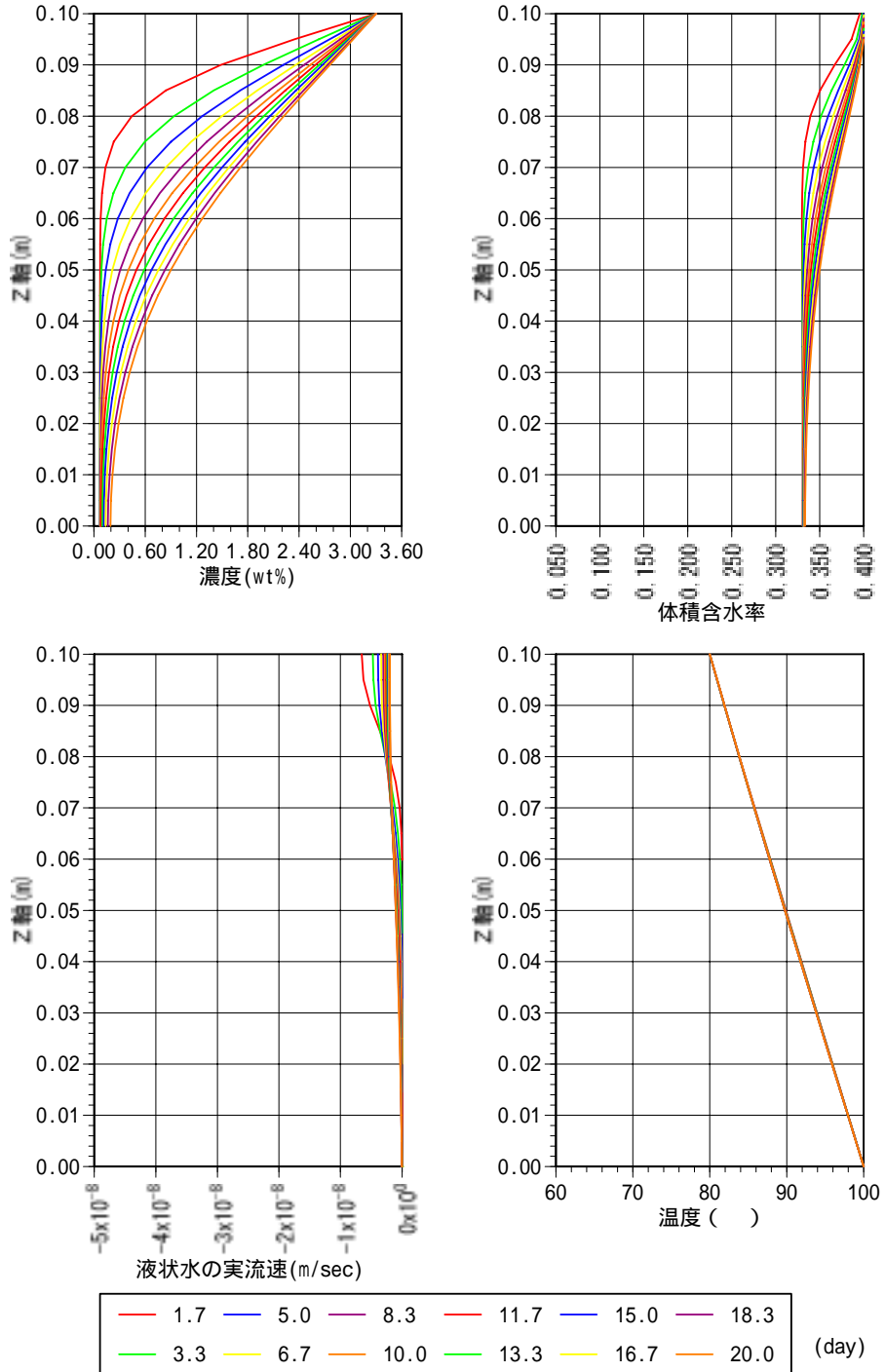


図 4-9 Case3-2：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時变化図

Case4-1：温度100-80，DT=DT0，注入圧=1MPa，分散長=0，初期濃度0.0717wt%，注入濃度3.3wt%

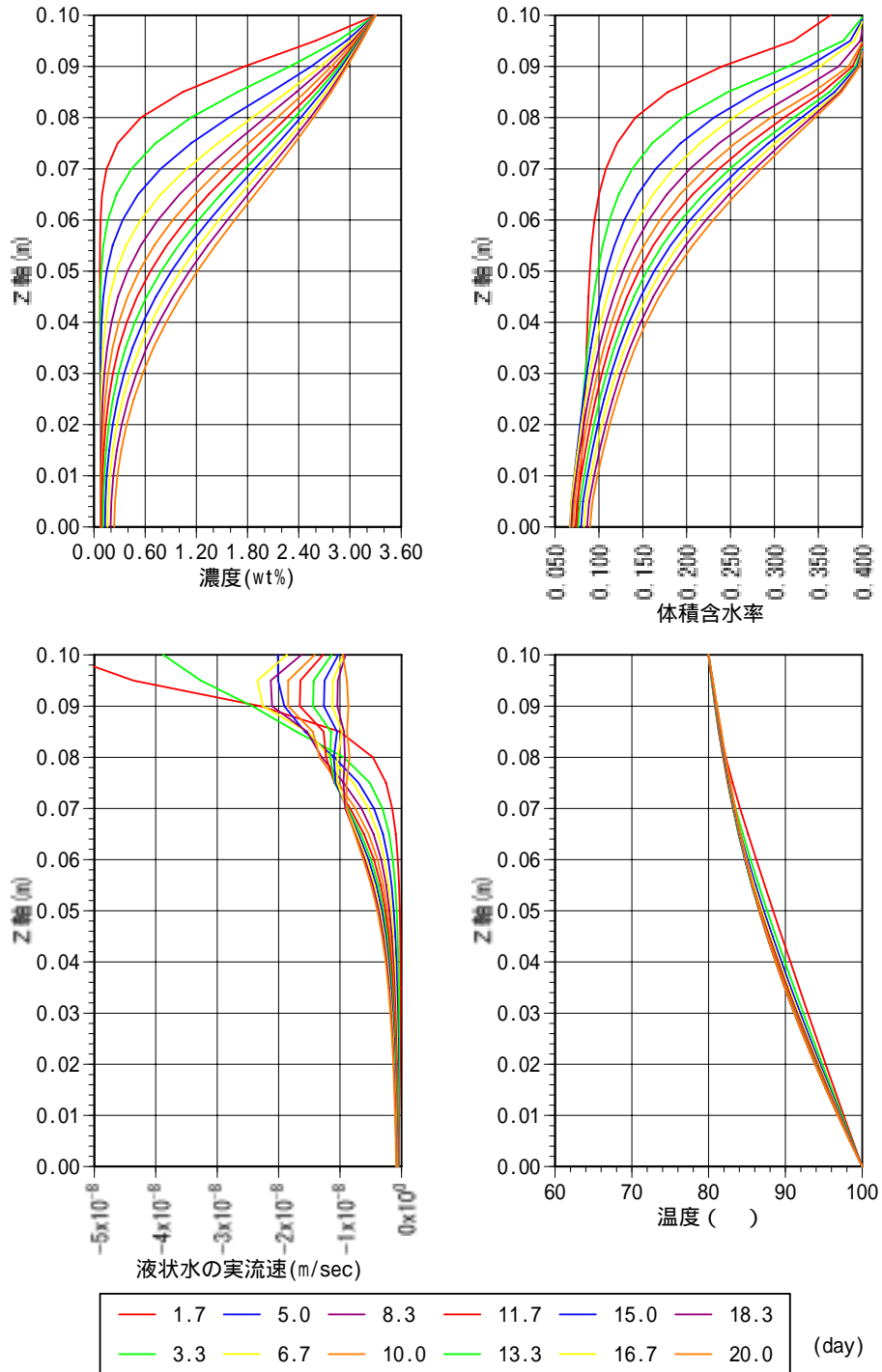


図 4-10 Case4-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時变化図

Case5-1 : 温度100-80 , DT=DT0 , 注入圧=0 , 分散長=0.1mm , 初期濃度0.0717wt% , 注入濃度3.3wt%

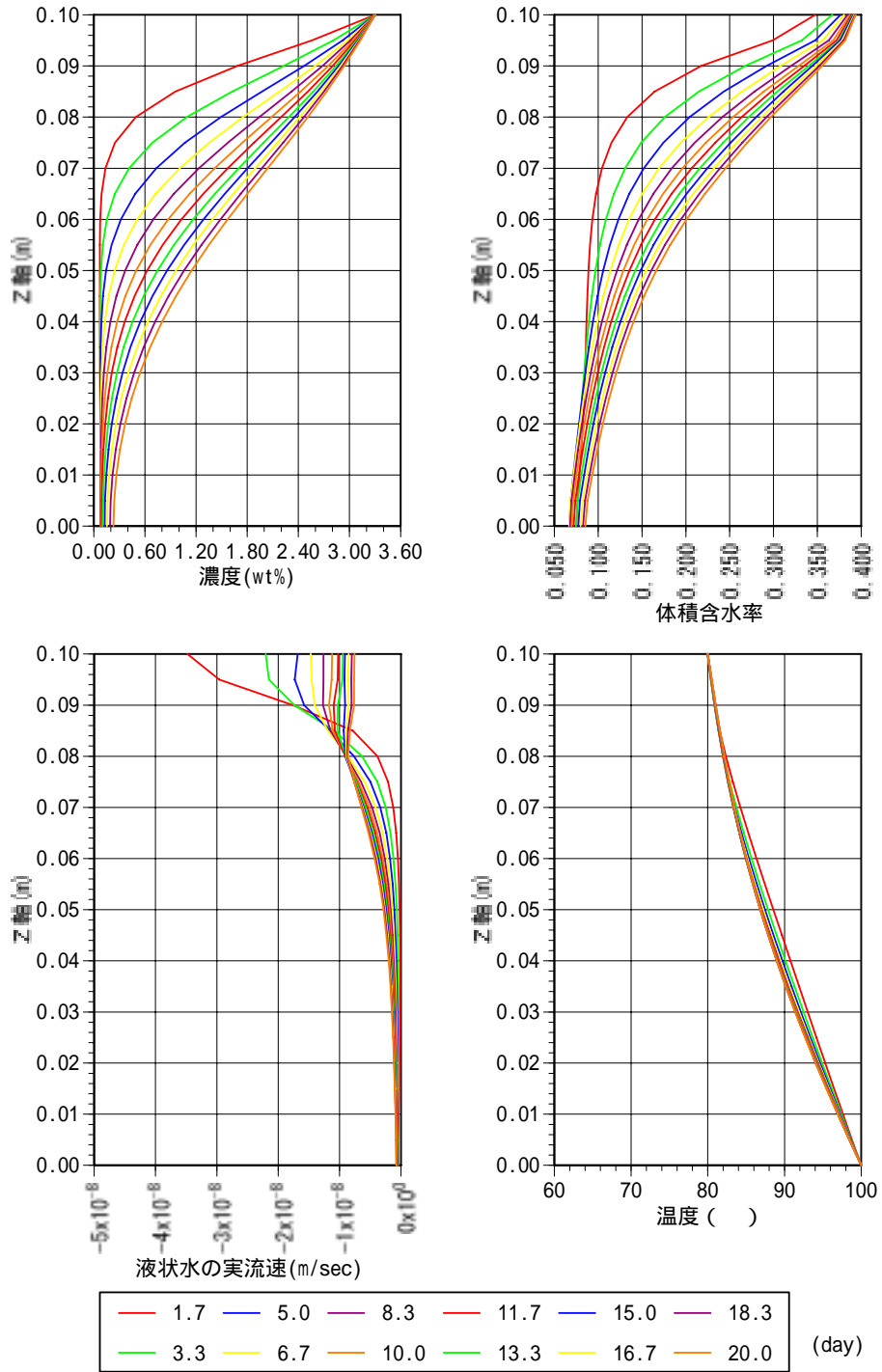


図 4-11 Case5-1 : 濃度 , 体積含水率 , 液状水実流速分布 , 温度経時变化図

Case6-1：温度100-80，DT=DT0，注入圧=0，分散長=0，初期濃度0.0wt%，注入濃度3.3wt%

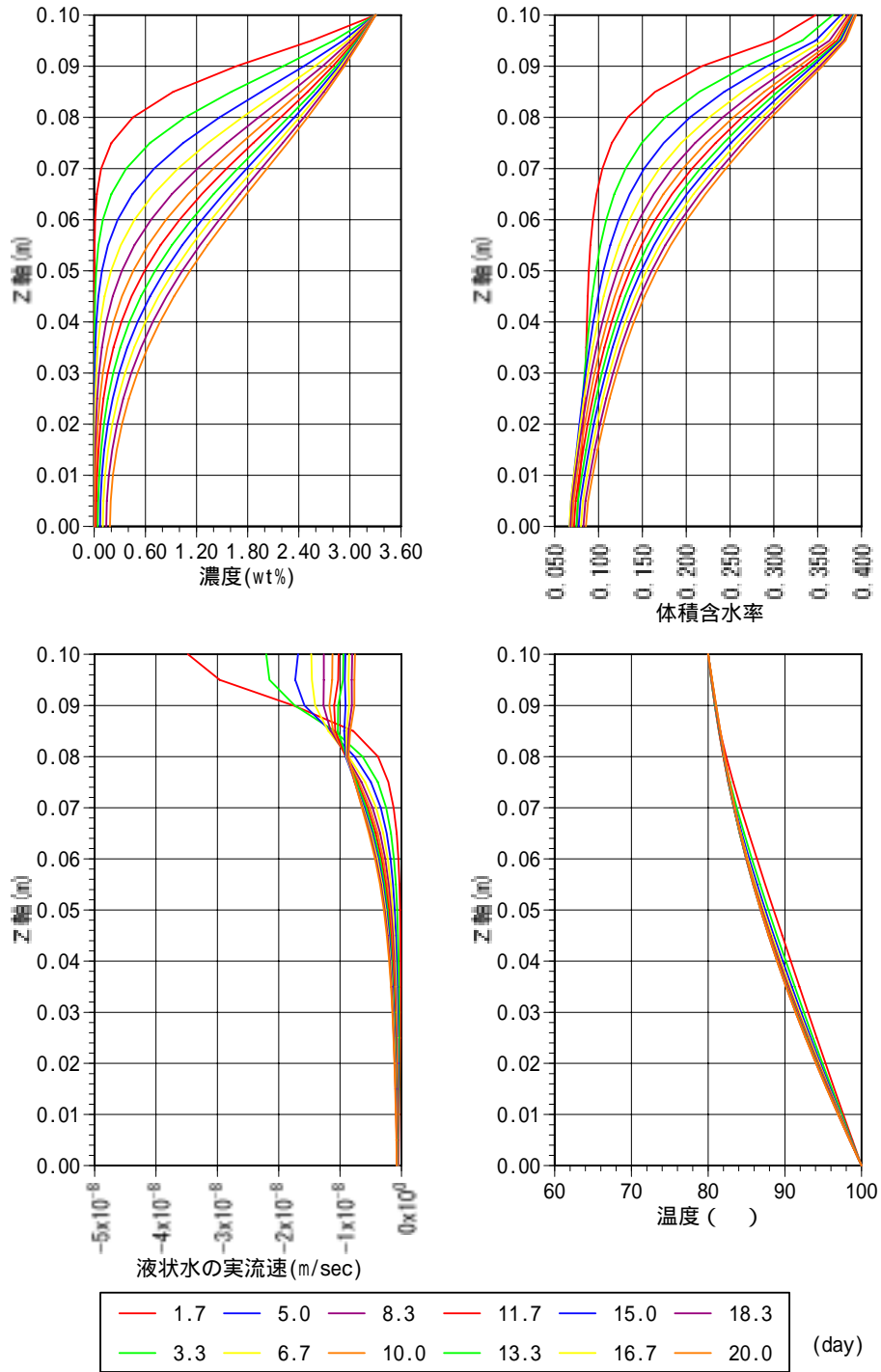


図 4-12 Case6-1：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時变化図

Case6-2 : 温度100-80 , DT=DT0 , 注入圧=0 , 分散長=0 , 初期濃度0.0717wt% , 注入濃度0.0wt%

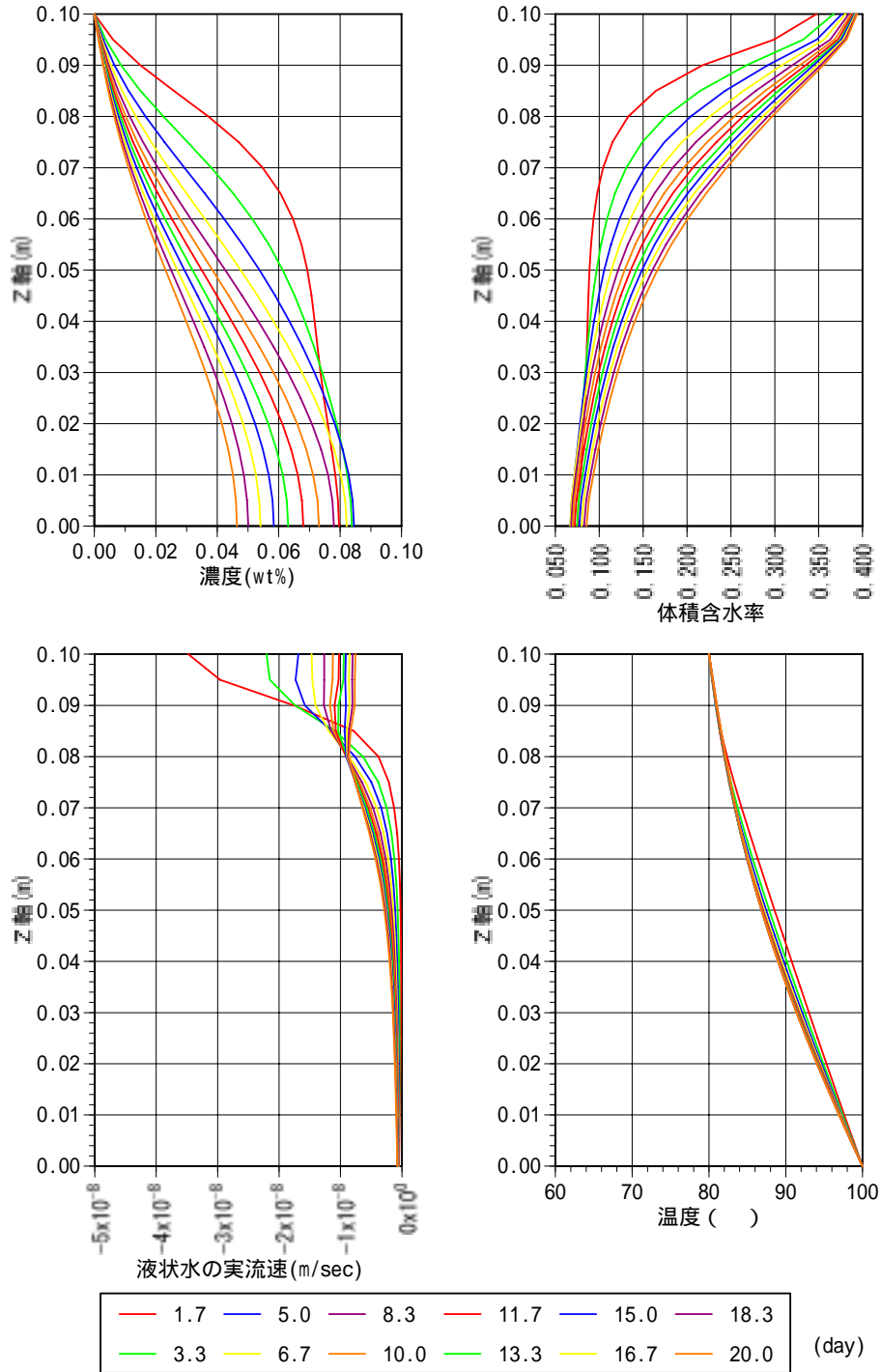


図 4-13 Case6-2 : 濃度 , 体積含水率 , 液状水実流速分布 , 温度経時变化図

Case6-3：温度100-80，DT=DT0，注入圧=0，分散長=0，初期濃度0.0717wt%，注入濃度2.0wt%

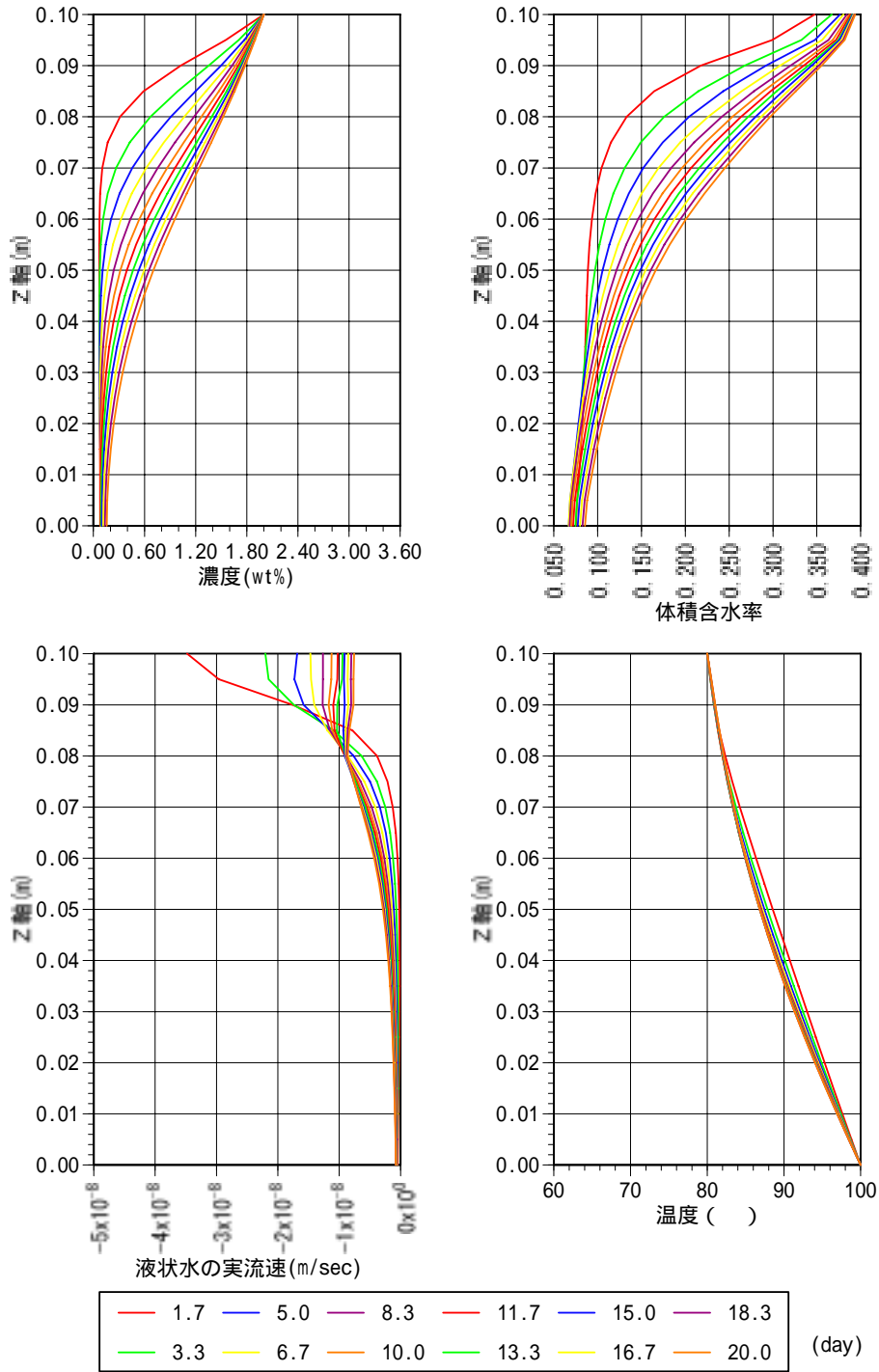


図 4-14 Case6-3：濃度，体積含水率，液状水実流速分布，温度経時变化図

Case6-4 : 温度100-80 , DT=DT0, 注入圧=0, 分散長=0, 初期濃度0.0717wt%, 注入濃度5.0wt%

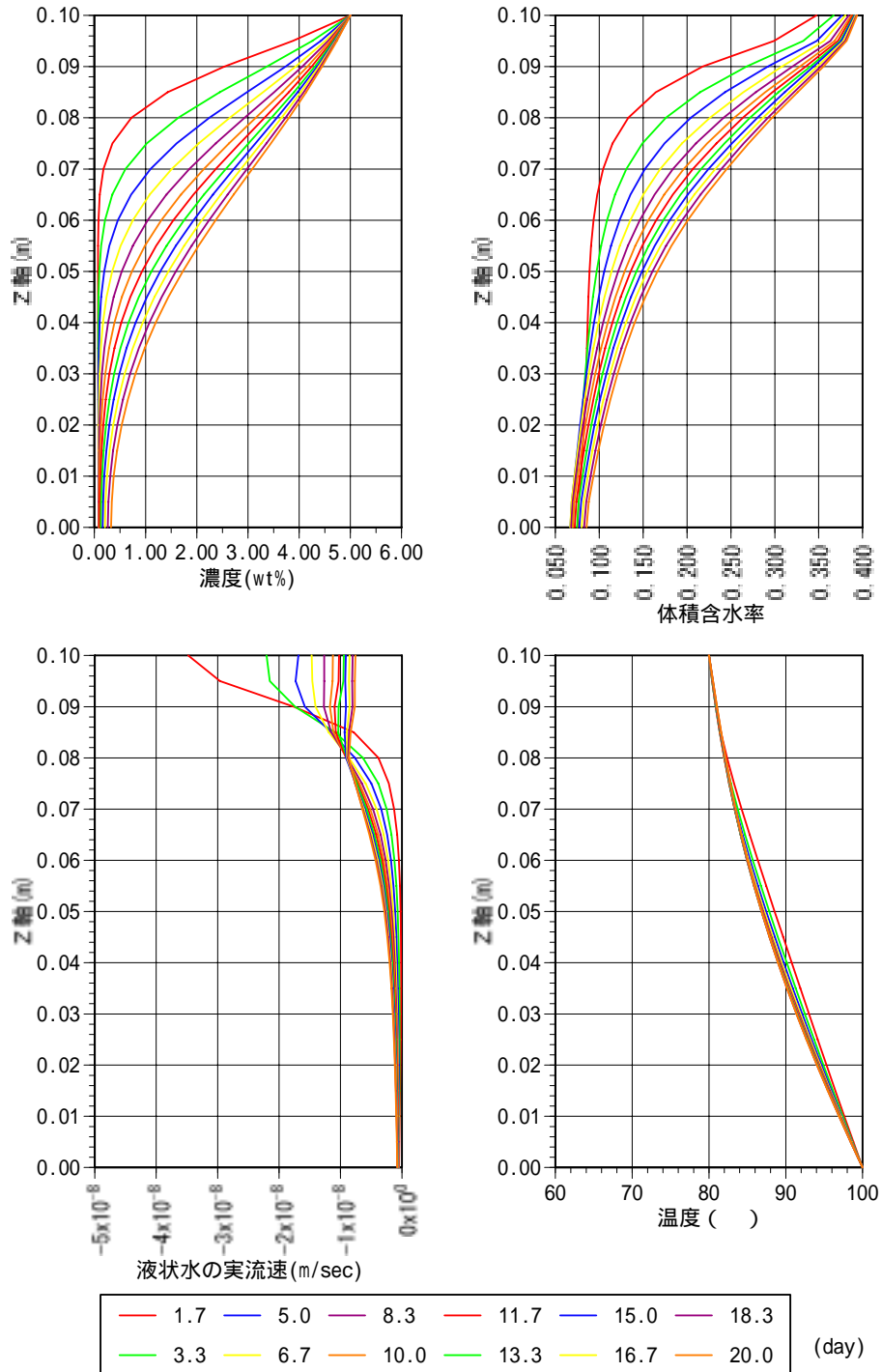


図 4-15 Case6-4 : 濃度, 体積含水率, 液状水実流速分布, 温度経時変化図

表 4-2 まとめ

解析ケース	摘要	
Case1-1	基本ケース	濃度分布を見ると、Z 軸に対して凹的な分布であり、移流的な挙動よりも拡散的な挙動が卓越していると考えられる。
Case1-2	温度勾配	基本ケースとほぼ同じ
Case1-3	温度勾配	初期の上面では基本ケースに比べて液状水実流速が多少小さくなっているが、濃度分布、体積含水率分布はほとんど変わらない。
Case2-1	温度勾配水分拡散係数	Case1-2 に比べて体積含水率が底面部において減少しており、これに対応した濃縮により、濃度分布が多少大きくなっている。
Case3-1	初期含水比	Case1-2 と比べて体積含水率分布が多少大きくなっており、また、上面部において液状水実流速が多少小さくなっているが、濃度分布はほとんど変わらない。
Case3-2	初期含水比	Case1-2 と比べて体積含水率分布が全体に大きくなっており、また、上面部において液状水実流速が小さくなっている。また、体積含水率分布差により、時間が経つにつれて濃度が小さくなっている。
Case4-1	注入圧	Case1-2 に比べて、液状水実流速が大きくなっている。これに対応して、上面からの体積含水率の上昇が速くなっている。また、濃度分布も若干速く上面から濃度が上昇している。
Case5-1	分散長	分散長を 0.1mm と設定したが、拡散が卓越した場であり、濃度分布は Case1-2 とほとんど変わらない分布となった。
Case6-1	初期濃度	初期濃度設定の差が少なく(0.0717 0.0)、Case1-2 とほとんど変わらない結果となった。
Case6-2	注入濃度	希釈するような注入濃度(0.0)であり、拡散場的に濃度が希釈される結果となった。
Case6-3	注入濃度	注入濃度を変えても、他のケースと同様、拡散場的な濃度挙動に変化は無かった。
Case6-4	注入濃度	注入濃度を変えても、他のケースと同様、拡散場的な濃度挙動に変化は無かった。

4.4 まとめ

本章では、今回開発した簡易熱-水-応力-物質移行-地化連成解析コードを用い、緩衝材内における塩の物質移行に関する解析を行った。結果として、緩衝材の初期塩濃度が低いこと、緩衝材の水分低下量が小さいこと等により、塩の蓄積現象は解析上、発生しなかった。しかしながら、塩の濃縮現象については解析上、表現できているため、解析コードとしての機能は十分に発揮しているものと考えられる。今後は、塩の蓄積現象がどのような条件で発生するのか解析的に検討していく一方、解析コードについても以下の通り高度化を図っていく必要があると考えられる。

- 1)塩の濃縮挙動は緩衝材の水分の変化に大きく依存すると考えられる。その意味では、今回使用した熱-水-応力連成解析コードでは温度勾配水分拡散係数が重要となってくる。したがって、高温下での温度勾配水分拡散係数の取得や、温度・水分量依存性等の取得等を行っていくことが重要である。
- 2)今回の解析では THM から物質移行、簡易地球化学解析への一方向の連成であった。しかしながら、実際には、今回の計算のケースだと、塩の濃度の変化による透水性の変化やその他の物性の変化が考えられるため、地球化学解析の結果を THM にフィードバックさせる必要がある。したがって、「THM Transport Chemical THM」のように各タイムステップにおける一連の計算終了した時点で、次のステップの解析に結果をフィードバックできるようにプログラムを改良する必要がある。
- 3)上記のようにプログラミングしたとしても、Chemical の変化に伴い、THM に関する物性値がどのように変化するかは、実験的に検討する必要がある。したがって、THM と Chemical とを相互に考慮した物性値を取得する必要がある。
- 4)上記のようにプログラミングおよび物性値取得を行った上で、解析モデルおよび解析コードに関しての検証および確認を行っていく必要がある。

5. 数値解析コード開発環境ツール上での連成解析の実現可能性に関する検討

本章では、予備的連成解析コードを数値解析開発環境ツール (Diffpack) 環境下で実現させることを目的として、以下の検討について実施した。

- ・ 既存解析コードの分析
- ・ 予備的連成解析コードの製作
- ・ 実現可能性に関する検討
- ・ 前記 3 項目の検討に関するまとめ

これらの検討に関する成果の概要を以下に示す。

- ・ 数値解析開発環境ツール (Diffpack) 環境下での連成解析の事例や既存の FORTRAN 解析コードの取扱い可能性について調査を実施した。本調査結果に基づき、連成手法などの情報を予備的連成解析の設計書に反映した。
- ・ 予備的連成解析コードは、地球化学、物質移行の連成を対象とし、組み込むための既存解析コードとしては、サイクル機構殿が所有している HYDROGEOCHEM (物質移行モジュール) と phreeqe60 (地球化学) とした。これらの解析コードについて、連成のために必要となる変数ならびに当該変数がコーディングされている箇所、関連すると考えられる変数について調査を実施し、これらの情報を予備的連成解析コードの設計書に反映した。
- ・ 前記の設計書に基づき、Diffpack 環境下において、物質移行、地球化学連成解析コードを作成し、動作の確認を行った。以上のことから、数値解析開発環境ツール (Diffpack) の連成解析に対する適用性ならびに実現可能性について見通しを得ることができた。

5.1 予備的連成解析システムの設計

5.1.1 既存解析コードの分析

上記のモデル式に基づき、入出力情報をまとめた結果を以下に示す。

既知の値 (入力)	P, TOT_j
既知の値 (入力)	$b_{p,j}, c_{i,j}, I, J, K_i, K_p, OPV, u_p, v_i, Z_i$
未知の値 (プログラム内での処理)	a_i, a_j, m_i, MIN_p

プログラム分析を行った結果、以下のことが確認できた。

TOTAL	: SOLUTION ブロック使用の場合の濃度入力情報
CREAC, LREAC	: REACTION ブロック使用の場合の濃度入力情報
NRMINS	: 入力で指定した沈殿候補鉱物の数
TOT	: 解析結果の濃度情報を格納

(2) HYDROGEOCHEM

本解析コードの物質移行解析モジュールでは、化学種ごとに総濃度を算出するために、総溶解濃度、総吸着濃度、総沈殿濃度を用いている。これを図示すると、図 5-1 のようになる。

ただし、本連成解析では、化学平衡計算を `phreeqe60` で実行することを前提とするため本研究では、吸着濃度 S は常に 0 として取り扱う必要がある。

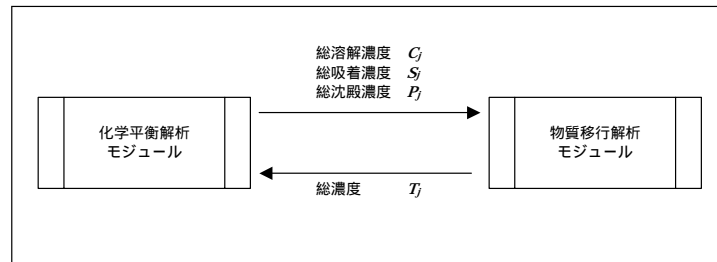


図 5-1 HYDROGEOCHEM のモジュール間のデータの流れ

(3) 授受変数とその対応付け

連成に組み込む際に必要となる変数のうち多くは、化学種ごとなどの配列を持っている。この配列内の配置順は、双方のコードで異なる。このように、授受変数を洗い出しただけでは連成解析は成立しない。ここではそれらの照合について述べる。検討の結果、`phreeqe60` の熱力学データベースに記載している名称を用いて、名称一致による配列位置の特定を行うことが必要となる。図 5-2 は、化学種名もしくは化学種番号を格納する変数が、それぞれの濃度データを格納する変数と同じ配列順序で用意されている。名称および熱力学データベースを介して化学種番号の一致を確認あるいは設定し、濃度データの授受を行う。

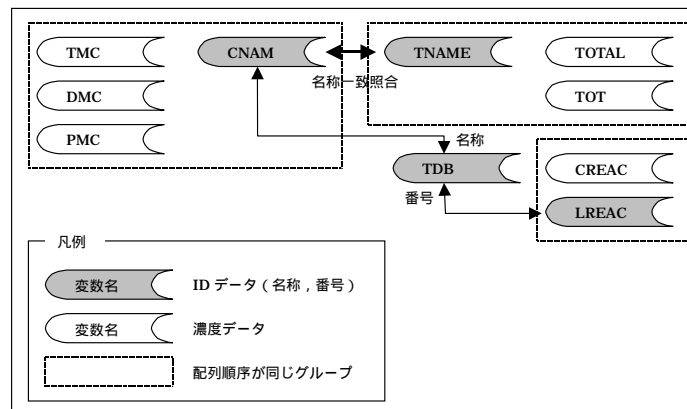


図 5-2 変数の配列位置確認手順

5.1.2 データ授受および処理フローの検討

連成解析を実装するうえで、技術的に選択可能な手法が複数存在する箇所がある。また、実装のために工夫が必要な箇所がある。ここでは、そうした課題点について、手法を整理し、採用する手法を検討する。

(1) 情報交換の手法

検討の結果、Diffpack の効果を大きくしようとするほど、新規作成量あるいは改良作業量が大きくなると見込まれる。最低限の条件としては、

メモリ上での情報交換による速度向上

Diffpack を利用した何らかの解析などに既存コードを付加した連成解析といった条件が整う場合には、メモリによる情報交換、仲介機能部分には c++言語による Diffpack 利用のプログラムを新規作成することによって、連成解析を実現する価値が生じるものとする。

(2) 処理の中断と再開

本研究で 3 種類の手法を検討した結果の一覧を表 5-1 に示す。3 番目に挙げた迂回手法を用いると、他の手法に比べて改良部位が少なく、かつ、この改良に伴う速度低下要因が無いことから、最も有利であると考えた。

表 5-1 化学平衡モジュール複数回呼出に関わる改良手法の比較

No.	手法 項目	main, gm2dxz の C++化	プロセス待機	化学平衡モジュール迂回
1	既存コード 改良量 (本目的 の範囲)	1000 行弱 (main: 183 行, gm2dxz: 785 行)	6000 行弱 (HYDROGEOCHEM 全 体と phreeqe60 の一部)	300 行弱 (entry 設置とそれに伴 う条件判断などで約 40 行×7ヶ所)
2	速度低下	無し。 速度低下を惹起する要 因は無い。	若干低下。 並列化できないプロセ ス分割により、プロセス 制御負荷が影響する。	無し。 速度低下を惹起する要 因は無い。

5.2 製作仕様

5.2.1 システム構成

連成解析を実現するために用いたハードウェア・ソフトウェア環境を、表 5-2 に掲げる。また、機能構成を図 5-3 に示す。

表 5-2 ハードウェア・ソフトウェア構成

No.	構成区分	製品名, バージョン
1.	ハードウェア	
1.1	計算機	Compaq AlphaStation XP1000
	計算機的主要仕様	CPU: Alpha 21264 667MHz ×1, RAM: 1280MB
2.	ソフトウェア	
2.1	OS	Compaq Tru64™ UNIX® 4.0
2.2	C/C++言語コンパイラ	Compaq C++ Version 6.2 for Tru64 UNIX Systems
2.3	C++言語クラスライブラリ	オブジェクト・オリエンテッド偏微分方程式シミュレータ開発環境 Diffpack 3.5
2.4	Fortran 言語コンパイラ	DIGITAL Fortran v5.2 for DIGITAL UNIX Alpha Systems
2.5	可視化ソフトウェア	Perl 5.0 (Diffpack 添付のフリーソフトウェア) gnuplot 3.7.0 (Diffpack 添付のフリーソフトウェア)

Compaq 社製ワークステーション上で、オブジェクト・オリエンテッド偏微分方程式シミュレータ開発環境 Diffpack を用いて、本連成解析を製作する。Diffpack 使用上、C++言語コンパイラは必須である。また、連成に組み込む既存解析器が Fortran 言語で記述されていることから、Fortran 言語コンパイラも必要である。後処理の可視化ツールとしては、Diffpack に添付されているフリーソフトウェア gnuplot を選択する。

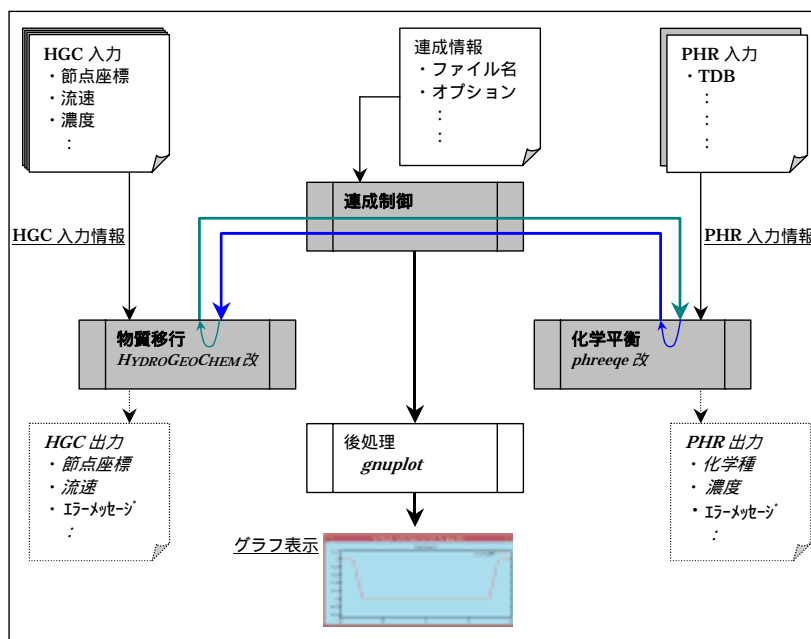


図 5-3 連成機能構成

5.2.2 入出力仕様

ここでは、入出力情報について記載する。

入力

検証の容易さ・操作性などを考慮して、できる限り各既存解析器の入力フォーマットを流用する。HYDROGEOCHEM については、ほぼそのままの入力ファイルを作成し（物質移行のみ）、利用できるものとする。

phreeqe については、入力情報は連成制御側から得られ、解析に必要な熱力学データベースおよびオリジナルの入力データを読み込む。

また、これらとは別に、連成制御用の情報が必要となる。解析途中で画面入出力待ちをするようでは連成解析とは言いがたいため、既存解析器の入出力ファイル名称、連成のために追加的に必要となる情報については、連成制御側から供給することとする。

表 5-3 入力ファイルに関する仕様・制約条件

No.	項目	内容
1.	ファイル名	
1.1	入力 HGC	"HgcInp.inp"に固定。既存必須。CUI 操作廃止，連成制御側で固定。
1.2	流速 HGC	"HgcFlowVel.inp"に固定。CUI 操作廃止，連成制御側で固定。
1.3	バイナリ再起動 HGC	"HgcRestart.inp"に固定。CUI 操作廃止，連成制御側で固定。
1.4	入力 PHR	"Phr.inp"に固定。既存必須。実行時設定廃止，連成制御側で固定。
1.5	熱力学 DB PHR	"phreeqe.tdb"に固定。既存必須。PHR 側固定廃止，連成制御側で固定。
2.	HGC 入力	
2.1	単位	mol, dm で入力。（オリジナルでは単位はユーザーの自由裁量）
2.2	整数パラメータ DS2	節点数，計算ステップ数などは有効。
2.3	実数パラメータ DS3	
2.4	出力制御 DS4	出力時刻間隔の設定は有効。
2.5	化学情報 DS10	使用する PHR の熱力学データベースに記載の名称を使用。LNH の設定は必須。
2.6	初期条件 DS11	有効。
2.7	境界条件 DS15	有効。
2.8	成分化学種 DS19	使用する PHR の熱力学データベースに記載の名称を使用。
2.9	水溶化学種 DS20	無効。PHR および PHR の熱力学データベースに従う。
2.10	吸着化学種 DS21	無効。常に 0 として扱う。
2.11	沈澱鉱物 DS22	沈澱鉱物は 1 種に限定。 PHR の MINERALS ブロックの指定と一致すること。 したがって、使用する PHR の熱力学データベースに記載の名称を使用。
3.	PHR 入力	
3.1	単位	オリジナルと同じく選択可。
3.2	SOLUTION	この項目は使用しない。REACTION ブロックに指定している化学種に対し、有意な値を入力した場合には、影響を与える。 pH, pe の値は、毎回データ授受で書換えるため、影響は無い。
3.3	REACTION	解析対象化学種およびその初期濃度を設定する。
3.4	MINERALS	沈澱候補鉱物は 1 種に限定。 HGC の Data Set 22 の指定と一致すること。

5.2.3 既存解析コードの改良仕様

本項では、連成に組み込むための、phreeqe60 と HYDROGEOCHEM の改良箇所について記述する。

(1) phreeqe60

phreeqe60 の改良箇所の概要について表 5-4 に示す。

表 5-4 既存解析器の改良箇所 - phreeqe60 -

No.	改良箇所	説明
1.	MAIN プログラム	データ授受に関わる改良 連成制御側から呼出すために、サブルーチン化。 COMMON 変数の追加。
2.	MAIN プログラム	処理フローに関わる改良 ファイル読込部を初回のみ実行に変更。 2 回目以降は解析部のみ実行。 連続解析ループを解消。 ファイルクローズを明示的に記述。
3.	サブルーチン PTOT	データ授受に関わる改良 COMMON 変数の追加。

phreeqe60 の改良は、メインプログラムとサブルーチン ptot について行う。

(2) HYDROGEOCHEM

HYDROGEOCHEM の改良箇所の概要について表 5-5 に示す。

表 5-5 既存解析器の改良箇所 - HYDROGEOCHEM -

No.	改良箇所	説明
1.	MAIN プログラム	サブルーチン化。 COMMON 変数の追加。 GM2DXZ 呼出部： RETURN, ENTRY 設置。
2.	サブルーチン GM2DXZ	COMMON 変数の追加。 OCSPIT 呼出部： RETURN, ENTRY 設置， DO ループ（時間ループ）の解消。
3.	サブルーチン OCSPIT	COMMON 変数の追加。（ローカル変数 NP と EQUIVALENCE） EQMOD 呼出部： EQMOD 呼出を廃止，RETURN, ENTRY 設置， DO ループ（節点ループ）の解消。
4.	サブルーチン EQMOD 以下	削除。 EQMOD から呼出すものを含めサブルーチン該当 16 個。

5.2.4 連成制御仕様

C++言語によるプログラムを新規作成して、連成制御側とし、予備的連成解析システムのメイン関数とする。関数構成を図 5-4 に、機能一覧を表 5-6 に示す。また、物質移行 - 化学平衡間の授受データの設定概要を、表 5-7, 8 に示す。

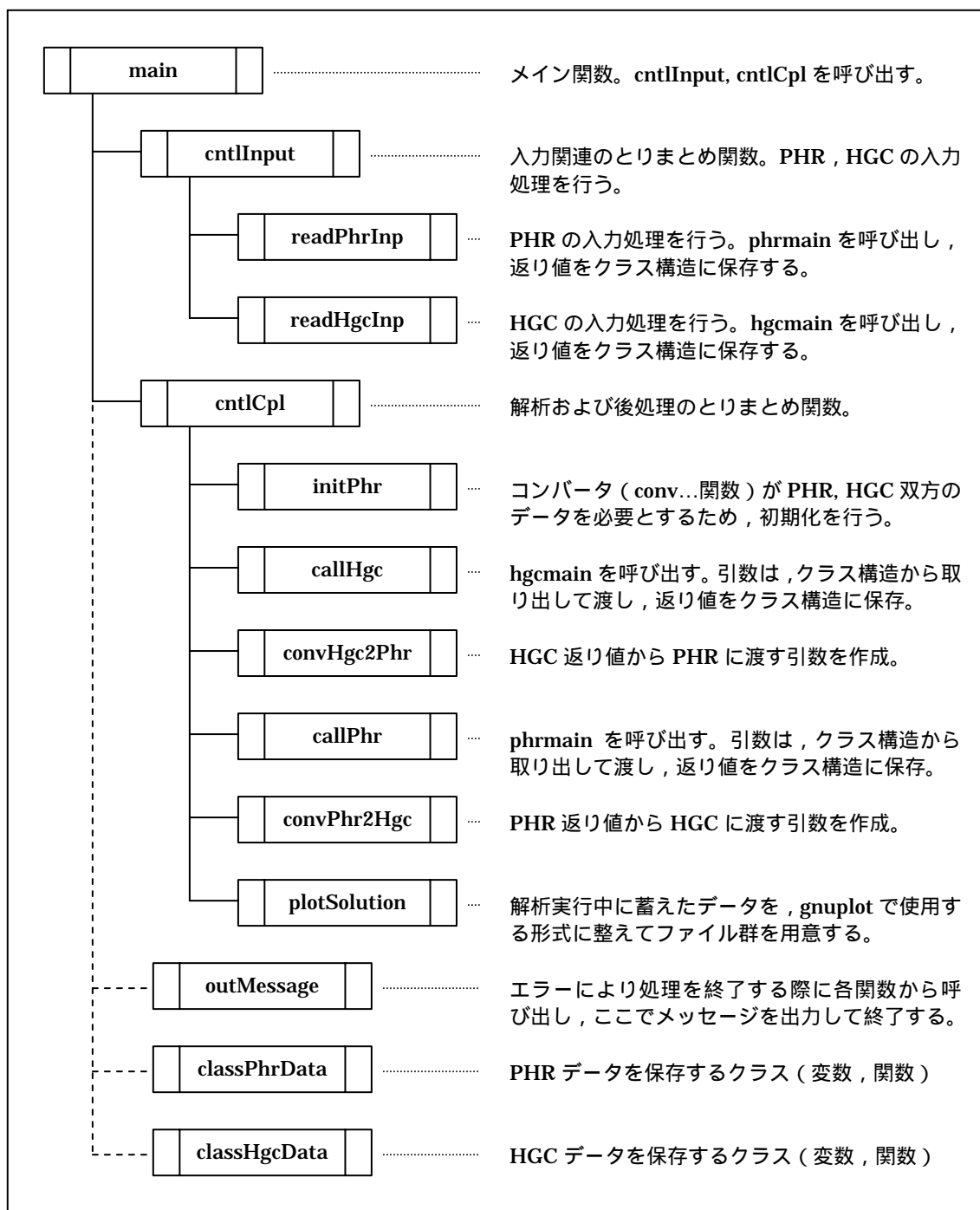


図 5-4 連成制御に関わる関数構成

表 5-6 連成制御部に持たせる機能一覧

No.	機能項目	機能概要	実装手法
1.1	入力情報読み込み	phreeqe60 入力データをファイルから取得する。	連成解析中の実行制御とほぼ同等。 サブルーチン化した phreeqe60 の引数にフラグを用意し,初回実行時はファイル読込部位を実行(2回目以降はファイル読込部位の処理を実行させない)とする。
1.2	入力情報読み込み	HYDROGEOCHEM 入力データをファイルから取得する。	連成解析中の実行制御とほぼ同等。 サブルーチン化した HYDROGEOCHEM の引数に,処理中断位置を把握するフラグを用意するため,ファイル読込はこのフラグの初回位置までとなる。
2.1	連成実行制御	フロー制御 HYDROGEOCHEM, phreeqe60 を必要に応じて交互に実行する。	基本フロー 基本は次の順序である。 <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block; margin: 5px 0;"> →HGC 変換器 PHR 変換器 ← </div> ここで HGC は,化学平衡計算を要求する都度中断し,連成解析全体で 1 回の実行, PHR は呼出ごとに 1 回実行する。 例外 1 PHR のダミー計算 変換器は HGC と PHR のデータ配列位置を照合する必要があるため,1 回目の処理でも HGC, PHR 双方のデータが必要となる。よって, PHR は最初に 1 回ダミー計算を実行しておく。 例外 2 PHR 再計算 PHR の解析結果で沈澱候補鉱物が再溶解を起こした場合は,想定しているモデルでの鉱物枯渇を意味するが, PHR 自体は沈澱候補鉱物が無限に存在するとして解析を進めてしまう。そこで,鉱物の溶解を変換器で検知し,再溶解計算抑止のために,入力データから沈澱候補鉱物数を 0 として PHR 再計算を行う。 ただし,再計算後は,鉱物数をリセットし,HGC 後の初回は必ず鉱物を考慮する。
2.2	連成実行制御	データ変換 HYDROGEOCHEM, phreeqe60 それぞれに必要なデータを整える。	物質移行 - 化学平衡間で授受するデータの設定を行う。 (設定概要は,表 5-7, 8 を参照)
3.	後処理	解析結果をとりまとめ,ファイル出力,グラフ表示を行う。	ファイル出力が必要な情報を連成制御側でとりまとめる。 Diffpack の機能を用い,ファイル出力とそのグラフ化を行う。

HGC から PHR へのデータ変換

HGC が化学平衡計算を要求して、連成側に処理を渡したときに動作する変換器の概要を表 5-7 に示す。

表 5-7 HGC 出力からのデータ変換一覧

No.	設定項目	変数概要	値設定の概要
1.	TOTAL	入力ファイルの SOLUTION ブロックの SPECIES の量、および pH, pe から換算した H ⁺ , e ⁻ の量などを保存	PH, PE 相当分のみ設定。 pH は、TMC の H ⁺ に相当する値をそのまま代入。 pe は、固定値設定。 (照合を C++で行うが、PHR(Fortran)で正しく位置を把握できる番号で設定することに注意。)
2.	LREAC	入力ファイルの REACTION ブロックの SPECIES No.を保存	CNAM と TNAME を照合し、一致するごとに PHR の SPECIES No.を配列変数 LREAC に前詰で保存。 (照合を C++で行うが、PHR(Fortran)で正しく位置を把握できる番号で設定することに注意。)
3.	CREAC	入力ファイルの REACTION ブロックの SPECIES の量を保存	CREAC の LREAC と対応する配列番号位置に、TMC をそのまま代入。
4.	NRMINS	入力ファイルの沈澱候補鉱物の数を保存	PHR 入力ファイルで指定した値に再設定。

PHR から HGC へのデータ変換

PHR が化学平衡計算を終えて、連成側に処理を渡したときに動作する変換器の概要を表 5-8 に示す。

表 5-8 PHR 出力からのデータ変換一覧

No.	設定項目	変数概要	値設定の概要
1.	CNMOL	化学種濃度を保存	pH は固定、pe は PE から変換
2.	DMC	液相濃度を保存	TOT と位置照合の上、そのまま代入
3.	PMC	沈澱濃度を保存	沈澱候補鉱物が沈澱する場合、TOT から取得
4.	NRMINS	入力ファイルに記載の沈澱候補鉱物の数を記録	鉱物が再溶解した場合：0 代入 鉱物が沈澱した場合：前回の値のまま 0 代入時は、再度 PHR を実行。

5.2.5 後処理仕様

概要

解析終了後、グラフ表示を行う。

グラフは、横軸を節点番号[-]、縦軸を濃度[mol/l]または pH[-]とし、それぞれの時刻毎に折れ線を表示できるものとする。必要となるデータは、各タイムステップで取得しておき、解析終了後に gnuplot 用にフォーマットを整える。結果のイメージを図 5-5 ~ 5-7 に示す。

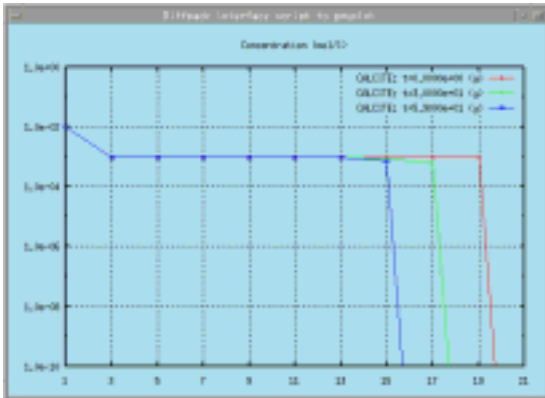


図 5-5 グラフ例(1)

横軸：節点（距離），縦軸：沈殿量，
線色：経時変化

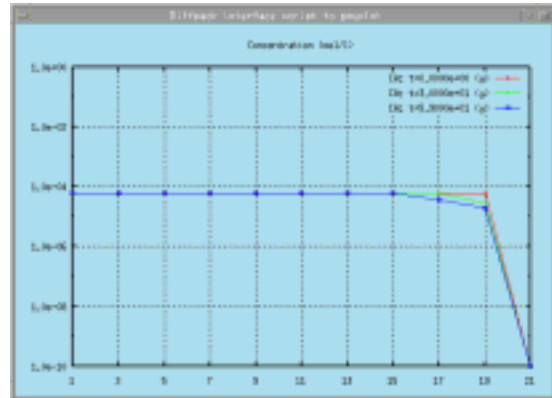


図 5-6 グラフ例(2)

横軸：節点（距離），縦軸：液相濃度，
線色：経時変化

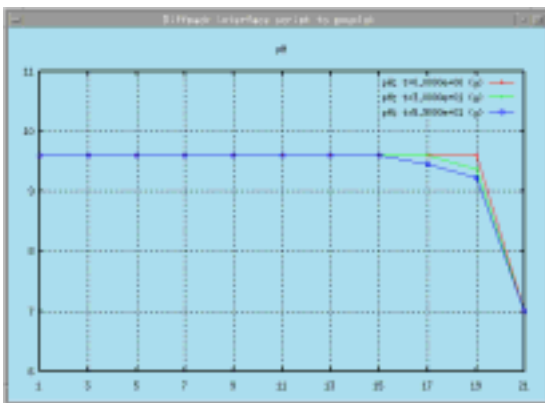


図 5-7 グラフ例(3)

横軸：節点（距離），縦軸：pH，
線色：経時変化

5.2.6 動作の確認

既存コードの改良および連成制御の新規製作が、仕様通りの動作をしているか確認を、表 5-9 のように行った。

表 5-9 動作確認

No.	機能項目	確認項目	確認結果
1.	phreeqe60 改良		
1.1	サブルーチン化	サブルーチン phrmain の引数が正しく設定できているか。 PHR の return 直前の内容 連成制御側に渡った直後の内容	デバッグ出力により、 の内容が一致することを確認。 また、その内容が入力、TDB と不整合を起こしていないことを確認。
1.2	ファイル読込部位の改良(1)	入力ファイル読込は正しいか。 既存コードによる出力 改良後のコードによる初回出力	の結果が一致することを確認。
1.3	ファイル読込部位の改良(2)	連成で更新しない情報について、初回読込の情報が維持できているか。	ダミー変換器によって ・何も変更しないと毎回まったく同じ結果を得る。 ・NRMINS のみを変更すると、沈澱鉱物の有無が変わる。 ことを確認。
1.4	連続解析機能の抑止	入力ファイルが末尾に至るまで連続解析を行う機能を抑止できているか。	PHR で連成を終了することが無いことで確認。
1.5	装置番号 11 の競合回避	HGC とのファイルの競合は起きていないか。	open エラーを生じないことを確認。
2.	HYDROGEOCHEM 改良		
2.1	サブルーチン化	サブルーチン hgcmain の引数が正しく設定できていることを確認 HGC の return 直前の内容 連成制御側に渡った直後の内容	デバッグ出力により、 の内容が一致することを確認。
2.2	ファイル読込部位の改良	入力ファイル読込は正しいか。 沈澱反応が起こらない濃度設定（低濃度）の入力ファイルを用いて、 既存コードによる出力 改良後のコードによる出力	の結果で、物質移行解析がよく一致することを確認。
2.3	装置番号 5, 6 の競合回避	PHR とのファイルの競合を起きているか。	open エラーを生じないことを確認。 Phr.out に HGC の情報が混入していないことを確認。
2.4	DO ループ解除	DO ループを GOTO 文利用で代替後の処理は正しいか。	デバッグ出力により OCSPIT 実行フローが同じであることを確認。 オリジナル HGC と連成システムの結果がよく合うことを確認。
2.5	処理中断・再開設定	処理の中断・再開は正しく制御できているか。	デバッグ出力により、OCSPIT 箇所、節点番号がフロー通りに進むことを確認。
3.	連成制御新規製作		
	HGC PHR 変換		
3.1	pH, pe の設定	pH, pe を正しく変換し、TOTAL に濃度設定しているか。	デバッグ出力と Phr.out の内容で確認。
3.2	LREAC, CREAC の設定	REACTION 入力データブロックを正しく構成できているか。	デバッグ出力によって、化学種名称の照合、TDB 記載の Species No.が

No.	機能項目	確認項目	確認結果
			合っていることを確認。
3.3	NRMINS 設定	NRMINS 設定を、正しくリセットしているか。	Phr.out で沈澱候補鉱物無しが連続しないことを確認。 Phr.out で沈澱候補鉱物が無いケースの次は必ず鉱物有りとなっている（リセットしていること）を確認。 デバッグ出力で NRMINS = 0 が連続しないことを確認。
	PHR HGC 変換		
3.4	沈澱鉱物再溶解時の動作(1)	再溶解がまったく発生しないケース初期条件、境界条件での Ca^{2+} , CO_3^{2-} の濃度を 10^{-2} mol/l 以上に設定。	NRMINS が 0 に再設定される場合が無いことを確認。
3.5	沈澱鉱物再溶解時の動作(2)	再溶解が発生するケース PHR の delta phase が負値を出力した箇所で、 連成制御のデバッグ出力で次の処理フローを確認。 Phr.out で再計算内容を確認。	PHR HGC 変換器、続いて PHR 再計算を実行。 沈澱候補鉱物が無いことを確認。 デバッグ出力で NRMINS = 0 が連続しないことを確認
3.6	沈澱量 PMC の値の分配	沈澱量から構成化学種の濃度への変換は正しく行っているか。	デバッグ出力により、沈澱鉱物名称、分配する構成化学種名称、構成化学種の化学量論係数が正しく設定されていることを確認。
3.7	CNMOL の設定	pH, pe を正しく設定しているか。	この設定の有無により、pH の値が変化することを確認。 オリジナルと連成で結果がよく一致することを確認。
3.8	DMC の設定	液相濃度を正しく設定しているか。	Phr.out の内容と Hgc.out の内容を比較することで合うことを確認。 デバッグ出力によって合うことを確認。

5.3 実現可能性に関する検討

本研究では、既存の解析コード（HYDROGEOCHEM, phreeqe60）を用いて、物質移行-地球化学連成解析コード（予備的連成解析ツール）を作成し、正常に動作することを確認した。本検討は、予備的連成解析システムの設計、製作作業を通じて Diffpack が連成解析コードの開発環境ツールとして実現可能か否かについて検討した。

Diffpack ツールは、FORTRAN 言語による解析コードも取り扱うことができ、かつ C++言語との親和性も確保できることから、連成解析のための開発環境ツールとして適している。

Diffpack ツールは、後処理機能（本年度一部使用）や入力機能において簡易に GUI が作成できるため（本年度は例題にて確認）、運用面での汎用性は確保されている。

本来は図 5-8 に示す様に Diffpack で用意されているライブラリの利用することにより、温度分布解析（定常、非定常）、水理解析、応力解析の体系を構築することが出来、標準的な部品（特定の人に依存しないこと）を用い、短期間で解析コードを作成し、更に検証の合理化が期待できるところが Diffpack 最大のメリットである。

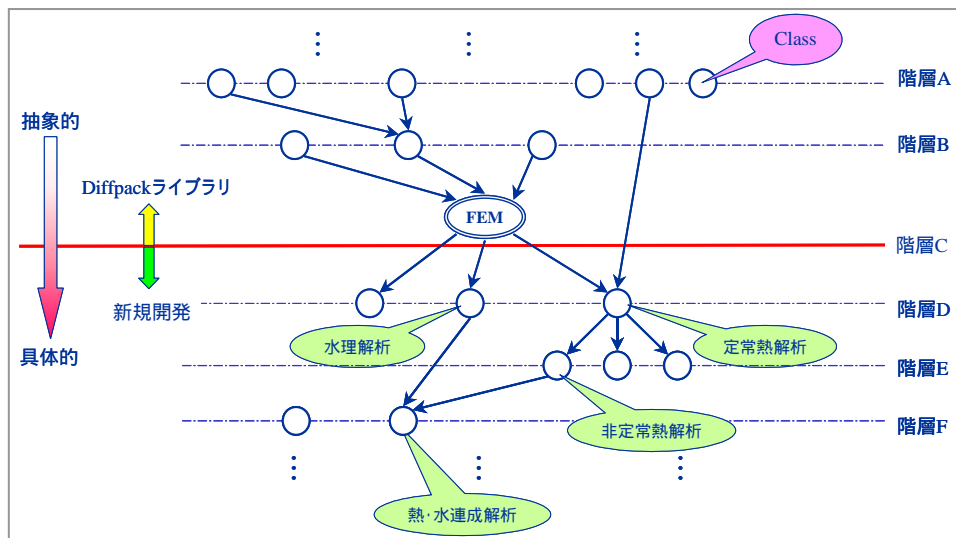


図 5-8 Diffpack の機能を有効に利用した場合の解析コード体系

Diffpack を効果的に利用するためには、少なくとも以下に示すレベル（粒度：小規模なプログラム）まで展開しておき、これらの粒度に対しても Diffpack の機能により構築しておく必要がある。解析コードは、1)～8)までがワンパッケージとなっていることから、連

成問題のうち特に支配方程式の変更，大規模・複数プロセスを取り扱う場合の高速化などが必要となった場合は，大改良，新規解析コードの導入，作り直しといった状況が考えられる。

- 1) 入力データ読み込み
- 2) 要素マトリクスの作成
- 3) 要素荷重ベクトルの作成
- 4) 全体マトリクスの作成
- 5) 全体荷重ベクトルの作成
- 6) 境界条件の処理
- 7) 連立方程式を解く
- 8) 出力処理

以上のことから，**Diffpack** を連成解析ツールとして有効に利用する場合は，問題に応じて支配方程式からの離散化やコーディング作業を行うだけの技術ポテンシャルが必要となる。既存の解析コードからの脱却も視野に入れつつ，中長期的に取り組むことが肝要である。

5.4 まとめ

本章では，**Diffpack** 上での連成解析の実現可能性を確認すべく，既存の物質移行解析コードと地球化学コードを対象として，予備的連成解析コードの設計，製作（動作の確認を含む）を行ない，その成果をまとめた。検討の結果，**Diffpack** は，既存の解析コードを用いた連成問題にも対応できることが確認できた。

今後は，**Diffpack** で予め用意している基本モジュールと既存解析コードとの親和性を考慮しつつ，既存解析コードを部分的に基本モジュールに置き換えていくことや，簡易な解析コードを **Diffpack** 機能により構築していくことにより，本ツールの理解度を上げなければならない。このようなアプローチを採用した場合は，短期的（1年）連成の実現は困難となるが，短期的な連成の実現方法については，後述の課題にて検討することとする。

6. 検証および課題の抽出

本研究では、Diffpack 環境下において物質移行-地球化学の連成解析を既存の解析コード HYDROGEOCHEM (物質移行モジュール) と phreeqe60 を採用することにより、予備的連成解析システムを構築した。本予備的連成解析システムが、Diffpack 環境下において正確に連成解析が実現できているか否かの確認を目的として、検証を行った。

また、本章では、連成解析コードの開発ならびに検証作業を通じて、課題の抽出、短期的実現に向けての対応策について記載する。

6.1 検証

本節では、物質移行-地球化学連成の機能が予備的連成解析システムを用いて正確な解であることを定量的に示す。以下に検証解析仕様 (6.1.1)、検証解析結果 (6.1.2) について示す。

6.1.1 検証解析仕様

本機能の検証は、HYDROGEOCHEM と phreeqe60 の連成解析 (予備的連成解析システムによる解析) を実行する際に、連成解析の結果が正確であるか否かについて確認しておくことを目的としている。予備的連成解析システムに格納されている HYDROGEOCHEM, phreeqe60 コードは、システム製作段階において、手が加えられており、かつ連成を行う際に必要となるデータの受け渡しが行われていることから、正確なコーディングが実施されているか否かについて確認するものである。

本テストケースでは、前記の目的ならびに前記の単体機能検証仕様に基づき、解析条件を設定した。物質移行に係わる解析条件を図 6-1、表 6-1 に示す。また、地球化学条件は、初期の時点でカラム内において方解石を沈殿させ、カラムの片側を希薄溶液条件とすることにより、徐々にカラム内の方解石が溶解していく挙動を計算するものである。

前記の解析条件に基づき、既存の物質移行-地球化学連成解析コード HYDROGEOCHEM による計算を行ない、この結果 (pH、溶液中のトータル濃度、カラム内の方解石濃度) と本研究で作成した予備的連成解析システムの結果との比較を行うこととする。

6.1.2 検証解析結果

初期状態におけるカラム内の pH は、図 6-2 に示す様に方解石との平衡状態となっている。また、予備的連成解析システム、HYDROGEOCHEM とも一致している。60

年時点におけるカラム内での pH は、両解析コードとも節点 15～19 にかけて減少傾向が見られ、方解石から溶解した Ca、C が外側（節点 21）に拡散で散逸し、方解石との平衡が成立していない領域であると考えられる（方解石が枯渇している可能性が高い。これに関する考察は、カラム内の方解石濃度の空間分布により明らかとなる）。

初期状態におけるカラム内の方解石の濃度は、図 6-3 に示す様に一定となっている。この傾向は、また、予備的連成解析システム、HYDROGEOCHEM と一致している。60 年時点におけるカラム内での方解石は、両解析コードとも節点 15～19 にかけて枯渇しており、前記 pH の挙動と整合性が取れている。すなわち、節点 15～19 の pH は、方解石の溶解平衡で支配されておらず、節点 1～13 に残っている方解石から溶解した Ca、C 濃度の拡散移動により化学系の平衡が保たれていることになる。

初期状態におけるカラム内の Ca 溶液トータル濃度は、図 6-4 に示す様に方解石との平衡状態となっている。また、予備的連成解析システム、HYDROGEOCHEM と一致している。60 年時点におけるカラム内での pH は、両解析コードとも節点 15～19 にかけて減少傾向が見られ、方解石から溶解した Ca、C が外側（節点 21）に拡散で散逸し、方解石との平衡が成立していないことを示している。

6.2 課題の抽出

本節では、検証作業、連成解析コードの開発を通じて、短期間に連成解析を実現させるべく、問題点・課題の抽出ならびに対応策について整理する。これらの成果を踏まえ、短期的な開発計画について示す。

6.2.1 短期的な運用を前提とした課題の抽出

本項では、先ず平成 13 年度の成果に基づき、今後、問題となり得る項目、課題の抽出を行った。また、1～2 年の短期間において、解析・評価者が、FORTRAN、C++などのプログラミング言語や Diffpack などの高度の知識を取得する必要なく（既存の解析コードにできる限り手を加えない）、連成解析を実現させるための手法についても予備的な検討を行った。

本項では、下記の項目について順次解説していく。

- 平成 13 年の成果：予備的連成解析システムの開発からの課題抽出
- 短期的（1～2 年）に連成解析を実現するための考え方
- 短期的に連成解析を実現するための予備検討

(1) 予備的連成解析システムの開発を通じて得られた問題点

本年度は、Diffpack の適用性確認を目的として、Diffpack 環境下において、既存の解析コードを用いた連成を実現させることができた。ここでは、予備的連成解析システムの開発を通じて、考えられ得る問題点について記載する。

表 6-2 の解説：物質移行-地球化学に係わる予備的連成解析システムの作成では、各解析コードの重要な変数の把握、Diffpack システムの一部機能(解析コード接続クラス、後処理用クラス)の把握、コーディングを含め約 2.5~3 ヶ月程度の期間を要した。作業時間に占める内容は、解析コードの内容を調査しつつコーディング・デバッグ作業となっている。この時間を短縮させることにより、短期間における連成が実現可能とあなる。連成実現の時間を短縮させるための手段としては、以下に示す 3 種類の方法が挙げられる。

プログラム言語(例えば C++)、ツール(例えば Diffpack)などの習熟を加速させる。

必要と考えられ得る複数の連成解析プログラムを同時並行で作る。

プログラム修正作業の自動化方策。

上記は、現在、鋭意進めているが早くとも 2~3 年の期間を要すると考えられる。

については、限られた資源の範囲内において、いくつもの連成解析コードを開発することは困難と考える。上記は、連成解析コード開発の支援ツールと位置付け、技術的に可能であるか否かについて検討することが肝要であると考えた。これらの状況を踏まえ、次項では、短期的に連成解析を実現するための考え方、課題について述べる。

(2) 短期的に連成解析を実現するための考え方と課題の抽出

前記の通り 1~2 年の短期間において連成解析を実現するためには、プログラム修正作業の自動化方策が有力な手段と考えられたことから、本項では、前記の課題に対応させた検討課題について述べるとともに、その概念について示した。また、6.2.2 では、ここで示した概念の実現可能性を確認することを目的として、一部の機能について、別途、社内検討を行った。

表 6-3 の解説：本表の改善策(案)に示すように、解析コードの内容、プログラム言語を熟知している場合、課題内容の作業としては、大きなウェイトは無い。ただし、機能の拡張をタイムリーに実施することや、解析コードの内容、プログラミング言語、ツールについて習熟する時間的な制約が付く場合は、評価者は連成に係わる挙動や着目する変数のみに注力すべきであると考えられる。本改善(案)の基本方針は、変数定義や変数の呼び出し、受取りをプログラム言語レベルで実施するのではなく、通常の解析コード

と同様にテキスト形式の入力データにより、連成を実現させることを考えている。

図 6.5 の解説：連成解析システムの比較（予備的連成システム，短期型改善案）

本図に示す様に H13 年度の連成システムは，連成機能に応じてオリジナルの解析コードのソースプログラムに手が加えられていく。一方，短期型改善案(本図の右側)は，初期段階においていくつかのプログラム作成(初期投資は必要)を行わなければならないが，連成解析評価における運用面では，多大な効率化が見込まれる。ただし，既存の解析コードが持ち合わせていない機能を付加する場合は，別途プログラムの作成が必要となる。

6.2.2 短期的に連成解析を実現するための予備検討

ここでは，図 6-5（短期的改善案・既存の解析コード使用）の一部機能について実現の可能性を確認することにより，短期間かつ種々の連成が汎用的にアプローチできる新たなツール構築を狙っている。

予備的検討では，メモリ管理クラスについてプロトタイプを作成し，プロトタイプの機能ならびに性能の確認を行ない，最終的に HYDROGEOCHEM と phreeqe60 の連成解析への適用性を確認するものである。本システム概念は，三菱重工業株式会社 / コンピュータソフト開発株式会社で CAPASA の開発業務に携わった複数の担当者により考案したものである。本概念は，図 6-6 に示す網掛け部分がシステム化しており，本項では，その概要について記載する。

1) 解析プログラム間のデータの授受

連成解析に必要な変数は，型，サイズをテキスト形式にて定義する。DDL は，予備的連成解析システムの計算機能に限定した HYDROGEOCHEM と phreeqe60 の連成において必要となる変数を定義している。

ここで定義した DDL 情報に基づき，メモリ定義関数 (C++を用いたプログラム) は，計算機メモリ内に変数の領域を自動的に確保する。一方，解析コード内で連成に必要な変数は，set (共有メモリ内へ変数を渡す)，get (共有メモリ内の必要な変数の取り込み) コマンドにより必要性を認識させる。本コマンドとメモリ間の認識・制御は，メモリ制御関数 (C++を用いたプログラム) により処理される。

ただし，図 6-6 の概念は，各プロセス (HYDROGEOCHEM，phreeqe60，両解析コード間のデータ変換プログラム) を制御するシステムを整備していないことから，解析プログラム内で，前記 3 種類のプロセスを指示するためのコーディングを

行っている。従って、現時点において本システムを利用して連成解析を実現するためには、以下の操作が必要となる。

DDL データの作成（変数，型，サイズの指定）

個別解析プログラム内において連成に必要な変数の前後に set , get コマンドを指定する。

プロセス（解析コード，解析コードが持っていないプログラム）を制御するプログラムの追加作成

上記 3 番目の処理は、汎用的なシステム化を行うことにより、自動化が可能となることから、最終的には、個別解析コードを用いて連成解析を行う場合、上記の 1 番目と 2 番目の作業のみを行うこととなる。

2) 適用性の確認

ここでは、前記の要領に従い、予備的連成解析システムで実施した物質移行-地球化学連成解析と同一の問題を解いた。

前記の操作を行ない、予備的連成解析システムで利用した入力データに基づき解析した結果、予備的連成解析システムの結果と一致することを確認した。これにより、短期的改善(案)の方法を更に操作性の観点から高度化することにより、解析・評価者は、連成に必要な変数の性質とプログラムの概略フローの知識に基づき、連成解析を実現することができる。すなわち、プログラム言語やコーディングの詳細を分析する時間やデバッグ作業の時間を取り除くことができるため、短期間に種々の連成解析を行うことが可能となる。

6.2.3 課題の整理

前記の課題に基づき、短期的に出来る限り多くの人々が連成解析コードを運用するための開発計画について検討した。Diffpack については、連成実現の見通しは得られたが、解析コードに手を加えなければならないこと(修正作業が多いことやデバッグ作業に時間を要する)、プログラム言語(FORTRAN, C++)の知識が必要不可欠となることから、連成解析を行うための制約条件が付いてくる。本研究では、これらの制約条件を可能な限り排除すべく、連成解析システムの枠組み構築の見通しが、得られたことから表 6-4 に示す研究計画(案)を策定した。

6.3 まとめ

本章では、数値解析コード開発環境ツール (Diffpack) を用いた予備的連成解析システムを開発する上での作業の正確性や計算の正確性の確認を目的とした検証解析を行ない、予定していた連成解析が正確に実施できることを確認した。本年度は、物質移行-地球化学連成現象を既存の個別解析コード HYDROGEOCHEM, phreeqe60 を用いて、Diffpack の連成問題に対する適用性を試みた。ただし、本年度は、既存の解析コードを導入したことから、Diffpack の基本機能 (解析コードを構成する部品を利用していない) は殆ど利用していない。そのため、Diffpack の運用を考えた場合、実用段階とは言えない。

このような背景から、課題の抽出に際しては、短期間で種々の連成解析実現に向けた、短期型改善案なる連成システム の概念を考案し、連成問題に対する適用性 (メリット: 汎用的、効率的、プログラミング言語の高度な知識不要) を確認するため、プロトタイプシステム (プロセス制御などの自動化を想定しているため完成には、半年程度を要する) を作成し、前記の予備的連成解析システムと同一の連成解析を試みた。本手法は、既存の解析コードを殆ど改良することなく連成解析を行うことが出来るが、支配方程式レベルの改良ニーズが出た場合は、解析コードの改良が必要となるため、前記のメリットが激減する。このようなニーズに迅速な対応が可能となるツールが Diffpack となる。この場合は、モデル解析の詳細知識 (有限要素法解析の流れと各処理の理解)、プログラミング言語の理解が必須となる。

以上のことから、短期的には短期型改善案なる連成システム の概念を推進し、その間に Diffpack ツールを使うための準備をしていくことが、肝要と考える。短期研究計画は、このような考えのもとに作成した。

表 6-1 予備的連成解析システムの検証用入力条件

No	入力条件項目	単位	入力条件	備考 / 引用情報
1	実効拡散係数	m ² / sec	3 × 10 ⁻¹⁰	入力値は 0.94608(dm / y) 第二次取りまとめ実効拡散係数参照
2	空隙率	-	0.33	
3	境界濃度 (節点 1 , 2)	mol / l	1 × 10 ⁻⁰²	
4	境界濃度 (節点 21 , 22)	"	1 × 10 ⁻¹⁰	
5	初期濃度 (節点 3 ~ 20)	"	1 × 10 ⁻⁰³	

表 6-2 予備的連成解析システム (Diffpack 環境下) の開発を通じて抽出された問題点の一覧

課題 No.	問題点と考えられる項目	抽出理由	時間を要する作業内容 (例)	備考
1-1	作業の非合理性	解析コード改良に時間を要する。 改良の正確性確認作業に時間を要する。	連成解析を行う場合には、受け渡すまたは受け取る変数を対象として、引数の定義(SUBROUTINE, COMMON 文)を行う必要がある。 例えば、HYDROGEOCHEM phreeqe60 (トータル濃度) TOTAL(溶液番号, 元素 ID) = TOTALK(元素 ID)	
1-2			連成解析を行う場合、受け渡す変数として引数の定義(SUBROUTINE または COMMON 文)を行う必要がある。 例えば、phreeqe60 の Delta phase は通常の変数 d1 にて定義されており、かつ 1 個のサブルーチンでのみ利用されている。	
1-3			HYDROGEOCHEM と phreeqe60 を単体で利用する場合は、プログラムの改良が必要となる。	
3	他の解析コードへの不適用性	個別解析コードの追加 / 機能追加に対する汎用性無し。 連成実現に時間を要する(コーディング、改良の正確性確認)。	連成接続は、phreeqe60 と HYDROGEOCHEM との連成に特化した接続プログラム (C++) となっている。この予備的連成解析コードに機能追加や THM を接続するためには、新たに接続用のプログラムを作成するためのプログラム分析、作成作業が必要となる。 例えば、既存の解析コードに特化した変数を集約している。	

本課題は、物質移行(HYDROGEOCHEM)-地球化学(phreeqe60)連成解析システムを Diffpack 環境下において実現させた際に抽出された課題である。

表 6-3 予備的連成解析システム (Diffpack 環境下) の開発を通じて抽出された問題点に対する改善策の一覧

課題 No.	問題点と考えられる項目	時間を要する作業内容 (例)	改善策 (案) の検討課題	備考
1-1	作業の非合理性	連成解析を行う場合には,受け渡すまたは受け取る変数を対象として,引数の定義(SUBROUTINE,COMMON文)を行う必要がある。 例えば, HYDROGEOCHEM phreeqe60 (トータル濃度) TOTAL(溶液番号, 元素 ID) = TOTALK(元素 ID)	プログラム言語に依存しない変数の取出しおよび受取り方式の検討 プログラム言語に依存しない変数領域の指定方式の検討	
1-2		連成解析を行う場合,受け渡す変数として引数の定義(SUBROUTINE または COMMON 文)を行う必要がある。 例えば, phreeqe60 の Delta phase は通常の変数 d1 にて定義されており,かつ 1 個のサブルーチンでのみ利用されている。	単一のサブルーチンでのみ利用されている変数の取出しおよび受取り方式の検討	
1-3		HYDROGEOCHEM と phreeqe60 を単体で利用する場合は,プログラムの改良が必要となる。	1-1, 1-2 と同じ	
3	他の解析コードへの不適用性	連成接続部は,phreeqe60 と HYDROGEOCHEM との連成に特化した接続プログラム(C++)となっている。この予備的連成解析コードに機能追加や THM を接続するためには,新たに接続用のプログラムを作成するためのプログラム分析,作成作業が必要となる。 例えば,既存の解析コードに特化した変数を集約している。	連成機能は,既存の解析コードに持たせず,外部のテキスト情報(一種の入力データファイル)から参照する。	

本課題は,物質移行(HYDROGEOCHEM)-地球化学(phreeqe60)連成解析システムを Diffpack 環境下において実現させた際に抽出された課題である。

表 6-4 短期研究計画策定（案）

No.	実施項目	今年度	平成 14 年度	平成 15 年度	平成 16 年度	備考
1	THAMES+物質移行+簡易 C の連成	■	→			
2	THAMES+物質移行+簡易 C の高度化 (その 1(C THM への検討(コード))		■	■	■	
3	THAMES+物質移行+簡易 C の高度化 (その 2)C THM への検討(物性値)		■	■	■	
4	THAMES+物質移行+ C の検討 地球化学計算コードとの連成			■	■	
5	THAMES+物質移行+ C の高度化 並列分散処理検討				■	
6	Diffpack による物質移行+C の連成	■				
7	汎用的連成解析システムの開発 H15～:システムの高度化		■	■	■	
8	THAMES+物質移行+C への適用性 H15～:その他の連成への適用		■	■	■	
9	Diffpack への実装可能性検討 / 実装 【既存解析コード, コード作りこみ】		Diffpack 簡易連成コード → ■	■	■	
10	H15:ネットワーク環境での運用整備 H16:並列分散処理, DB 構築			■	■	

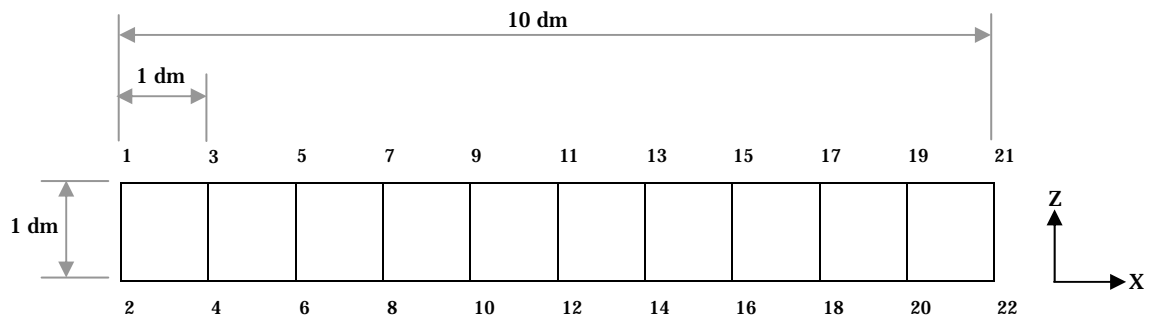


図 6-1 予備的連成解析システム検証用解析モデル

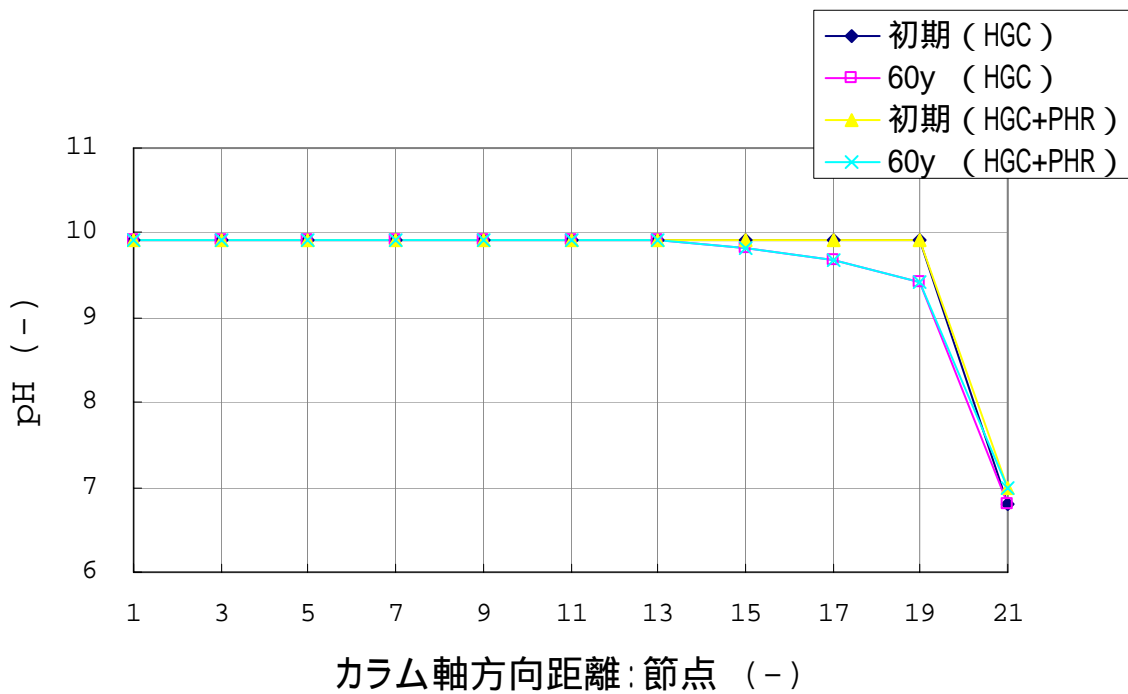


図 6-2 カラム内における pH の分布

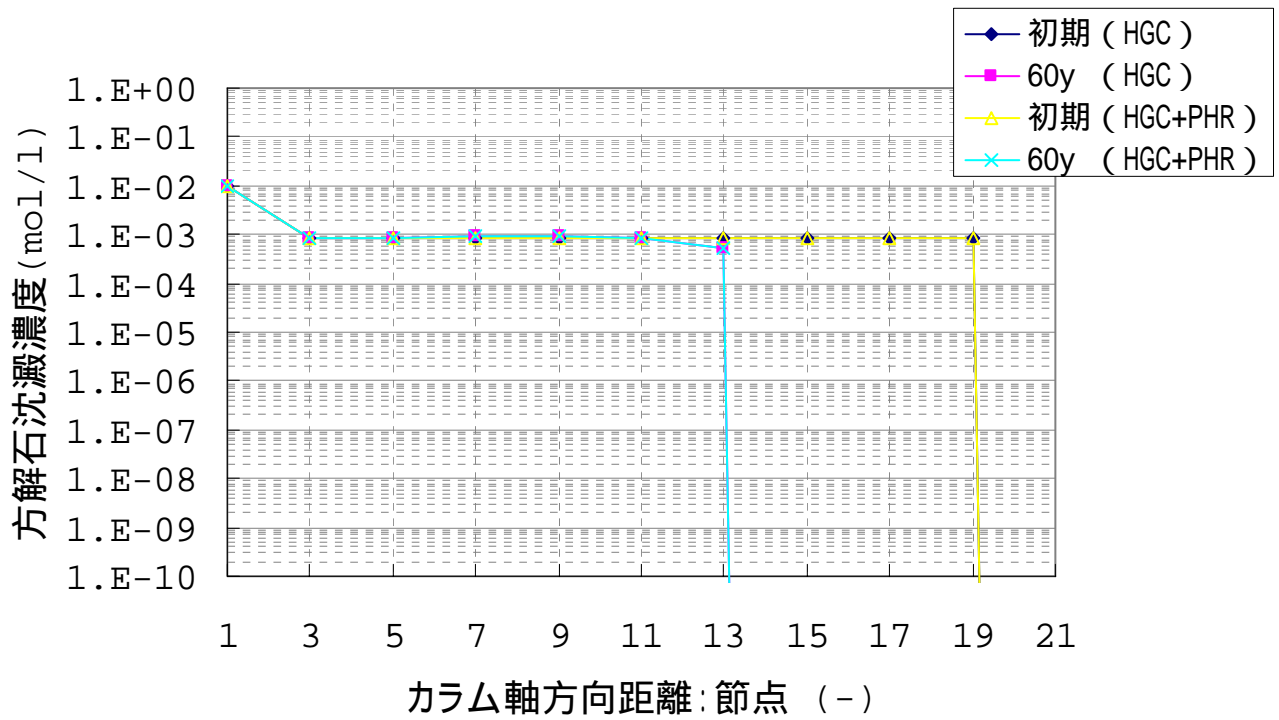


図 6-3 カラム内における方解石の濃度分布

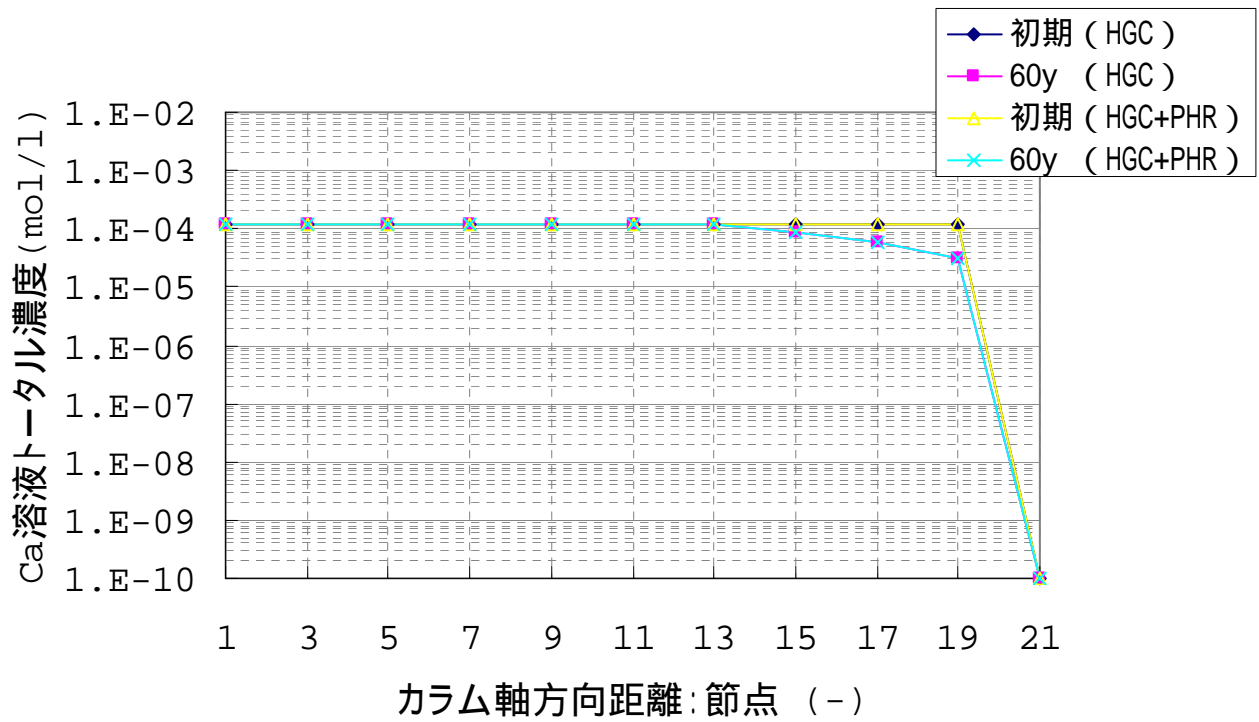


図 6-4 カラム内における Ca 溶液トータル濃度分布

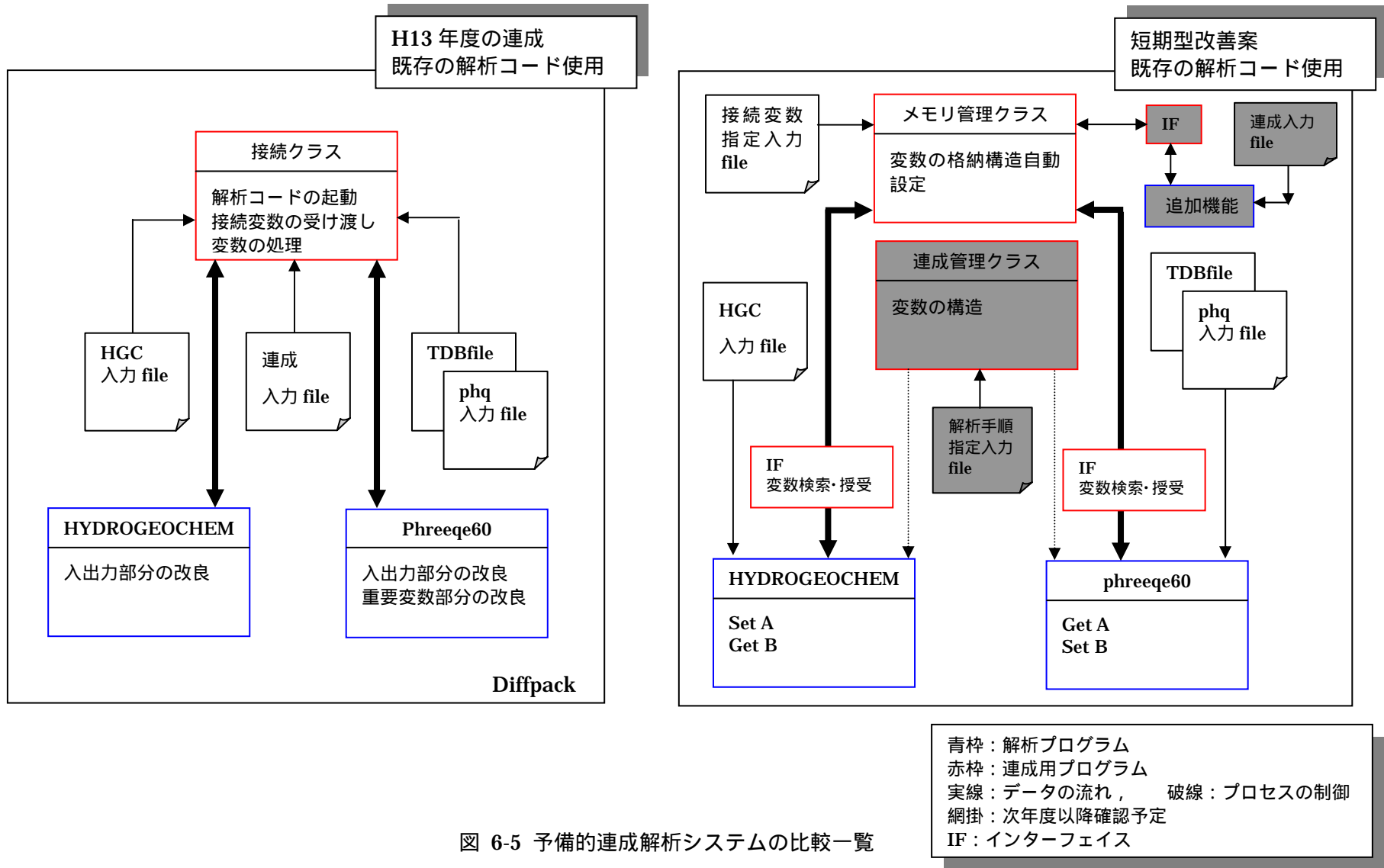


図 6-5 予備的連成解析システムの比較一覧

7. おわりに

熱 (T) - 水 (H) - 応力 (M) - 物質移行 (Tr) - 化学 (C) 連成解析コードの実現を目的として、既存の熱-水-応力連成解析コード (THAMES) への物質移行モデルの追加 (THAMES-Transport) ならびに数値解析コード開発環境ツール (Diffpack) を用いた予備的な連成解析の実施を行った。

今回開発した簡易熱-水-応力-物質移行-地化連成解析コード (THAMES-Transport) を用い、緩衝材内における塩の物質移行に関する解析を行った。解析の結果、緩衝材中の塩の移行挙動や濃縮挙動は表現できたが、今回設定した解析条件の下では、塩の蓄積現象は生じなかった。しかしながら、塩の濃縮現象については解析上、表現できているので、解析コードとしての機能は十分に発揮しているものと考えられる。今回の解析では THM から物質移行、簡易地球化学解析への一方向の連成であった。しながら、実際には、今回の計算のケースだと、塩の濃度の変化による透水性の変化やその他の物性の変化が考えられるため、地球化学解析の結果を THM にフィードバックさせる必要がある。したがって、「THM Transport Chemical THM」のように各タイムステップにおける一連の計算終了した時点で、次のステップの解析に結果をフィードバックできるようにプログラムを改良する必要がある。

今回開発した数値解析コード開発環境ツール (Diffpack) 上での予備的連成解析システムは、物質移行解析コード (HYDROGEOCHEM の物質移行機能のみ利用) と地球化学計算コード (PHREEQE60) を対象とし、適用性確認のための検証解析を行った。本来、Diffpack ツールは、粒度の小さい標準的なモジュール (サブルーチンレベルの関数やクラス) を利用することにより、信頼性、効率性などのメリットが発揮されるため、本年度の作業は、あくまでも Diffpack 上において、既存の FORTRAN プログラム連成の確認、Diffpack 専用の出力機能の確認を行った。Diffpack の標準的なモジュールを使いこなすためには、時間を要することから、実用に向けての運用までに習得するための解析コード開発を行っていく必要がある。

また、Diffpack ツールの環境下において、既存の解析コードを連成する方法は、プログラム言語やプログラムの構造などに依存した改良作業が必要となり、かつ既存の解析コードに依存した制御モジュールの作成が必要となる。本研究では、エンドユーザーの作業効率性を配慮し、汎用性が高いと思われる連成システム概念 (短期的な連成を実現するためのシステム) を課題として取り上げ、その適用性について確認した。

8. 謝辞

本研究の実施にあたり、核燃料サイクル開発機構の関係各位に多大の御指導、ご教示を頂きました。ここに記して感謝致します。

9. 参考文献

第2章の参考文献

- 2-1) 西垣誠：“ 土壌・地下水汚染と対策 ”, 土と基礎, Vol.47, No.10, Ser.No.501, pp.1-4, 1999.
- 2-2) 初井和朗他, 日本地下水学会編：地下水水質の基礎 - 名水から地下水汚染まで -, pp.90-91, 2000.
- 2-3) 在原典男, 内木元義他, 石油鉱業便覧編集委員会：石油鉱業便覧, 石油技術協会, pp.254-531, 1983.
- 2-4) 登坂博行, 伊藤一誠, 蛸原雅之, 稲葉薫, 伊藤彰, 小島圭二：“ 多成分多相型移流拡散モデルによる包括的な地下水汚染解析 ”, 地下水学会誌, 第 38 巻, 第 3 号, pp.167-180, 1996.
- 2-5) 玉井信行, 河西基, 改訂地下水ハンドブック編集委員会編集：改訂地下水ハンドブック, 建設産業調査会, p.103, 1998.

第3章の参考文献

- 3-1) 鈴木英明, 藤田朝雄：“ 緩衝材の不飽和水理特性 (試験報告) ”, 核燃料サイクル開発機構技術資料, JNC TN8430 99-010, 1999.
- 3-2) A. W. Warrick, J. W. Bigger, D. R. Nielsen：“ Simultaneous Solute and Water Transfer for Unsaturated Soil ”, *Water Resources Research*, Vol. 7, No. 5, pp.1216-1225, 1971.

第5章の参考文献

- 5-1) David L. Parkhurst, et al.：“ PHREEQE – A COMPUTER PROGRAM FOR GEOCHEMICAL CALCULATIONS ”, Water-Resources Investigations Report 80-96, U.S. GEOLOGICAL SURVEY, National Center, Office of Regional Research Hydrologist, MS 432 Reston, Virginia 22092, (1980, 1985)
- 5-2) David L. Parkhurst：“ USER'S GUIDE TO PHREEQC – A COMPUTER PROGRAM FOR SPECIATION, REACTION-PATH, ADVECTIVE-TRANSPORT, AND INVERSE GEOCHEMICAL CALCULATIONS ”, Water-Resources Investigations Report 95-4227, Chief, Branch of Regional Research, U.S. GEOLOGICAL SURVEY, BOX 25046, MS 418 Denver Federal Center, Denver, Colorado 80225, (1995)
- 5-3) G. T. Yeh, V. S. Tripathi：“ HYDROGEOCHEM: A Coupled Model of HYDROlogic Transport and GEOCHEMical Equilibria in Reactive Multicomponent Systems ”, ORNL-6371, Environmental Sciences Division Publication No.3170, Oak Ridge

National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831, (1990)

- 5-4) Hans Petter Langtangen : Computational Partial Differential Equations, Numerical Methods and Diffpack Programming, (3-540-65274-4), Springer-Verlag Heidelberg, Tiergartenstr. 17, D-69121 Heidelberg, Germany, (1999)
- 5-5) D.Calhoun, H.P.Langtangen :“ Writing C++ Interfaces to FORTRAN Packages ”, Oslo Scientific Computing Archive 1998-3, (1998)
- 5-6) 房枝茂樹 , 柳沢一郎 :“ 地層処分性能評価の品質保証に関する研究() ”, 核燃料サイクル開発機構研究委託内容報告書 , JNC TJ1400 99-021, (1999)