

亀裂内不均質性を考慮した 流体解析コードの開発

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)

2003年3月

株式会社 クインテッサジャパン

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、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

電話：029-282-1122（代表）

ファックス：029-282-7980

電子メール：jserv@jnc.go.jp

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)

2003

亀裂内不均質性を考慮した流体解析コードの開発

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)

青山 裕司*

高瀬 博康*

要 旨

本研究は詳細な亀裂内部形状をもとに構築した解析モデルについて流体シミュレーションを行うためにセルオートマタ法によるシステムを開発し、セルオートマタ法の適用性について検討を行った。本研究でシミュレーションの対象とする流体は比較的レイノルズ数の低い領域であるので、相対的に計算負荷の低い格子ガスオートマトン法を用い、3次元空間においても対称性がある FCHC メッシュを用いた。選定された手法による流体解析モデルと物質移動モデルを開発し、システムの妥当性を三乗則など理論解が知られた系に適用することにより示した。実際に LABROCK で測定された亀裂形状をもとに作成したモデルへ適用した。また、フラクタル理論に基づいて生成した模擬的な亀裂についてシミュレーションを行い、亀裂の形状と水理特性の関係について整理した。

本報告書は、株式会社クインテッサジャパンが核燃料サイクル開発機構との契約により実施した業務成果に関するものである。

機構担当課室：東海事業所 環境保全・研究開発センター 処分研究部 システム解析グループ

* 株式会社クインテッサジャパン

Development of an Analysis Code for Hydrodynamics in a Heterogeneous Crack

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

Yuji Aoyama* , Hiroyasu Takase*

Abstract

A hydrodynamics analysis system for a precise crack model was developed using a cellular automata method and the applicability of the system was investigated. Since the Reynolds number of the target fluid is low, the lattice gas method, for which the computation cost is relatively small, was applied. As for the mesh, a four dimensional face-centered hyperbolic cube projecting onto the three dimensional space was used. The hydrodynamic and migration model was developed for the lattice gas method. The system was evaluated using Snow's law of hydrodynamics in a parallel plate. The system was also applied to a crack model based on LABROCK data. Several trial crack models were generated using fractal theory and the relationship between the configuration and hydrodynamics of a crack was investigated.

This work was performed by Quintessa Limited under contract with Japan Nuclear Cycle Development Institute.

JNC Liaison : System Analysis Group, Waste Isolation Research Division, Waste Management and Fuel Cycle Research Center, Tokai Works

*Quintessa Limited

目 次

1.	はじめに.....	1
1.1	研究の背景.....	1
1.2	研究の目的.....	2
1.3	研究内容.....	2
1.3.1	解析手法の選定.....	2
1.3.2	セルオートマトン法による流体モデルの作成.....	3
1.3.3	セルオートマトン法による物質移動モデルの作成.....	3
1.3.4	入力データの生成ツールの開発.....	3
1.3.5	セルオートマタを用いた亀裂内流体力学・物質移動シミュレーション システムの構築.....	3
1.3.6	並列化手法の開発.....	4
1.3.7	解析システムの検証.....	4
1.3.8	可視化ツールの開発.....	4
1.3.9	シミュレーション結果と実験結果との比較.....	4
2.	セルオートマタ.....	5
2.1	研究の歴史.....	5
2.2	研究事例.....	5
2.2.1	基礎理論.....	5
2.2.2	適用例.....	7
2.2.3	大規模化.....	7
2.3	手法の選定.....	7
3.	セルオートマタによる流体解析.....	9
3.1	流体解析モデル.....	9
3.1.1	基本原理.....	9
3.1.2	FCHC メッシュ.....	9
3.1.3	衝突則.....	10
3.1.4	粘性.....	14
3.1.5	壁面での反射則.....	15
3.1.6	結果の評価.....	15
3.2	物質移動解析モデル.....	15
4.	シミュレーションシステムの構成.....	16
4.1	モデル設定方法.....	16
4.1.1	亀裂データ読み込み.....	16
4.1.2	統計的データ.....	16
4.2	シミュレーションプログラムの構成.....	20

4.2.1	フロー	20
4.2.2	行列の設定	21
4.2.3	粒子の注入	22
4.2.4	衝突クラススの計算	22
4.3	結果の出力	23
4.3.1	ベクトル図	23
4.3.2	圧力分布	23
4.3.3	トレーサー分布	24
4.3.4	流出粒子数	25
5	シミュレーション結果	26
5.1	三乗則によるシステムの検討	26
5.1.1	三乗則	26
5.1.2	セルオートマタシミュレーションによる三乗則の再現	26
5.1.3	シミュレーション結果と実現象との対応	31
5.2	LABROCK データを用いたシミュレーション	32
5.2.1	LABROCK により測定された亀裂データ	32
5.2.2	解析結果	36
5.2.3	計算時間	37
6	おわりに	38
	参考文献	39
	付録 プログラム説明書	付(1)

表 目 次

表 2.1	様々なセルオートマトン法の特徴.....	8
表 3.1	運動量によるクラス分類.....	13
表 3.2	クラスに適用される対称変換.....	13
表 4.1	パラメータと生成されるフラクタルの variogram の指数の関係	18
表 4.2	運動方向の番号一覧	21
表 5.1	シミュレーションのパラメータと結果.....	29
表 5.2	内挿により求めた各開口幅における特性	30
表 5.3	結果に含まれる誤差の評価.....	30
表 5.4	物性値	31
表 5.5	計算時間	37

目 次

図 3.1	FCHC のメッシュの概念図	9
図 3.2	メッシュ点あたりの粒子数と粘性指数 μ_4 の関係	14
図 3.3	壁面での衝突則	15
図 4.1	successive random addition 法による fractal 場の生成概念図	17
図 4.2	Hausdorff measure の変化による variogram の変化	18
図 4.3	相関距離の変化による variogram の変化	19
図 4.4	シミュレーションプログラムのフロー	20
図 4.5	ベクトル図のサンプル	23
図 4.6	圧力分布のサンプル	24
図 4.7	トレーサー分布のサンプル	24
図 4.8	破過曲線のサンプル	25
図 5.1	ステップ数と流出粒子数の関係	27
図 5.2	x 方向成分の厚さ方向分布	28
図 5.3	圧力の x 方向分布	28
図 5.4	三乗則評価モデルの概念図	29
図 5.5	開口幅と透水量係数の関係	31
図 5.6	亀裂壁面の鳥瞰図	32
図 5.7	亀裂の開口幅	33
図 5.8	全データによる variogram	34
図 5.9	通常の変りogram	34
図 5.10	近接領域のみの variogram	35
図 5.11	圧力分布	36
図 5.12	流速分布	36

1. はじめに

1.1 研究の背景

第2次取りまとめにおいても述べられている通り、高レベル放射性廃棄物を花崗岩等の結晶質岩に地層処分する場合には、岩盤の亀裂内を核種が移行すると考えられており、天然バリアの性能評価においては亀裂内の透水・物質移行特性について検討する必要がある。このため、これらの地質環境における天然バリア性能を規定するものとして、亀裂ネットワーク全体としての統計的特徴（頻度、トレース長、方向、等）及び個々の亀裂の特性（透水量係数、開口幅、flow-wet surface area、等）が極めて重要となる。個々の亀裂の特性については、ボーリング孔を利用した透水試験やトレーサ試験そして室内試験等の結果に基づき設定されているのが現状である。しかしながら、これらの試験は、いずれも、透水量係数や開口幅あるいは flow-wet surface area を直接測定するものではなく、相関を有する物理量から上記の特性値を間接的に推定するものである。また、このような推定には、単純な近似モデル（透水試験結果から透水係数そして透水量係数を導出するための等方的連続体モデルやトレーサ試験結果から開口幅を導出するための平行平板亀裂モデル等）が用いられており、これらのモデルにおける簡単化のための仮定は未検証であるために、推定結果（つまり、性能評価上の入力パラメータ）には不確実性が付随することとなる。さらに、各モデルにおける仮定は必ずしも相互に整合的なものではないことが、観察される開口幅（幾何学的開口幅）と透水性を規定する開口幅（水理学的開口幅）そして実流速を規定する開口幅（物質移動上の開口幅）がそれぞれ異なる場合がある等のジレンマの生ずる原因となっている。

このような背景から、核燃料サイクル開発機構では亀裂内の透水・物質移行特性を理解するために、平成13年度までに亀裂状媒体水理試験設備(LABROCK)を使用して天然亀裂岩体の透水・物質移行特性に関するデータを取得している。今後、これに関連して次の作業が計画されている。

レジン注入法による天然亀裂岩体の開口幅測定

亀裂内にレジンを注入した後、NETBLOCK で開発した岩体研削撮影装置を使用して亀裂開口幅を計測する。

取得された開口幅データから亀裂の幾何学的形状をモデル化する。

モデル化された開口幅を使用して流体解析を行う。

流体解析結果（解析値）と平成13年度までに取得された透水・物質移行特性データ（実測値）とを比較する。

上記の で流体解析を行う必要があり、現在その解析手法としてセルオートマトン法(CA法)を使用した解析を実施することが予定されている。

1.2 研究の目的

本研究は、亀裂状媒体に関する性能評価における主要な不確実性要因の一つである、幾何学的、水理的そして物質移動上の亀裂特性を統一的に定義する上で不可欠な、厳密な亀裂内流体力学・物質移動モデルを構築し、これをベースとした亀裂内流体力学・物質移動シミュレーションシステムを開発することを目的とする。また、LABROCKにより測定された詳細な亀裂内部形状をもとに構築した解析モデルについてシミュレーションを行い、算出された透水量係数や flow-wet surface area あるいは分散係数を、室内試験結果と比較することにより、亀裂内流体力学・物質移動モデルやシミュレーションシステムの検証を行うことを目的とする。

1.3 研究内容

流体のシミュレーションは一般に Navier-Stokes などの微分方程式の形で記述された支配方程式を、有限要素法や差分法を用いて離散化して、マトリックス方程式を数値的に解くことによって行われる。しかし、LABROCK により測定された詳細な亀裂内部形状は極めて複雑かつ不規則なものであり、このような体系中での流体力学あるいは物質移動の問題を有限要素法等により数値的に解くことは困難である。そこで、本研究では、多孔質媒体中の微細な空隙構造等の、複雑な形状を持つ多数の流路における流体粒子及び溶質の挙動を計算することの可能なセルオートマトン法によるモデル化を行う。セルオートマトン法は、比較的簡単なローカルルールから複雑な現象を再現しようという手法であり、流体粒子間で質量と運動量を保存する衝突を繰り返させることにより Navier-Stokes を解いた場合と同等な流れが再現できることが実証されている。また、このような流速場における溶質の移動についても、拡散及び移流問題を正確に解くことが可能である。本研究では、以下の項目を実施することによって、セルオートマトン法による亀裂内流体力学・物質移動モデルの構築及びシミュレーションシステムの開発を行う。

1.3.1 解析手法の選定

格子ガスオートマトン法は粒子法とセルオートマトン法を組み合わせた流体解析法である。粒子法は流体を粒子の集まりとして離散的に扱う手法の総称であり、計算が容易でかつ複雑な流体解析に適した手法である。ここで、粒子の移動を空間内に敷き詰めた格子上のみに制限したのが格子ガスオートマトン法であり、時間、空間及び速度について完全に離散化した格子ガスオートマトン法が 1973 年に発表された。

さらに、格子ガスオートマトン法における粒子のかわりに粒子密度分布を変数として用いるのが格子ボルツマン法であり、統計的なばらつきがのぞかれるため現象の評価に適した手法となっている。

これらの手法では等方向性が確保されないという問題があり、これを解決する方法とし

て FCHC (Face Centred Hyper Cubic: 4 次元面心立法格子の 3 次元射影)が提案されている。

ここでは、これらの手法について近年の研究成果について調査を行い、本シミュレーションシステムにおいて最適な手法を選定する。

1.3.2 セルオートマトン法による流体モデルの作成

前項で選定した手法による流体モデルを作成する。このモデルに基づく基本的なコードを開発して、

- 1) メッシュの形状 (正方格子、三角形格子、六角格子)
- 2) 境界条件の設定方法
- 3) 粒子の衝突プロセス (移動、衝突、散乱) に関するルールの決定
- 4) 擬似保存量の問題
- 5) 圧力テンソルの非等方性の問題

について検討を行い、それぞれについて適切な手法あるいは解決策を選択する。また、単純な系の上で流体モデル単体での妥当性を評価する。

1.3.3 セルオートマトン法による物質移動モデルの作成

同様に選定した手法による物質移動モデルを作成する。このモデルに基づく基本的なコードを開発して、前項と同様の点について検討を行い、それぞれについて適切な手法あるいは解決策を選択する。また、単純な系の上で物質移動モデル単体での妥当性を評価する。

1.3.4 入力データの生成ツールの開発

LABROCK により測定された詳細な亀裂内部形状を数値解析に適用するデータに変換するツールを開発する。また、将来的に入力パラメータの不確実性を評価するために、フラクタル理論などを適用した亀裂モデルを生成する機能も付加する。

1.3.5 セルオートマタを用いた亀裂内流体力学・物質移動シミュレーションシステムの構築

開発したモデルをベースに両者を統合したモデルを開発する。前項で生成した大規模なモデルデータに対して、統合モデルを適用してシミュレーションを行うシステムを実際に構築する。ここでは、大規模な計算を実施するための、行列の配置方法、高速に計算を行うための演算方法などを検討する。

1.3.6 並列化手法の開発

セルオートマトン法では局所的な相互作用を系全体で一斉に計算するため、原理的に並列処理(一連の計算を分割して複数のプロセッサにより並列に処理することによって高速化を図る)に極めて適している。複数の PC をネットワークで接続した PC クラスタは安価でかつ高度な並列計算を行える並列計算環境として実用化されている。ここでは、並列処理を行うハードウェアとして、PC クラスタを想定し、問題及び計算機環境に最適な並列化手法を開発する。また、MPI (Message Passing Interface、並列計算を行う際に必要なプロセッサへのタスクの割り当てやプロセッサ間に通信を制御するライブラリー)を用いた並列解析システムについて検討する。

1.3.7 解析システムの検証

理論解が知られている単純化されたモデル(亀裂のない一様なモデル、平行平板亀裂モデルなど)、境界条件のもとでのシミュレーション結果により解析システムの妥当性を定量的に検証する。また、亀裂が存在する場合、境界条件の違いによるシミュレーション結果の変化等を用いシステムの妥当性を定性的に検証する。

1.3.8 可視化ツールの開発

AVS などの汎用可視化ツールを適用する方法、あるいは、本解析システムに特化した専用可視化ツールを開発する方法などについて検討する。

1.3.9 シミュレーション結果と実験結果との比較

LABROCK により測定された詳細な亀裂内部形状をもとにしたモデルについて解析を行って、以下の項目について段階的に実験結果と比較する。

- 1) バルクとしての透水量係数
- 2) 保存性のトレーサーを通過させた場合の Breakthrough curve
- 3) 保存性のトレーサーを通過させた場合の内部の濃度分布の経時変化

2. セルオートマタ

2.1 研究の歴史

セルオートマタは当初、生物の形態生成のモデル化を行なうために開発された。流体解析への適用は、分子動力学が輸送係数をマイクロに計算する手法として始まった。ただし、この時点では粒子間の相互作用は連続であった。その後、J. E. Broadwell が気体力学を考察するために速度を離散化し (J. E. Broadwell, 1964) さらに、L. P. Kadanoff と J. Swift (L. P. Kadanoff, 1968) が音波の問題に適用する際に空間について離散化を行い格子ガスオートマトン (Lattice gas cellular automaton) 法の原型が完成した。やがて、時間についても完全に離散化された HPP モデルが 1973 年に発表された (J. Hardy, 1973)。ただし、このモデルでは等方性が確保されないという問題が残されており、この問題を解決した FHP モデルが 1986 年に発表された。FHP モデル以降、セルオートマタ法は流体解析に本格的に適用されるようになった。また、これとほぼ平行して、粒子数を離散化しない、格子ボルツマン法も開発されている (U. Frisch, 1986) (S. Wolfram, 1986) (G. McNamara, 1988)。格子ボルツマン法は格子ガスオートマトン法の粒子数を粒子数の平均値 (実数)、衝突則を実数の関数に置き換えたものとなる。格子ボルツマン法では粒子の局所平均分布関数を用いているので、格子ガスオートマトン法で必要な空間及び時間平均化が不要となる長所を持つ。ただし、衝突関数が複雑であるという問題が存在する。また、近年、実数格子ガス法とよばれる手法も提案されている (A. Malevanets, 1997) (田原和彦, 2000) (大橋弘忠, 2001) (大谷佑, 2002)。この手法では、逆に粒子は離散値を用いるが、位置や速度は連続値を取る。複雑流体への適用、粘性係数の調整が可能、温度の概念を自然に導入することが可能などの長所があるとされている。本節は文献 (加藤恭義, 1998) を参考に記述した。

2.2 研究事例

2.2.1 基礎理論

文献 (U. Frisch 1987) では格子ガスオートマトンのモデル及び関連する理論について詳細にまとめている。各モデルの概要を以下にまとめる。

HPP モデル (J. Hardy, 1973) (J. Hardy, 1976) (J. Hardy, 1972) では 2 次元正方格子上を単位質量、単位速度をもった粒子が移動、各タイムステップで粒子は隣接する格子点に到達する。同時刻に各格子点において同一の方向の速度をもった粒子は多くても 1 個である (排他律)。計算手順は次の通りである。まず、各粒子はその速度方向にしたがって隣接する格子点に移動する。各格子点において相反する方向の速度をもつ粒子が存在すると、衝突により、90 度異なる方向に散乱される (衝突則)。この規則では質量と運動量が保存されるのみくわえ、さらに伝播方向、運動方向も保存されるため、必要以上の保存則が成り立っている。

FHP モデル (U. Frish, 1987) には I、II、III の 3 通りある。2 次元三角形格子、

したがって格子点は隣接する6個の格子点と接続している。三角形格子上での衝突則は決定論的なものとそうでないものを考えなければならない。例えば粒子同士の正面衝突について決定論的に方向を決定すると対称性が損なわれる。非決定論的に乱数を用いて決めると対称性が保存される。

しかし、このような衝突では総粒子数だけでなく、相反する方向に向かう粒子数が保存されるため（質量と運動量の保存をくわえ）、合計4個のスカラーが保存される。したがって、不要な保存則が存在することになる。このようなモデルでは本質的に流体力学とは異なるものとなる。不要な保存則を除去するひとつの方法は3粒子の衝突則を導入することである。

FHP-Iは不要な保存則をもたない最も簡単なモデルである。FHP-IIモデルはFHP-Iモデルに静止している粒子をくわえたモデルであり、粒子密度が低い状況でも不要な保存則を除去する効果が高い。FHP-IIIはすべての衝突に対する規則を定義したモデルである。

しかし、格子ガスオートマトン法を3次元解析に適用する場合、対称性をもつ3次元立方格子が存在しないという問題があった。しかし、四次元空間上の面心立法格子（Face Centered Hypercube; FCHC）は必要な対称性をもっているが示され、四次元格子を三次元空間に射影することによって対称性をもった3次元解析が実現できるようになった（D. d'Humieres、1986）。FCHCの格子は(0, 0, 0, 0)を中心に(0, 0, ±1, ±1)、(0, ±1, 0, ±1)、(0, ±1, ±1, 0)、(±1, 0, 0, ±1)、(±1, 0, ±1, 0)、(±1, ±1, 0, 0)の4 x 6 = 24個の格子点を結ぶ格子である。不要な保存量を除いた衝突則は2個の粒子の衝突を定義するだけでも実現できるが、もっと効率的な手法も開発されている。

このFCHCを3次元に射影すると3 x 3 x 3の立法格子の中心点(0, 0, 0)から(0, ±1, ±1)、(±1, 0, ±1)、(±1, ±1, 0)の4 x 3 = 12個の格子点へはそれぞれ1本の通路が、(0, 0, ±1)、(0, ±1, 0)、(±1, 0, 0)の2 x 3 = 6個の格子点へはそれぞれ2本の通路が存在する。

文献（R. Nasilowski、1991）では、格子ガスオートマトン法では一般に等方性を解消するためにFHPモデルが適用されるが、FHPモデルは2次元では三角形格子にまた3次元ではFCHCモデルという複雑なモデルを適用しなければならないという欠点がある、という問題を指摘している。これを解決する方法として文献の中で2次元で四角形格子、3次元で六面体格子とすることができて、アルゴリズムが容易な手法を提案している。この手法を適用した場合、非圧縮性流体であれば等方性となる。しかし、粘性は非等方性となる問題は残されている。

2.2.2 適用例

文献(松隈洋介、1999a)では格子ガスオートマトン法で二成分混相流の分離を模擬する Immiscible Lattice Gas モデルを用いて、平均粒径と空隙率を制御した多孔質体モデル(2次元)の生成を試み任意の粒径分布をもつ複雑経路の生成を実現している。さらに、解析結果の検証、アクリル板と発砲スチロールを用いた実験により解析結果の比較を行っている。文献(松隈洋介、2001)では、さらに同じ質量をもつ高温粒子と低温粒子を用いて温度分布を表現し、複雑形状流路内の自然対流の解析を行っている。文献(阿部豊、2000)(阿部豊、2001)では3次元15速度メッシュ上で Immiscible Lattice Gas モデルを用いて多孔質内部を模擬したモデルについて水理解析を行っている。64 x 64 x 64 = 262144 という大きなメッシュ上での解析を行い、相分離現象を模擬している。

文献(松岡俊文、2002)では格子ボルツマン法により3次元15速度メッシュ上に作成した亀裂モデル内の水理解析を実施している。フラクタル理論により亀裂形状を模擬した2次元モデルを作成して、亀裂の形状により平行平板中で満たされる三乗則から乖離する様子をまとめている。また、3次元モデルについても少数の解析例を示し、同様に三乗則から乖離する様子を示している。

2.2.3 大規模化

文献(松隈洋介、1999b)1024x1024のメッシュを用いた格子ガスオートマトン法をPVMにより並列化、CPU4台ぐらいまでは良好な並列効率が得られているが、それ以上では並列効率が低下。(各メッシュにおける1.0のような情報をどのようにINTEGERに割り当てるか、演算をどのようにするのか工夫を要する。)

2.3 手法の選定

流体解析に適用されるセルオートマトン法には1)格子ガスオートマトン法、2)格子ボルツマン法、3)実数格子ガスオートマトン法などがある。格子ガスオートマトン法は粒子が等間隔格子上一定のタイムステップ毎に隣接する格子点へ移動するモデルで、粒子、速度、空間、時間すべてが離散化されているため、粒子の移動および衝突に関する処理が整数演算に限られるため計算効率は高い。しかし、安定した解を得るためには諸量を平均化する計算が必要であり、また、三次元問題に適用する際には四次元空間上の面心立方格子を三次元空間に射影した格子を用いる必要がある。実績は多く、流体解析や本役務の目的である複雑流路中の流れの解析に適用された例も多い。格子ボルツマン法は格子ガスオートマトン法を発展させたモデルであり、粒子数(整数)の代わりに粒子数の期待値(実数)を用いる。このため、平均化は必要がなく、また、立方格子に適用できるが、計算量は格子ガスオートマトン法に比べて格段に大きくなる。円柱まわりの水の流れなどに適用された例がある。実数格子ガスオートマトン法も同様に格子ガスオートマトン法を発展させたモデルであり、格子ガスオートマトン法と同様に

粒子数（整数）を用いるが、速度、空間については離散化せずに実数値を用いる。このため、温度の概念を取り入れられるなど自由度は大きい、計算量も大きく、また衝突に関する演算は複雑である。比較的新しい手法であり、多孔質媒体中の流れへの適用なども検討されている。表 2.1 にそれぞれの手法の特徴についてまとめる。

本役務では極めてメッシュ数が大きい問題に適用するため、最も計算負荷の小さいモデルで、かつ複雑流路中の流れの解析にも実績のある格子ガスオートマトン法を用いることとする。

表 2.1 様々なセルオートマトン法の特徴

	粒子	速度	空間	時間
格子ガスオートマトン法	整数	離散化	離散化	離散化
格子ボルツマン法	実数	離散化	離散化	離散化
実数格子ガスオートマトン法	整数	実数	実数	離散化

3. セルオートマタによる流体解析

3.1 流体解析モデル

3.1.1 基本原理

セルオートマタ(格子ガスオートマトン)では空間中に規則的に配置されたメッシュ点上に単位質量の粒子を配置する。粒子の運動は単位時間(ステップ)に隣接するメッシュ点への移動に限定される。粒子は毎ステップ、一定の割合で注入され、他の粒子と衝突したり、壁面に衝突すると、あらかじめ決められた衝突則、壁面での反射則に従い、運動方向が変化する。これらの処理は、各ステップにおいて全メッシュ点で同時に行い、平衡状態に達するまで計算を反復する。平衡に達した後も粒子の位置や運動方向には統計的なばらつきがあるので、時間的、空間的に平均化することによって流体の圧力分布や流速分布などマクロな流体特性が得られる。衝突則には保存則などが適用される。また、同一時刻、同一運動方向、同一メッシュ点上に存在し得る粒子は1個以下に限定されるという排他律も課せられる。

3.1.2 FCHC メッシュ

等方性を満たす三次元メッシュが存在しないため、四次元面心立方格子を三次元空間に射影した格子を用いる。FCHC のメッシュの概念図を図 3.1 に示す。四次元面心立方格子は中心の点(0, 0, 0, 0)から(0, 0, ±1, ±1)、(0, ±1, 0, ±1)、(0, ±1, ±1, 0)、(±1, 0, 0, ±1)、(±1, 0, ±1, 0)、(±1, ±1, 0, 0)の $4 \times 6 = 24$ 個の点が隣接する点として結ばれている。排他則により、一般に同一時刻に同一格子点上で同一の速度をもつ粒子数は最大1個に限定されるが、三次元に射影した場合、中心の点(0, 0, 0)から(0, 0, ±1)へ2本、(0, ±1, 0)へ2本、(0, ±1, ±1)へ1本、(±1, 0, 0)へ2本、(±1, 0, ±1)へ1本、(±1, ±1, 0)へ1本となるため、見かけ上、中心の格子点()から赤線で結んだ隣接する格子点()へは最大2個の粒子が、青線で結んだ格子点()へは最大1個の粒子が移動する。

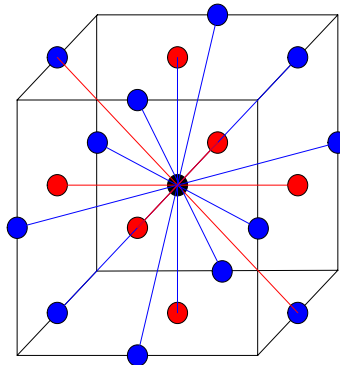


図 3.1 FCHC のメッシュの概念図

以下四次元空間での軸は x_1 、 x_2 、 x_3 、 x_4 と表現し、三次元空間に射影する場合には x_1 、 x_2 、 x_3 軸をそれぞれ x 、 y 、 z 軸に一致させて、 x_4 軸は縮退させる。解析では xy 平面を亀裂面、あるいは平行平板の面の方向として、亀裂あるいは平行平板の厚さ方向を z 方向とする。水あるいはトレーサの流れの方向を x 方向とし、 $-x$ 側の端から粒子を注入して、 $+x$ 側の端で粒子の流出を計測する。

3.1.3 衝突則

衝突則は以下の条件を満たさなければならない。

粒子の数は保存される。

運動量は保存される。

これ以外の量は保存されてはいけない。

衝突後の新しい運動量は他の粒子と異なるものでなければならない。

衝突則は対称でなければならない。

衝突は対称変換によって表現するので、FCHC メッシュ上での対称変換について整理する。FCHC メッシュ上では次の3種類の基本的な対称変換が存在する。まず、第一は x_1 、 x_2 、 x_3 、 x_4 軸に対して反転である。例えば x_1 軸に対する反転は式(3.1)の行列によって表現される。

$$S_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

第二は二つの軸の入れ替え。例えば x_1 と x_2 軸の入れ替えは式(3.2)の行列によって表現される。他に、 x_1 と x_3 、 x_1 と x_4 、 x_2 と x_3 、 x_2 と x_4 、 x_3 と x_4 の合計6種類が存在する。

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

もうひとつ三次元以下では存在しない式(3.3)の変換が存在する。

$$\Sigma = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

これらを組み合わせることによってすべての対称変換を表現することが可能である。さらに便宜のため、

$$\Sigma_1 = P_{14} P_{14} S_1 S_2 S_3 S_4 \Sigma = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$\Sigma_1 = P_{14} P_{14} S_2 S_3 S_4 \Sigma S_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

としておくと、すべての対称変換行列 M は

$$M = \begin{pmatrix} I \\ S_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ S_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ S_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ P_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ P_{23} \\ P_{24} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ P_{12} \\ P_{13} \\ P_{14} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ \Sigma_1 \\ \Sigma_2 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

で表される。ただし、各括弧の中からひとつの行列が選ばれる。また、Iは単位行列である。

実際の衝突の処理は各ステップごとに全メッシュ点上で実施する。処理の手順は以下の通りである。

メッシュ点に入射する全粒子の運動量の総和の各成分を求めて、 q_1 、 q_2 、 q_3 、 q_4 とする。

q_1 q_2 q_3 q_4 0 となるように座標変換を行なう。

運動量の総和からメッシュ点に入ってくる全粒子の対称性によるクラスを決定する。

対称変換行列を乱数により決定して、対称変換を行なう。

の逆変換を行なって衝突後の粒子の運動方向を決定する。

(1) 運動量の総和

メッシュ点に入ってくる全粒子の運動量を足し合わせる。

(2) 座標変換

(a) $q_1 < 0$ ならば対称変換 S_1 を行なう。 q_2 、 q_3 、 q_4 についても同様に < 0 であればそれぞれ対称変換 S_2 、 S_3 、 S_4 を行なう。

(b) $q_1 \quad q_2 \quad q_3 \quad q_4 \quad 0$ となるように対称変換 $P_{\alpha\beta}$ を必要な回数行う。

(c) $q_4 > 0$ かつ $q_1 + q_4 = q_2 + q_3$ ならば、対称変換 Σ_2 を行なう。 $q_4 > 0$ かつ $q_1 + q_4 > q_2 + q_3$ ならば、対称変換 Σ_1 を行ない、さらに $q_4 < 0$ ならば対称変換 S_4 を行なう。

(3) クラスの決定

(a) 座標変換により得られた q_1 、 q_2 、 q_3 、 q_4 より表 3.1 に従って、入射する粒子の対称性を表すクラスを決定する。 r は各クラスに分類される q_1 、 q_2 、 q_3 、 q_4 の組み合わせの数を表す。 r の合計は 7009 である。

(4) 対称変換の決定と適用

クラスに適用することが可能な対称変換を表 3.2 より決める。クラスに適用される対称変換が複数個存在する場合、乱数により適用する対称変換を選択する。 q_1 、 q_2 、 q_3 、 q_4 に対して対称変換を行なう。

表 3.1 運動量によるクラス分類

q_1	q_2	q_3	q_4	Class	r
0	0	0	0	12	1
1	1	0	0	10	24
2	0	0	0	11	24
2	1	1	0	6	96
2	2	0	0	10	24
2	2	2	0	8	96
3	1	0	0	9	144
3	2	1	0	3	192
3	3	0	0	10	24
3	3	2	0	5	288
3	3	3	1	2	192
4	0	0	0	11	24
4	1	1	0	7	288
4	2	0	0	9	144
4	2	2	0	6	96
4	3	1	0	3	192
4	3	3	0	7	288
4	4	0	0	10	24
4	4	2	0	5	288

q_1	q_2	q_3	q_4	Class	r
4	4	3	1	1	576
4	4	4	0	8	96
5	1	0	0	9	144
5	2	1	0	4	576
5	3	0	0	9	144
5	3	2	0	3	192
5	4	1	0	3	192
5	4	3	0	4	576
5	5	0	0	10	24
5	5	2	0	5	288
6	0	0	0	11	24
6	1	1	0	7	288
6	2	0	0	9	144
6	2	2	0	7	288
6	3	1	0	4	576
6	3	3	0	6	96
6	4	0	0	9	144
6	4	2	0	3	192

表 3.2 クラスに適用される対称変換

Class	Optimal isometries
1	1 P_{12}
2	2 $P_{23}P_{12}, P_{23}P_{13}$
3	2 $S_1\Sigma_1, S_1\Sigma_2$
4	1 S_1
5	1 S_1P_{12}
6	4 $S_1\Sigma_1, S_1\Sigma_2, S_1P_{23}\Sigma_1, S_1P_{23}\Sigma_2$
7	1 S_1P_{23}
8	4 $P_{23}P_{12}, P_{23}P_{13}, S_1P_{23}P_{12}, S_1P_{23}P_{13}$
9	3 $S_1S_3, S_3P_{34}, S_1P_{34}$
10	6 $S_3P_{34}P_{12}, S_1P_{34}P_{12}, S_1S_3\Sigma_1,$ $S_1S_3P_{34}P_{12}\Sigma_1, S_1S_3\Sigma_2, P_{34}P_{12}\Sigma_2$
11	6 $S_1S_2P_{23}, S_1S_3P_{23}, S_3S_2P_{24},$ $S_1S_3P_{24}, S_3S_2P_{34}, S_1S_2P_{34}$
12	12 $S_3S_1P_{34}P_{12}, S_1S_1P_{34}P_{12}, S_3S_2P_{34}P_{12}, S_1S_2P_{34}P_{12},$ $S_2S_1P_{24}P_{13}, S_1S_1P_{24}P_{13}, S_3S_2P_{24}P_{13}, S_1S_3P_{24}P_{13},$ $S_2S_1P_{23}P_{14}, S_3S_1P_{23}P_{14}, S_1S_2P_{23}P_{14}, S_1S_3P_{23}P_{14}$

(5)(2)で行なった変換の逆変換を行い衝突後の粒子の運動方向とする。

3.1.4 粘性

FCHC メッシュによるセルオートマタシミュレーションでの流体の粘性は次式で与えられる。

$$\nu = \frac{\tau^2}{2(D+2)} \frac{\mu_4}{1-\mu_4} \tag{3.7}$$

で与えられる。ただし、 ν は粘性、 τ は時間ステップ、 c は流速、 D は空間次元、 μ_4 は指数である。FCHC では規格化すると $\tau = 1$ 、 $c^2 = 2$ 、 $D = 4$ であるので、式(3.7)は

$$\nu = \frac{1}{6} \frac{\mu_4}{1-\mu_4} \tag{3.8}$$

となり、また μ_4 はメッシュ点あたりの粒子数の関数として図 3.2 のように与えられる。

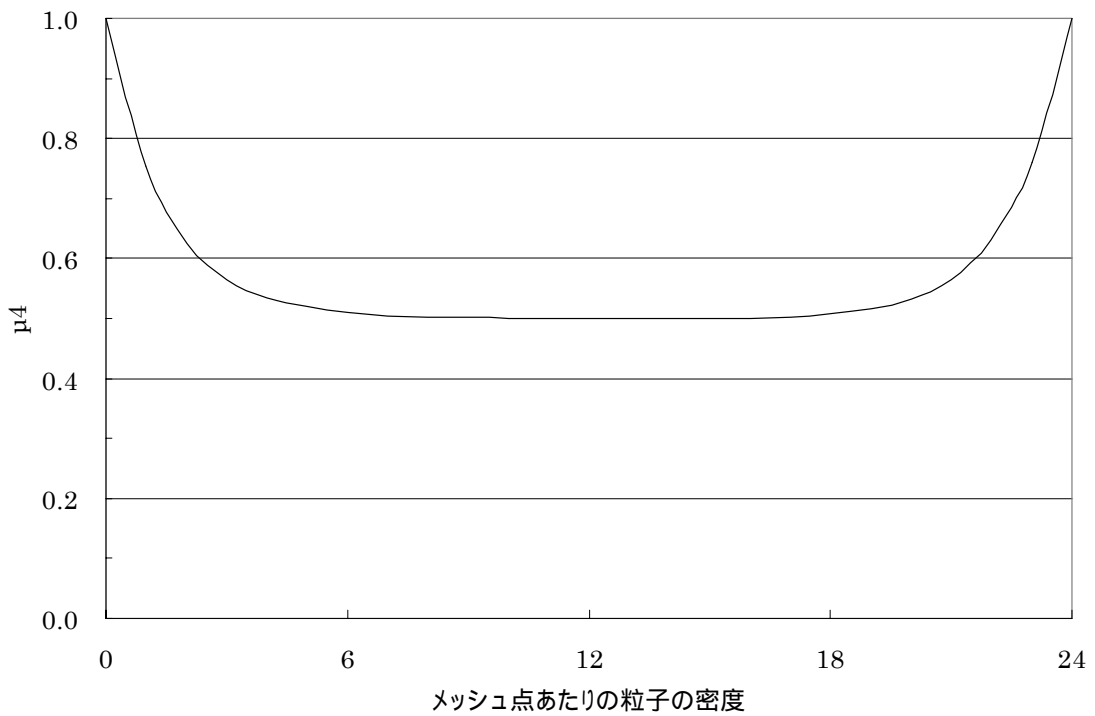


図 3.2 メッシュ点あたりの粒子数と粘性指数 μ_4 の関係

3.1.5 壁面での反射則

セルラーオートマタによる流体解析で設定される境界条件は a)すべりあり、b)すべりなし、c)組み合わせの 3 通りである。それぞれの概念図を図 3.3 に示す。

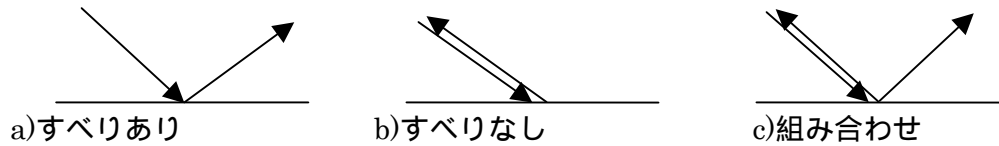


図 3.3 壁面での衝突則

実軸 (x_1 、 x_2 、 x_3) の壁面は、壁面に平行な速度成分を 0 とするために b) の衝突則を適用する。 x_4 軸の壁面は実際には存在しない壁面なので a) の衝突則を適用する。

3.1.6 結果の評価

平衡状態に達した後の各メッシュ点における粒子の運動量の和を各メッシュ点における流速とする。結果として出力する場合、厚さ方向 (z 方向) と四次元空間の x_4 方向すべてのメッシュ点上の流速を足し合わせて出力する。圧力分布も同様に平衡に達した後、各壁面上のメッシュ点に衝突する粒子数を圧力とする。結果として出力する場合、厚さ方向 (z 方向) については上面と下面、さらに四次元空間の x_4 方向すべてのメッシュ点上の圧力を足し合わせて出力する。

3.2 物質移動解析モデル

基本的な概念は水理モデルと全く同様である。トレーサを注入するステップ数はトレーサー開始ステップ数と終了ステップ数という形式で指定される。トレーサー粒子の注入に先立って、通常の粒子を注入して、平衡に達した後に、トレーサー粒子の注入を開始する。トレーサーが注入されるステップ数では、 $-x$ 側の端から注入される粒子をすべてトレーサーとして、通常の粒子としてすべての処理 (移動、衝突、反射等) を行うと同時にトレーサー粒子として、位置と場所を別に記録しておく。トレーサー粒子と通常の粒子が衝突した場合、衝突はすべて通常の粒子が衝突した場合と同じ処理を行い、衝突後の粒子の中から衝突したトレーサー粒子数と同じ粒子数を乱数により選択して、衝突後のトレーサー粒子とする。トレーサー分布図はトレーサー粒子の数を各メッシュにおけるトレーサー粒子数とする。結果として出力する場合、厚さ方向 (z 方向) と四次元空間の x_4 方向すべてのメッシュ点上のトレーサー数を足し合わせてトレーサー分布として出力する。破過曲線については、各タイムステップで $+x$ 側の端のすべてのメッシュから流出するトレーサー粒子数を計測して破過曲線とする。

4. シミュレーションシステムの構成

4.1 モデル設定方法

4.1.1 亀裂データ読み込み

LABROCK などにより測定された亀裂開口面のデータを読み込みモデル化する。入力画面で「データのメッシュ数」、「データのメッシュ間距離」、「解析のメッシュ数」、「解析のメッシュ間距離」を設定する。y 方向では(データのメッシュ数) × (データのメッシュ間距離) = (解析のメッシュ数) × (解析のメッシュ間距離) が一致している必要がある。x 方向では(データのメッシュ数) × (データのメッシュ間距離) (解析のメッシュ数) × (解析のメッシュ間距離) である必要があり、余剰のメッシュ数、すなわち、(解析のメッシュ数) (データのメッシュ数) × (データのメッシュ間距離) ÷ (解析のメッシュ間距離) が二等分されて、前後の助走区間に設定される。助走区間の開口幅は亀裂端面の開口幅と前後それぞれ一致する。

解析のメッシュ間距離から、自動的に開口幅が計算される。ただし、最大開口幅は z 方向の解析メッシュ数の範囲になければならない。

4.1.2 統計的データ

一次元のフラクタルを生成する方法として提案されている「Successive random additions」法 (Voss1985, 1988) とよばれる統計的手法を二次元に拡張して、様々なフラクタルとしての特徴をもつ亀裂開口面を生成する。本手法による二次元フラクタルの生成手順は以下の通りである。

図 4.1 に示す、 1×1 の領域の中の \square で示した 9 点に平均値 0、分散 1 のガウス分布をもつ乱数により値を設定する。

次に \square の中間に位置する \square で示した点に近接する \square における値の平均値を設定する。2 個の \square の中間に位置する \square には両隣の 2 個の \square の平均値を、4 個の \square の中間に位置する \square には近接の 4 個の \square の平均値を設定する。

、 \square の手順により値の設定された 25 個の点に対して、平均値 0、分散 $\left(\frac{1}{2}\right)^{2Ha}$ の

ガウス分布をもつ乱数による擾乱を足しこむ。ただし、 Ha は Hausdorff measure とよばれるパラメータである。

と同様に、値の設定された 25 個の点の中間の点に値を設定する。

と同様に、値の設定された 64 個の点に対して、平均値 0、分散 $\left(\frac{1}{4}\right)^{2Ha}$ のガウ

ス分布をもつ乱数による擾乱を足しこむ。

、 の手順を繰り返すことにより、 n^2 個の点をもつフラクタルが形成される。実際のプログラムでは $256(+1) \times 256(+1)$ 個の点を生成して、解析に用いるメッシュ数を取り出して用いている。また、相関距離における分散を与えられた分散の値で規格化している。

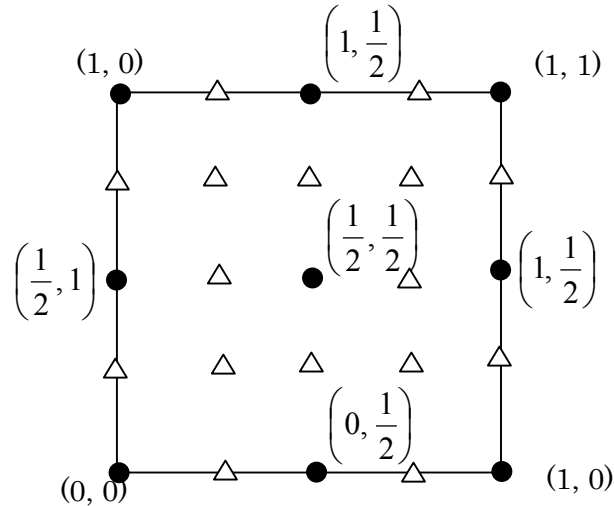


図 4.1 successive random addition 法による fractal 場の生成概念図

次に、本手法により生成されたフラクタルの特徴を示す。表 4.1 に H_a 、相関距離と power-law 型の variogram を仮定したときの指数の関係をまとめる。図 4.2 は相関距離を一定(100 メッシュ)として生成したフラクタルの距離と共分散の関係を両対数でプロットしたものである。また、図 4.3 は H_a を一定(0.6)として生成したフラクタルの距離と共分散の関係を両対数でプロットしたものである。

表 4.1 パラメータと生成されるフラクタルの variogram の指数の関係

Ha	相関距離	variogram の指数
0.0	100	0.2289
0.2	100	0.5898
0.4	100	0.9966
0.6	100	1.4882
0.8	100	1.7481
1.0	100	1.6678
0.6	128	1.4464
0.6	64	1.4771
0.6	32	1.5116
0.6	16	1.3796
0.6	8	1.2948

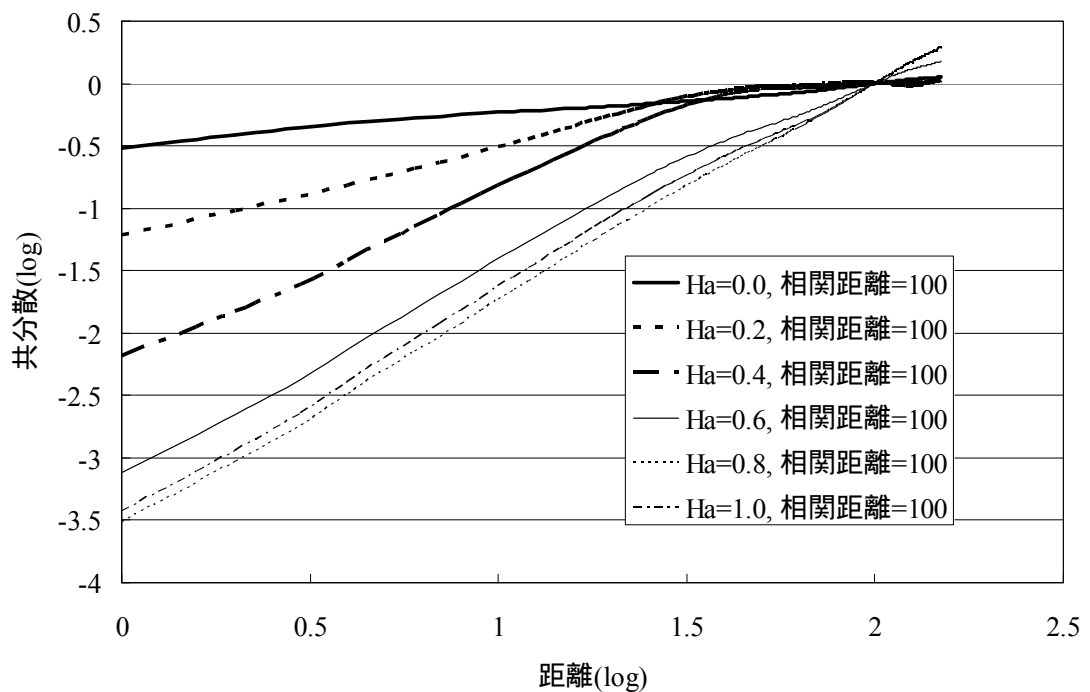


図 4.2 Hausdorff measure の変化による variogram の変化

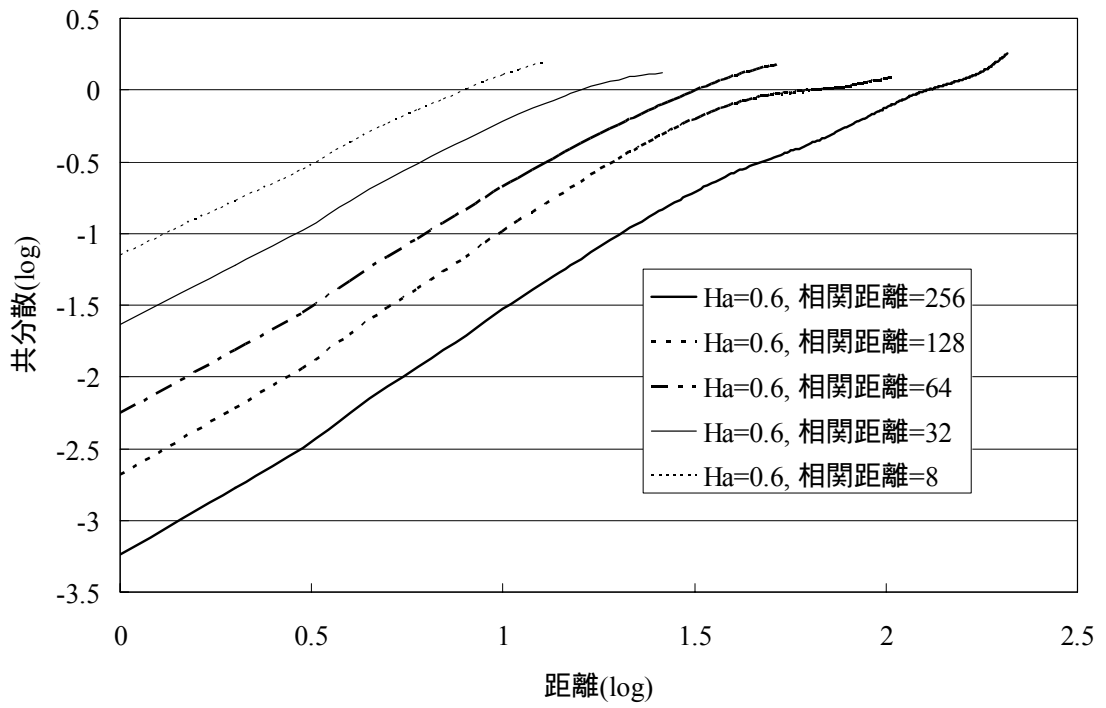


図 4.3 相関距離の変化による variogram の変化

4.2 シミュレーションプログラムの構成

4.2.1 フロー

全体のフローは以下の通りである。また、フローチャートを図 4.4 に示す。

対称変換のための行列を記憶する（Unix 版）。Windows 版ではメモリに制限があるため、行列を記憶せずに、逐次計算する。

亀裂形状ファイルの読み込みなどモデルの設定を行なう。

シミュレーションの開始、各ステップで以下の計算を行なう。

(a) 粒子の注入

(b) 各メッシュで以下の計算を行なう

i) メッシュに流入する粒子から対称性を表すクラスを選択する

ii) クラスに対して適用可能な衝突による変換パターンの中から実際に適用するものを乱数で選ぶ。

iii) 粒子の衝突による変換を求める。

(c) 境界面上での粒子の反射、消滅などの処理を行なう。

(d) 粒子を 1 ステップ移動させる。

シミュレーション終了後、結果を出力する。

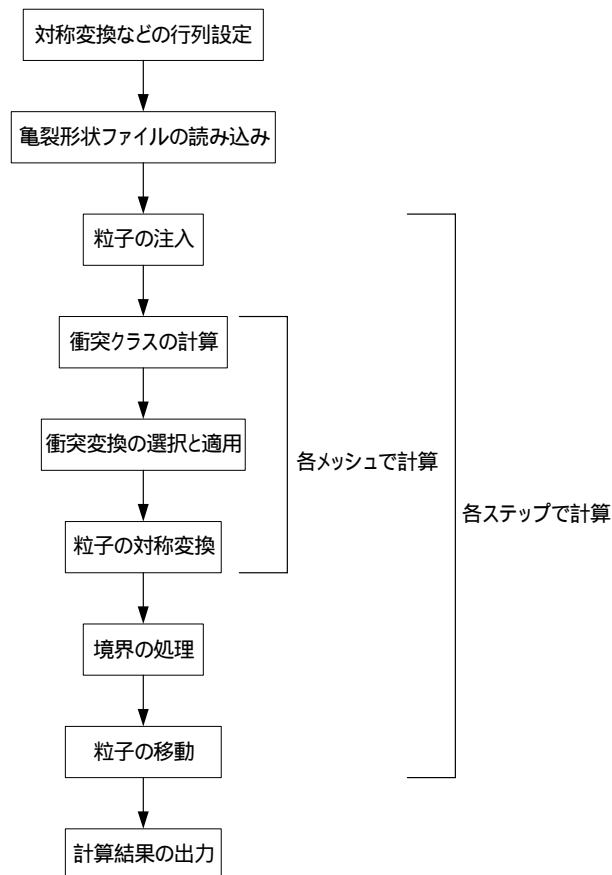


図 4.4 シミュレーションプログラムのフロー

4.2.2 行列の設定

粒子の運動方向は $(0, 0, \pm 1, \pm 1)$ 、 $(0, \pm 1, 0, \pm 1)$ 、 $(0, \pm 1, \pm 1, 0)$ 、 $(\pm 1, 0, 0, \pm 1)$ 、 $(\pm 1, 0, \pm 1, 0)$ 、 $(\pm 1, \pm 1, 0, 0)$ の $4 \times 6 = 24$ 通りであり、それぞれに表 4.2 のように番号をつける。実際のプログラムでは x_1 、 x_2 、 x_3 方向をそれぞれ x 、 y 、 z 方向、 x_4 方向を架空の方向としている。

表 4.2 運動方向の番号一覧

番号	x_1 成分	x_2 成分	x_3 成分	x_4 成分	番号	x_1 成分	x_2 成分	x_3 成分	x_4 成分
1	0	0	-1	-1	13	-1	0	0	-1
2	0	0	-1	1	14	-1	0	0	1
3	0	0	1	-1	15	1	0	0	-1
4	0	0	1	1	16	1	0	0	1
5	0	-1	0	-1	17	-1	0	-1	0
6	0	-1	0	1	18	-1	0	1	0
7	0	1	0	-1	19	1	0	-1	0
8	0	1	0	1	20	1	0	1	0
9	0	-1	-1	0	21	-1	-1	0	0
10	0	-1	1	0	22	-1	1	0	0
11	0	1	-1	0	23	1	-1	0	0
12	0	1	1	0	24	1	1	0	0

対称変換の行列 (変数名 `***iso`) は番号の変更として行列に記憶する。例えば、対称変換 S_i は x_1 成分のみが逆符号になる変換であるので、上記 1 ~ 24 番の運動方向はそれぞれ 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 15, 16, 13, 14, 17, 18, 19, 20, 23, 24, 21, 22 に変換されるので、これを行列の成分として記憶する。

—メッシュに流入する粒子のクラスを求めるための座標変換行列は 8192 個の種類があり、上記対称変換の組み合わせにより表現される。座標変換行列 (変数名 `**isoset1`) に各変換について 24 個の数字の順番を行列の成分として記憶する。

すべての対称変換行列 M の組み合わせは 1152 通りであり、同様に対称変換の組み合わせにより表現される。座標変換行列 (変数名 `**isosetm`) に各変換について 24 個の数字の順番を行列の成分として記憶する。

12 種類の衝突のクラスに適用される対称変換の組み合わせのパターンを行列（変数名****matcomp）に記憶する。

一メッシュに流入する粒子の組み合わせは $2^{24}=16777216$ 通り存在する。全パターンに対する亀裂壁面（z 方向上下面）での反射（すべり無し）、x4 端での反射（すべりあり）をそれぞれ行列（変数名**reflect1all, **reflect2all）に記憶する。これらのパターンを記憶するための行列はそれぞれ約 67Mbytes となるが、windows 上のプログラムではこの要領を確保することが難しいので、反射が発生する度に関数を呼び出して計算している。

一メッシュに流入する粒子の組み合わせに対して、対応する衝突のクラスを行列（変数名*classmat）に記憶しておいて、再度同じ組み合わせが発生した場合には記憶しておいたクラスを用いることにより計算時間を短縮している。これらのパターンを記憶するための行列は約 67Mbytes となるが、windows 上のプログラムではこの要領を確保することが難しいので、衝突の度にクラスを求めている。

粒子の組み合わせに対して、クラス求めるための対称変換パターンを行列（変数名*transmat）に記憶しておいて、再度同じ組み合わせが発生した場合には記憶しておいた対称変換パターンを用いることにより計算時間を短縮している。これらのパターンを記憶するための行列は約 67Mbytes となるが、windows 上のプログラムではこの要領を確保することが難しいので、衝突の度に対称変換パターンを求めている。

4.2.3 粒子の注入

-x 側の端面から注入する粒子は(1, 0, 0, ±1)、(1, 0, ±1, 0)、(1, ±1, 0, 0)の 6 通りとしている。各メッシュにおいて、これら 6 通りの運動方向に対してそれぞれ $0 < r < 1$ の白色乱数を発生して、 $r < (\text{注入粒子密度}) \div 6$ であれば、該当する運動量をもつ粒子をメッシュに付加する。+x 側の短面から注入する場合は x 方向の運動量が-1 である 6 通りについて同様の処理を行なう。

4.2.4 衝突クラスの計算

3.2.1 で説明した手順により、メッシュに流入する粒子の組み合わせに対応する衝突のクラスを求める。各クラスに適応可能な対称変換の中から実際に適用する対称変換を乱数により決める。選択した変換を行なって、クラスを求める際に行なった変換の逆変換を行なって、粒子の衝突後の状態を求める。

4.3 結果の出力

4.3.1 ベクトル図

ベクトル図データファイルには、各 xy 平面上の点について、厚さ方向 (z 方向) すべての点における粒子の運動量の和の x 及び y 方向成分を出力。フィールドファイルはデータファイルを AVS で可視化するためのファイルである。図 4.5 に出力のサンプルを示す。

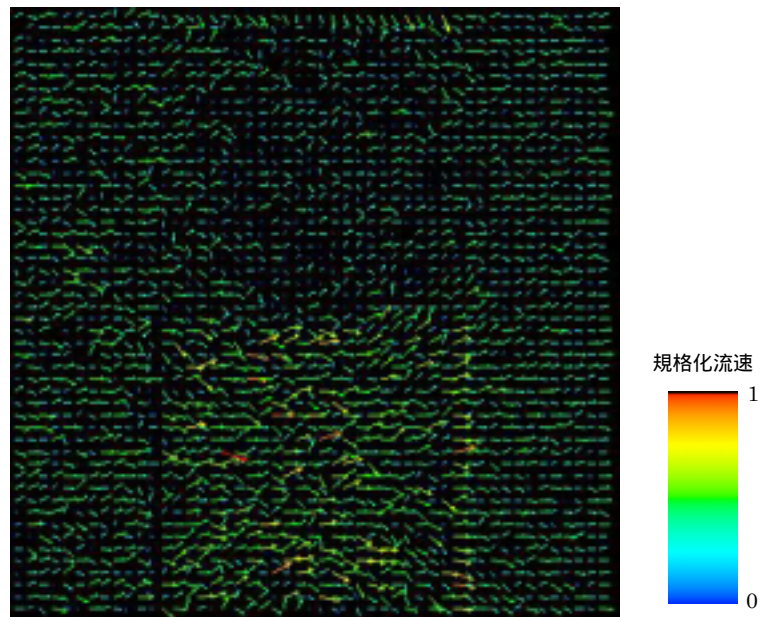


図 4.5 ベクトル図のサンプル

4.3.2 圧力分布

圧力分布データファイルには、各 xy 平面上の点について、上面と下面に衝突する粒子数の和を出力。フィールドファイルはデータファイルを AVS で可視化するためのファイルである。図 4.6 に出力のサンプルを示す。

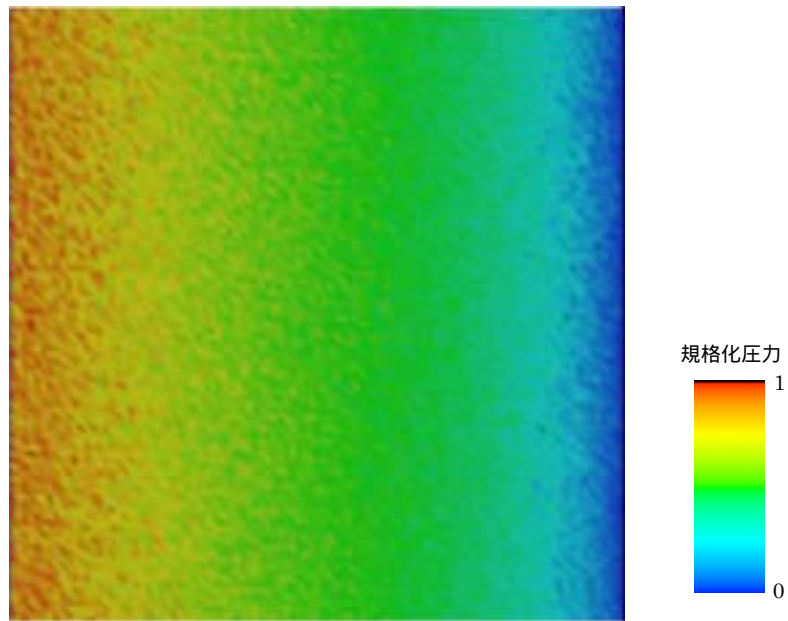


図 4.6 圧力分布のサンプル

4.3.3 トレーサー分布

トレーサ分布データファイルには、各 xy 平面上の点について、厚さ方向 (z 方向) すべての点におけるトレーサ粒子の粒子数の和を出力。フィールドファイルはデータファイルを AVS で可視化するためのファイルである。図 4.7 に出力のサンプルを示す。

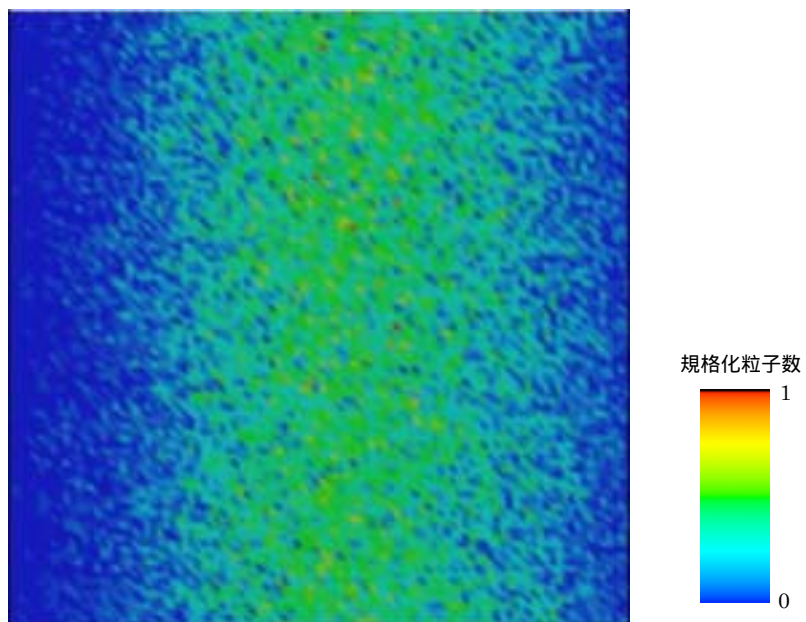


図 4.7 トレーサー分布のサンプル

4.3.4 流出粒子数

各ステップ毎に+x 側の端面から流出する粒子数及びトレーサー粒子数の和を出力。

図 4.8 にエクセルを用いて出力したサンプルを示す。

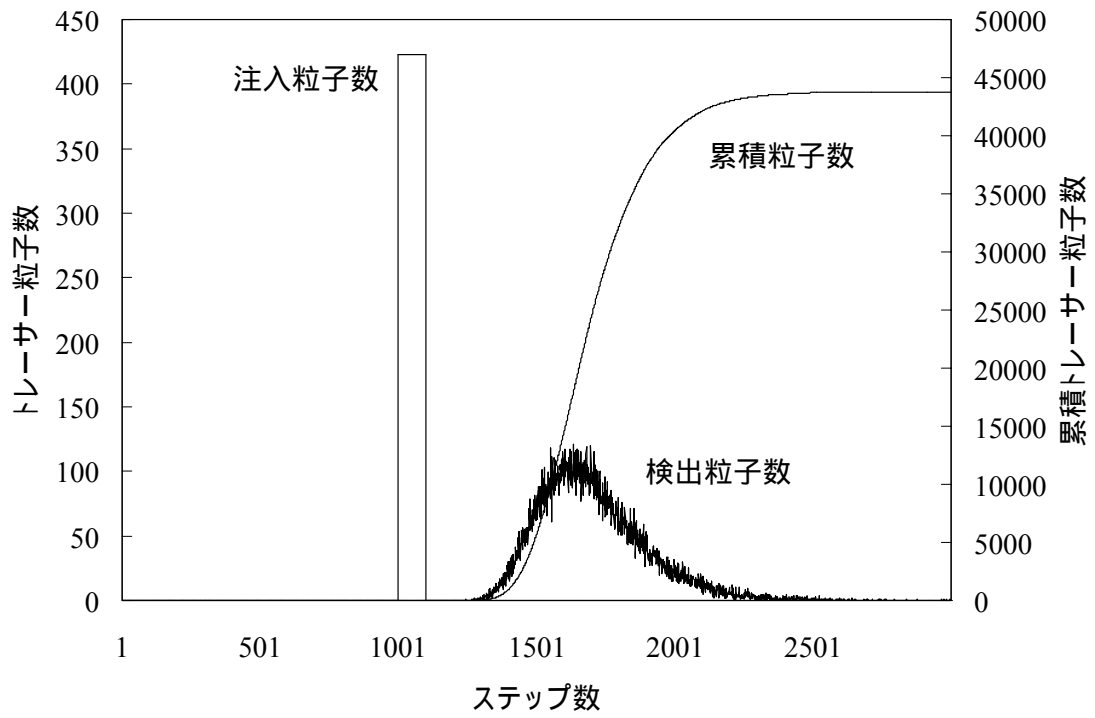


図 4.8 破過曲線のサンプル

5. シミュレーション結果

5.1 三乗則によるシステムの検討

5.1.1 三乗則

平行平板中の水理は以下の三乗則に従うことが理論的に知られている。平行平板の開口幅 $2b$ と平行平板内流量 V は次式により表される。

$$V = \frac{1}{12\eta} \cdot \frac{\Delta p}{L} \cdot (2b)^3 \quad (5.1)$$

ただし、 η は水の粘性係数、 $\Delta p / L$ は流れ方向の圧力勾配である。また、透水量係数 T と動水勾配 ΔH を用いると

$$V = T \cdot \Delta H \quad (5.2)$$

であるので、開口幅 $2b$ と透水量係数の関係は、

$$2b = \left(\frac{\rho g}{12\eta} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot T^{\frac{1}{3}} \quad (5.3)$$

となる、ただし、ただし ρ は水の密度、 g は重力加速度である。この関係式を用いて開発したシミュレーションシステムを上記の三乗則を用いて検証する。

5.1.2 セルオートマタシミュレーションによる三乗則の再現

第 3 章で述べたようにセルオートマタでシミュレーションする流体の粘性は格子上の粒子の密度によって変化する。したがって、三乗則により検証するためには、粒子密度一定、すなわち流体の粘性が一定の状態で行なうことに留意する必要がある。また、連続性をもつ流体を離散的な粒子でシミュレーションするため、結果を単一のステップあるいは単一の場所で評価することは適切でなく、適切な数のステップ数あるいは、適切な範囲を定め、これらの平均値を用いることが必要である。

x 方向のメッシュ数を 300、 y 方向のメッシュ数を 100 にそれぞれ固定して、 z 方向のメッシュ数を 10~30 まで変化して、開口幅と等水量係数の関係を調べた。セルオートマタシミュレーションと式(5.3)の対応は、(開口幅 $2b$) (z 方向メッシュ数) (流量 $2bV$) (流出粒子数) (動水勾配 ΔH) (入口圧力) - (出口圧力) として、等水量係数を (等水量係数 K_e) (流量 / 動水勾配) として求め、開口幅との関係を調べる。実際のシミュレーションの方法及び結果について以下に説明する。

図 5.1 にステップ数と流出粒子数の関係の一例を示す。シミュレーション開始時 (ステップ 1) から $x=0$ において粒子を注入して、粒子は 1 ステップで最大 1 メッシュしか進まないため、ステップ数 300 までは、流出粒子数は 0 である。ステップ数 300 の直後は全く衝突を経験しなかった粒子が $x=300$ より流出するので、流出粒子数が急速

に大きくなる。その後、衝突の影響により粒子の直進が阻害されて一旦現象した後、定常状態に達する。本シミュレーションではステップ数 6000 で十分に定常に達するとして、ステップ数を 6000 に設定した。

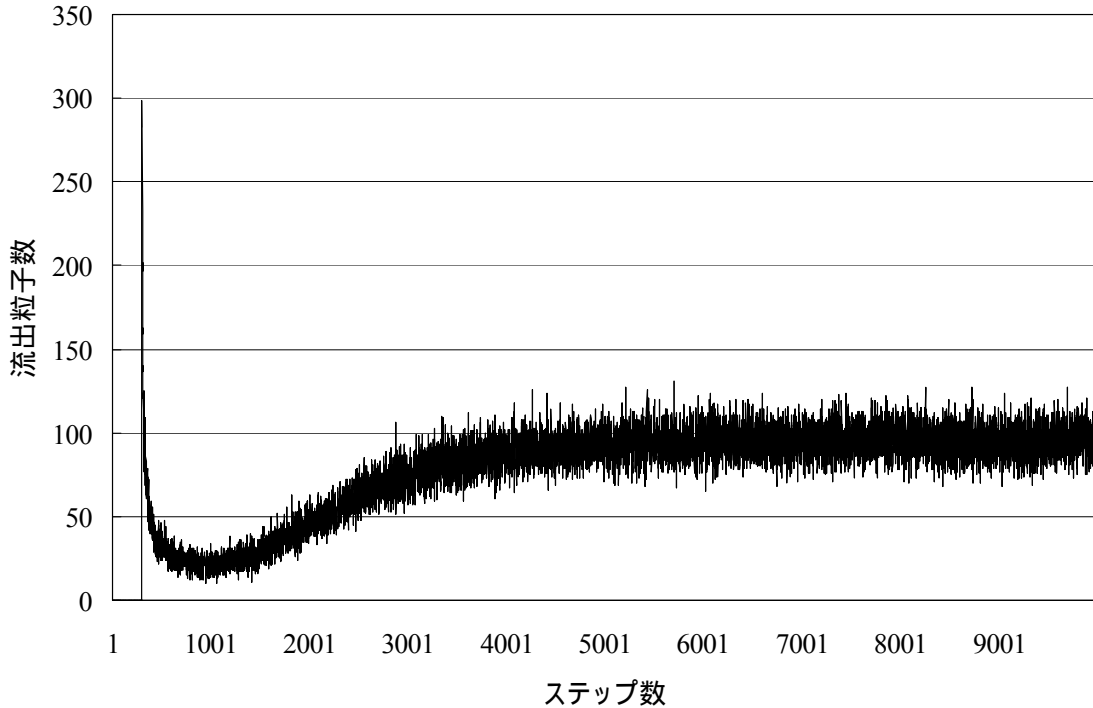


図 5.1 ステップ数と流出粒子数の関係

図 5.2 に $x=1 \sim 20$ 、 $x=141 \sim 160$ 、 $x=281 \sim 300$ 、における x 方向流速分布を「入り口近傍」、「中央」、「出口近傍」として示す。各 x の範囲の全格子点に存在する粒子の x 方向成分の和を「 x 方向成分」とした。平行平板中の厚さ方向の流速分布 v_x は

$$v_x = \frac{1}{2\eta} \frac{\Delta P}{L} (y^2 - b^2) \quad (5.4)$$

であることが理論的に示されている。すなわち、平行平板中の厚さ方向の流速分布は放物線である。セルオートマタシミュレーションの「中央」及び「出口近傍」の流速分布は、ほぼ、放物線状の分布となっている。ただし、「入り口近傍」の流速分布は、注入する粒子の分布は厚さ方向の場所によらずに一定としているため、ひずんだ形状となっている。また、図 5.3 に x 方向の圧力分布を示す。出口近傍では粒子数が減少して粘性が上がるため、圧力勾配が大きくなっているものと考えられる。したがって図 5.4 に示すように、速度分布が放物線状に落ち着く $x=51-70$ において壁面に衝突する粒子数を「入口圧力」、 $x=231-250$ において壁面に衝突する粒子数を「出口圧力」として、その間の $x=51-250$ を平行平板内の水理として三乗則の検証に用いる。

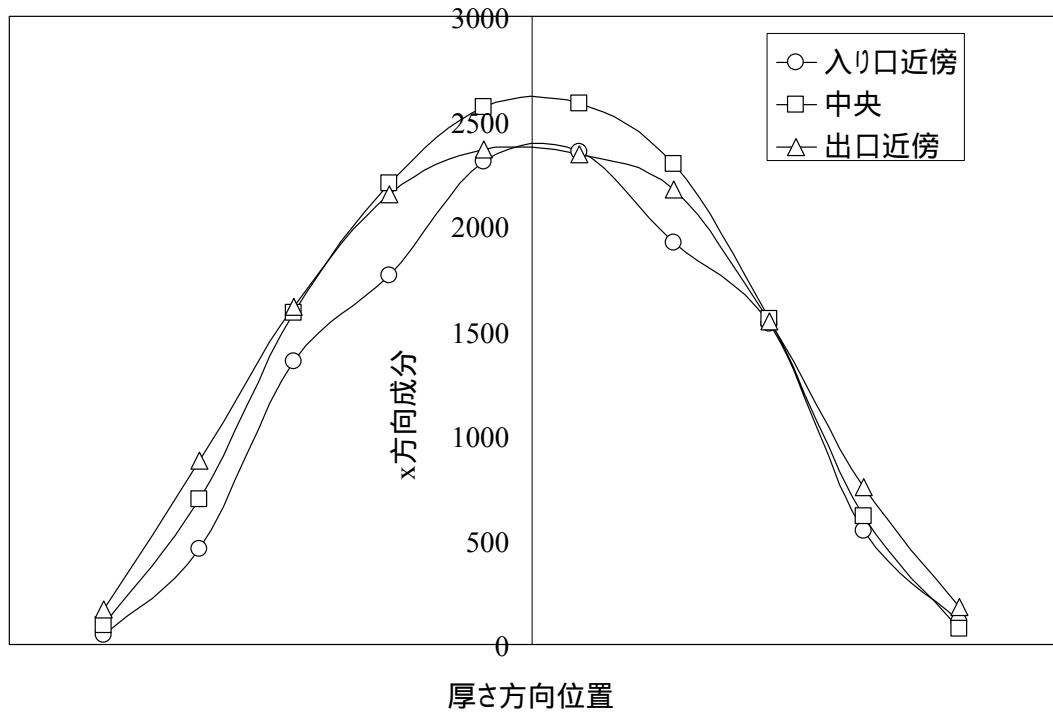


図 5.2 x 方向成分の厚さ方向分布

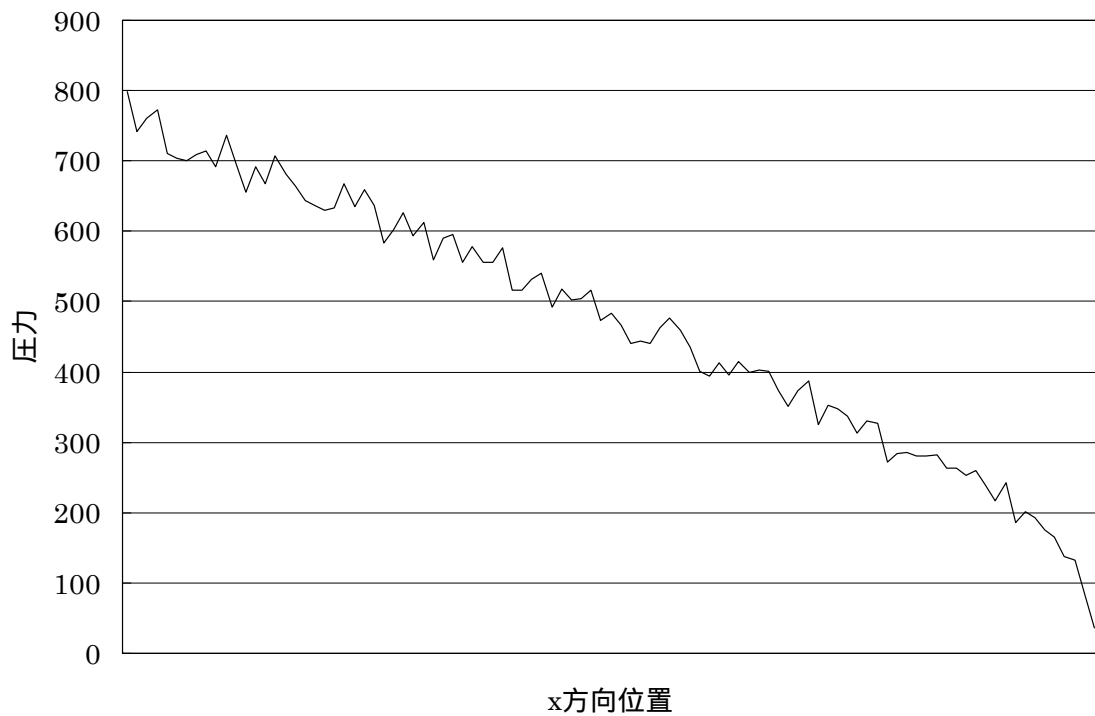


図 5.3 圧力の x 方向分布

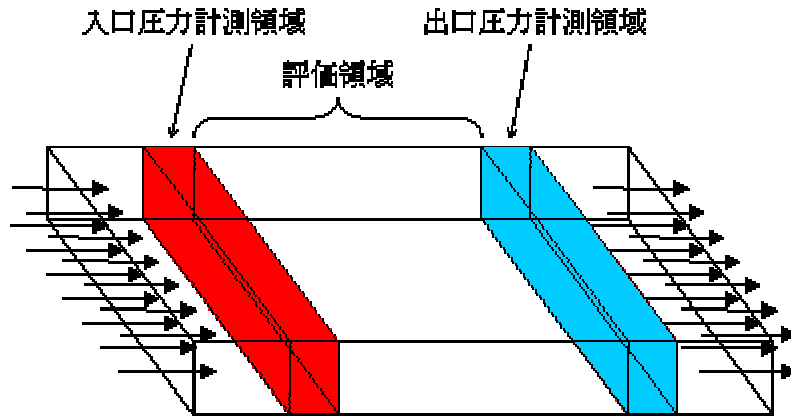


図 5.4 三乗則評価モデルの概念図

表 5.1 に実際に行なったシミュレーションのパラメータ（表左側）と結果（表右側）を示す。開口幅は z 方向のメッシュ数、注入粒子密度は-x 側の端から各ステップ毎に 1 メッシュ点あたりに注入する粒子の密度である。

表 5.1 シミュレーションのパラメータと結果

開口幅	注入粒子密度	入口圧力	出口圧力	流出粒子数	平行平板内粒子数
10	0.45	1065	405	81.123	404,452
10	0.50	1191	467	93.818	451,539
15	0.45	1048	461	262.055	630,921
20	0.45	902	448	521.070	820,253
20	0.50	949	498	596.331	902,642
25	0.45	851	397	819.416	986,772
25	0.50	928	501	936.123	1,084,381
30	0.50	861	481	1,295.688	1,249,497
30	0.55	898	461	1,451.969	1,360,347

流体の粘性を一定として各開口幅の結果を比較するために、定常状態に達した後の平行平板内粒子数を平行平板内メッシュ数と一致させる、すなわち 1 メッシュ点あたりの粒子密度が 1 となるように、注入粒子密度を調整することを試みた。平行平板内メッシュ数は助走区間にあたる両端 10 メッシュを差し引いて、開口幅 10、15、20、25、30 でそれぞれ 42 000、63 000、84 000、105 000、126 000 個となる。実際には完全に一

致させることは困難であるので、表 5.1 に示したように目標とする粒子数の前後の注入粒子密度の結果を内挿して求めた。その結果をまとめたものを表 5.2 に示す。

表 5.2 内挿により求めた各開口幅における特性

開口幅	透水量係数	動水勾配	流量
10	0.125254	681.1326	85.31485
15	0.311599	841	262.055
20	1.189347	453.281	539.1086
25	2.050387	436.5103	895.0151
30	3.400345	385.4007	1310.496

表 5.1 に示したシミュレーション結果の誤差について表 5.3 にまとめる。流量を決める流出粒子数の 1000 ステップ平均値の誤差は小さく流出粒子数 100 の場合で標準偏差 0.3、最大誤差 $\pm 0.3\%$ 程度である。動水勾配を決める壁面に衝突する粒子数は粒子数 600 の場合で標準偏差 50、最大誤差は $\pm 8\%$ にも達する。したがって、セルオートマタシミュレーション結果から算出する指数（三乗則を完全に満たす場合、指数=3.0）は数%程度の誤差は含んでいると考えられる。

表 5.3 結果に含まれる誤差の評価

項目	最大誤差	標準偏差
入口圧力	$\pm 8\%$	50
出口圧力	$\pm 4\%$	34
流出粒子数	$\pm 0.3\%$	0.3
平行平板内粒子数	$\pm 0.6\%$	350

図 5.5 にセルオートマタシミュレーションによる三乗則の再現結果を示す。横軸は開口幅の常用対数、縦軸は透水量係数の常用対数であり、したがって、最小二乗法により近似した直線の傾きは、開口幅と透水量係数の関係の指数となる。数%程度の誤差を含む可能性があるものの、目標としていた指数 3 にほぼ一致する結果を得た。

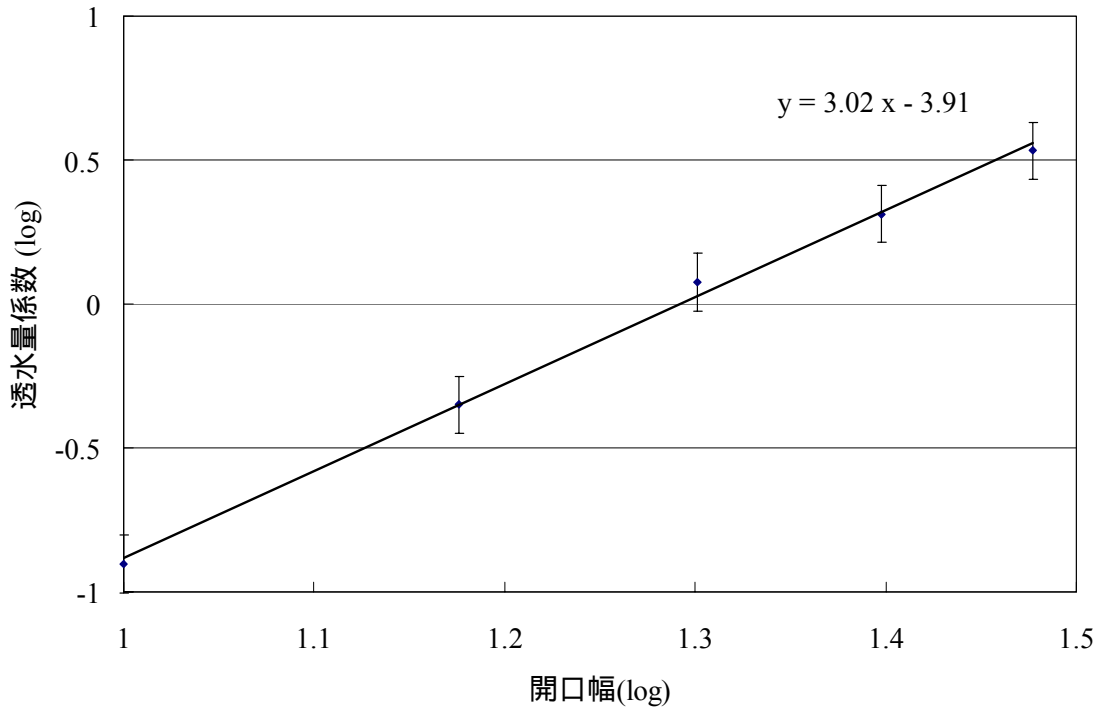


図 5.5 開口幅と透水量係数の関係

5.1.3 シミュレーション結果と実現象との対応

前節の議論によりセルオートマタシミュレーションが三乗則に比例することが示されたので、本節では実現象の値との関係を明確化する。まず、表 5.4 に物性値をまとめる。

表 5.4 物性値

水の密度	1.0 kg/m ³
重力加速度	9.8 m / sec ²
水の粘性係数	1.0 Pa · sec = 1.0 N · sec / m ² = kg / (m · sec)

厚さ方向メッシュ数を 10 の事例について、メッシュ間隔を 200 μ m とすると、開口幅 2mm であるので、式(5.3)より透水量係数は 6.53×10^{-9} m²/sec となる。開口幅 10 メッシュにおけるセルオートマタシミュレーションの動水勾配 681 を実現象の動水勾配 1 に対応させると、実現象の流量 V は 6.53×10^{-9} m²/sec となりセルオートマタシミュレーションの流出粒子数 1.7 個/(メッシュ x step)に対応することになる。以上をまとめる

と、セルオートマタシミュレーション結果と実現象との対応の一例は、

$$\Delta H_r = 0.034a \cdot \Delta H_s \quad (5.5)$$

$$V_r = 3.84 \times 10^{-9} \times a \cdot V_s \quad (5.6)$$

となる。ただし、 ΔH_r は実現の動水勾配、 V_r は実現の流速、 ΔH_s はシミュレーションの動水勾配で x 、 y 方向の1メッシュあたりの圧力差（壁面に衝突する粒子数の差）、 V_s はシミュレーションの流速で y 方向1メッシュあたりの（流出する粒子数）を表す。 a は任意の比例定数である。

5.2 LABROCK データを用いたシミュレーション

5.2.1 LABROCK により測定された亀裂データ

図 5.6 に LABROCK により測定された亀裂壁面の三次元鳥瞰図を示す。上下面の両方を描画しているが、上下面の間隔が小さいので亀裂の開口を見ることは困難である。

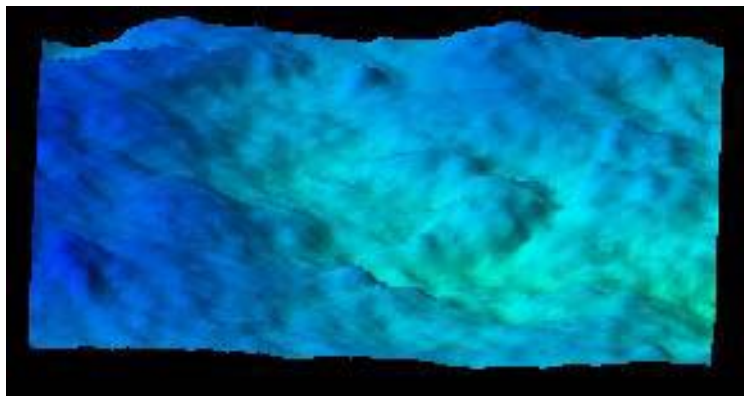


図 5.6 亀裂壁面の鳥瞰図

図 5.7 に開口幅の分布を示す。シミュレーション用に作成したモデルデータを表示しているため、両端に助走区間がつけられている。

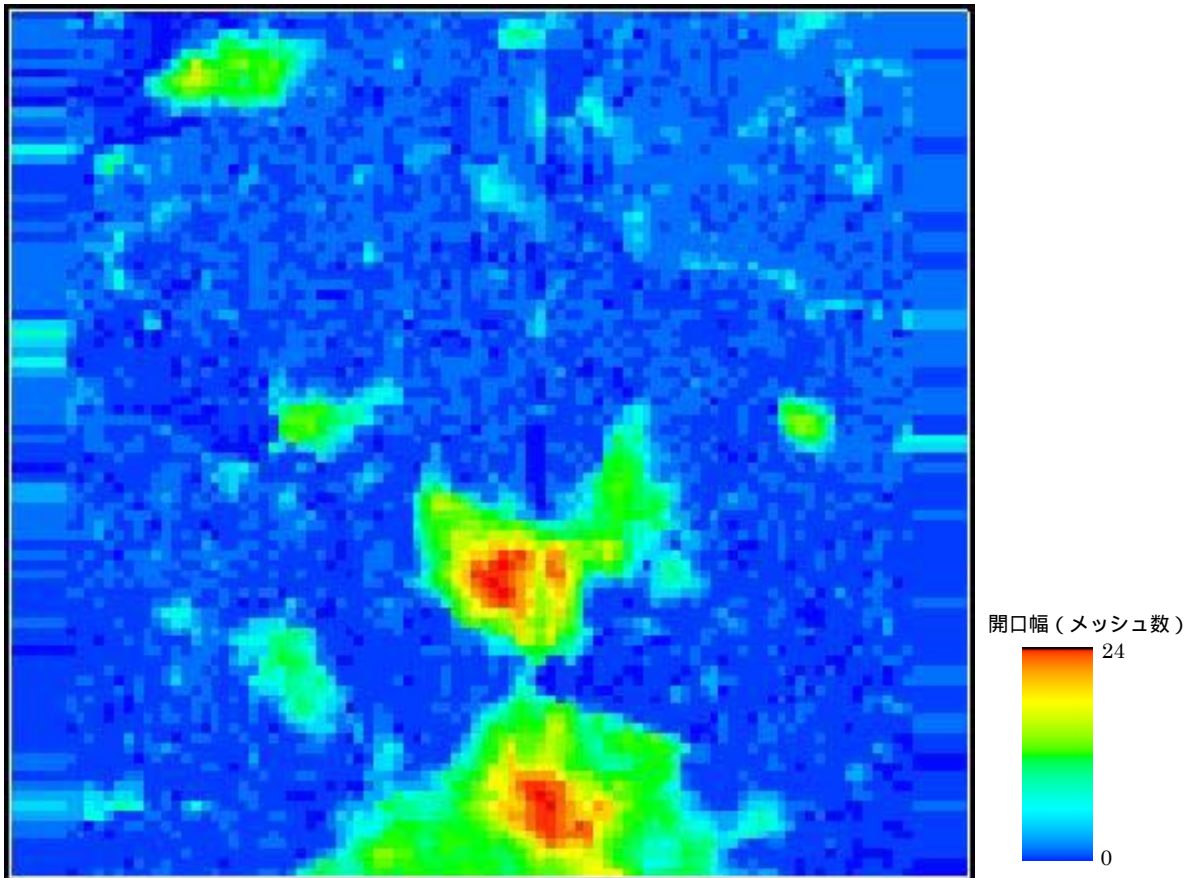


図 5.7 亀裂の開口幅

図 5.8 ~ -10 に 90mm x 90mm 亀裂データから作成した実験的 variogram を示す。図 2 は全データから作成した variogram であり、距離の大きいほうで低下しているのはデータ数が少なくなるためであると考えられる。(正方形の対角の位置にある 2 つの頂点の組み合わせに限定される。) 図 5.8 はデータ数の少ない部分を取り除いたデータで、power-law 型の variogram の指数は 1.11 程度となる。ただし、亀裂の真ん中付近にある亀裂開口幅の極端に大きいところの影響のため、途中で直線が折れたような形状となっている。さらに、図 5.9 は直線の折れた部分を取り除いて作成した実験的 variogram で、このときの指数は 1.37 程度となった。実際の亀裂の指数はこの値になる可能性もある。

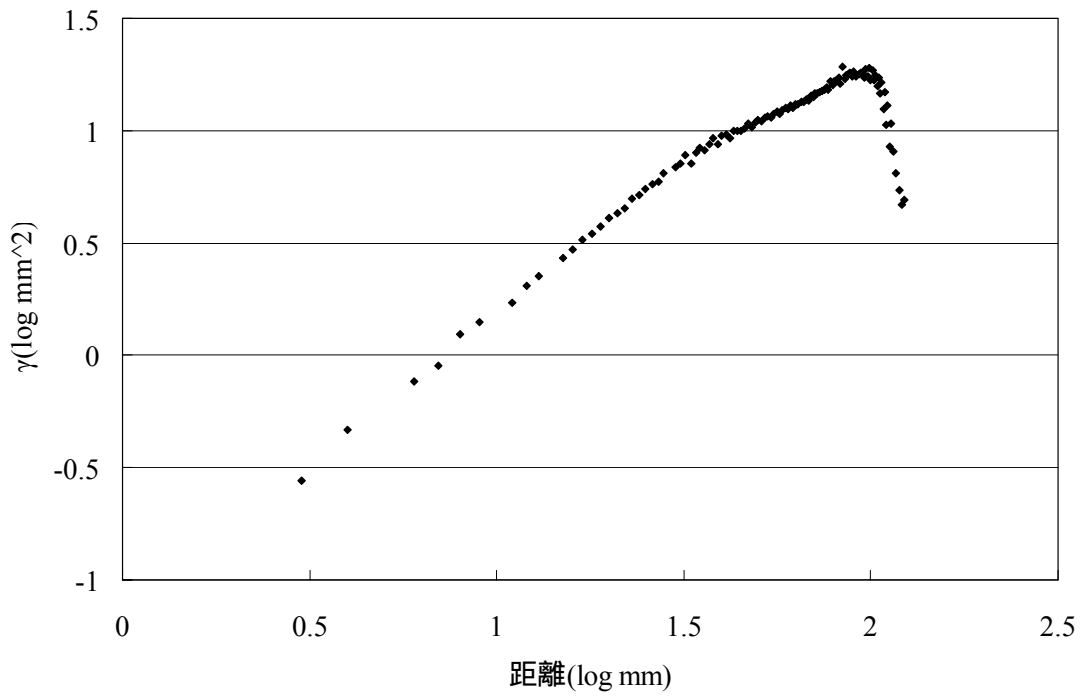


図 5.8 全データによる variogram

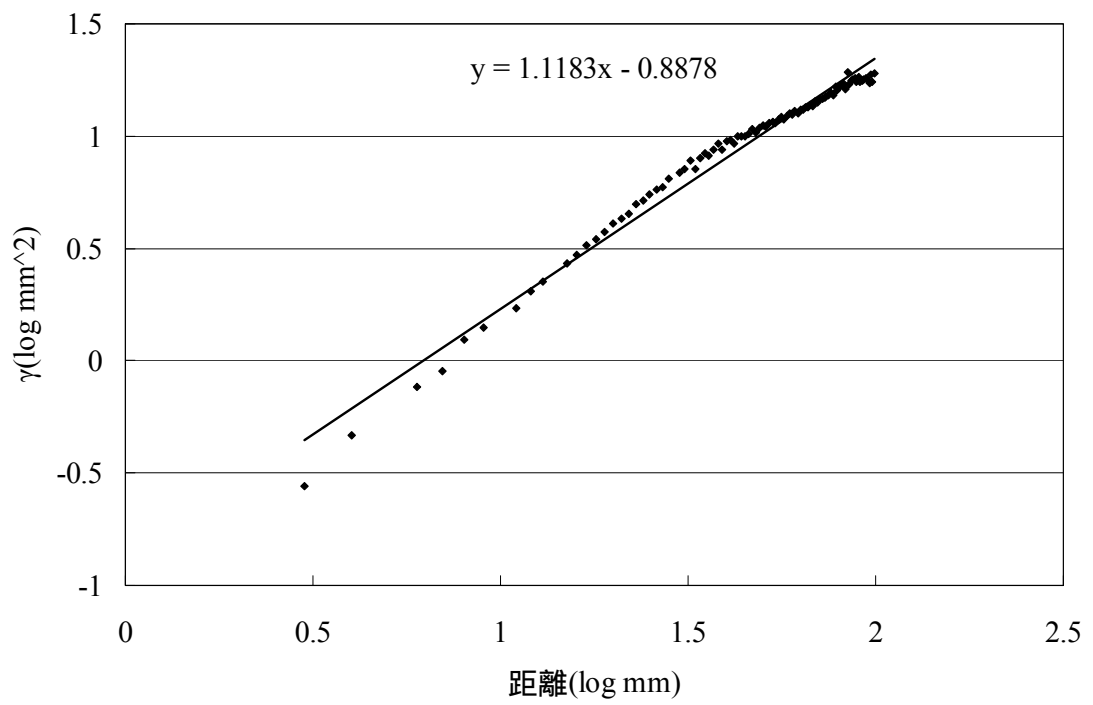


図 5.9 通常の variogram

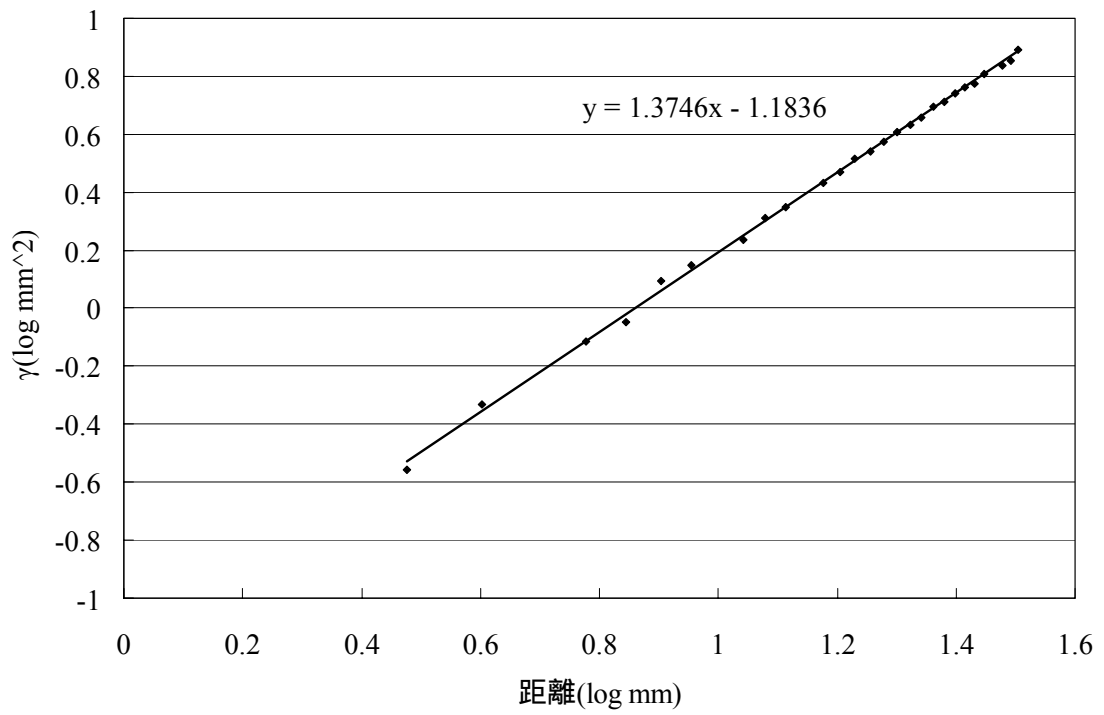


図 5.10 近接領域のみの variogram

5.2.2 解析結果

図 5.11 に圧力分布を、図 5.12 に流速分布を示す。

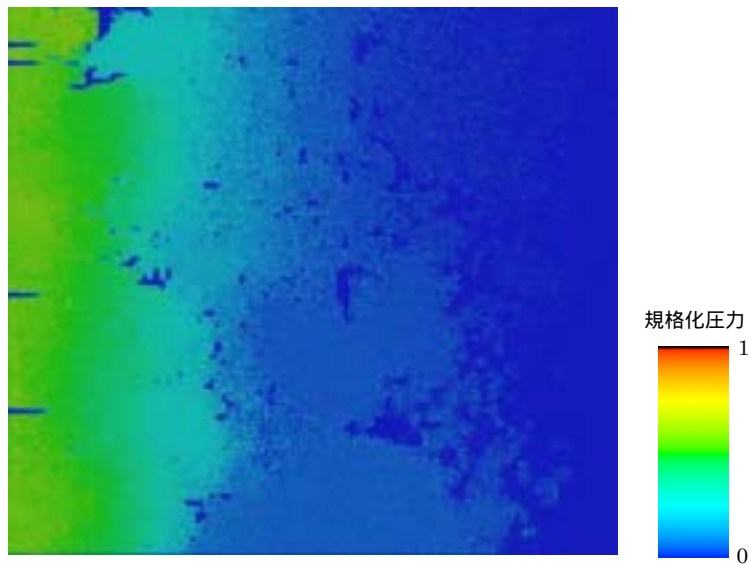


図 5.11 圧力分布

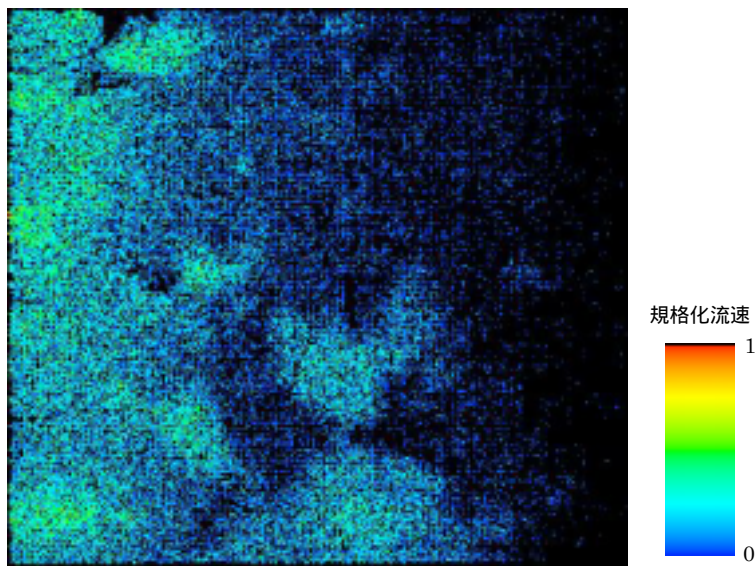


図 5.12 流速分布

5.2.3 計算時間

Pentium4、2.0GHz 上で Unix 上のプログラムで計算した場合のおよその計算時間を表 5.5 に示す。

表 5.5 計算時間

メッシュ	モデル形状	粒子密度	ステップ数	計算時間
300 x 50 x 10	平行平板	1.0	6000	6 時間
300 x 50 x 30	平行平板	1.0	6000	36 時間
100 x 100 x 10	平行平板	1.0	1000	45 分
100 x 100 x 10	平行平板	3.0	1000	95 分
500 x 450 x 24 メッシュ数約 1,000,000	亀裂	1.0	30000	120 時間

6. おわりに

本研究の成果は以下の通りである。

セルオートマタ手法全般について文献等により既存の研究事例を調査し、本研究の目的である亀裂内の水理を解析するために適した格子ガスオートマトン法を適用することを決めた。また、等方性の問題などを解決するために、四次元面心立法格子を三次元空間に射影した FCHC とよばれるメッシュを用いた。

選定した手法により水理解析を行うために、粒子の設置方法、衝突則、壁面における反射則などを設定する方法を決定した。また物質移動解析ために注入する粒子をトレーサーとして区別して分布及び破過曲線を計測する方法を確立した。

以上の方法を用いた流体解析コードを作成した。基本的なパラメータの設定は windows の画面から行なうインターフェースを開発した。LABROCK などにより測定されたデータを読み込んでモデルを自動的に作成する機能、統計的な手法によって模擬的に亀裂形状を作成する機能も付加した。結果の出力は AVS で可視化できるフォーマットに整えた。破過曲線などのデータはテキストファイルとして出力してエクセル等で可視化できるものとした。

開発した流体解析コードを検証するために、平行平板中の水理の解析に適用して、結果が三乗則と一致することを確認した。また、実際に LABROCK のデータをもとに作成したモデルに適用した。

参考文献

栃尾大輔、松隅洋介、阿部豊、成合英樹：“3次元格子ガスオートマトン法を用いた多孔質内部の微視的流動解析”、日本機械学会第13回計算力学講演会講演論文集、577 - 578 (2000)

阿部豊、栃尾大輔、橋本英治、松隅洋介、成合英樹：“格子ガス法によるマイクロチャネル内流れの解析”、第38回日本電熱シンポジウム講演論文集、67 -68 (2001)

J. E. Broadwell: “Study of the rarefied shear flow by the discrete velocity method”, *Journal of Physical Fluid Mechanics*, 19, 401 (1964)

U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau: “Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes”, *Physical Review Letter*, 56, 1505 - 1508 (1986)

U. Frisch, D. d’Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau and J.P. Rivet: “Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions”, *Complex System* 1, 649 - 707 (1987)

J. Hardy and Y. Pomeau: “Thermodynamics and hydrodynamics for a modeled fluid”, *Journal of Mathematical Physics*, 13, 1042 - 1051 (1972)

J. Hardy, O. de Pazzis and Y. Pomeau: “Time evolution of a two-dimensional model system I: invariant states and time correlation functions”, *Journal of Mathematical Physics*, 14, 1746 (1976)

J. Hardy, O. de Pazzis and Y. Pomeau: “Molecular dynamics of a lattice gas: transport properties and time correlation functions”, *Physical Review*, A13, 1949 - 1961, (1973)

D. d’Humières and P. Lallemand: “Lattice Gas Models for 3D Hydrodynamics”, *Euro physics Letter*, 2, pp291-297 (1986)

J. Swift and L. P. Kadanoff: “Transport Coefficients Near the Liquid-Gas Critical Point”, *Physical Review*, 165, 310 (1968)

G. MacNamara and G. Zanetti: "Use of the Boltzmann equation to simulate lattice gas automata", Physical Review Letter, 61, pp2332-2335 (1988)

松岡俊文、三善孝之、村田澄彦、芦田譲：“格子ボルツマン法による単一フラクチャ内の流体解析”、The 11th Japan National Symposium of Rock Mechanics (2002)

松隈洋介、後藤秀樹、阿部豊、安達公道：“格子ガスオートマトン法による複雑形状流路内の流動解析”、混相流、13巻、2号、126 - 137 (1999a)

松隈洋介、阿部豊：“格子ガスオートマトン法のPVMを用いた並列計算”、日本機械学会東北支部 米沢地方講演会講演論文集、185 -186 (1999b)

松隈洋介、阿部豊：“格子ガスオートマトン法による複雑形状流路内の自然対流解析”、日本機械学会論文集 (B編) 67巻 654号、313 - 320 (2001)

A. Malevanets: "Statistical mechanics of hydrodynamic lattice gases", Ph.D. thesis., University of Toronto (1997)

R. Nasilowski: "A Cellular-Automaton Fluid Model with Simple Rules in Arbitrarily Many Dimensions", Journal of Statistical Physics, Vol. 65, Nos1/2, 97 - 138 (1991)

大谷祐, 他：“地下水中のコロイド輸送モデルの開発”、日本原子力学会「2002年春の年会」第III分冊、p677 (2002)

大橋弘忠, 他：“放射性廃棄物地層処分における天然バリア中の物質輸送予. - (2)実数格子ガス法による不規則体系流れの解析 - ”、日本原子力学会「2001年秋の大会」, p987 (2001)

田原和彦、堺知則、陳昱、大橋弘忠：“実数格子ガス法を用いた界面活性剤による構造形成の数値解析”、日本機会学会第13回計算力学講演会講演論文集、579 - 580 (2000)

R. F. Voss: "Radom fractals: Characterization and measurement" Scaling Phenomena in Disordered Systems, R. Pynn & A. Skejeltorp, eds., Plenum Press, New York, pp1-11 (1985)

R. F. Voss: "Fractals in Nature: From characterization to simulation", The Science of

Fractal Images, H. O. Peitgen & D. Saupe, eds., Springer-Verlag, New York, pp21-70
(1988)

S. Wolfram: Theory and Applications of Cellular Automata, World Scientific (1986)

付 録
プログラム使用説明書

1 . シミュレーションシステムの構成

1 . 1 ファイルの構成

analyze.exe : windows 画面でシミュレーションプログラムに入力するファイルを作成する。

fchcw.c : windows 上のシミュレーションプログラム本体。

fchcu.c : Unix 上のシミュレーションプログラム本体。

fractal2Dw.c : windows 上のシミュレーションプログラムのサブプログラム (統計データの生成)

fractal2Du.c : Unix 上のシミュレーションプログラムのサブプログラム (統計データの生成)

1 . 2 コンパイル、実行

Windows 上 : Microsoft Visual C++ 6.0 でコンパイル。入力画面から実行。

Unix 上 : g++ -o fchc fchcu.c fractal2Du.cpp でコンパイル。fchc>(出力ファイル)で実行。

2. データ入力画面

analyze.exe を起動すると次の画面が表示される。

入力データの選択

解析を行なう形状データを選択する。「亀裂データ読み込み」は亀裂形状データを読み込み亀裂内の水理のシミュレーションを行なう。この場合、 が有効となり、ファイル名等の亀裂データに関する情報を入力する。「平行平板」は平行平板内の水理のシミュレーションを行なう。「統計的データ」ではフラクタル理論に基づいて生成した亀裂形状データを生成し、生成した亀裂内の水理のシミュレーションを行なう。この場合、 が有効となり、Hausdorff measure などのパラメータを入力する。

亀裂形状データに関する情報の設定

で「亀裂データ読み込み」を選択した場合に有効となり、亀裂データファイル名、xy 方向のメッシュ数（データ数）、メッシュ間距離（測定点間の距離、単位 μm ）を入

力する。ただし、亀裂平面を xy 平面、亀裂厚さ方向を z 方向とし、さらに流体の流れる方向を $+x$ 方向とする。亀裂データファイルの形式はテキスト形式で、まず、亀裂下面のデータが (x 方向メッシュ数) 個だけ一行に並べられ、これが (y 方向メッシュ数) 行続く。この後、亀裂上面のデータが同じ形式で並ぶ。

「統計的データ」に関するパラメータの入力

で「統計的データ」を選択した場合に有効となり、 H_a (Hausdorff measure) 相関距離 (メッシュ数)、平均値 (平均開口幅、単位 = メッシュ数)、分散 (メッシュ数) を入力する。詳細については報告書内を参照。

解析メッシュ数、メッシュ間距離設定

で「亀裂データ読み込み」を選択した場合、シミュレーションを行なうメッシュ数と、メッシュ間距離を入力する。 y 方向では (データのメッシュ数) \times (データのメッシュ間距離) = (解析のメッシュ数) \times (解析のメッシュ間距離) が一致している必要がある。 x 方向では (データのメッシュ間距離) \times (データのメッシュ間距離) (解析のメッシュ数) \times (解析のメッシュ間距離) である必要があり、余剰のメッシュ数、(解析のメッシュ数) (データのメッシュ間距離) \times (データのメッシュ間距離) \div (解析のメッシュ間距離) が二等分されて、前後の助走区間に設定される。

で「亀裂データ読み込み」または、「統計的データ」が選択された場合、シミュレーションを行なうメッシュ数のみを設定する。

解析条件設定

「ステップ数」にはシミュレーションを行うステップ数を入力する。「注入粒子数」には前方 ($-x$ 方向端面) 及び後方 ($+x$ 方向端面) から注入する粒子の 1 タイムステップ、1 メッシュ点あたりの密度 ($0 < (\text{密度}) \leq 6$) の範囲で入力する。「トレーサー注入」ではトレーサーを注入を開始するステップ数と終了するステップ数を入力する。

境界条件設定

$\pm y$ 方向の端部での境界条件を設定する。「反射端」を選択すると、粒子は $\pm y$ 方向の端部で全反射する。「周期境界」を選択すると $+y$ 方向の端部から $+y$ 方向に飛び出した粒子は $-y$ 方向の端部に現れる。同様に $-y$ 方向の端部から $-y$ 方向に飛び出した粒子は $+y$ 方向の端部に現れる。

出力ファイル名設定

ベクトル図、圧力分布、トレーサー分布については AVS により表示するためのファイルを、流出粒子数などの情報はテキストファイル (エクセルで表示) で出力する。

ベクトル図、圧力分布、トレーサ分布についてはそれぞれのデータファイル名、フィールドファイル名を拡張子なしで入力する（データファイルには.txt、フィールドファイルには.fld の拡張子が自動的に添付される。）流出粒子数についてはデータファイル名のみを入力する。（.txt の拡張子が自動的に添付される。）流出粒子数のファイルには、解析の条件、各ステップで流出する粒子及びトレーサの数、最終的な粒子数の分布などの情報が格納される。

処理ボタン

「ファイル出力」ボタンを押すと、シミュレーションプログラムに入力するためのファイルのみが出力される（Unix 上でシミュレーションを行なう場合に使用）。「解析」ボタンを押すと、シミュレーションプログラムに入力するためのファイルのみが出力され、windows 上のシミュレーションプログラムが起動される。「終了」を押すと、入力画面が終了する。

3 . 結果の可視化

AVS を用いて可視化を行うためのアプリケーションファイル（サンプルを添付）フィールドファイル（データ入力画面から「ファイル出力」または「解析」ボタンを押すと自動的に生成される）とデータファイル（解析プログラムが生成）が生成される。以下に出力されるファイルの形式を示す。

1)ベクトル図データファイル

各(x, y)におけるすべてのメッシュ点(z 及び第四軸方向)に存在する粒子の運動エネルギーの和の x 及び y 方向成分を出力。（シミュレーション終了直前の 100 ステップ分の総和）

ファイルのフォーマットは以下の通りである。

(1, 1)における粒子の x 方向成分、(1, 1)における粒子の y 方向成分
(2, 1)における粒子の x 方向成分、(2, 1)における粒子の y 方向成分
⋮
(N_x , 1)における粒子の x 方向成分、(N_x , 1)における粒子の y 方向成分
(1, 2)における粒子の x 方向成分、(1, 2)における粒子の y 方向成分
⋮
(N_x , N_y)における粒子の x 方向成分、(N_x , N_y)における粒子の y 方向成分
ただし、 N_x 、 N_y は x 及び y 方向メッシュ数

2)圧力分布データファイル

各(x, y)において、z 軸に垂直な壁面(上下面の和、第四軸方向については全メッシュ点)に衝突する粒子数の合計。(シミュレーション終了直前の 100 ステップ分の総和)

ファイルのフォーマットは以下の通りである。

(1, 1)において壁面に衝突する粒子数
(2, 1) において壁面に衝突する粒子数
⋮
(N_x , 1) において壁面に衝突する粒子数
(1, 2) において壁面に衝突する粒子数
⋮
(N_x , N_y) において壁面に衝突する粒子数

3)トレーサ分布データファイル

各(x, y)におけるすべてのメッシュ点(z 及び第四軸方向)に存在するトレーサ粒子数の合計。(シミュレーション終了時の値)

ファイルのフォーマットは以下の通りである。

(1, 1)において壁面に衝突するトレーサ粒子数
(2, 1) において壁面に衝突するトレーサ粒子数
⋮
(N_x , 1) において壁面に衝突するトレーサ粒子数
(1, 2) において壁面に衝突するトレーサ粒子数
⋮
(N_x , N_y) において壁面に衝突するトレーサ粒子数

4)流出粒子数

各ステップにおいて+x 側の端(y, z 及び第四軸方向のすべてのメッシュ点)から外部に流出する粒子数(通常粒子とトレーサ粒子)の合計。付加情報として、ファイルの初めに入力パラメータに関連する記述、ファイルの最後に計算終了時の、粒子数の分布が出力される。

ファイルのフォーマットは以下の通りである。

データ形式、ファイル名

ファイルに含まれるデータ数

解析メッシュ数

反復回数、注入粒子密度等

境界条件

出力ファイル名

亀裂データ読み込み時、データメッシュと解析メッシュの比

設定された助走区間長

全メッシュ点数

亀裂内メッシュ点数

step = 1 particleout = P_1 tracer= T_1

⋮

step = M particleout = P_M tracer= T_M

total particle = (シミュレーション終了時、メッシュ内全粒子数)

particle in crack = (シミュレーション終了時、亀裂内(助走区間を除く全粒子数)

hitting x3 particle = n (シミュレーション終了時、x=nにおいて壁面に衝突する粒子数の和)

all particle = n (シミュレーション終了時、x=nにおける粒子数の和)

ただし、 P_m 、 T_m はステップ m で外部へ流出する粒子及びトレーサ粒子数。