

密度流を考慮した水理・物質移動解析コードの 整備及び解析 プログラム使用説明書

(核燃料サイクル開発機構 役務作業内容報告書)

1999年3月

株式会社CRC総合研究所

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下さい。

〒319-1194 茨城県那珂郡東海村大字村松4-33

核燃料サイクル開発機構 東海事業所

運営管理部 技術情報室

核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Development Institute) 1999

密度流を考慮した水理・物質移動解析コードの整備及び解析

プログラム使用説明書

(核燃料サイクル開発機構 役務作業内容報告書)

斎藤 裕明^{*}, 入谷 佳一^{*}

要 旨

高レベル放射性廃棄物の地層処分においては、地下水流动および水質の変化の少ない安定した環境下に処分サイトを決定することが重要な課題である。特に沿岸地域の地下深部に処分場を想定した場合は、塩水の浸入により処分場周辺の水質が変化する可能性があるため、塩水／淡水境界の挙動が処分環境に与える影響を把握することが重要である。そのためには塩水の淡水への浸入過程および塩水／淡水境界の挙動を適切にモデル化する必要がある。

核燃料サイクル開発機構は、これまでに室内試験により得られたデータを使用して様々な水理・物質移動モデルを用いた数値シミュレーションを行い精度を比較し、動燃事業団と共同研究を行っている九州大学の提案しているモデル(解析コード)の数値誤差が比較的少なく精度の良い結果が得られることを確認した。

本作業は、より多様な条件の解析を行うことを可能とするため、この解析コードの入出力を整備したものである。具体的な作業内容としては、対話式であった入力をファイルによる入力に変更し、以下の内容を入力により指定できるよう整備を行った。

- 解析領域、格子サイズ
- 透水係数、間隙率、貯留係数、縦方向および横方向分散長
- 2流体密度
- 初期条件(圧力分布、濃度分布)
- 境界条件(濃度固定、圧力固定、流量固定、流量時間変化)
- 注入孔について位置、サイズ、濃度、流量、圧力水頭
- 計算精度に係わるパラメータ(収束条件、移動粒子数)
- 出力ファイル名、計算結果出力時間間隔
- 濃度時間履歴出力位置

本報告書は、株式会社 CRC 総合研究所が核燃料サイクル開発機構との契約により実施した役務作業に関するものである。

契約番号：10C4836

機構担当部および担当者：

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 畑中 耕一郎 殿

*：株式会社 CRC 総合研究所 エネルギー技術部

目 次

1. 目的	1
2. 入力マニュアル	2
2.1 入出力ファイルの構成	2
2.2 入力ファイル形式	2
2.3 各種分布データファイル形式	6
3. 出力ファイル	7
3.1 計算情報	7
3.2 計算結果ファイル	7
4. 入力サンプル	10

表目次

表 1： 入力ファイル内容	3
表 2： 分布、履歴データの入力指定	4
表 3： ネームリスト変数	5

図目次

図 1 ファイル構成	2
図 2 領域情報の配列	6

1. 目的

高レベル放射性廃棄物の地層処分においては、地下水流动および水質の変化の少ない安定した環境下に処分サイトを決定することが重要な課題である。特に沿岸地域の地下深部に処分場を想定した場合は、塩水の浸入により処分場周辺の水質が変化する可能性があるため、塩水／淡水境界の挙動が処分環境に与える影響を把握することが重要である。そのためには塩水の淡水への浸入過程および塩水／淡水境界の挙動を適切にモデル化する必要がある。

核燃料サイクル開発機構は、これまでに室内試験により得られたデータを使用して様々な水理・物質移動モデルを用いた数値シミュレーションを行い精度を比較し、動燃事業団と共同研究を行っている九州大学の提案しているモデル(解析コード)の数値誤差が比較的小なく精度の良い結果が得られることを確認した。

本作業は、より多様な条件の解析を行うことを可能とするため、この解析コードの入出力を整備したものである。具体的な作業内容としては、対話式であった入力をファイルによる入力に変更し、以下の内容を入力により指定できるよう整備を行った。

- 解析領域、格子サイズ
- 透水係数、間隙率、貯留係数、縦方向および横方向分散長
- 2流体密度
- 初期条件(圧力分布、濃度分布)
- 境界条件(濃度固定、圧力固定、流量固定、流量時間変化)
- 注入孔について位置、サイズ、濃度、流量、圧力水頭
- 計算精度に係わるパラメータ(収束条件、移動粒子数)
- 出力ファイル名、計算結果出力時間間隔
- 濃度時間履歴出力位置

2. 入力マニュアル

2.1 入出力ファイルの構成

使用するファイルの構成を図1に示す。

計算の制御データを「入力ファイル」とし標準入力より読み込む。収束状況、断面流量変化等の「計算情報」を標準出力より出力する。

透水係数、間隙率、貯留係数、縦方向および横方向分散長、初期条件(圧力分布、濃度分布)の設定ファイルは入力ファイルの指定により必要に応じて読み込まれる。

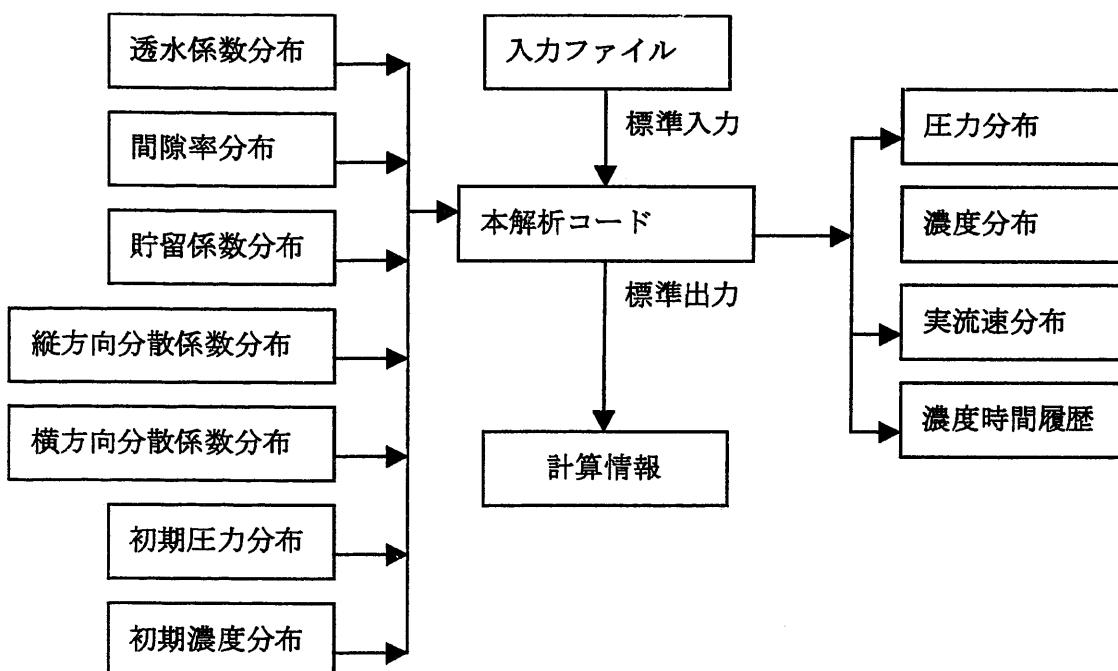


図1 ファイル構成

2.2 入力ファイル形式

入力ファイルは以下の形式である。

入力形式： 標準入力

ファイル形式： 1行 80 文字以内

コメント行：#で始まる行

入力ファイルの内容を表1に示す。

表 1：入力ファイル内容

項目	変数名	形式	備考
1. 表題 セクション			
表題	title	a80	
2. ネームリスト セクション			
Namelist	\$param...\$end	---	表 3 参照
3. リスタート セクション			
リスタートフラグ	iag, iag2	2i5	=0:通常計算, =1 リスタート計算
圧力水頭ファイル名	fnamh0	a10	iag=0 のとき省略
濃度データファイル名	fnamc0	a10	iag=0 のとき省略
4. 形状データ セクション			
解析領域	xl, yl, dx, dy	4f10.3	
境界圧力(左右)	hl, hr	2f10.3	
境界濃度(左右)	cl cr	2f10.3	
透水係数	ksat	2a10	*1 表 2 参照
間隙率	theta	2a10	*1 表 2 参照
貯留係数	ca	2a10	*1 表 2 参照
縦方向分散係数	al	2a10	*1 表 2 参照
横方向分散係数	at	2a10	*2 表 2 参照
5. 注入孔 セクション			
注入孔フラグ	injct	i5	=0: 無し, =1: 1 個所有り =2: 2 個所有り
位置, サイズ	injcx(2) injcsz	2f10.3, i5	injct=0 のとき省略
濃度	conci	f10.3	
境界条件フラグ	injcbd	i5	=0: 圧力水頭, =1: 流量 1, =2: 流量 2 *4 injct=0 のとき省略
境界条件の値	---	2a10	*3 表 2 参照 injct=0 のとき省略
位置, サイズ	injcx2(2) injcsz2	2f10.3, i5	injct=0,1 のとき省略
濃度	conci2	f10.3	
境界条件フラグ	injcbd2	i5	=0: 圧力水頭, =1: 流量 1, =2: 流量 2 injct=0,1 のとき省略
境界条件の値	---	2a10	*3 表 2 参照 injct=0,1 のとき省略
6. 計算コントロール セクション			
解析時間, 初期時間刻み, 時間刻み調整フラグ	ttime, dt, idt	2f10.3, i5	idt=0: 時間刻みを制御しない idt=1: 時間刻みを制御する

表 1：入力ファイル内容(続き)

項目	変数名	形式	備考
計算結果出力セクション			
圧力分布ファイル名	fnamhd	a10	
濃度分布ファイル名	fnamcd	a10	
実流速分布ファイル名	fnamvd	a10	
濃度変化ファイル名	fnamcc	a10	
圧力分布(リスタート用)	fnamh0	a10	
濃度分布(リスタート用)	fnamc0	a10	
計算結果出力時間間隔	dtprt	f10.3	
濃度分布変化出力点数	nprt	i5	mprt 以下
濃度分布変化出力点座標	prtxy(2,mprt)	2f10.3	nprt 行指定

分布・履歴データの入力方法(*1,*2,*3)

透水係数、間隙率、貯留係数、縦方向分散係数等、格子毎の分布を入力する変数では行の最初の 10 文字で入力方法を指定する。指定方法を表 2 に示す。

表 2：分布・履歴データの入力指定

最初の 10 文字	適用	内容
'file'	*1 *2 *3	続く 10 文字で読み取るファイル名を指定する。
'ratio'	*2	続く 10 文字で(f10.3)で縦方向分散係数に対する比を指定する。
数値	*1 *2	解析領域を与えられた数値で一様に指定する。 続く 10 文字は無視される。
	*3	注入口の流量あるいは圧力水頭を与えられた数値で一定とする。 続く 10 文字は無視される。

例：ファイル'ksat.dat'より透水係数を入力

カラム	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	2
	f	i	l	e						k	s	a	t	.	d	a	t				0

透水係数を一定値 0.385 として入力

カラム	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	2
				0	.	3	8	5	0												0

注入孔境界指定(*4)

注入孔境界条件で流量を指定するとき injcbd=1 は注入孔の四方を同等に扱い、injcbd=2 では注入孔右側境界にのみ流出するものとして扱う。

濃度の指定について

入力ファイルでの濃度は $100(\rho - \rho_f)/(\rho_s - \rho_f)$ で計算される 100 百分率で指定する。

ネームリスト変数

Namelist param で指定できる変数を表 3 に示す。

表 3： ネームリスト変数

項目	変数名	形式	既定値・内容
物理パラメータ			
分子拡散係数	dm	real*8	1.000d-5
流体密度 1	rohf	real*8	1.0000
流体密度 2	rohs	real*8	1.0250
計算パラメータ			
圧力水頭計算時 SOR 加速パラメータ	omega	real*8	1.60
圧力水頭計算時収束判定値	epsi	real*8	1.0d-2
SPM 移動粒子数初期値	nspm	real*8	0 =0 で各セル 4 つ ずつ均等配置 ≠0 では指定数だけ 乱数にて一様配置
リスタート時濃度ファイルオプション	irestc	integer	0 =0 : 濃度 =1 : 密度

2.3 各種分布データファイル形式

透水係数、間隙率、貯留係数、縦方向および横方向分散長、初期条件(圧力分布、濃度分布)の設定ファイルは入力ファイルの指定により必要に応じて読み込まれる。

入力フォーマットは 5d14.7 である。データの格納順を図 2 に示す。

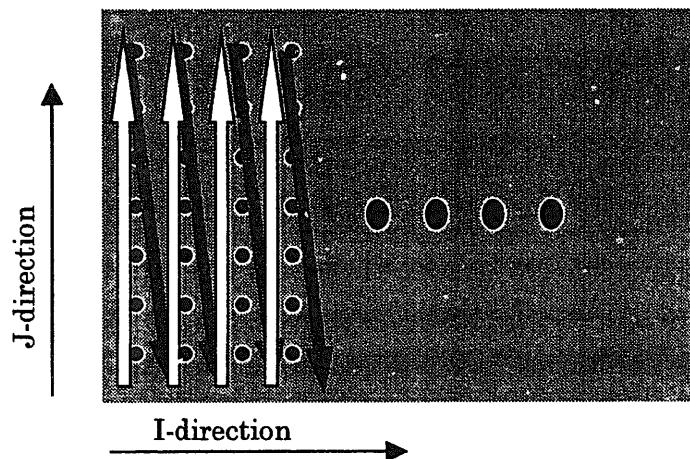


図 2 領域情報の配列

例

KSAT(I,J) :

I x 方向グリッド番号

J y 方向グリッド番号

入力 : read(70,1171) ((ksat(i,j),j=1,jmax),i=1,imax)

1171 format(5d14.7)

3. 出力ファイル

3.1 計算情報

標準出力より出力される計算情報は次の通りである。

a)入力情報

 入力内容の確認

b)各タイムステップの情報

 タイムステップ番号, 時間, タイムステップ幅

 圧力水頭計算収束情報

 x 方向を 5 等分した 6 ケ所の断面流量

 粒子移動法における粒子数

リスト 1 に具体例を示す。

3.2 計算結果ファイル

圧力, 濃度, 実流速は指定時間間隔で分布が出力される。

1 行目に内容名, 以下出力時間後とに時間, 計算結果を出力する。

計算結果は e10.3 フォーマットで $imax \times jmax$ のマトリクスで出力される。

例

*** Hydraulic Pressure Head (cm) ***

**** Time = 6000.0000000000 ***

0.102E+03 0.102E+03 0.102E+03 0.102E+03 以下略

但し, リスタートファイルは入力時のフォーマット 5d14.7 で出力される。

リスト1 計算結果サンプル

```
*****
* Input Data Information *
*****  
  
test data  
  
restart flug : 0  
  
*** geometrical data ***  
size of reasion(x,y) 200.00000000000 100.00000000000  
          (dx,dy) 1.0000000000000 1.0000000000000  
number of grid(imax, jmax) 200 100  
press. head of corner(left,right) 100.00000000000 101.50000000000  
concentration of corner(left,right) 100.00000000000 0.  
  
permeability(uniform) 0.385000000000000  
porosity (uniform) 0.370000000000000  
ca (uniform) 1.000000000000D-06  
al (uniform) 2.93000000000000D-02  
at (uniform) 2.93000000000000D-03  
  
**** injection data ***  
injection flug : 0  
  
*** time step data ***  
ttime: 30000.000000000(sec) dt= 10.0000000000000  
time step contl. : 0  
  
*** output file name ***  
head press. dist : hd000  
concentration dist : cd000  
velocity dist : vd000  
concentration change : cc000  
head press. (restart) : h0111  
concentration(restart) : c0111  
3 200 100  
    12.50000000000 6.5000000000000  
13 7  
  
*****  
** 1 ** <time= 10.000 sec > delta t : 10.000 sec  
*****  
### fresh water discharge 5.00000000000000>> q= 1269.8256208471  
### fresh water discharge 40.00000000000000>> q= -103.075199400105  
### fresh water discharge 80.00000000000000>> q= -173.14807764141  
### fresh water discharge 120.00000000000000>> q= -173.24998645514  
### fresh water discharge 160.00000000000000>> q= -173.24999937971  
### fresh water discharge 198.00000000000000>> q= -173.25000101083  
### tracer qout ### >> qout= 0.  
##### initial particle no.= 39997 ##### max particle no.= 500000  
amari migi 198 amari ue 0  
* empty no= 201  
      no. of particles : 59965 <500000 ok ?  
amari migi 3 amari ue 0 0
```

(途中省略)

```
*****  
** 3000 ** <time= 30000.000 sec > delta t : 10.000 sec  
*****  
### fresh water discharge 5.00000000000000>> q= 26.650903980572  
### fresh water discharge 40.000000000000>> q= 15.645572797155  
### fresh water discharge 80.000000000000>> q= -15.886325909629  
### fresh water discharge 120.000000000000>> q= -50.957230731709  
### fresh water discharge 160.000000000000>> q= -72.125582091353  
### fresh water discharge 198.000000000000>> q= -57.478299633179  
### tracer qout ### >> qout= 0.  
amari migi 7259 amari ue 2619  
no. of particles :465922 <500000 ok ?  
*** UV_MAX *** time= 30000.000000000 uvmax= 6.6192454707506D-02
```

4. 入力サンプル

入力サンプルを以下に示す。

サンプル入力リスト1:

```
Pool Case04
#comennt line
$param epsi=1.e-5, nspm=200000,
$end
#not restart
    0      1
#h0111
#c0111
#
#_____
#reasionsize
 200.000   100.000     1.000     1.000
 102.800   100.000
  0.000   100.000
#
#_____
# ksat
    0.385
# theta
    0.370
# ca
  0.000001
# al
  0.0293
# at
  0.00293
#
#_____
# injection
    0
#
#_____
# time step
100000.00     1.000     1
# 10.0
#
#_____
# output
#
# file name
hdp04
cdp04
vdp04
ccp04
h0p14
c0p14
10000.0
```

```
#  
# print out position  
10  
180.      5.0  
160.      5.0  
140.      5.0  
120.      5.0  
110.      5.0  
80.       5.0  
60.       5.0  
40.       5.0  
20.       5.0  
5.        5.0
```

サンプル入力リスト2:サンプル入力1の計算結果に模擬坑道を設置してリストート計算を行う

```
Pool Case02
#comennt line
$param epsi=1.e-5, nspm=200000,
$end
# restart
    1      1
h0p14
c0p14
#
#
#reasionsize
  200.000   100.000     1.000     1.000
  102.800   100.000
    0.000   100.000
#
#
# ksat
    0.385
# theta
    0.370
# ca
  0.000001
# a1
  0.0293
# at
  0.00293
#
#
# injection
    1
  100.00   50.000     2
    0.000
    0
  50.000
#
#
# time step
105002.00     1.000     1
# 10.0
#
#
# output
#
# file name
hdp02
cdp02
vdp02
ccp02
h0p12
c0p12
500.0
#
# print out position
10
180.      5.0
```

160.	5.0
140.	5.0
120.	5.0
110.	5.0
80.	5.0
60.	5.0
40.	5.0
20.	5.0
5.	5.0