PNC ZJ1222 97-010

限定資料

分置01

ニアフィールド水理／核種移行解析における数値解の安定性に関する研究(III)

(動力炉・核燃料開発事業団 契約業務報告書概要版)

技術資料		
開示区分	レポートNo.	受領日
2	J1222-97-010	97.7.25.

この資料は技術管理室保存資料です
閲覧には技術資料閲覧票が必要です

動力炉・核燃料開発事業団 技術協力部技術管理室

1997年3月

株式会社 三菱総合研究所

この資料は，動燃事業団の開発業務を進めるため，限られた関係者だけに開示するものです。ついては，複製，転載，引用等を行わないよう，また第三者への開示または内容漏洩がないよう管理して下さい。また今回の開示目的以外のことには使用しないよう特に注意して下さい。

本資料の問い合わせは下記に願います。
〒319-11　茨城県那珂郡東海村大字村松4-33
動力炉・核燃料開発事業団 東海事業所
環境技術開発部・地層処分開発室

限定資料
PNC ZJ1222　97-010
1997年3月

ニアフィールド水理/核種移行解析における数値解の安定性に関する研究（Ⅲ）

伊藤武彦*, 篠崎剛史*, 角田弘和*,
長嶋利夫*, 義澤宜明*

要旨

ニアフィールド水理／核種移行解析には緩衝材中および緩衝材の周辺母岩中での水理／核種移行プロセスを組み合わせたモデルが用いられ、コードの開発にあたり様々な数値解析／離散化手法が使用される。従って、性質を十分に把握したうえで解析コードを用いることは、解析結果もしくは評価の信頼性の観点から重要である。本研究ではモデル／コード適用範囲と数値解等の安定性について評価体系を確立する。

昨年度に引き続き「TAGSAC」について、さまざまな不飽和特性を有する土壌を対象としたベンチマーク・テストを実施し、効率的に高精度な解を得るための空間分割を決定した。また断層を含む場合についてベンチマーク・テストを実施し、不飽和特性と解の収束性を検討した。さらに時間ステップ自動設定機能や三角柱要素の追加、要素ごとの三次元不均質透水係数場のとりこみなど、コードの改良あるいは部分的に新しい機能を付加する作業を実施し、「TAGSAC」利用性の向上を図った。

一次元亀裂＋マトリクス系核種移行解析コード「CRYSTAL」について、適応限界を把握するためにベンチマークを実施した。「CRYSTAL」はLaplace変換による解析解を利用したコードであり効率的なコードである。しかし、その解法ゆえに適応範囲を把握することは困難であった。今回のベンチマークでは、解析の精度を数値的に表す指標を導入し、その有用性を確かめた。

本報告書は、株式会社三菱総合研究所が動力炉・核燃料開発事業団との契約により実施した業務の成果である。
契約番号：080D0347
事業団担当部課室：環境技術開発部 地層処分開発室
事業団担当者：石川 博久
*（株）三菱総合研究所 総合安全研究センター

COMMERCIAL PROPRIETARY
PNC ZJ1222 97-010
March, 1997

Numerical Stability of the Calculation Model of the Nearfield Groundwater Flow and Transport of Radioactive Dissloved Constitutents (Ⅲ)

Takehiko Itoh*, Tsuyoshi Shinozaki*, Hirokazu Tsunoda*,
Toshio Nagashima*, Nobuaki Yoshizawa*

Abstract

In the calculation of the nearfield groundwater flow and transport of radioactive dissolved constitutents, various numerical models and discretization methods have been applied to simulate convective and diffusive through Backfilling Material (Bentonite) and rock region.

In order to obtain accurate solutions efficiently, various parameters should be defined based on the criteria which depends on calculation models and methods.

Continuous to last year, some benchmark problems with the variety of unsaturated properties , including fault region, are applied to three dimensional calculation code for groundwater flow ("TAGSAC") to introduce the criteria for accuracy, stability and efficiency. Moreover, improvements of the code, adding the function of auto timestep determination and the availability of prismatic cells and inhomogeneity per cell, are carried out.

In order to get the criteria for accuracy and efficiency, some benchmark problems are applied to one-dimensonal contaminant transport calculation code of a densely fissured geosphere ("CRYSTAL"). "CRYSTAL" solves model equations in Laplace transform space and inverted numerically to the time domain. This approach is very efficient, but causes the difficulty of grasping the criteria of adptation. In this study, an indicator which expresses the accuracy of result numerically is introduced, and this indicator's justification and efficiency is confirmed.

Work performed by Mitsubishi Research Institute, Inc. under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation

PNC Liaison : Hirohisa Ishikawa (Geological Isolation Technology Section, Waste Technology Development Division, Tokai Works)

* : Mitsubishi Research Institute, Inc. Research Center for Safety Science

目 次

1. 本年度研究の目的および概要 1
1.1 背景・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1
1.2 "TAGSAC"関連研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 2
1.2.1 "TAGSAC"の改良・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 2
1.2.2 "TAGSAC"ベンチマーク／適用性・・・・・・・・・・・・・ 3
1.3 "CRYSTAL"関連研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 4

2. "TAGSAC"コード改良 5
2.1 自動時間増分機能の追加・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 5
2.2 三角柱要素の追加・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 7
2.3 不均質透水係数場の取り込み・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 7

3. "TAGSAC"ベンチマーク 8
3.1 不飽和特性に関する文献調査・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8
3.2 ベンチマーク・テスト 最適分割の決定・・・・・・・・・・・・・ 13
3.2.1 解析モデル／条件・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 13
3.2.2 解析結果・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 14
3.2.3 まとめ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 15
3.3 ベンチマーク・テスト 断層を含む場合の数値解の収束性・・・・・ 18
3.3.1 解析条件・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 18
3.3.2 解析結果／まとめ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 19

4. "CRYSTAL"コードの内容調査 21
4.1 CRYSTALコードの概要・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 21
4.2 CRYSTALコード内での解法・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 22

5. "CRYSTAL"適用限界に関するベンチマーク 25
5.1 CRYSTALコードの修正・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 26
5.1.1 プログラム内の計算精度の統一・・・・・・・・・・・・・ 26
5.1.2 Talbot法パラメータの前タイムステップ値利用の中止・・・ 26
5.1.3 計算時刻の見直し・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 26
5.2 代表的パラメータの組合せによるベンチマーク・・・・・・・・・・ 27
5.2.1 ベンチマークケース・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 27
5.2.2 ベンチマーク結果・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 28
5.2.3 解が精度良く求められる条件について・・・・・・・・・・ 30
5.3 scale値に基づくベンチマーク・・・・・・・・・・・・・・・・・ 31
5.3.1 scale値について・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 31
5.3.2 ベンチマーク手法・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 32

5.3.3 ベンチマーク結果・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 32

6. "CRYSTAL"一次元差分コードとの比較 38
6.1 解析モデル／条件・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 38
6.1.1 解析対象・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 38
6.1.2 離散化スキーム・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 38
6.1.3 自動時間増分機能・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 38
6.2 CRYSTALとのベンチマーク・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 40
6.2.1 ベンチマークケース・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 40
6.2.2 ベンチマーク結果・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 41

7. 本年度研究のまとめ 43
7.1 "TAGSAC"関連研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 43
7.1.1 コード改良・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 43
7.1.2 ベンチマーク・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 43
7.2 "CRYSTAL"関連研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 44

参考文献 46

1. 本年度研究の目的および概要

1.1 背景

緩衝材及び緩衝材周辺母岩を含めたニアフィールドにおける地下水流れや核種移行の現象を記述するモデルは計算機上でコード化され、解析的／数値的手法によって解かれる。これらの解析コードの開発には様々な数値解析／離散化手法が使用され、基本的なモデルの考え方、モデル設定の前提条件、解法などによって特有の性質を有する。したがって、コードの性質を十分に把握し、信頼性を有する解を与える解析パラメータの範囲を明らかにすることは、システム評価を行なう上での重要な課題である。

本研究はニアフィールドの水理／核種移行解析に使用するモデル／コードのパラメータ空間における適用範囲と数値解の安定性などについて分析／調査し、それらの品質評価体系を確立することを目的に実施するものである。平成6年度は、ニアフィールド核種移行解析モデル／コードのうち比較的単純にコード化されている緩衝材中での核種移行解析コード"RELEASE"と"MESHNOTE"を選び、ベンチマーク･テストを実施し、それらの結果をもとにコードの使用に当たってのパラメータの最適な設定 (高精度な結果を短い計算時間で得られるような設定) のための指針を作成し、2つのコードで異なった定式を採用している場合の優劣を評価した。また、ベンチマーク･テストによって得られたパラメータの最適設定指針は実解析においても妥当であることを示した。しかしながら、これらのベンチマーク･テストにおいては1つのパラメータだけを変化させ、他のパラメータは固定かつ単数崩壊系列の場合について実施された。

平成7年度作業においては平成6年度に引き続いて、ニアフィールド核種移行解析プログラム"RELEASE"と"MESHNOTE"のベンチマーク･テストをさらに複雑なケースについて実施した。また同様の手法によって三次元飽和／不飽和浸透流解析プログラム"TAGSAC"を対象として、内容調査、性能解析を行なうことにより、その適用範囲と安定性についての検討を実施し、評価体系の確立に向けての知見を得た。具体的には、モデルの前提条件及び解析コードの機能と限界を調査することにより評価項目を抽出し、それぞれの項目を

評価するために適当なベンチマーク・テストを実施した。さらに、ベンチマーク・テストの結果をもとに、コードの使用にあたっての精度／計算時間を考慮したパラメータの最適な設定のための指針を作成した。

平成8年度研究としては、以上の過程に基づき"TAGSAC" に関する研究を継続するとともに、ラプラス変換による亀裂／マトリクス系における一次元核種移行解析プログラム"CRYSTAL"を対象として、内容調査、性能解析を行なうことにより、その適用範囲と安定性についての検討を実施し、評価体系の確立に向けての知見を得る。具体的には、モデルの前提条件及び解析コードの機能と限界を調査することにより評価項目を抽出し、それぞれの項目を評価するために適当なベンチマーク・テストを実施する。さらに、ベンチマーク・テストの結果をもとに、コードの使用にあたっての精度を考慮したパラメータの最適な設定のための指針を作成する。また、必要に応じて解析コードの改良を行なう。

1.2 "TAGSAC"関連研究

1.2.1 "TAGSAC"の改良

以下に示すコードの改良あるいは部分的に新しい機能を付加する作業を実施する。

1. 時間ステップ自動設定機能

   平成7年度により得られた指針にしたがい、時間分割を自動的に決定する機能を"TAGSAC"に組み込む。現在の"TAGSAC"は時間分割を利用者があらかじめデータとして入力することとなっているが、非定常問題では適切な時間分割は状況に応じて変化するため、解析の進み具合にしたがって自動的に決定されるようにする。以後、時間ステップ自動設定機能を自動時間増分機能と記す。

2. 三角柱要素の追加

   現在の"TAGSAC"は六面体要素しか取り扱うことができないので、三角柱要素を導入することにより、より複雑な解析対象のモデル化を可能とする。

3. 要素ごとの三次元不均質透水係数場のとりこみ

   現在の"TAGSAC"においては三次元の不均質透水係数場を材料ごとに読み込む形式となっているが、これを要素ごとに読み込むことを可能とする。

1.2.2 "TAGSAC"ベンチマーク／適用性

"TAGSAC"の解析性能を評価するために、ベンチマーク·テストを実施する。"TAGSAC"では、飽和／不飽和、定常／非定常、均質／不均質など、さまざまな解析条件が考えられる。平成7年度研究では、

- トンネル周辺に不飽和領域が存在する問題
- 広域水理問題
- 掘削をともなう問題

を対象としてこれらの問題を解くのに適したベンチマーク·テストを設定し、

1. 効率的に高精度な解を得るための時間分割(非定常問題の場合)と空間分割(メッシュ幅)
2. 岩盤などの存在により物性が急激に変化する場合の空間分割法
3. 隣接要素でメッシュ幅を変化させる場合の最適変化率
4. ゆがんだメッシュを使用する場合の安定性

などについて検討した。

平成8年度研究では、1.2.1で述べた自動時間増分機能を用いて、さまざまな不飽和特性を有する土壌を対象としたベンチマーク·テストを実施し、効率的に高精度な解を得るための空間分割(メッシュ幅)について検討する。また平成7年度研究で対象とした上記3種類の問題の他に断層を含む場合についてベンチマーク·テストを実施し、不飽和特性と解の収束性について検討する。

1.3 "CRYSTAL"関連研究

本研究においては亀裂+マトリクス系の一次元核種移行解析コードである"CRYSTAL"のモデル／コードの適用範囲、解の安定性についての評価体系を確立する。

"CRYSTAL"コードは後述の様に、実時間空間上で表される核種の移行に関する微分方程式に対し Laplace 変換を実施し、Laplace 空間内での解析解を求め、その解を実時間空間に逆 Laplace 変換することにより解を求めている。

このため本来ならば、離散化手法の介在による誤差／安定性の問題は生じないはずであるが、逆 Laplace 変換を実行する際に、"Talbot 法" と呼ばれる離散化の手法を用いているため、誤差や解の不安定性を生じる可能性が存在する。ただし、Talbot 法に関するパラメータは、コード内で定義され、外部から user が指定、変更することはできない。

従来から"CRYSTAL"コードの使用時においては解が正しく求まらなかったり、解析自体が実行されていないといった不具合が報告されている。このような不具合が生じる場合の規則性は観察されておらず、様々なパラメータ範囲に対する"CRYSTAL"の適用性について十分に検討されていない。

従って本年度のベンチマークテストは、"CRYSTAL"の適用限界を解析条件を変化させることにより把握することに主眼をおいて実施した。

なお、"CRYSTAL"による解が正しいものであるかを比較／検討するために"CRYSTAL"と同等の機能を有する一次元差分コードを作成し、その解との対比を実施した。

本年度の作業概要としては以下の通りになる。

1. "CRYSTAL"コードの内容調査
2. 実用的なパラメータの組合せによる予備的なベンチマーク
3. 上記ベンチマーク結果の検討。不具合が生じる例の分類。
4. 不具合が生じる例に対するコードの修正 (可能なものに関して)
5. "CRYSTAL"の適用限界のベンチマーク (一次元差分コードとの比較も実施)
6. Talbot 法に関するパラメータを変化させてのベンチマーク

2. "TAGSAC"コード改良

2.1 自動時間増分機能の追加

"TAGSAC"が用いられている三次元飽和／不飽和浸透流解析ではその問題の複雑さから、少ない計算量 (計算時間およびメモリ) で効率的に高精度な数値解を得ることができるタイムステップを事前に知ることは困難である。

平成7年度研究で取り扱った掘削問題 ("TAGSAC" マニュアル添付の例題) では、解の精度を考慮した場合には基本的には時間経過とともにタイムステップを段階的に大きくすることが可能であるが、自由表面を含む要素が移動する場合にはタイムステップを小さくする ($\Delta t = \Delta t_0$) 方が望ましいことがわかった (図2.1-1)。

数値解の誤差の要因として、1ステップあたりの従属変数変化量が大きいことが考えられる。本研究では1ステップあたりに許容される従属変数変化量の最大値をユーザーが定義する方式を用いた自動時間増分機能を作成した。平成7年度研究で対象とした一次元鉛直モデルおよび掘削モデルに適用し、検証を行なった結果を以下にまとめる。

1. 固定タイムステップを用いた場合と比較してより少ない計算時間でより高精度なあるいは許容範囲内の精度を有する数値解を得ることが可能であり、機能の有用性が確認された。

2. 1ステップあたりに許容される従属変数変化量の許容値を初期状態から定常状態までの最大変化量の見積り値の約 10^{-2} 倍以下とすると、平成7年度研究で決定した最適な固定タイムステップ ($\varepsilon_s = \varepsilon_c = 10^{-3}$) を用いた場合と比較してより少ない計算時間でより高精度なあるいは許容範囲内の精度を有する数値解を得ることが可能であった。

3. 自動時間増分機能によりタイムステップを増大させた場合であっても、解の振動を生じることはなかった。

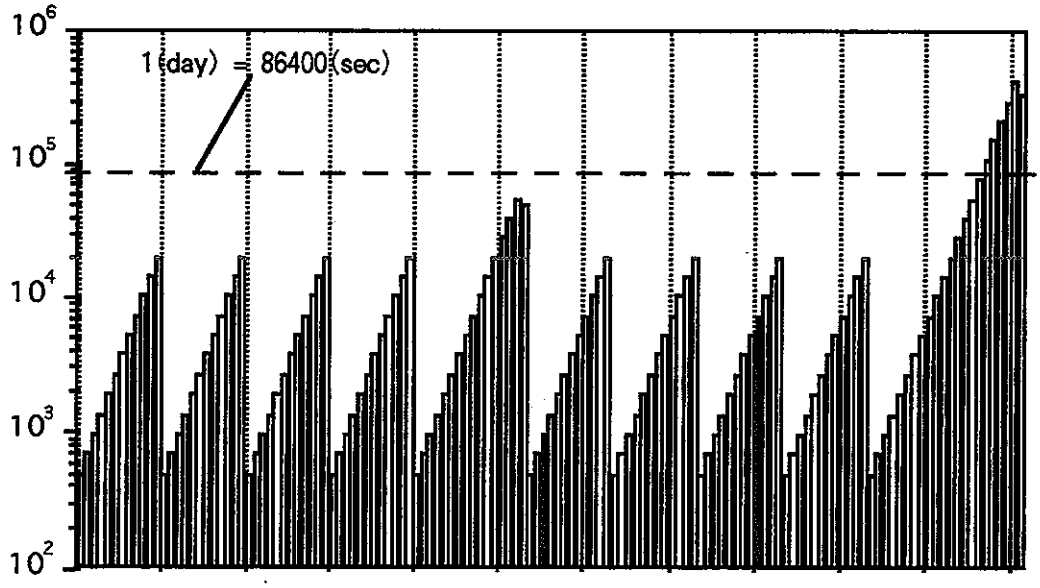


図2.1-1　最適な時間分割(平成7年度研究)

時間経過とともにΔtを増加させることが可能であるが,
自由表面がある要素から別の要素へと移動する時刻においては
ΔtをΔt_{opt}(初期Δt)と小さく設定する必要がある

2.2　三角柱要素の追加

現在の"TAGSAC"は六面体要素しか取り扱うことができないので、三角柱要素を導入することにより、より複雑な解析対象のモデル化を可能とした。また六面体要素に比べ三角柱要素を用いた場合には、解の精度が低下する場合があることがわかった。

2.3　不均質透水係数場の取り込み

現在の"TAGSAC"においては三次元の不均質透水係数場を材料ごとに読み込むことが可能であるが、これを要素ごとに読み込むことを可能とした。

3. "TAGSAC"ベンチマーク

"TAGSAC"を用いて不飽和領域の地下水流動解析を行なうにあたっては、土壌の物性値、特に透水係数と飽和度の関係 ($K \sim \theta$関係) やサクション圧と飽和度の関係 ($\psi \sim \theta$関係) を記述した不飽和特性が必要である。

平成7年度研究では、不飽和特性曲線において飽和度を変化させた場合についても解析を行なった (広域水理定常解析)。図 3.1-1 に平成7年度解析結果を例として示す。解析対象内の最小サクション圧が小さくなると最小飽和度および最小相対透水係数は小さくなり、最適分割の条件は厳しくなることが確認された。ただし用いた不飽和特性は"TAGSAC"添付のマニュアル例題 (掘削解析例) と同じものであった (図 3.1-2)。

平成8年度研究では、2.2 で述べた自動時間増分機能を用いて、さまざまな不飽和特性を有する土壌およびその飽和度を変化させた場合についてベンチマーク·テストを実施し、効率的に高精度な解を得るための空間分割を決定した。また解析領域内に断層を含む場合についてベンチマーク·テストを実施し、解の安定性に対する不飽和特性の影響を調査した。なお研究は以下の手順で進めた。

1. 文献調査により実際の土壌が示す不飽和特性を把握し、ベンチマーク·テストのためのパラメータ範囲を設定する。
2. ベンチマーク·テストを実施し、最適分割に対する不飽和特性の影響を検討した。
3. 断層を含む場合についてベンチマーク·テストを実施し、解の収束性に対する不飽和特性の影響を調査した。

3.1 不飽和特性に関する文献調査

文献調査により実際の土壌が示す不飽和特性を把握し、ベンチマーク·テストのためのパラメータ範囲を設定した。文献調査結果を以下にまとめる。

1. Brooks-Corey による不飽和特性式 (サクション圧ψと飽和度θの関係および相対透水係数rと飽和度θ関係) が一般に広く用いられている。

$$S_e = \left(\frac{\psi_{cr}}{\psi}\right)^{\lambda_1} \tag{3.1}$$

$$r = S_e^{\alpha} \tag{3.2}$$

ただしλ_1, αはパラメータである。

$$S_e = \frac{W - W_r}{W_{sat} - W_r} = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_{sat} - \theta_r} \tag{3.3}$$

S_e : 有効飽和度
ψ_{cr} : 最大サクション圧
W : 体積含水率
θ : 飽和度

W(あるいはθ) の添字 sat は飽和状態 (最大値)、rは気乾状態 (最小値) を表す。

2. 実際の土壌の種類 (砂粒、シルト、粘土) によって、不飽和特性式中の変数あるいはパラメータの範囲は異なる。

3. Brooks-Corey 式中の変数ψ_{cr}, W_{sat}, W_r およびパラメータλ_1, αに関しては、表 3.1-1 に示した範囲が現実的である。ただし砂粒に関しては飽和透水係数 K_{sat}からα を概算可能である。

$$\alpha = 0.69 - 1.31 \times \log(K_{sat}) \tag{3.4}$$

4. Brooks-Corey 式 ($\psi \sim \theta$関係) ではパラメータλ_1の値に関わらず常に下に凸である。比較的利用される機会が多い Van Genuchten 式を用いると、変曲点が大きく移動し凹凸が変化する$\psi \sim \theta$ 関係を表現することが可能である。Van Genuchten 式中のパラメータλ_2, a_2に関しては表 3.1-2 に示した範囲が現実的である。

$$S_e = \left[\frac{1}{1 + (a_2\psi)^{\lambda_2}}\right]^{1-\frac{1}{\lambda_2}} \tag{3.5}$$

表3.1-1：ベンチマーク・テストに用いるBrooks-Corey式中の変数／パラメータの範囲

	K_{sat} (cm/sec)	ψ_{cr} (cm)	W_{sat}	W_r	λ_1	α
砂粒	1.0×10^{-4}～1.0×10^{-1}	-80～-5	0.2～0.8	0.01～0.08	0.1～8.0	-
シルト	9.0×10^{-5}～6.0×10^{-3}	-80～-5	0.2～0.6	0.06～0.14	1.0～5.0	3.0～7.0
粘土	7.0×10^{-6}～3.0×10^{-2}	-80～-5	0.2～0.6	0.06～0.14	0.4～4.0	3.0～9.0

(*)砂粒におけるパラメータαはK_{sat}より求められる：$\alpha = 0.69 - 1.31 \times \log(K_{sat})$[7)]

表3.1-2：ベンチマーク・テストに用いるVan Genuchten式中のパラメータの範囲

	λ_2	α_2 (1/cm)
砂粒，シルト，粘土	2.0～10.0	-1.0～-0.01

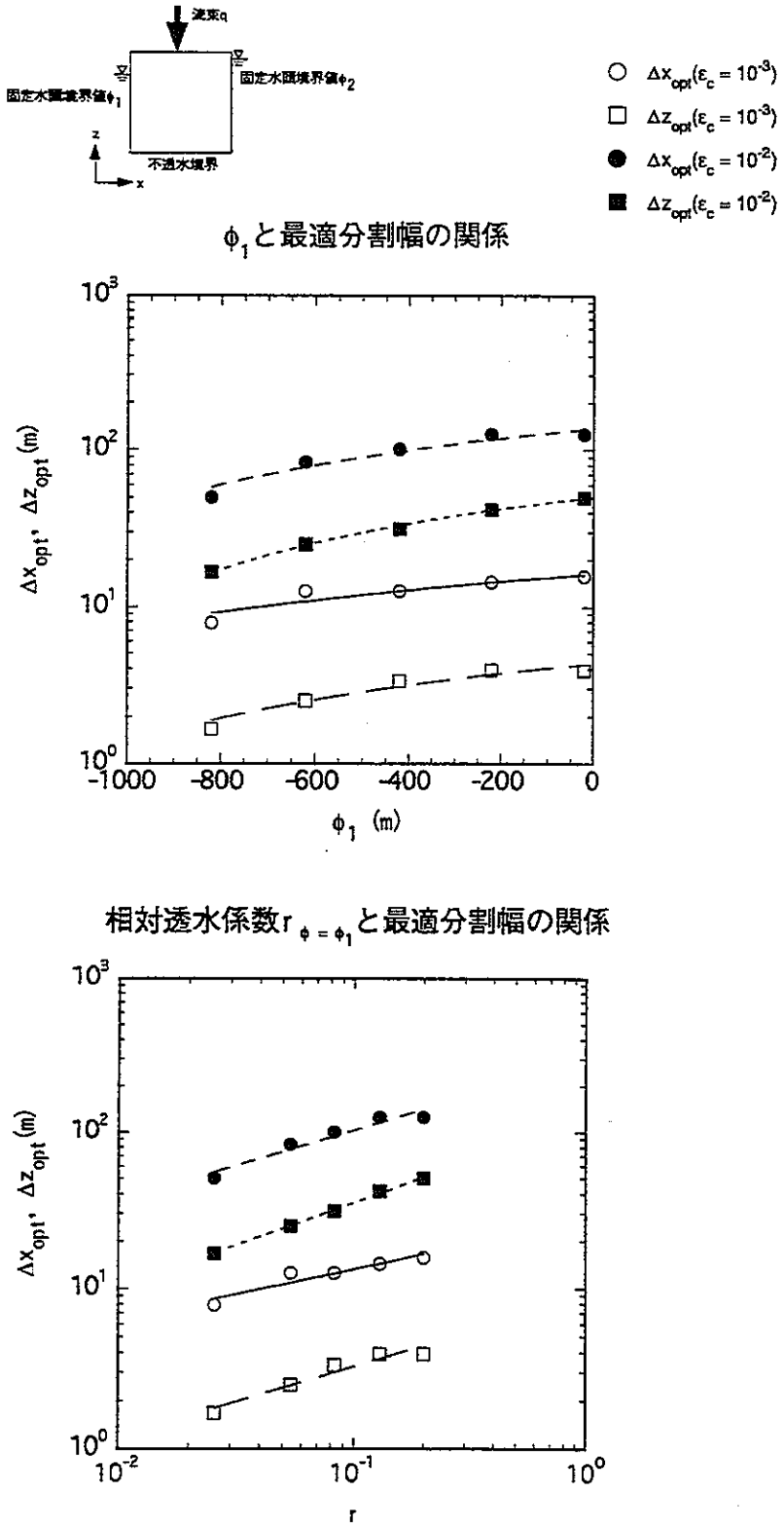


図3.1-1　不飽和特性曲線において飽和度を変化させた場合
：広域水理定常解析(平成7年度研究)
最小サクション圧および最小相対透水係数と最適分割の関係

K_{sat} = 1.0×10^{-6}(cm/sec), ϕ_2 = −10(m),

q = 6.60×10^{-9}(m/sec)　としてϕ_1を変化させた場合

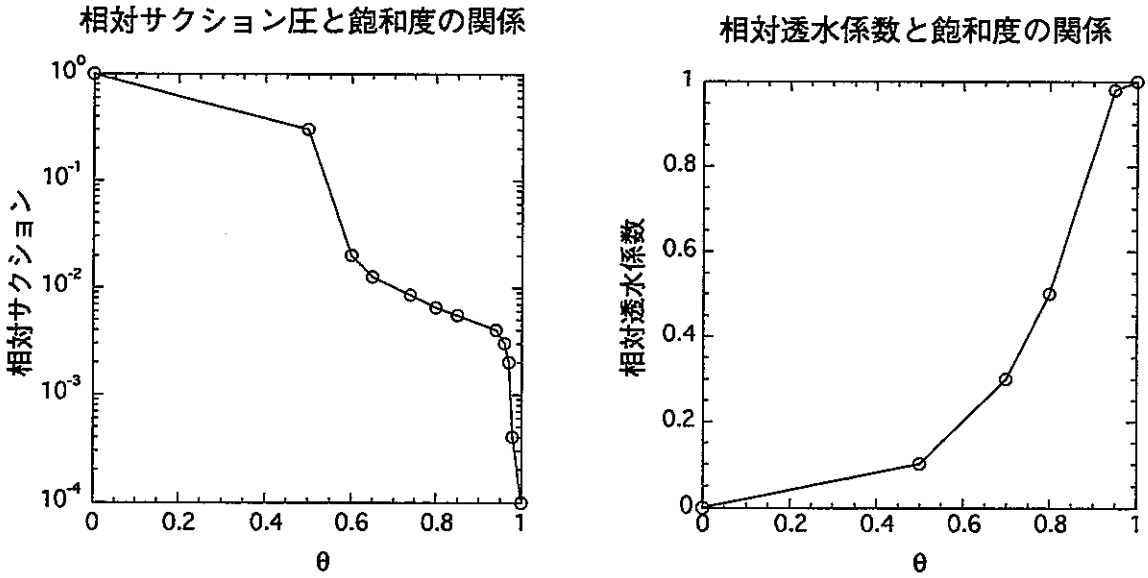


図3.1-2　平成7年度研究で用いた不飽和特性曲線

3.2 ベンチマーク·テスト 最適分割の決定

表 3.1-1、表 3.1-2 に示した Brooks-Corey 式および Van Genuchten 式中の各変数／パラメータ範囲についてベンチマーク·テストを実施し、最適分割に対する不飽和土壌特性の影響を評価する。

3.2.1 解析モデル／条件

平成 7 年度研究で用いた掘削解析モデル A(掘削部側方境界が自由浸出条件側) を用いた (図 3.2-1)。なお簡単のため掘削速度は一定とし、より厳しい条件側を採用して 2.5(m/day) の速度で 8 日間連続掘削する (深度 20(m)) 設定とした。

まず Brooks-Corey 式で表される不飽和特性について最適分割を決定し、さらに Van Genuchten 式 ($\psi \sim \theta$関係) で表される不飽和特性について検討した。文献調査から得られた各変数およびパラメータの上限値および下限値を考慮する範囲とし、その標準的な値を基本ケース値として設定した (表 3.2-1, 表 3.2-2)。なお Van Genuchten 式 ($\psi \sim \theta$関係) で表される不飽和特性について検討する場合には、$r \sim \theta$関係には Brooks-Corey 式の基本ケース値を用いた。またベンチマークにあたっては、基本ケースから 1 つの変数あるいはパラメータを変化させ、それ以外の変数あるいはパラメータは基本ケースと同じ値とした。

解析にあたっては自動時間増分機能を用い、不均等格子を用いた場合の最適な空間分割を決定した。まず最適な均等格子を決定し、さらに水平方向および鉛直方向に不均等な最適格子分割を決定した。なお解の精度の評価にあたっては平成 7 年度同様安定性かつ一様性の条件を考慮した ($\varepsilon_s = \varepsilon_c = 10^{-3}$)。

3.2.2 解析結果

まず固定水頭境界値$\phi_{A1} = 50(m), \phi_{A2}(t), \phi_{A3}(t)$ とした場合について解析を実施した (図3.2-1)。さらにそれぞれの固定水頭境界値を$\phi_{A1} + \Delta, \phi_{A2}(t) + \Delta, \phi_{A3}(t) + \Delta$ (ただしΔは定数とする) とした場合、すなわち同一の不飽和特性曲線において飽和度が異なる部分を用いた場合について解析を実施した。

(1) 境界水頭値を固定した場合

固定水頭境界値$\phi_{A1} = 50(m), \phi_{A2}(t), \phi_{A3}(t)$ として、解析を実施した (図 3.2-1)。W_{sat}, W_rを変化させても最適分割には影響はなく、K_{sat}を小さくした場合あるいは$\alpha, \psi_{cr}, \lambda_1$を大きくした場合に最適分割の条件は厳しいことがわかった。

また Van Genuchten 式 ($\psi \sim \theta$関係) および Brooks-Corey 式 ($r \sim \theta$関係) を用い、それぞれ a_2, λ_2を変化させた場合には a_2を小さくした場合あるいはλ_2を大きくした場合に最適分割の条件は厳しいことがわかった。

(2) 境界水頭値／θ_{min}を変化させた場合

固定水頭境界値を$\phi_{A1} + \Delta, \phi_{A2}(t) + \Delta, \phi_{A3}(t) + \Delta$ (ただしΔは定数とする) として、解析を実施した (図 3.2-1)。これは同一の不飽和特性曲線において飽和度が異なる部分を用いたことに相当するものである。

一方、不飽和状態では$C(\psi) = n\frac{\partial\theta}{\partial\psi}$ であり、rが小さいほどあるいは$C(\psi) = n\frac{\partial\theta}{\partial\psi}$が大きいほど最適分割の条件が厳しくなると考えられる。(1) における基本ケース値の解析では$\theta_{min} = \theta_r$であり、不飽和特性曲線の$\theta_r \leqq \theta \leqq \theta_{sat}$ の範囲を解析に使用した。ここでは例えば飽和度が高い部分のみを用いた解析を行ない、$\frac{\partial\psi}{\partial\theta}|_{\theta=\theta_{min}}$ および$r(\theta_{min})$ と最適分割の関係を検討した (θ_{min}は最小飽和度とする)。

Brooks-Corey 式 ($\psi \sim \theta$関係、および$r \sim \theta$関係) を用い、それぞれλ_1, αを変化させた場合 (αはK_{sat}に依存せずに変化させた:$K_{sat} = 3.0 \times 10^{-3}(cm/sec) =$ 一定) には、$\frac{\partial\psi}{\partial\theta}$が小さいほどあるいは$r$が小さいほど最適分割の条件は厳しいことが確認された。

また Van Genuchten 式 ($\psi \sim \theta$関係) および Brooks-Corey 式 ($r \sim \theta$関係) を用いそれぞれ a_2, λ_2を変化させた場合にも、$\frac{\partial\psi}{\partial\theta}$が小さいほど最適分割の条件は厳しいことが確認された。

3.2.3 まとめ

得られた知見を以下にまとめる。

1. Brooks-Corey 式を用いた場合、変数 W_{sat}および W_rに関しては最適分割に対する影響は確認されなかった。また $K_{sat}, \psi_{cr}, \lambda_1, \alpha$に関しては、最適分割に関する条件が厳しくなるのは以下に示す場合であった。

K_{sat} :小さい場合
ψ_{cr} :大きい場合
λ_1 :大きい場合
α :大きい場合

2. Van Genuchten 式を用い変曲点が大きく移動する場合について検討した結果、λ_2および a_2に関しては、最適分割に関する条件が厳しくなるのは以下に示す場合であった。

λ_2 :大きい場合
a_2 :小さい場合

3. 固定水頭境界値を変化させた解析の結果、$\frac{\partial \psi}{\partial \theta}$が小さいほど、あるいは rが小さいほど、最適分割の条件は厳しくなることが確認された。

4. 検討した変数およびパラメータ範囲では、不飽和土壌特性の違いによる最適分割幅は最大で約 0.5 ～ 2.0 倍程度変化するのみである。一方平成 7 年度研究で検討を実施したように飽和透水係数を変化させた場合には最大で約 8 ～ 10 倍程度変化しており、これに比べると不飽和土壌特性の影響は極めて小さいと考えられる。

表3.2-1：ベンチマーク・テストに用いるBrooks-Corey式中の変数／パラメータの基本ケース値

	K_{sat} (cm/sec)	ψ_{cr} (cm)	W_{sat}	W_r	λ_1	α
砂粒	3.0×10^{-3}	-43	0.5	0.05	4.1	(4.0)
シルト	7.0×10^{-4}	-43	0.4	0.10	3.0	5.0
粘土	5.0×10^{-4}	-43	0.4	0.10	2.2	6.0

(*) 砂粒におけるパラメータαはK_{sat}より求められる：$\alpha = 0.69 - 1.31 \times \log(K_{sat})$ [7)]

表3.2-2：ベンチマーク・テストに用いるVan Genuchten式中のパラメータの基本ケース値

	λ_2	α_2 (1/cm)
砂粒，シルト，粘土	5.0	-0.1

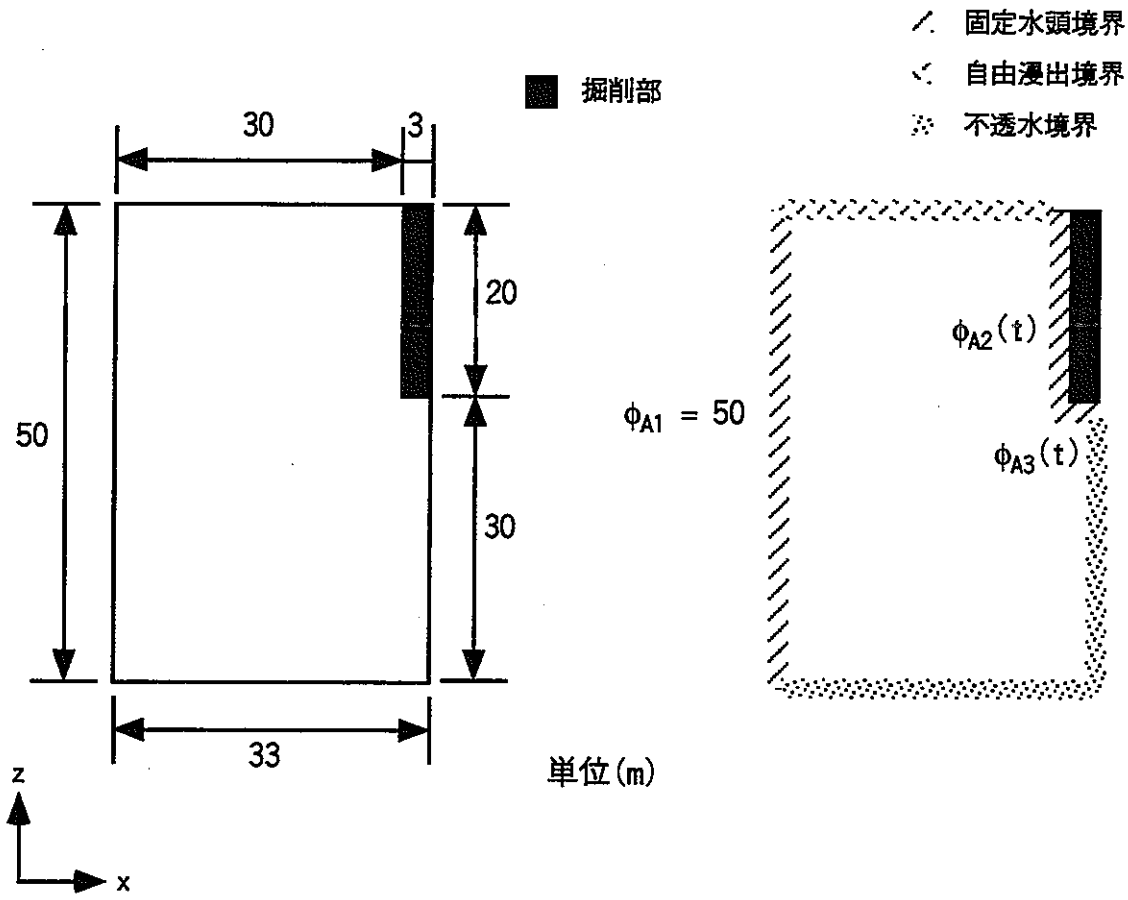


図3.2-1　掘削モデルの対象／境界条件

3.3 ベンチマーク·テスト 断層を含む場合の数値解の収束性

自由表面が断層を横切る場合に収束解を得るために多くの計算時間を要する、あるいは収束解を得ることができないといった不具合が報告されている。ここでは自由表面が断層を横切るモデルを用いたベンチマーク·テストを実施し、解の安定性に対する不飽和特性の影響を調査する。なお不飽和土壌特性にはBrooks-Corey式を用いた。

3.3.1 解析条件

解析モデル、解析にあたって使用した不飽和土壌特性および空間分割／タイムステップについて述べる。

(1) 解析モデル

解析対象および境界条件、初期条件を図3.3-1に示す。

(2) 不飽和土壌特性

平成7年度研究で用いた不飽和土壌特性("TAGSAC"添付のマニュアル例題の$\psi \sim \theta$関係および$r \sim \theta$関係、図3.1-2) に対応するBrooks-Corey式中の変数およびパラメータは:

$$
\begin{array}{lll}
\psi_{cr} & = \text{- } 0.088(\text{m}) & \\
W_r & = 0.0 & \diagup\ \theta_r = 0.0 \\
W_{sat} & = 0.5 & \diagup\ \theta_{sat} = 1.0\ (\text{間隙率 n} = 0.5) \\
\lambda_1 & = 0.120 & \\
\alpha & = 3.09 &
\end{array}
$$

である。

上記の$\psi \sim \theta$関係 (Brooks-Corey式、$\theta_r = 0.0, \theta_{sat} = 1.0, \psi_{cr} = -0.088(m), \lambda_1 = 0.120$) を用い、$r \sim \theta$関係を変化させた場合を検討した:

- $\alpha = 3.09$(一定) として、$\theta_r = 0.0 \sim 0.9$ の範囲で変化させた場合
- $\theta_r = 0.75$(一定) として、$\alpha = 10^{-3} \sim 10^4$ の範囲で変化させた場合

なお変数$W_{sat} = 0.5$ ／$\theta_{sat} = 1.0$(間隙率 n = 0.5) は一定とした。

(3) 空間分割／タイムステップ

$\Delta x = \Delta z = 5(m)$ (水平／鉛直方向 10 分割ずつ) の均等格子および均等タイムステップ $\Delta t = 10^2(sec)$ を用い、$T = 1(day) = 86400(sec)$ 後までの非定常解析を行なった。

3.3.2 解析結果／まとめ

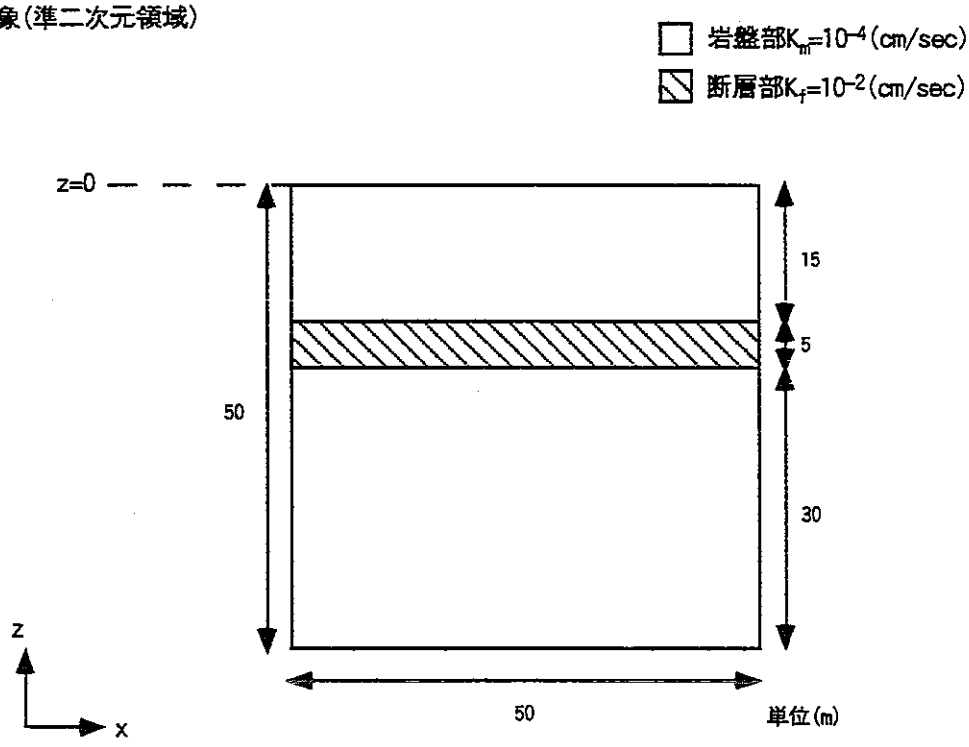
解析の結果得られた、解の収束性に対する不飽和土壌特性 (Brooks-Corey の $r \sim \theta$関係式) の影響を以下にまとめる。計算時間 (CPU TIME) および非線形ループ部／マトリクスソルバー部の反復回数により、収束性を評価した。

1. $\theta_r = 0.0 \sim 0.9$ の範囲でθ_r を大きくするほど解の収束性は低下するが、計算時間あるいは反復回数が最大で約 1.3 倍となる程度であった。

2. $\alpha \leqq 1.0$ とした場合には、1 ステップあたりの非線形反復回数を大きくしても収束解を得ることができなかった。しかしながら文献調査での現実的なパラメータ範囲 $\alpha > 1$(表 3.1-1) においては収束解を得ることが可能であった。

3. 文献調査により得られたθ_rおよびαの範囲 ($0 < \theta_r \leqq 0.7, 2 \leqq \alpha \leqq 9$) では、$\theta_r$を大きくするほどあるいは$\alpha$を小さくするほど解の収束性が低下するが、計算時間あるいは反復回数を最大でそれぞれ約 1.2 倍、約 1.02 倍要する程度であった。

解析対象(準二次元領域)



境界条件

ただし$\phi_1=\phi_2=-10$とした場合の定常状態を初期条件とする

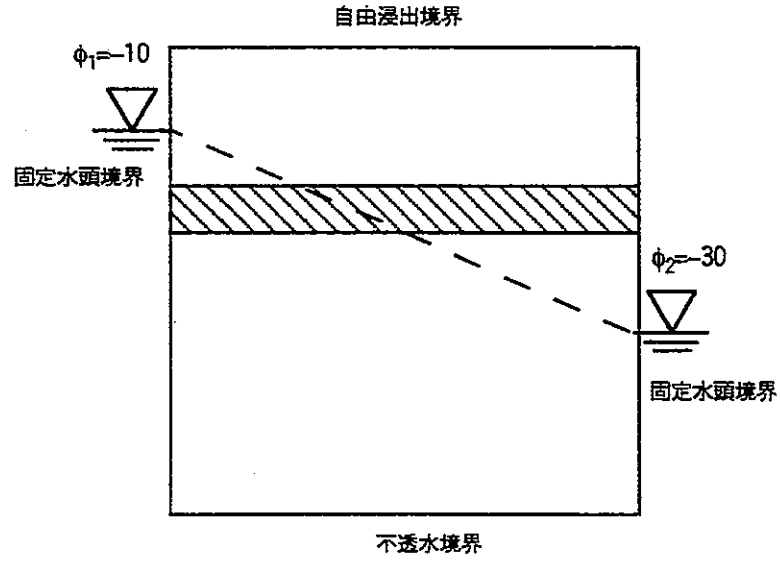


図3.3-1　解析対象および条件

4. "CRYSTAL"コードの内容調査

4.1 CRYSTAL コードの概要

CRYSTAL は、一次元亀裂+マトリクス系における核種移行解析を行なうコードである。一定流速で地下水が流れる亀裂部と、拡散のみによる輸送を考慮したマトリクス部からなる、Dual Porosity モデルを用いている。

亀裂部からマトリクス部への拡散は、亀裂から垂直方向のみが定義され、その他取り扱い可能な現象は下記の通りである。

移流 (亀裂内のみ)
分散 (亀裂内のみ／亀裂方向のみ)
マトリクス内拡散
線形吸着 (亀裂／マトリクス :独立に設定可)
核種の崩壊／生成

また扱えるモデルとしては、ソースターム／亀裂形態それぞれ下記の通りである。

ソースターム	亀裂形態
simple leach	平行平板
band release	球
simple leach(娘核種の生成なし)	円筒
Delta 関数	
時系列を持った入力	

解法としては、実空間内において立てられた支配方程式に Laplace 変換を施し、Laplace 空間内での解を解析的に求める。この Laplace 空間内での解を、逆 Laplace 変換を施すことによって求めている。最終的には、user の設定した評価点 (亀裂内) の濃度／ Flux が時系列として出力される。

4.2 CRYSTAL コード内での解法

今回のベンチマーク対象となっている"Time Series 入力"をソースタームとし、平行平板モデルを採用した場合に、具体的な CRYSTAL コードでの処理のながれを紹介する。

まずはサブルーチン関係がわかるように、CRYSTAL コードの簡単なフローチャートを図 4.2-1に示す。

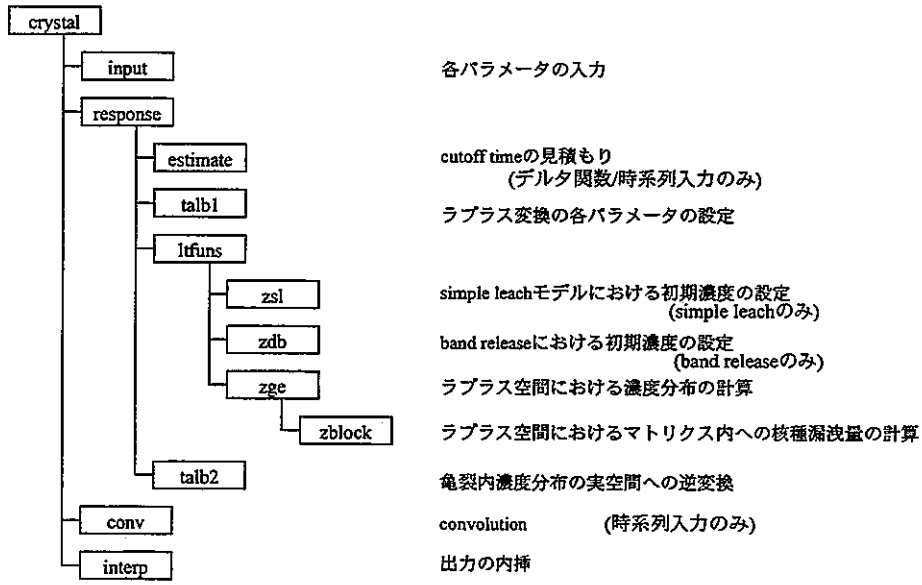


図 4.2-1 : CRYSTAL のフローチャート

処理の流れの概要 — Time Series 入力をソースタームとした場合—

Time Series 入力をソースタームとした場合には、Delta 関数に対する応答関数をたたみこむことによって、解を求めている。下記の図 4.2-2に示されるイメージとなる。

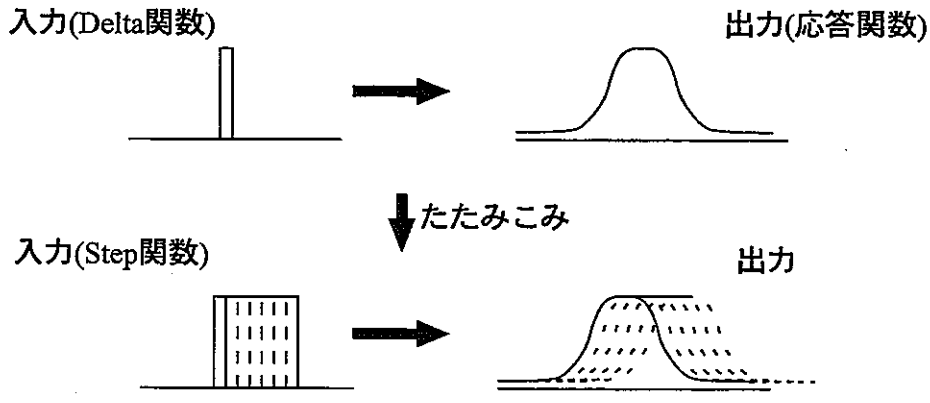


図 4.2-2 : TimeSeries ソースタームに対する解法

従って、まずはデルタ関数に対する応答関数を求め、その後ソースタームの形状に合わせて、たたみこみを行なう。以下、処理の概要を順に subroutine ごとに解説する。

(1) 入力データの読み込み (input)

まずは、解析条件を規定する諸データを読み込む。

(2)Cutoff-Time、その他の見積り (estimate)

estimate では、Cutoff-Time その他の見積りを行なう。これは、**計算の不確定性を除去する**目的で実施するものである。後述するように本アルゴリズムでは、返り値が小さくなると、その精度には多くの不確実さを含む。このため、応答関数値が小さくなると予想される領域の計算は無意味なものとなる。Cutoff-Time は、返り値に不確実さを含むとみなされる領域の計算を実施しないために設定されるもので、以下の基準により決定されている。

1. デルタ関数に対する応答関数は、ガウス分布をとるものとする。
2. まず、このガウス分布のピークを与える時刻、標準偏差を計算する。
3. (ピーク時刻+標準偏差× 2) を上限時刻 (Cutoff-Time) とする。

またこのサブルーチンでは、応答関数曲線が占める面積も計算される。この値は、subroutine response の最後において用いられる。(後述)

(3) 応答関数の計算 (response) 引き続いて、Cutoff-Time 以前の各 (実) 時刻における応答関数値を求める。下記の subroutine talb1, ltfun, talb2 によって時刻 t における応答関数値が求まる。

(3-1)talb1

逆 Laplace 変換における、各パラメータを決定するルーチン。具体的には、式 (??) における $s_k, \frac{\lambda}{N}(\nu + i\beta_k)$ を求める。

(3-2)ltfun

Laplace 空間における濃度 ($\overline{F}(s)$) を計算するルーチン。まず、入力 Flux を求めた後 (Delta 関数時には 1.0 が代入される)、subroutine zge において $\overline{F}(s)$ が計算される。その際 subroutine zblock において、マトリクス部の濃度が、亀裂部の濃度で示される。(式??)

(3-3) talb2

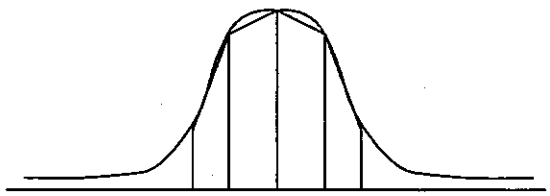
実際に、Talbot法による逆変換を実行するルーチン。subroutine talb1, ltfun で求められた値を元に、式 (??) に基づき、$F(t)$ を求める。

この際以下にあげる判定基準に基づき、解の精度を評価している。

Talb2 における判定 1 (解の値の有用性) 応答関数値が一定値 1.0×10^{-20}以下であれば、解の値そのものを無意味なものとし、精度の評価は下さない。

Talb2 における判定 2 (解の精度の検討) *Talbot* 法の積分点数を半分にした結果と比較し、両者の解の差が一定割合 *(解の 1/100)* 以上であれば、*Warning Message* を出す。

以上のルーチンにより、各時刻 t における応答関数値 $F(t)$ が求まる。全ての $F(t)$ が求まった後、subroutine response の最後において、各 $F(t)$ の補正を行なっている。これは、一種の質量保存則を満足させるための補正と同様のものであり、離散的に求められた $F(t)$ が占める面積 (台形則で近似 :図 4.2-3参照) が、応答関数曲線が占める面積と等しくなるように補正を加えるものである。



$$\text{scale}=\frac{\text{(曲線が占める面積)}}{\text{(台形の面積の総和)}}$$

図 4.2-3 : scale による補正

(4)conv

以上で求まった、応答関数値をソースタームの形状に応じてたたみこむルーチン。

(5))interp

以上で求まった F(t) を user が要求する時刻の出力に内挿するルーチン。線形補間を用いている。

また、出力最大値に対して一定割合 (1.0×10^{-12}) 以下の出力は無意味なものとして、0.0 におき直している。

5. "CRYSTAL"適用限界に関するベンチマーク

5章では、CRYSTAL コードの適用限界把握のために実施したベンチマークの結果を示す。4 章で示したように CRYSTAL コードは、Laplace 変換に基づく理論解を用いているため、この段階で誤差が生じる可能性は極めて低い。しかし、最終的な解を得る段階で実空間への逆 Laplace 変換が行なわれており、この変換に数値的な離散化手法 (Talbot 法) を用いている。このため誤差が生じ、正しく解が得られる解析条件には限界が存在する。本節で実施したベンチマークはこの CRYSTAL の適用限界／適用可能範囲を、解析条件を決定するパラメータの範囲として把握する目的で実施されたものである。

ベンチマークは以下の手順に従い実施した。

1. CRYSTAL コードの修正

CRYSTAL コードの使用に当たっては、従前より多くの不具合が報告されていた。その一部に、特定のパラメータの組合せ時に解が得られないといったコードの不備と思われる不具合が含まれているため、このようなケースを除去する目的で、コードの修正を実施した。

2. 代表的パラメータの組合せによるベンチマーク

まず、どのような解析条件時に計算の不具合が発生するかの概要を把握する目的で、パラメータの代表値を組み合わせた体系的なベンチマークを実施した。

3. scale 値に基づくベンチマーク (適用限界の把握)

次に体系的なベンチマークの結果を元に、適用限界を正確に把握するため、より詳細なベンチマークを実施する。この際に解析精度を評価する数値的指標を導入し、その指標値が一定範囲内におさまる解析条件 (パラメータ値の範囲) を適用限界として示す。

5.1 CRYSTAL コードの修正

体系的なベンチマークに先立って、従来の報告より CRYSTAL コードで解が正しく求まっていないと思われる例が多数認められていたため、不具合の生じる例を元に修正を加えた。

5.1.1 プログラム内の計算精度の統一

まず、オリジナルのプログラム内では、倍精度と単精度の変数／関数が混在していたため、倍精度表現に統一した。

5.1.2 Talbot 法パラメータの前タイムステップ値利用の中止

オリジナルのプログラム内では、`subroutine response` において、計算時間短縮のため、"ある条件を満足する間"は前タイムステップに用いた Talbot 法に関するパラメータを用いるようになっている。しかし、この判定基準が"ある変数 (`dreal(zexp)`) が 100.0 を超えなければ"という物理的根拠に乏しいものであり、この判定基準を通るか否かで解が著しく異なるケースも認められている。

このためタイムステップごとに Talbot 法のパラメータを計算するように改良した。その結果、不具合が生じなくなった。

5.1.3 計算時刻の見直し

オリジナルのプログラム内では、応答関数の最小計算時刻が 1.0 年となっている。しかし、亀裂性媒体を模擬した流速が速い場合／もしくは評価地点までの距離が短い場合には 1.0 年よりも短い時刻における計算が必要である。

そこで、計算開始時刻を流速／評価地点までの距離に応じて決定するように修正を加えた。具体的には、

$$min\left(\frac{Length * Retard}{Vel.}, 1.0\right) \tag{5.1}$$

を計算開始最小時刻に用いる。

上記式中左項は、分散がないとした場合に溶質が評価地点までの移動に要する時間である。

この修正により、流速が速い場合 (その他次節以降の条件を満たすことが必要) の解析が正しく実施されるようになった。

5.2 代表的パラメータの組合せによるベンチマーク

どのような解析条件時に計算の不具合が発生するかの概要を把握する目的で、パラメータの代表値を組み合わせた体系的なベンチマークを実施した。このベンチマークは以下の手順をとる。

1. 解析条件を決定するパラメータを抽出、その値のとり得る範囲を検討
2. 各パラメータについて、とり得る範囲から代表値を設定
3. 代表値を組み合わせることによりベンチマークケースを作成
4. 各ベンチマークケースについて計算結果を評価、適用限界の概要を把握

5.2.1 ベンチマークケース

ベンチマークケースは、多孔質媒体を模擬したマトリクス拡散を考慮しない 81 ケースと亀裂性媒体を模擬したマトリクス拡散を考慮した 81 ケースとからなる。

多孔質媒体を模擬したケース (マトリクス拡散なし)

ベンチマークに用いたパラメータ中で変化させた値及びケース名を下表に示す。

パラメータ	(1)		(2)		(3)	
半減期 (yr)	H1	1.0×10^{-1}	H2	1.0×10^{5}	H3	1.0×10^{10}
評価距離 (m)	L1	1.0×10^{1}	L2	1.0×10^{2}	L3	1.0×10^{3}
亀裂内流速 (m/yr)	V1	1.0×10^{-5}	V2	1.0×10^{-1}	V3	1.0×10^{2}
亀裂遅延係数 (–)	R1	1.0×10^{0}	R2	1.0×10^{3}	R3	1.0×10^{5}

亀裂性媒体を模擬したケース (マトリクス拡散あり)

ベンチマークに用いたパラメータ中で変化させた値及びケース名を下表に示す。

パラメータ	(1)		(2)		(3)	
半減期 (yr)	H1	1.0×10^{-1}	H2	1.0×10^{5}	H3	1.0×10^{10}
評価距離 (m)	L1	1.0×10^{1}	L2	1.0×10^{2}	L3	1.0×10^{3}
亀裂内流速 (m/yr)	V1	1.0×10^{0}	V2	1.0×10^{3}	V3	1.0×10^{6}
マトリクス深さ (m)	M1	1.0×10^{-2}	M2	1.0×10^{-1}	M3	1.0×10^{0}
マトリクス拡散係数 (m^2/yr)		3.2×10^{-1}		3.2×10^{-4}		3.2×10^{-7}
マトリクス遅延係数 (–)		1.0×10^{1}		1.0×10^{4}		1.0×10^{7}

5.2.2 ベンチマーク結果

以上の162ケースに対して実施したベンチマークの結果を以下に示す。結果に関しては、値自体についての精度の評価ができないため、解析が正しく終了したか否かについての判断を下している。○は正常に解析が行なわれたことを、その他数字は、表下に示された不具合が生じたことを示している。

表 5.2-1：多孔質媒体を模擬したケースのベンチマーク結果

ケース名	結　果	ケース名	結　果	ケース名	結　果
H1L1V1R1	1,4	H2L1V1R1	○	H3L1V1R1	○
H1L1V1R2	5	H2L1V1R2	○	H3L1V1R2	○
H1L1V1R3	5	H2L1V1R3	4	H3L1V1R3	○
H1L1V2R1	1,4	H2L1V2R1	1	H3L1V2R1	1
H1L1V2R2	5	H2L1V2R2	○	H3L1V2R2	○
H1L1V2R3	5	H2L1V2R3	○	H3L1V2R3	○
H1L1V3R1	5	H2L1V3R1	5	H3L1V3R1	5
H1L1V3R2	1	H2L1V3R2	1,6	H3L1V3R2	1
H1L1V3R3	1,2,4	H2L1V3R3	○	H3L1V3R3	○
H1L2V1R1	5	H2L2V1R1	○	H3L2V1R1	○
H1L2V1R2	5	H2L2V1R2	4	H3L2V1R2	○
H1L2V1R3	5	H2L2V1R3	5	H3L2V1R3	○
H1L2V2R1	2,3,4	H2L2V2R1	6	H3L2V2R1	1,6
H1L2V2R2	5	H2L2V2R2	1,6	H3L2V2R2	6
H1L2V2R3	5	H2L2V2R3	3,4	H3L2V2R3	6
H1L2V3R1	1	H2L2V3R1	1,6	H3L2V3R1	1
H1L2V3R2	2,3,4	H2L2V3R2	1	H3L2V3R2	1
H1L2V3R3	5	H2L2V3R3	○	H3L2V3R3	○
H1L3V1R1	5	H2L3V1R1	○	H3L3V1R1	○
H1L3V1R2	5	H2L3V1R2	5	H3L3V1R2	○
H1L3V1R3	5	H2L3V1R3	5	H3L3V1R3	5
H1L3V2R1	2,3,4	H2L3V2R1	○	H3L3V2R1	5
H1L3V2R2	5	H2L3V2R2	○	H3L3V2R2	○
H1L3V2R3	5	H2L3V2R3	4	H3L3V2R3	○
H1L3V3R1	1	H2L3V3R1	1,6	H3L3V3R1	1
H1L3V3R2	2,3,4	H2L3V3R2	○	H3L3V3R2	○
H1L3V3R3	5	H2L3V3R3	○	H3L3V3R3	○

表 5.2-2 : 亀裂性媒体を模擬したケースのベンチマーク結果

ケース名	結　果	ケース名	結　果	ケース名	結　果
H1L1V1M1	1	H2L1V1M1	1,6	H3L1V1M1	6
H1L1V1M2	2,3,4	H2L1V1M2	6	H3L1V1M2	6
H1L1V1M3	2,3,4	H2L1V1M3	○	H3L1V1M3	○
H1L1V2M1	4,6	H2L1V2M1	4,6	H3L1V2M1	4,6
H1L1V2M2	4,6	H2L1V2M2	6	H3L1V2M2	6
H1L1V2M3	4,6	H2L1V2M3	6	H3L1V2M3	○
H1L1V3M1	4,6	H2L1V3M1	4,6	H3L1V3M1	4,6
H1L1V3M2	4,6	H2L1V3M2	4,6	H3L1V3M2	4,6
H1L1V3M3	4,6	H2L1V3M3	4,6	H3L1V3M3	○
H1L2V1M1	2,3,4	H2L2V1M1	1,6	H3L2V1M1	1,6
H1L2V1M2	2,3	H2L2V1M2	○	H3L2V1M2	○
H1L2V1M3	2,3	H2L2V1M3	○	H3L2V1M3	○
H1L2V2M1	4,6	H2L2V2M1	1,6	H3L2V2M1	1,6
H1L2V2M2	1	H2L2V2M2	1,6	H3L2V2M2	6
H1L2V2M3	1	H2L2V2M3	6	H3L2V2M3	○
H1L2V3M1	4,6	H2L2V3M1	4,6	H3L2V3M1	4,6
H1L2V3M2	4,6	H2L2V3M2	6	H3L2V3M2	6
H1L2V3M3	4,6	H2L2V3M3	6	H3L2V3M3	○
H1L3V1M1	2,3,4	H2L3V1M1	6	H3L3V1M1	6
H1L3V1M2	5	H2L3V1M2	○	H3L3V1M2	○
H1L3V1M3	5	H2L3V1M3	○	H3L3V1M3	○
H1L3V2M1	1	H2L3V2M1	1,6	H3L3V2M1	1,6
H1L3V2M2	1	H2L3V2M2	6	H3L3V2M2	6
H1L3V2M3	1	H2L3V2M3	6	H3L3V2M3	○
H1L3V3M1	4,6	H2L3V3M1	4,6	H3L3V3M1	4,6
H1L3V3M2	4,6	H2L3V3M2	6	H3L3V3M2	6
H1L3V3M3	4,6	H2L3V3M3	6	H3L3V3M3	○

表中数字は

(1) 一定時刻 (1.0E5) 以降、flux の値が突然 0 になる。

(2) flux の値がごく限られた短い時間のみにしか認められない。

(3) flux の値が、極めて小さい。(-100 乗の order)

(4) 解の値がある時刻において 0.0 になる。(解の振動)

(5) 解の値が全て 0

(6) Log ファイルに"Warning possibly inaccurate talbot result" の表示が存在する。

を表している。

5.2.3 解が精度良く求められる条件について

本節では以上のコード概要調査／ベンチマーク結果に基づき、CRYSTAL コードを用いて解析を実施する場合に、解が精度良く求まる条件について考察する。

CRYSTAL コードを用い、時系列入力をソースタームとした場合は Delta 関数に対する応答関数をたたみこむことにより解析される。従って、時系列入力をソースタームとした場合に解が精度良く求まるためには、応答関数が精度良く求まることが必要となる。

応答関数が精度良く求まる条件としては、前節のベンチマーク結果より、

- 応答関数のピークにある程度の高さがあり、Talbot 法による精度が保証されない領域 (約 1.0×10^{20}以下の占める面積) が少ないこと

この応答関数のピークおよび、その形状は解析条件により決定される。例えばピークの高さは、

- 分散係数に比例し、遅延係数／評価地点までの距離に反比例すること

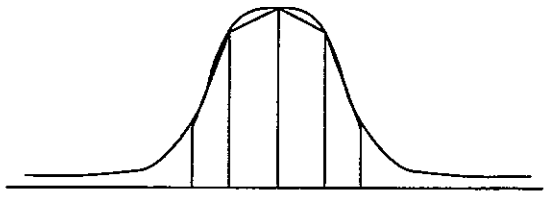
が認められている。

5.3 scale 値に基づくベンチマーク

5.3.1 scale 値について

前節では、CRYSTAL コードのベンチマークを定性的に実施した。ベンチマーク結果に対して不具合発生の有無を、解の値、振動などに注目し検討した。しかし、これらは数値的判断基準に基づいた検討でないため、適用限界を把握することは不可能である。

このため本研究では、プログラムコード内を検証した結果、変数"scale"の値を数値的指標として導入し、適応限界把握のベンチマークを実施した。"scale"とは、応答関数曲線が占める面積と、離散的に求められた各 $F(t)$ を用いて台形の面積の総和として予想される応答関数曲線が占める面積の比率であり、精度良く解析されていればこの値は 1.0 に近付く。



$$\text{scale}=\frac{\text{(曲線が占める面積)}}{\text{(台形の面積の総和)}}$$

5.2 節で実施した体系的ベンチマークの結果について scale 値を調べてみると、以下のような特徴が見られる。

- 解析が正しく行なわれたと思われる例 (○のついたケース) では scale 値はほぼ 1.0 に近い。
- 解が全て 0.0 であるケース (5)、解が振動しているケース (4) では scale 値は計算できない、あるいは 1.0 から大きくかけ離れた値をとっている。
- Flux が突然 0.0 になるケース (1)、Warning が出るケース (6) では、基本的には scale 値は 1.0 に近い値をとるが、稀に (H1L1V2R1 など)1.0 からかけ離れた値をとるケースも存在する。

これらの特徴から、scale を解析が正常に実施されているかの指標にすることは妥当であると考えられる。

すなわち、解析実施時に scale 値を調べ、その値が 1.0 に近い場合には解析が精度良く行なわれたと判断することが可能である。

5.3.2 ベンチマーク手法

前節の結果を踏まえ、scale 値を数値的な指標とし、CRYSTAL の適用限界把握ベンチマークを実施した。すなわち、scale 値が一定の範囲 (本研究では $0.995 < scale < 1.005$ を正しく解析ができている限界とした) に収まる限界をベンチマークにより明らかにした。

5.3.3 ベンチマーク結果

5.3.2 節に基づいて実施されたベンチマークから得られる、安定な計算を実現する条件に関する知見は 3 つの観点からまとめることができる。

ペクレ数に関する条件

ペクレ数が小さいこと

遅延係数に関する条件

1. (流速) × (評価距離)$^{\alpha}$に対し、(遅延係数) が大きいこと
2. (分散係数) に対し、(遅延係数) が大きいこと

半減期に関する条件

(半減期) と Flux の出力期待時刻を比べ、(半減期) が短かすぎないこと

以下に、これらの知見を詳しく解説する。また、ペクレ数に関する条件を調査中に新たに発見されたペクレ数が小さい場合の不具合について対処法と合わせ、説明する。

(1) ペクレ数に関する条件

ペクレ数に関する条件としては、ペクレ数が小さいことがあげられる。

ペクレ数は、$\frac{(\text{流速})\times(\text{評価距離})}{(\text{分散係数})}$で計算される量である。従って、(流速) × (評価距離) に対して、(分散係数) が一定割合以上の値をとることが必要となる。(流速) × (評価距離) に対する (分散係数) の下限値について実施したベンチマークの結果を以下に示す。

(1-a) 半減期を固定した場合のベンチマーク

ベンチマークは、流速と評価地点までの距離を変化させ、各ケースにおける分散係数の下限値を調べることにより実施した。分散係数の下限値を図 5.3-1に示す。

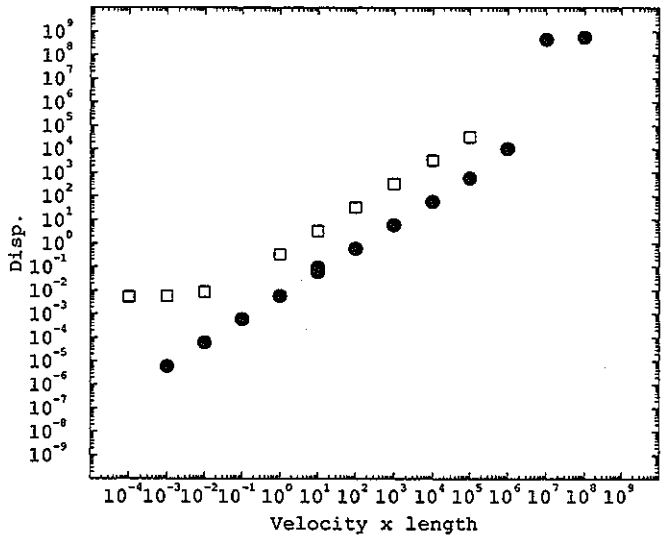


図 5.3-1 : (流速)×(評価距離) に対する (分散係数) の下限 (半減期 $10^9 yr$)
●は scale 値に基づいたベンチマークで得られた下限
□は 5.2 節で実施したベンチマークで得られた結果

□で示されたベンチマークケースは全てこの下限を上回っており、この条件を満たしている。これは、5.2 節で得られたベンチマーク結果と一致する。

(1-b) 半減期を変化させた場合のベンチマーク

さらに半減期を変化させた結果を以下に示す。上記ベンチマーク 18 ケースを半減期を $10^1 yr, 10^5 yr$ と変化させた場合にも実施する。結果を図 5.3-2に示す。

傾向としては半減期が短くなるとこの傾きが高くなる、すなわちペクレの上限が小さくなる傾向にある。

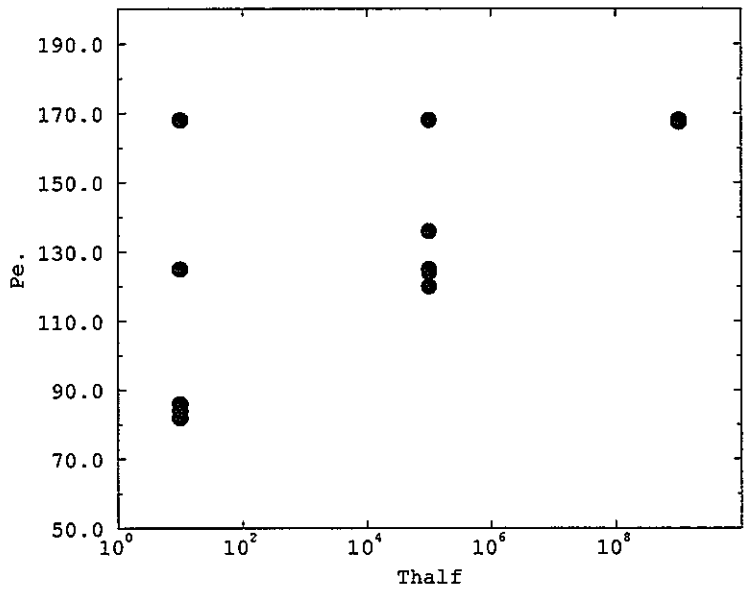


図 5.3-2 : 半減期とペクレ数の上限との関係 :図中●がベンチマークで得られた上限値

しかし、半減期が 10 年程度に短くなった場合でもペクレ数の上限値は、80 ～ 170 程度であり、PNC 殿から提示されている多孔質媒体に関する分散係数を導出する式、

$$D = \frac{L \times V}{10} + \frac{1.58 \times 10^{-2}}{3} \tag{5.2}$$

に基づいて計算されるペクレ数 (10 程度) と比べると十倍以上大きな値となっているため影響はない。

これらの結果より、半減期が短い場合でも

$$(\text{ペクレ数}) = \frac{V \times L}{D} < 80 \tag{5.3}$$

を保つような範囲では、解析が正常に実施されることが確認できる。(L:評価距離、V:亀裂内流速、D:分散係数)

(2) 遅延係数に関する条件

遅延係数に関する条件は2つに分けることができる。すなわち、

1. (流速) × (評価距離)$^{\alpha}$に対し、(遅延係数) が大きいこと

2. (分散係数) に対し、(遅延係数) が大きいこと

である。遅延係数に関する本条件は半減期による影響はほとんど受けない。

(2-a) 遅延係数に関する条件1

遅延係数に関する1つ目の条件は、(流速) × (評価距離)$^{\alpha}$に対し (遅延係数) が大きいことである。(流速) × (評価距離) に対する (遅延係数) の下限値に関し実施したベンチマーク結果を以下に示す。

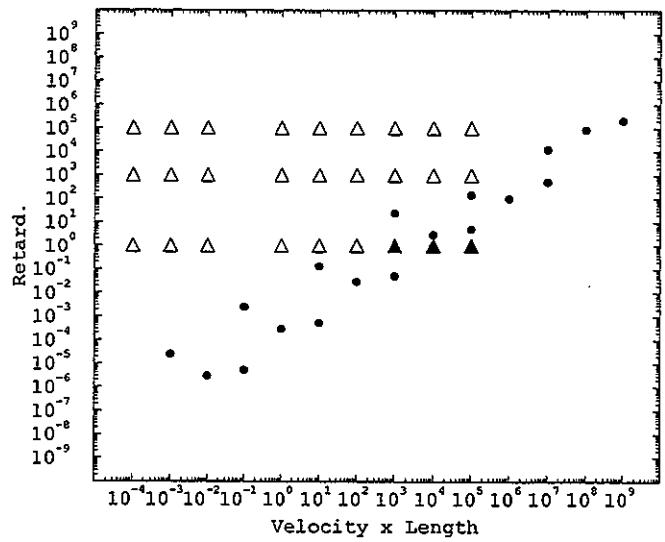


図 5.3-3 : (流速)×(評価距離) に対する (遅延係数) の下限 (半減期 $10^9 yr$)
●はベンチマークにより得られた遅延係数の下限
△は体系的なベンチマークで正しく解析ができたケース
▲は体系的なベンチマークで正しく解析ができなかったケース

図中●がベンチマークにより得られた遅延係数の下限値である。また、図中△は5.2節で得られたベンチマーク結果中正しく解析が実施されたケースであり、▲で示された3ケースは同ベンチマークにおいて解析が正しく実施されなかったケースである。

これらの3ケースは●で得られた限界点よりも遅延係数が小さいことが確認でき、この指標の正しさが裏付けられている。

(2-b) 遅延係数に関する条件2

遅延係数に関する2つ目の条件は、(分散係数) に対し (遅延係数) が大きいことである。(流速)、(評価距離) を固定し、(分散係数) に対する (遅延係数) の下限値に関し実施したベンチマーク結果を以下に示す。

得られた曲線よりも上の領域のパラメータ組合せであれば解析が正しく実施されることを示している。

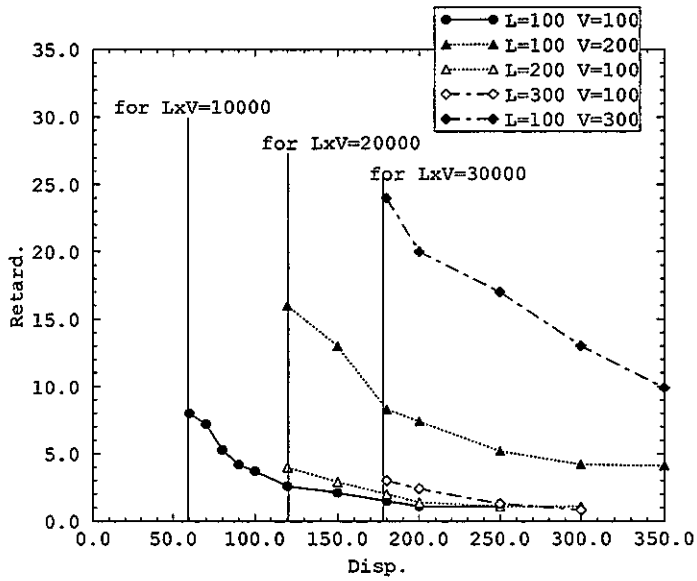


図 5.3-4 : (分散係数) に対する (遅延係数) の下限

図より、分散係数が大きくなると遅延係数の下限が小さくなることが確認できる。また、図中の縦線は、ペクレ数に関する条件により得られる限界であり、この線の左側、すなわち分散係数が小さい領域では、どんなに遅延係数を大きくしてもペクレ数に関する条件を満足しないため、正しい解析は行なわれない。

これら遅延係数に関する2条件を合わせ、また安全性を考慮すると、

$$R > \frac{L \times V}{1000.} \tag{5.4}$$

程度を満足すればよいことになる。(R:遅延係数、L:評価距離、V:亀裂内流速)

(3) 半減期に関する条件

半減期に関する条件は、(半減期) と Flux の出力期待時刻を比べ、(半減期) が短かすぎないことである。この条件は、(評価距離) × (遅延係数) ／ (流速) で簡易的に与えられる Flux の出力予想時刻が、(半減期) と比べて遅すぎないという条件である。

$$\frac{L \times R}{V} < 10 \sim 100H \tag{5.5}$$

の条件を満足する必要がある。実際の使用上での不具合は大部分この条件によるものである。

限界点が明確に得られていないため、5.2 節の体系的なベンチマーク 81 ケースの結果を、横軸に (出力期待時刻)、縦軸に (半減期) をとり、プロットしたものを図 5.3.3に示す。図中▲は解析が正常に実施されなかったケース、△は正常に解析されたケースを示す。また、●は遅延係数の条件により解析が正常に実施されなかったケースを示す。

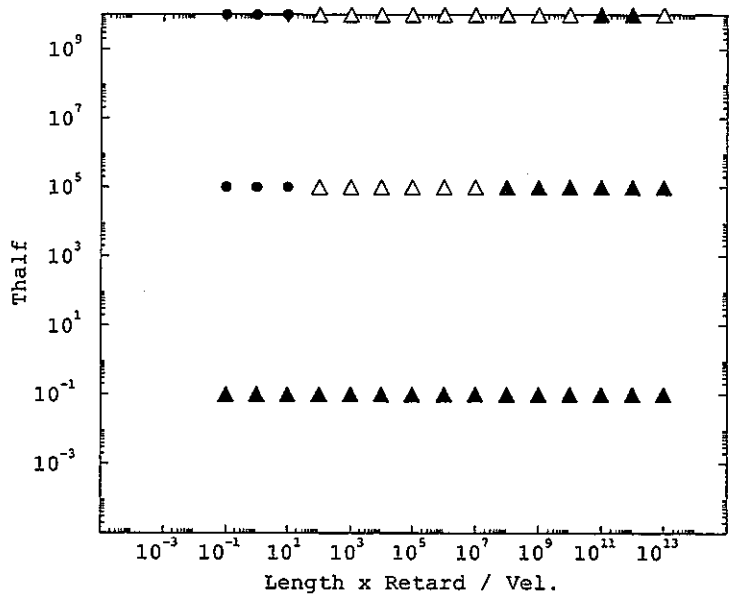


図 5.3-5 : 体系的ベンチマーク結果を (出力期待時刻)–(半減期) に関しまとめたなおした結果
△は体系的ベンチマークで正しく解析ができたケース
▲は体系的ベンチマークで正しく解析ができなかったケース
●は遅延係数の条件により解析できなかったケース

指標で示された通り、出力期待時刻に対して半減期が大きいケース (グラフ内で左上付近で表される点) では解析が正常にできていることが確認できる。

6. "CRYSTAL"一次元差分コードとの比較

一次元移流拡散プログラムを作成し、"CRYSTAL"との比較を行なう。

6.1 解析モデル／条件

有限差分法による一次元移流拡散プログラムを作成した。なおマトリクス部における拡散を考慮し、核種の崩壊／生成、吸着／沈澱に関しては考慮しないものとした。

6.1.1 解析対象

亀裂部は一次元、マトリクス部は二次元領域とする (図 6.1-1)。またプログラムの作成にあたっては平板モデルおよび円筒モデルを取り扱い可能とした。

6.1.2 離散化スキーム

亀裂部

移流項 $u\frac{\partial C_f}{\partial x}$ の離散化にはハイブリッド法、時間積分にはオイラー後退差分法を用いた。ハイブリッド法は、$0 \leqq P_e \leqq 2$ の範囲では中央差分法と同じ離散化手法を用いたものである。

マトリクス部

離散化には二次の中央差分法、時間積分にはオイラー後退差分法を用いた。

6.1.3 自動時間増分機能

"TAGSAC"コード改良において追加した自動時間増分機能と同様に、1 ステップあたりに許容される従属変数変化量の最大値をユーザーが定義する方式を用いた。自動時間増分機能の詳細については 2.1 を参照のこと。

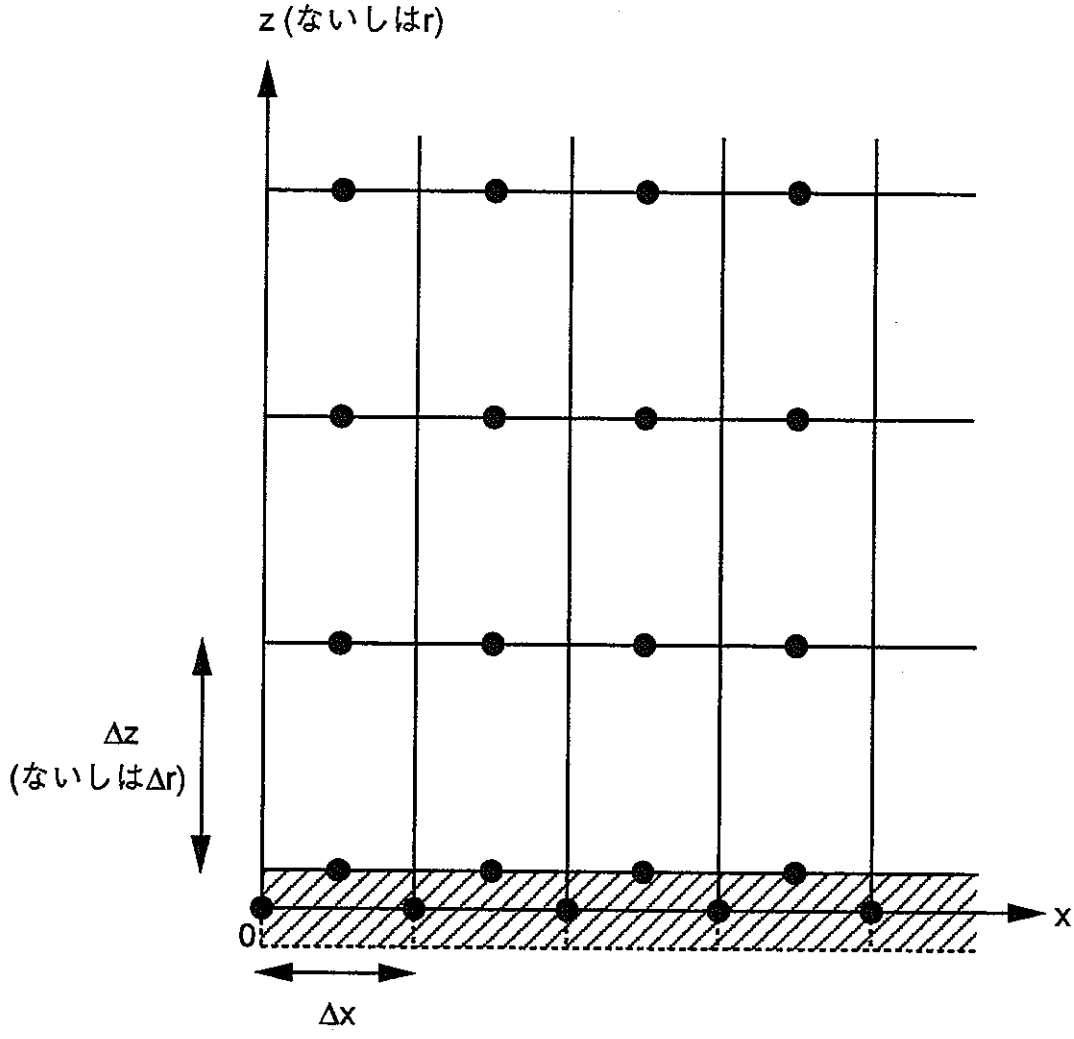


図6.1-1　解析対象：亀裂部およびマトリクス部

●は節点，▨は亀裂部，□はマトリクス部を表す

6.2 CRYSTAL とのベンチマーク

本節では、前節までに従い作成された一次元差分コードと"CRYSTAL" コードとで同一条件の問題を解析することにより、CRYSTAL で得られた解の信憑性についてベンチマークを実施する。

6.2.1 ベンチマークケース

ベンチマークケースは多孔媒体を模擬したケースで、評価距離、遅延係数、半減期を一定とし地下水流速、分散係数を変化させた 12 ケースからなっている。

まず、各ケースで共通なパラメータを以下に示す。

評価距離	$10m$
遅延係数	1.0
半減期	$10^{10}yr$
ソースターム	$t < 1.0 \times 10^4 yr : 1.00$
	$t \leqq \times 10^4 yr : 0.00$

次に変化させたパラメータとケース名を以下に示す。流速に対して付けられた名前 (V*) と分散係数に対して付けられた名前 (D*) とを組み合わせて (V*D*) のケース名で呼ぶこととする。

表 6.2-1 : 一次元差分コードと CRYSTAL とのベンチマークパラメーター覧

流速 (m/yr)	10^{-5} V1	10^{-3} V2	10^{-1} V3	10^{3} V4
分散係数 (m^2/yr)	$org/3.$ D1	org D2	$org * 3.$ D3	

ここで org とは、PNC 殿から提示されている分散係数を導出する式、

$$D = \frac{L}{10} \times V + 1.58e^{-3}/0.3 \tag{6.1}$$

によって導出された値を示す。

6.2.2 ベンチマーク結果

ベンチマーク結果を以下に示す。結果を表 6.2-2に、また V3D2 の結果を図 6.2-1に示す。ここで、誤差とは

$$(\text{誤差}) = \frac{\sqrt{\sum(x_1 - x_2)}}{N \times peak} \tag{6.2}$$

で表される。

表 6.2-2 : 一次元差分コードとのベンチマーク結果

case	peak(1D)	peak(CRY)	scale(CRY)	誤差
V1D1	0.1564	0.1578	1.004	0.0297
V1D2	0.3641	0.3571	1.003	0.0382
V1D3	0.6626	0.5769	1.001	0.0536
V2D1	0.6923	0.7031	1.001	0.0182
V2D2	0.7175	0.7036	1.003	0.0178
V2D3	0.8909	0.7792	1.005	0.0481
V3D1	1.0000	1.0000	0.999	0.0158
V3D2	1.0000	1.0000	0.999	0.0142
V3D3	0.9969	0.9920	1.004	0.0742
V4D1	0.1978	2.2×10^{-13}	7.0×10^{7}	1.073
V4D2	5.7×10^{-7}	2.3×10^{-13}	1.3×10^{7}	0.883
V4D3	7.3×10^{-11}	2.1×10^{-13}	5.3×10^{7}	1.101

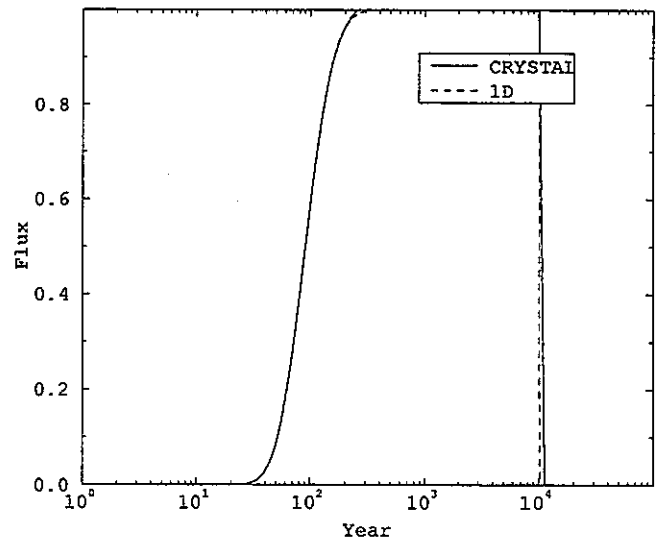


図 6.2-1 : 一次元差分コードと CRYSTAL の結果比較 (ケース V3D2)

これらの結果より、流速の遅い範囲 (V1～V3) では一次元差分コードと CRYSTAL の解のよい一致が認められる。グラフからも出力フラックスの立ち上がりの時刻などもよく一致していることが確認できる。これらのケースでは scale 値も 1.0 に近い値をとっている。

また、流速が速く scale 値が乖離しているようなケースでは (V4) 一次元差分コードの結果との乖離も非常に大きい。

これらの結果から、scale 値を指標とすることの妥当性と、scale 値が 1.0 付近では CRYSTAL の解も妥当であることが示された。

7. 本年度研究のまとめ

7.1 "TAGSAC"関連研究

7.1.1 コード改良

- 従来の"TAGSAC"では利用者がタイムステップを入力する必要があったが本研究では自動的にタイムステップを決定する機能を追加し、固定タイムステップを用いた場合と比較してより高精度な解 (あるいは許容範囲内の精度を有する解) をより少ない計算時間で得ることを可能とした。

- 従来の"TAGSAC"は六面体要素しか取り扱うことができなかったが、三角柱要素を導入することにより、より複雑な解析対象のモデル化を可能とした。

- 従来の"TAGSAC"においては三次元の不均質透水係数場を材料ごとに読み込むことが可能であったが、これを要素ごとに読み込むことを可能とした。

7.1.2 ベンチマーク

Brooks-Corey 式 ($\psi \sim \theta$関係および$r \sim \theta$関係)、あるいは Van Genuchten 式 ($\psi \sim \theta$関係) で表される不飽和土壌特性を用いて、最適分割や数値解の収束性に対する不飽和土壌特性の影響を検討した。

最適分割に対する影響としては、平成 7 年度研究で検討を実施したように飽和透水係数を変化させた場合に最適分割が最大で約 8 ~ 10 倍程度変化するのに比べ、Brooks-Corey 式あるいは Van Genuchten 式中の変数／パラメータの影響は極めて小さく、最適分割幅が最大で約 2.0 倍程度変化するのみであった。

また、文献調査で得られた Brooks-Corey 式中の変数あるいはパラメータ範囲では、θ_rを大きくするほどあるいはαを小さくするほど解の収束性は低下するが、計算時間あるいは反復回数を最大でそれぞれ約 1.2 倍、約 1.02 倍要する程度であった。

7.2 "CRYSTAL"関連研究

本研究では、亀裂+マトリクス系の一次元核種移行解析コードである "CRYSTAL" について

- コードの内容把握
- 細かい不具合の修正
- 実用的なパラメータの組合せによる体系的なベンチマークを実施
- 解析の確からしさを数値的に示す指標"scale"の提案
  - "scale"導入の妥当性
  - CRYSTAL 適用限界把握への応用

を実施した。

CRYSTAL は、Laplace 空間上で解を解析的に求め、その結果を実空間に逆変換することにより解を求めるコードであるため、本来ならば誤差や解析の精度／安定性は問題にならないはずである。

しかし、逆 Laplace 変換を実行する際に、"Talbot 法" と呼ばれる離散化の一種を用いているため、この段階で誤差や解の不安定性を生じる可能性が存在する。ただし、"Talbot 法" に関するパラメータは、コード内に完全に埋め込まれており、外部から user が手を加えられるようにはなっていないため、解析が正しく実行されたか否かを判断することは困難であった。

本研究で提案した指標 scale を用いれば、解析時に scale を調べることで解析が精度良く行なわれたかを判断することが容易に可能となり、非常に有用である。

scale とは、Delat 関数を入力とした時に得られる応答関数について、どれだけ正確に解析されたかを示すものである。CRYSTAL コードでは、精度良く解が得られる応答関数値に下限が存在する。(1.0×10^{-20}程度) 従って、この領域が無視できるようなケース／すなわち応答関数にある程度の大きさのピークが存在するケースでは精度良く解が求められる。しかし、ピークの値が小さいケースでは、この誤差を生じる領域の影響が大きくなり、解全体の精度に影響を及ぼす。

この判定をする指標がscaleであり、1.0に近いほど精度よく解が得られていることになる。また、この応答関数の形状は解析条件により決定され、ピークの高さは分散係数に比例し、遅延係数／評価地点への距離に反比例する。

scale値を指標としたベンチマークでは、簡単な3条件によりCRYSTALで解が精度良く求まるパラメータの範囲を示した。

これらは、

- (流速) × (評価距離) に対し、(分散係数) が大きいこと
- (流速) × (評価距離)$^{\alpha}$ に対し、(遅延係数) が大きいこと
  (分散係数) に対し、(遅延係数) が大きいこと
- (評価距離) × (遅延係数) / (流速) に対し、(半減期) が一定割合以上であること

として示される。これらの指標は、種々のパラメータ値の組合せによる体系的なベンチマークでもその有用性が示された。

最後に、CRYSTALと同等の機能を有する一次元差分コードを作成し、CRYSTALの解自体の信憑性についてのベンチマークを実施した。この結果より、scaleを導入することの妥当性及び、CRYSTALの解の正当性が示された。

参考文献

[1] 日野・太田・砂田・渡辺共著, 洪水の数値予報 (その第一歩), 森北出版 (1990)

[2] Watson.K.K., "Numerical and experimental study of column drainage" , ASCE, HY (2), pp.1-15 (1964)

[3] Mualem.Y., "Hydraulic conductivity of unsaturated porous media : generalize macroscopic approach", Water. Reso. Res., Vol.114 (2), pp.325-334 (1978)

[4] Brooks.R.H. and Corey.A.T., "Properties of porous media affecting fluid flow" , ASCE, IR(92), pp.61-88 (1966)

[5] Topp.G.C. and Miller.E.E., "Hysteretic moisture characteristics and hydraulic conductivities for glass-bead media", Soil Sci. Soc. Amer. Proc., Vol.30, pp.156-162 (1966)

[6] 河野伊一郎ほか, "変水位透水試験法に関する 2,3 の考察", 第 17 回土質工学研究発表会, pp.2381-2384 (1982)

[7] 西垣誠, "飽和·不飽和領域内の土中水の浸透特性に関する 2,3 の考察", 土質工学会論文報告集, Vol.23, pp.165-177 (1983)

[8] Van Genuchten.R., "Calculating the unsaturated hydraulic conductivity with a new closed-form analytical model", Research Report No.78-WR-08, Princeton Univ. (1978)

[9] Kroszynski.U., "Flow in a vertical porous column drained at its bottom at constant flux", J.Hydro., Vol.24, pp.135-153 (1975)

[10] Farrel.D.A. and Larson.W.E., "Modeling the pore structure of porous media", Water Reso. Res, Vol.8, pp.699-706 (1972)

[11] Haverkamp.R., Vauclin.M., Touma.J., Wierenga.P.J. and Vachaud.G., "A comparison of numerical simulation models for one dimensional infiltration", Soil Sci. Soc. Amer. J., Vol.41, pp.285-294 (1977)

[12] Gardner.W.R., "Field mesurement of soil water diffusivity", Soil Sci. Soc. Amer. Proc., Vol.34, pp.832-833 (1970)

[13] Hillel.D. and Gardner.W.R., "Measurement of unsaturated conductivity and diffusivity by infiltration through an impeding layer", Soil Sci., Vol.109, pp.149-153 (1970)

[14] 動力炉·核燃料開発事業団, 高レベル放射性廃棄物地層処分研究開発の技術報告書 –平成3年度– pp.4-92–4-116 (1992)

[15] K.Worgan, "The CRYSTAL User Guide", INTERA, 1992.1

[16] K.Worgan, "The CRYSTAL Reference Guide", INTERA, 1992.1

[17] コンピュータによる熱移動と流れの数値解析, S.V. パタンカー原著, 水谷·香月共訳, 森北出版 (1985)