Single Screw Simulator (Ver.12.0.0)

SSSカスタマイズ機能
補足資料

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

③ SSSカスタマイズ機能

ユーザ定義ルーチン ／ Fortran compiler の利用方法

SSS Ver.12.0.0 で利用可能な開発環境／下表2種類のいずれかを利用してください.

開発環境（compiler）	使用PCのOS (Operating System)
① Intel Fortran	Windows
② GFortran (GNU Fortran)	Windows (MinGWを使用)

SingleScrewSimulatorVer12.0.0¥bin¥x86 内には3つのSystemフォルダが存在します.

フォルダの内容と対象ユーザ

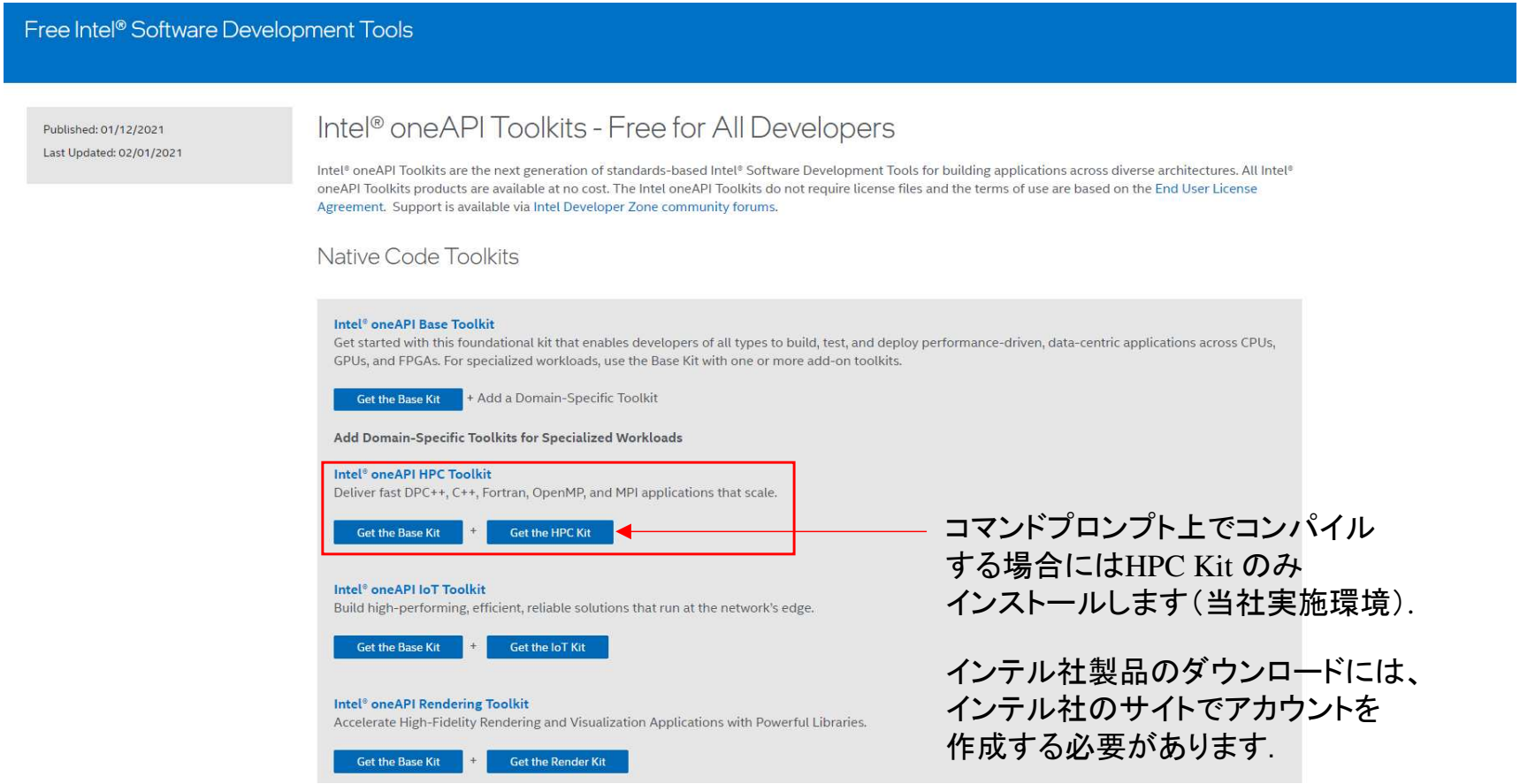
Systemver.12.0.0	： 通常解析を実施されるユーザ	標準版
Systemver.12.0.0_IFORT	： ①Intel Fortranを利用されるユーザ	ユーザ定義ルーチン利用ユーザ
Systemver.12.0.0_GFORT	： ②GFortranを利用されるユーザ	

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　① Intel Fortran

1) Intel® oneAPI HPC Toolkit をダウンロードする.

入手可能なウェブサイト（下図に抜粋）
https://www.intel.com/content/www/us/en/developer/articles/news/free-intel-software-developer-tools.html



コマンドプロンプト上でコンパイルする場合にはHPC Kit のみインストールします（当社実施環境）.

インテル社製品のダウンロードには、インテル社のサイトでアカウントを作成する必要があります.

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　① Intel Fortran

2) Intel® oneAPI HPC Toolkit をインストールする.

【補足情報】

・Intel® oneAPI HPC Toolkit を使用するためには, Microsoft社の Visual Studio をインストールする必要があります.
(当社使用バージョン:　Microsoft Visual Studio Community 2017)

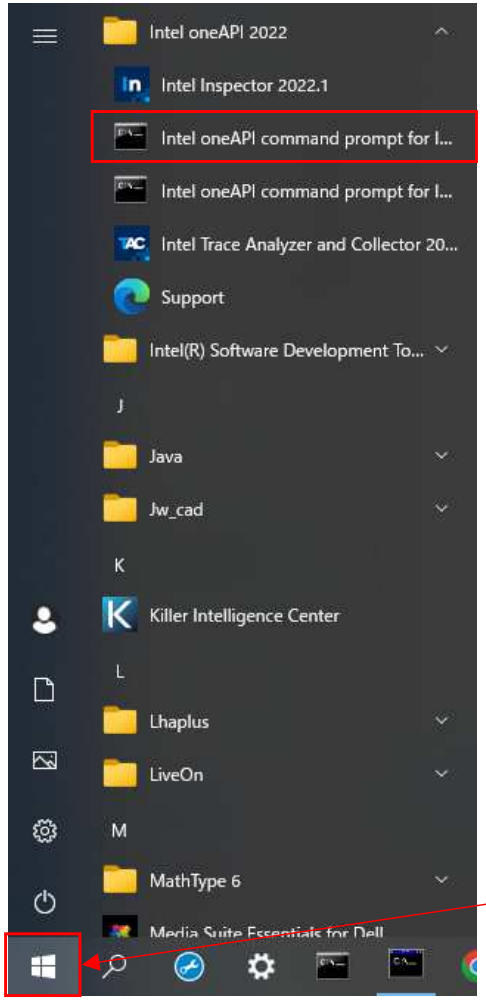
・インテルソフトウェア開発製品の正規販売代理店であるエクセルソフト株式会社のウェブサイトから
評価版をインストールすることも可能です．30日間のサポートサービスを受けられます.

エクセルソフト株式会社のウェブサイト（下図に抜粋）
https://www.xlsoft.com/jp/products/intel/download/eval.html

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

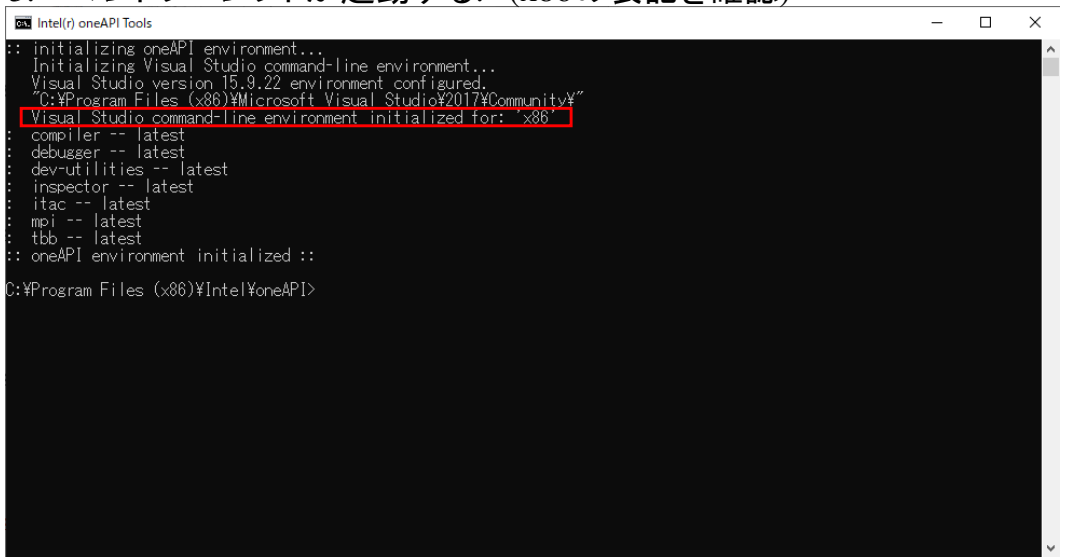
開発環境の設定例　① Intel Fortran

3) Intel® oneAPI HPC Toolkit をインストール後, Windows 画面左下のスタートボタンから
Intel oneAPI command prompt for Intel32 をクリックしてコマンドプロンプトを起動します.



2. Intel oneAPI command prompt
for Intel32 をクリックする.
(Intel64 も存在するため注意)

3. コマンドプロンプトが起動する. (x86の表記を確認)

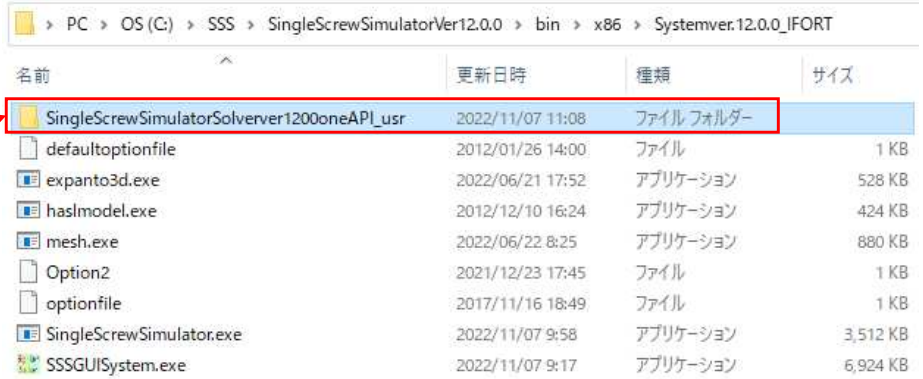


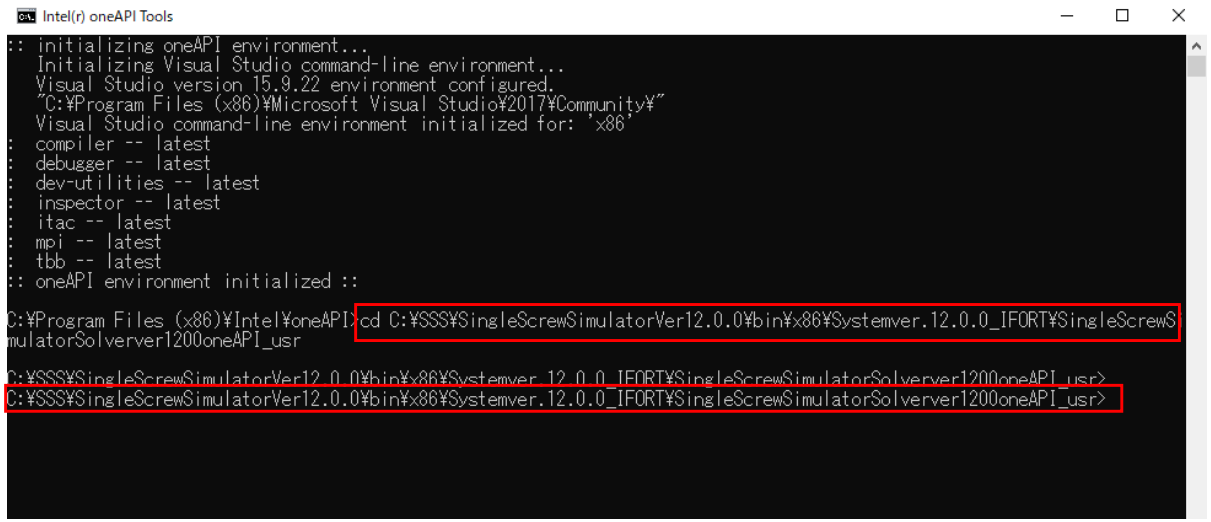
1. Windowsスタートボタン
をクリックする.
(当社実施環境 windows10)

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　① Intel Fortran

4) Intel oneAPI command prompt for Intel32 のコマンドプロンプト上で, ユーザルーチンのソースコードが格納されているSSS内のフォルダに移動します.
(¥bin¥x86¥Systemver.12.0.0_IFORT¥SingleScrewSimulatorSolverver1200oneAPI_usr)



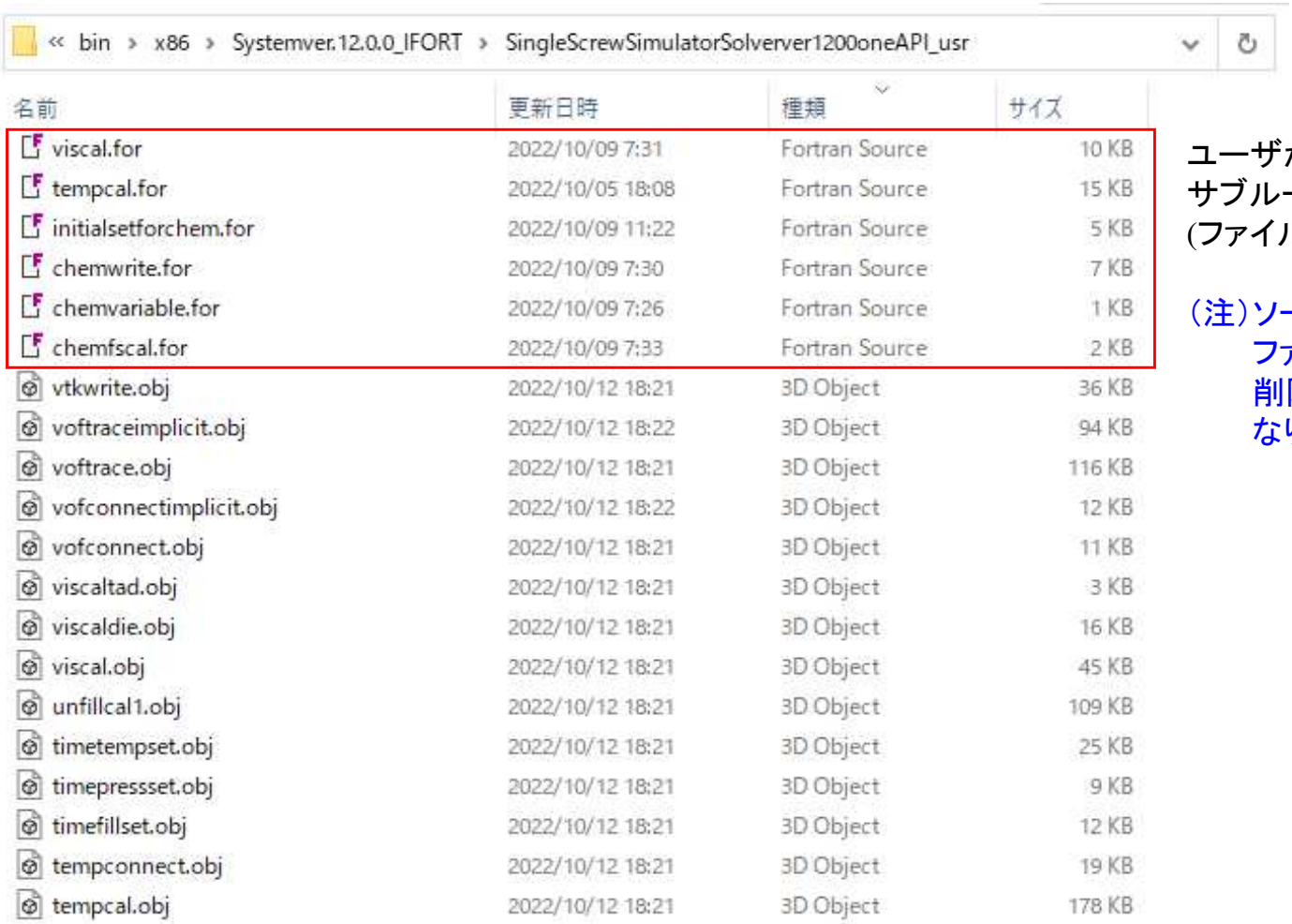


cd (ディレクトリ移動コマンド) の後に,
SingleScrewSimulatorSolverver1200oneAPI_usr
までのパス(C:ドライブからの絶対パス)
を入力して, キーボードのEnterキーを
押すと, カレントディレクトリが変更されます.

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　① Intel Fortran

5) ¥SingleScrewSimulatorSolverver1200oneAPI_usr 内に存在するソースコードを用途向きに書き直します（任意のエディタを使用）.

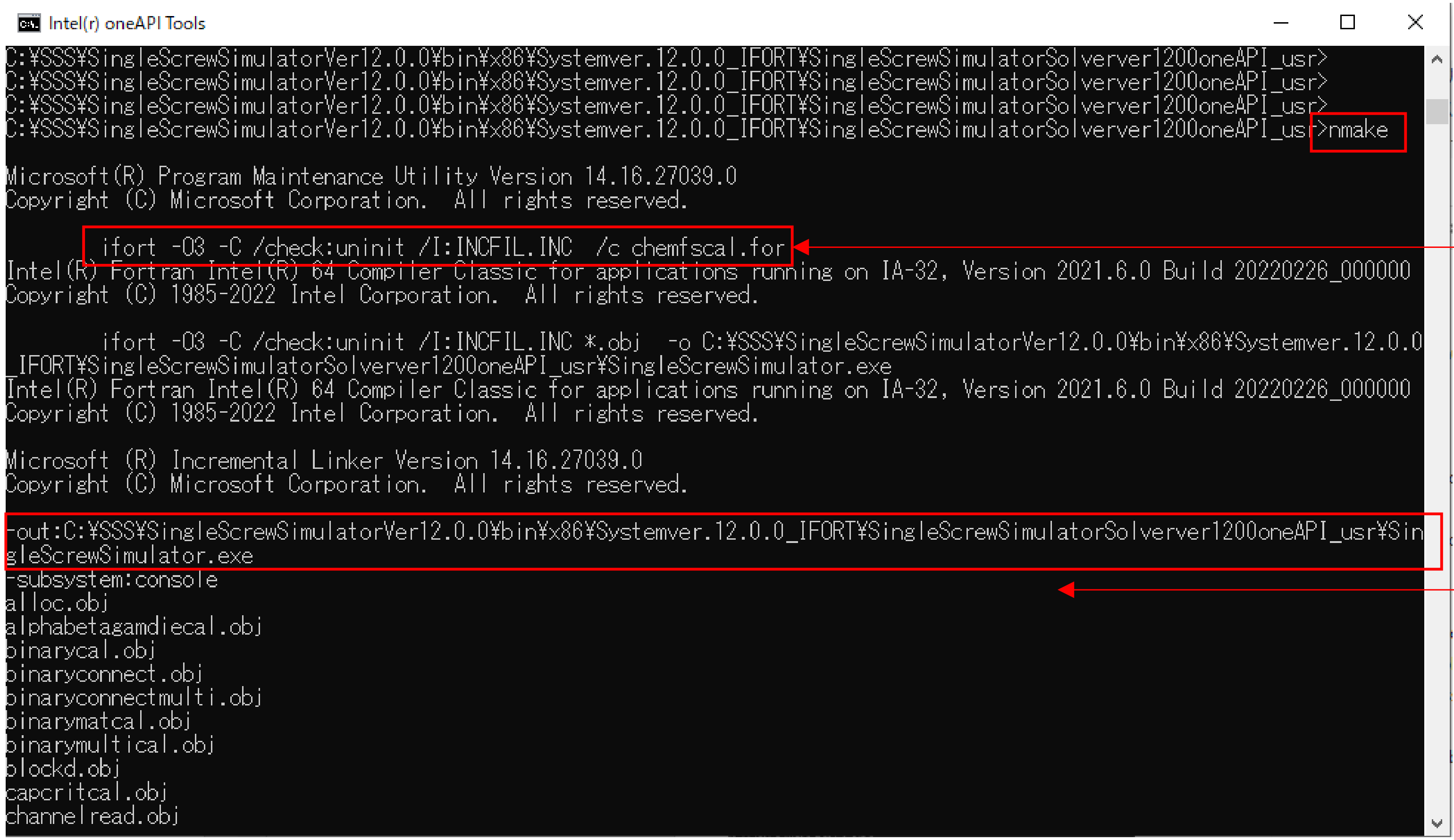


ユーザがカスタマイズ可能な
サブルーチンのソースコード
(ファイル名.for)

（注）ソースコード以外に格納されている
ファイル (.obj など) を変更したり
削除するとコンパイルができなく
なりますので注意して使用ください.

開発環境の設定例　① Intel Fortran

6) ソースコードを編集後，コマンドプロンプト上で nmake と入力してキーボードのEnterキーを押すと，
makefile を利用したコンパイルが実行されます．



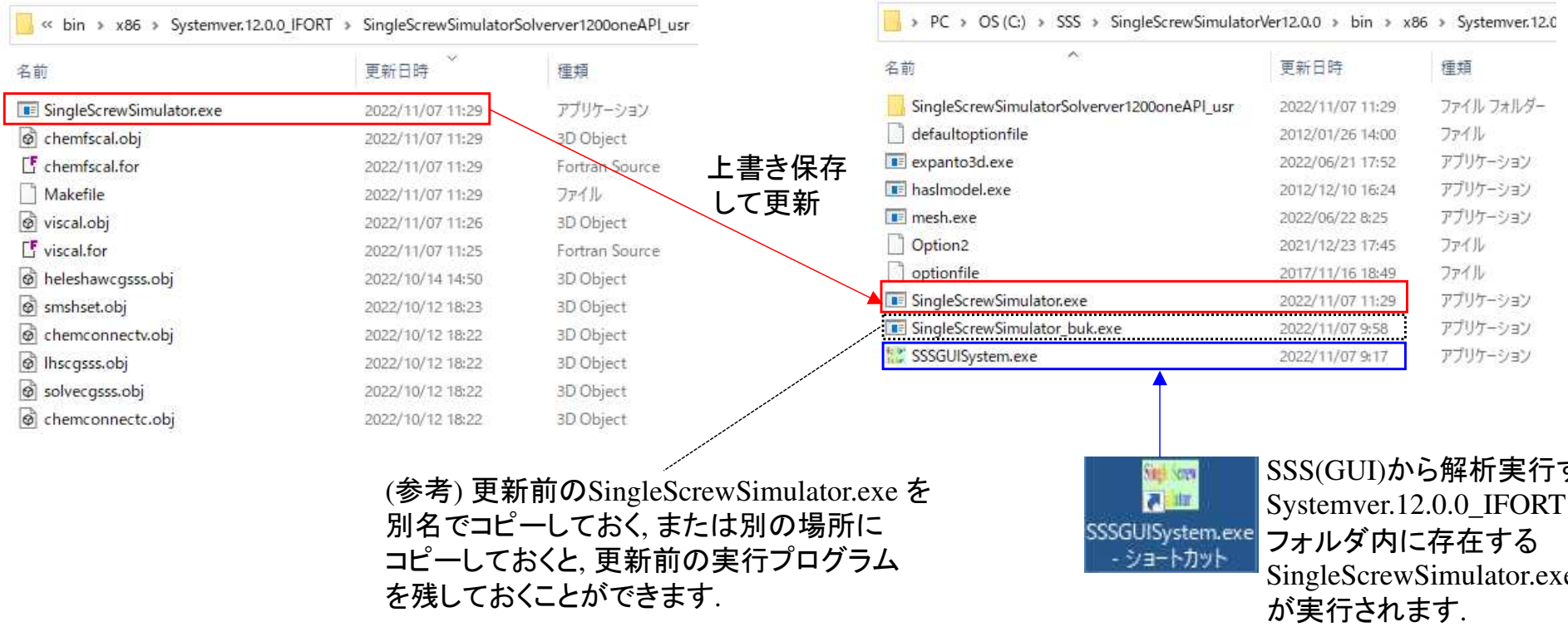
変更したソースコードのみコンパイルされます．

コンパイルに成功すると，フォルダ内に実行プログラム SingleScrewSimulator.exe が作成されます．

コンパイルに失敗した場合はエラーメッセージが出力されるので，ソースコードを修正後に 再度 nmake を実施してください．

開発環境の設定例　① Intel Fortran

7) ¥ SingleScrewSimulatorSolverver1200oneAPI_usrフォルダ内の SingleScrewSimulator.exe の更新日時が, コンパイルした日時に変更されていることを確認後, Systemver.12.0.0_IFORTフォルダ内に存在する SingleScrewSimulator.exeを上書き保存して更新すると, SSSのGUIから解析実行した際に, 更新された SingleScrewSimulator.exe が実行されます.

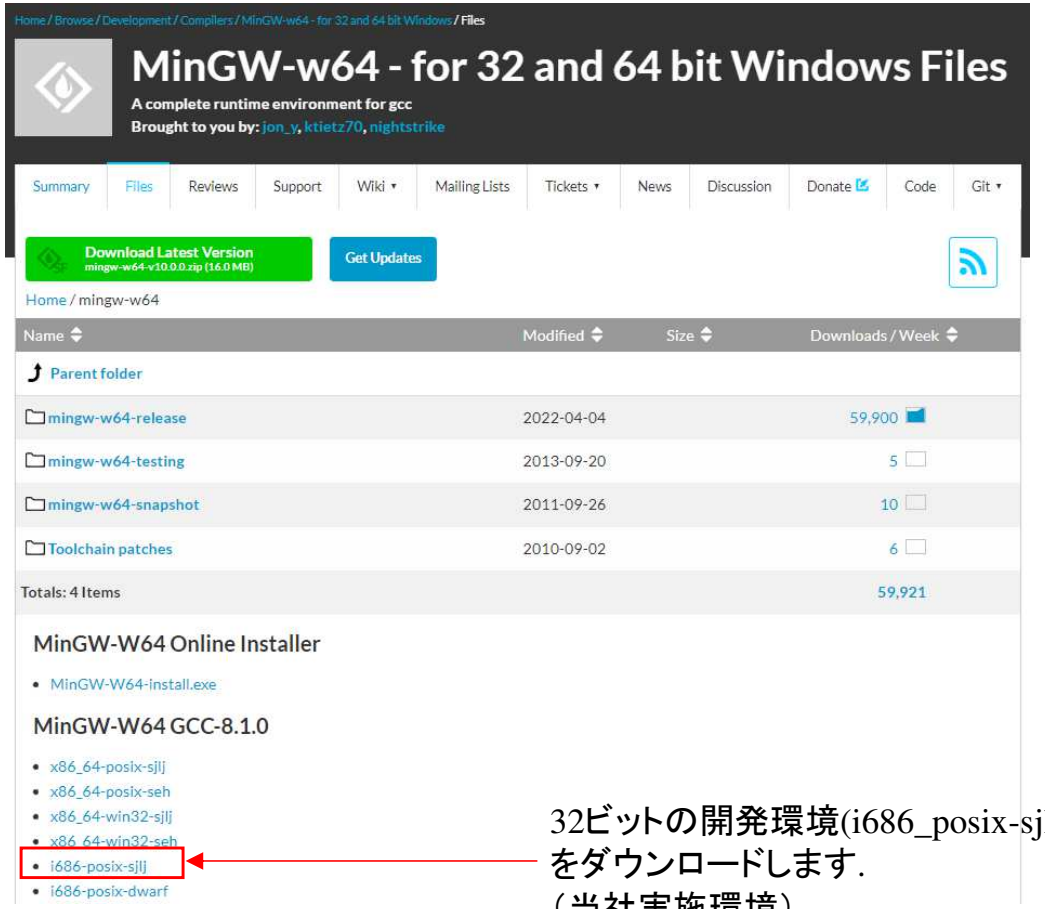


HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　② GFortran

1) MinGW (Minimalist GNU for Windows, GUNコンパイラのWindows移植版) をダウンロードする.

入手可能なウェブサイト（下図に抜粋）
https://sourceforge.net/projects/mingw-w64/files/mingw-w64/

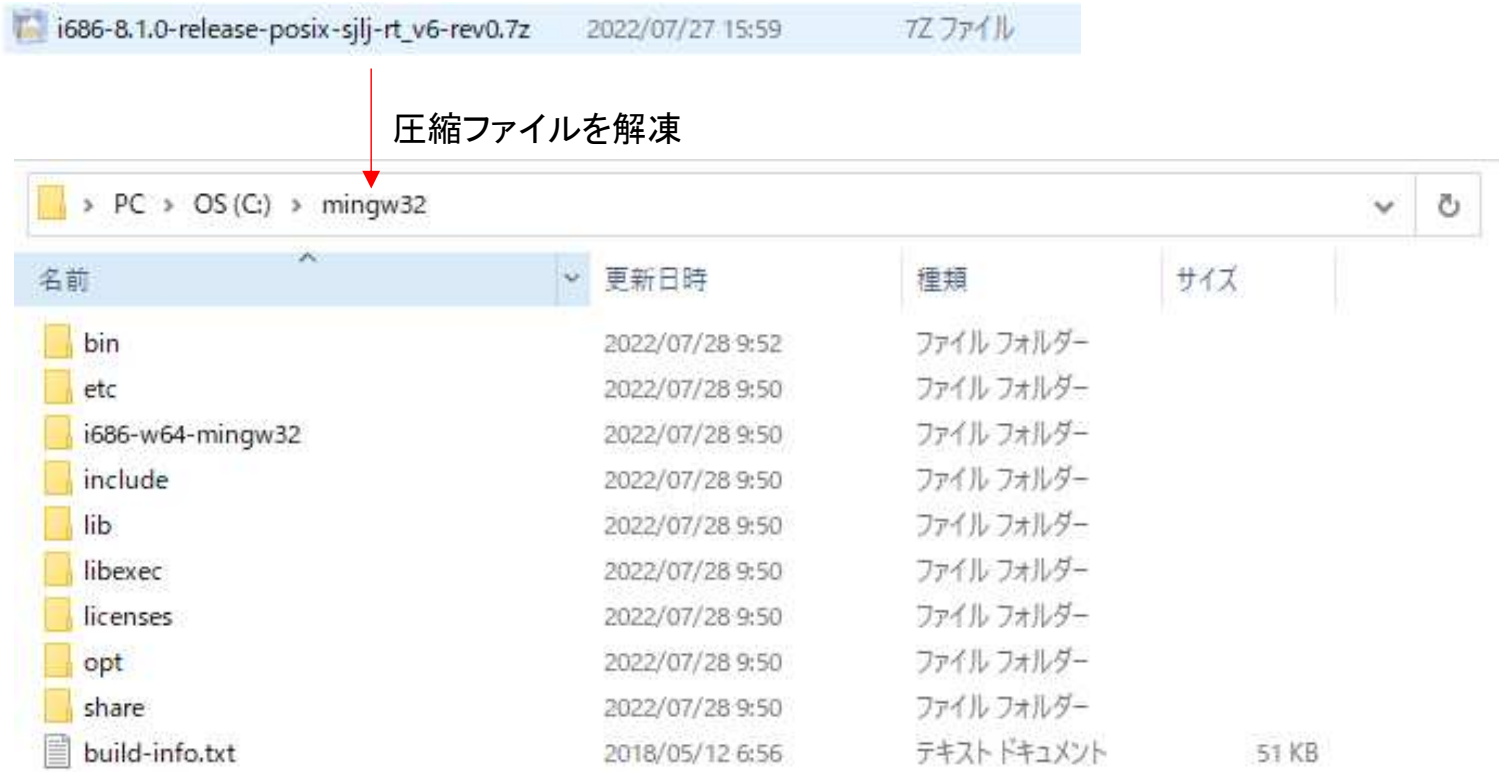


32ビットの開発環境(i686_posix-sjlj)
をダウンロードします.
（当社実施環境）

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

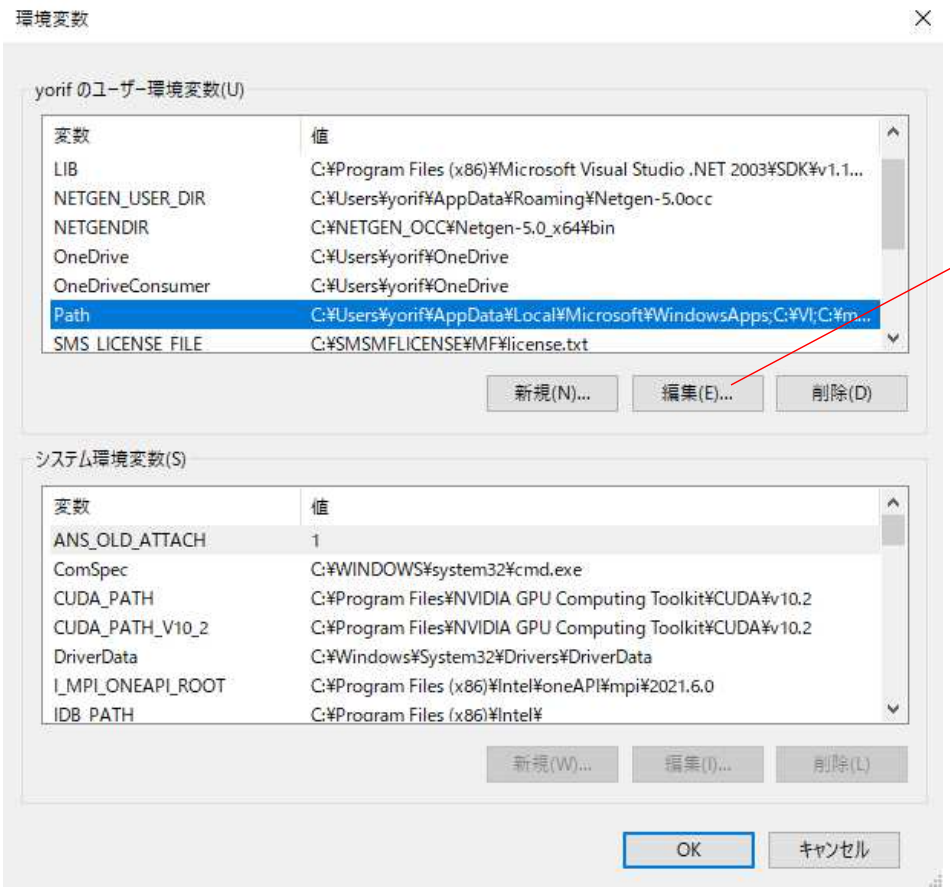
開発環境の設定例　② GFortran

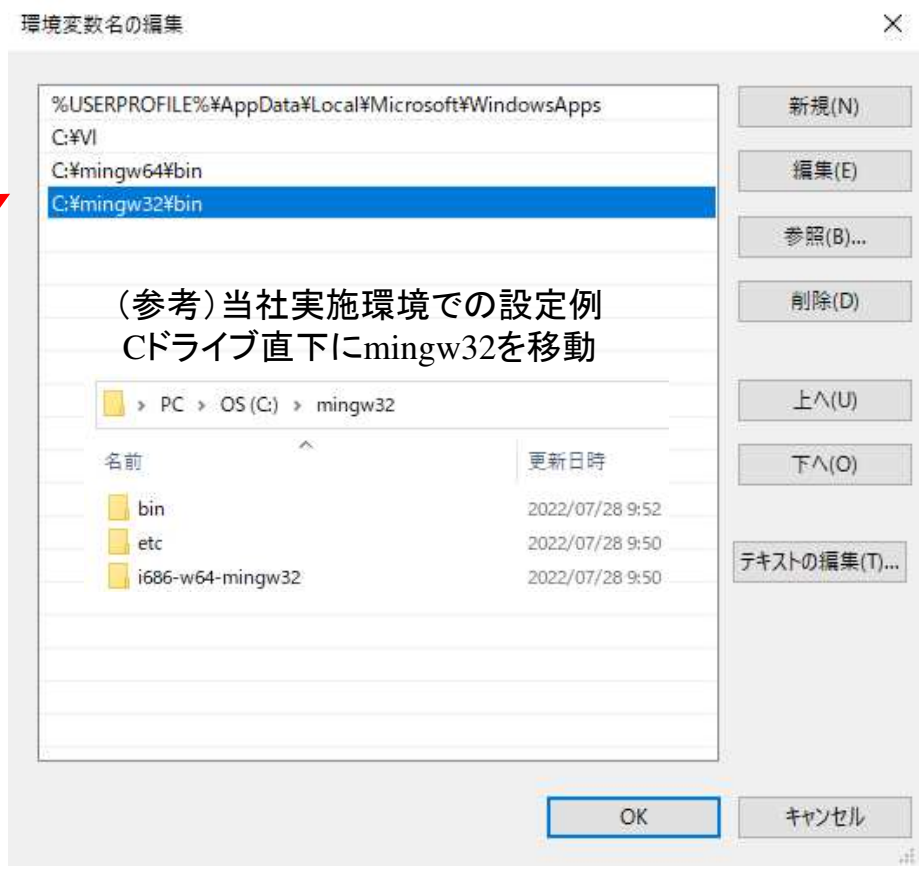
2) ダウンロードした圧縮ファイル(.7z)を解凍すると, mingw32というフォルダが作成される.



開発環境の設定例　② GFortran

3) mingw32 フォルダを任意の場所に移動し（注: 日本語を含むフォルダ名は不可）, Windowsの環境変数の設定から, ¥mingw32¥bin フォルダへの Path を設定する.

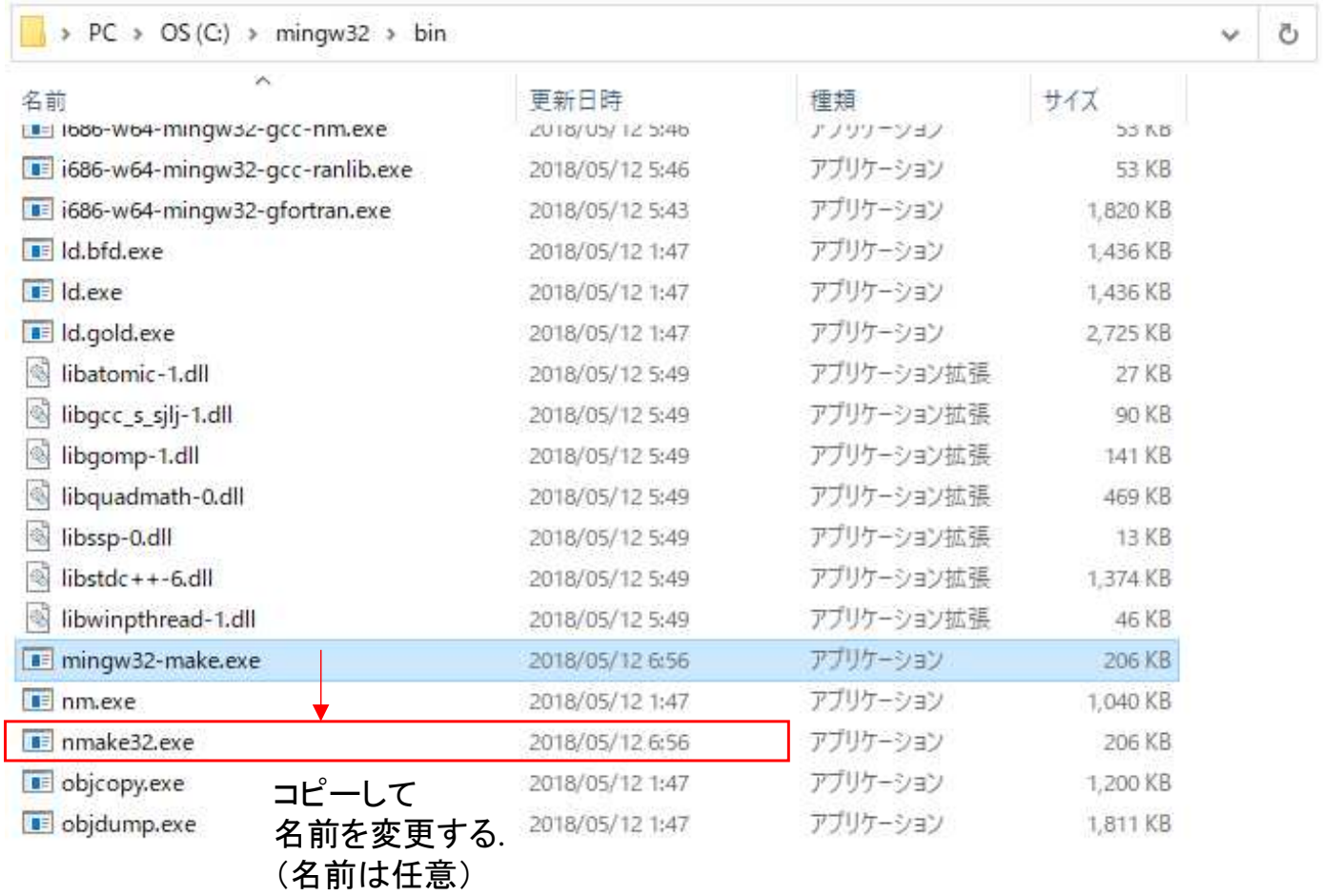




HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

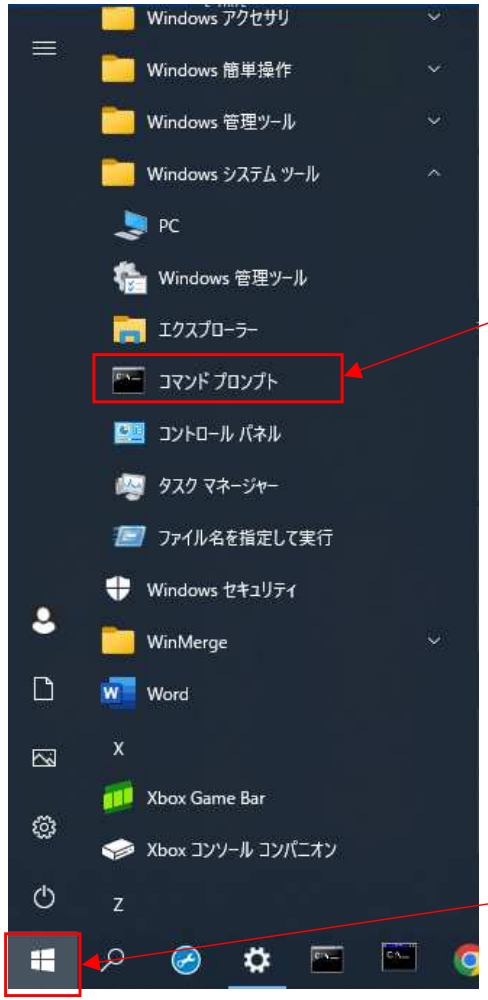
開発環境の設定例　② GFortran

4) ¥mingw32¥bin フォルダ内の makefile を用いたコンパイル実行プログラム mingw32-make.exe
をフォルダ内にコピーし, nmake32.exe に名前を変更する. ここまでがMinGwのインストール手順例です.



開発環境の設定例　② GFortran

5) MinGw をインストール後, Windows 画面左下のスタートボタンから
Windows システムツール内のコマンドプロンプトを起動します.



2. コマンドプロンプト
をクリックする.

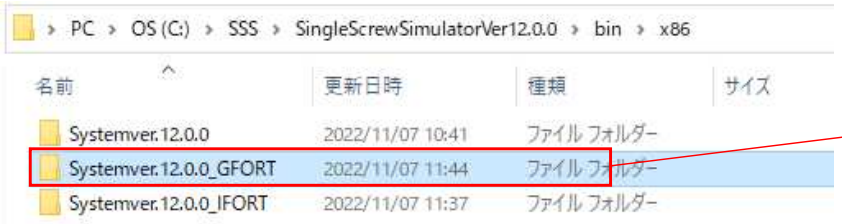
1. Windowsスタートボタン
をクリックする.
(当社実施環境 windows10)

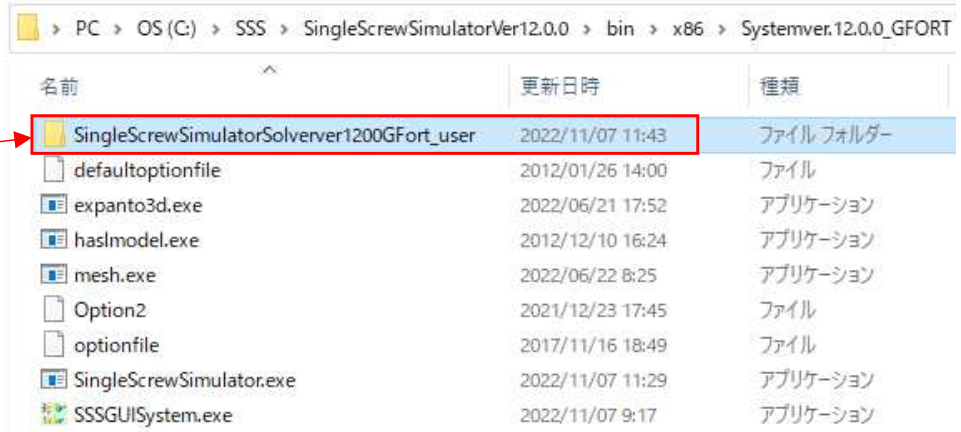
3. コマンドプロンプトが起動する.

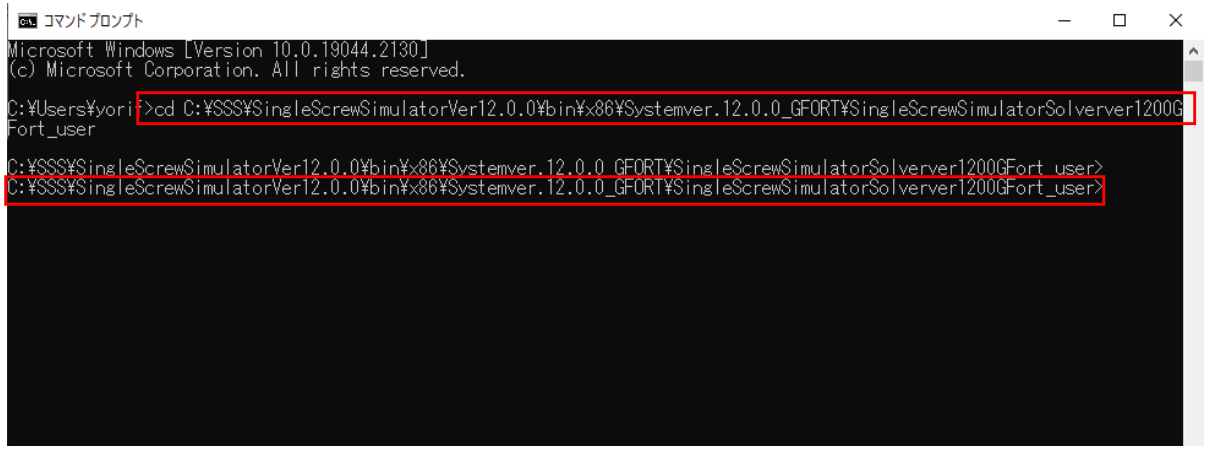
HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　② GFortran

6) コマンドプロンプト上で, GFortran用ユーザルーチンのソースコードが格納されているTSS内のフォルダ (¥bin¥x86¥Systemver.9.0.0_GFORT¥ SingleScrewSimulatorSolverver1200GFort_user) に移動します.





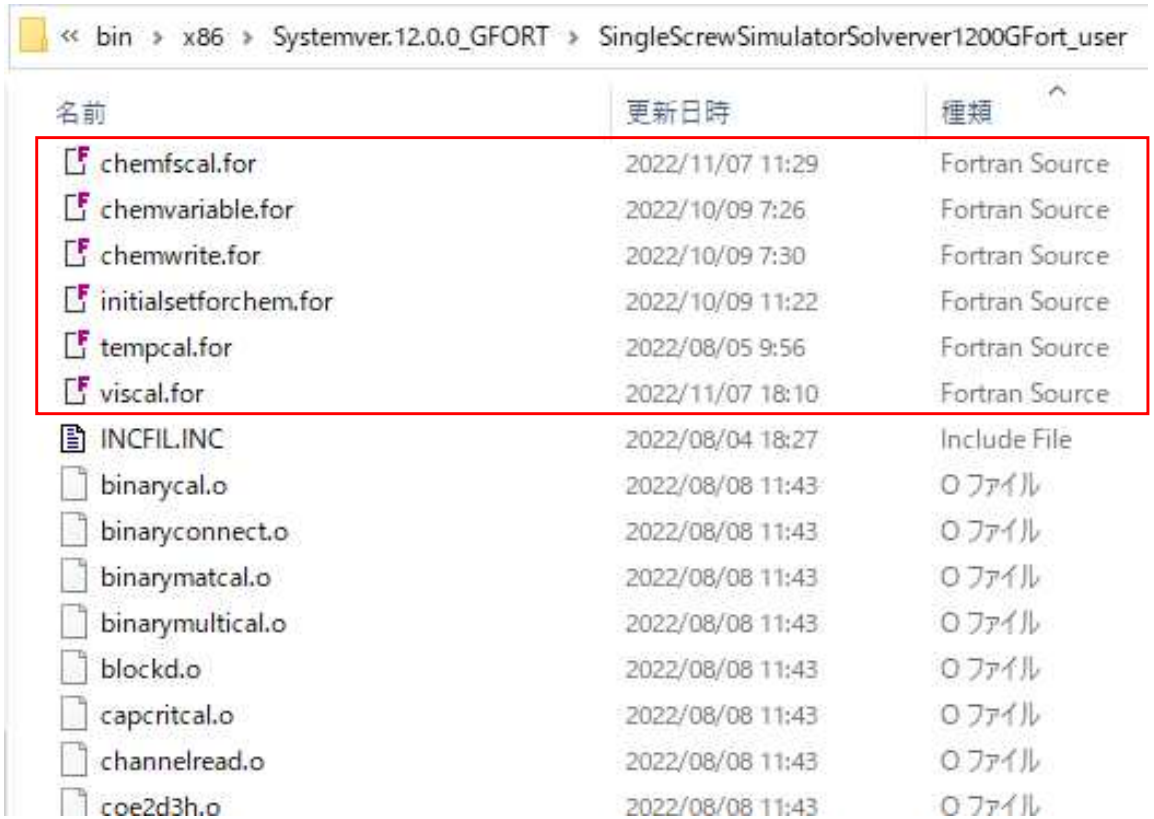


cd (ディレクトリ移動コマンド) の後に,
¥SingleScrewSimulatorSolverver1200GFort_user
までのパス(C:ドライブからの絶対パス)
を入力して, キーボードのEnterキーを
押すと, カレントディレクトリが　変更されます.
(注: 日本語を含むフォルダ名は不可)

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　② GFortran

7) ¥SingleScrewSimulatorSolver1200GFort_user 内に存在するソースコードを用途向きに書き直します（任意のエディタを使用）.



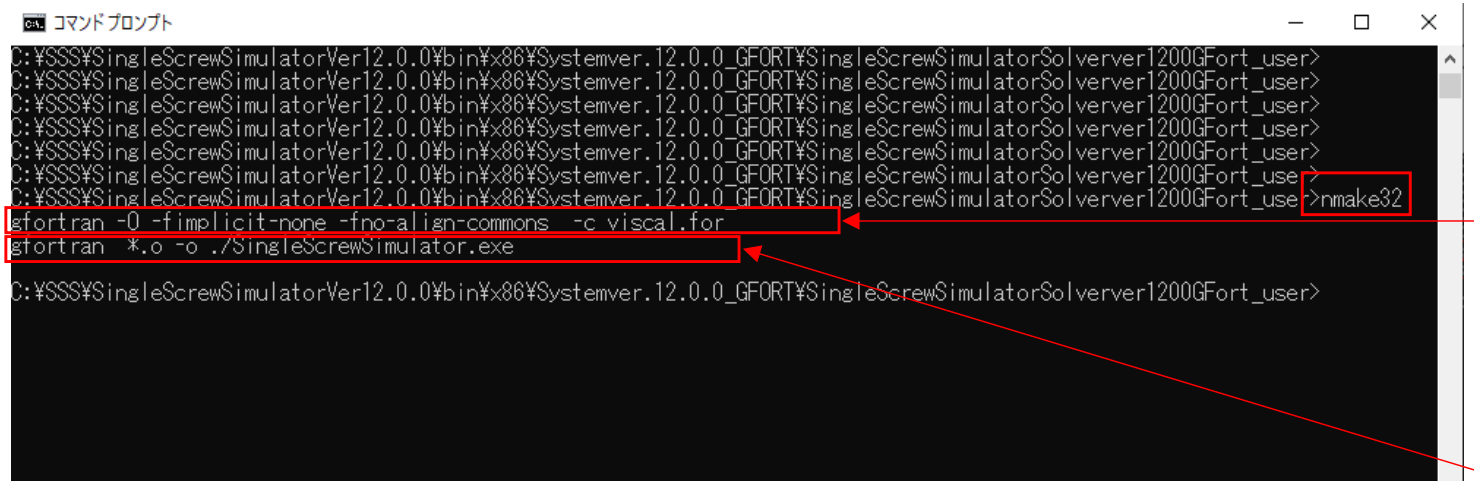
ユーザがカスタマイズ可能な
サブルーチンのソースコード
(ファイル名.for)

（注）ソースコード以外に格納されている
ファイル (.o など) を変更したり
削除するとコンパイルができなく
なりますので注意して使用ください.

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

開発環境の設定例　② GFortran

8) ソースコードを編集後，コマンドプロンプト上で　nmake32 (p.12 の4) で変更した名前) と入力してキーボードの Enterキーを押すと, makefile を利用したコンパイルが実行されます.



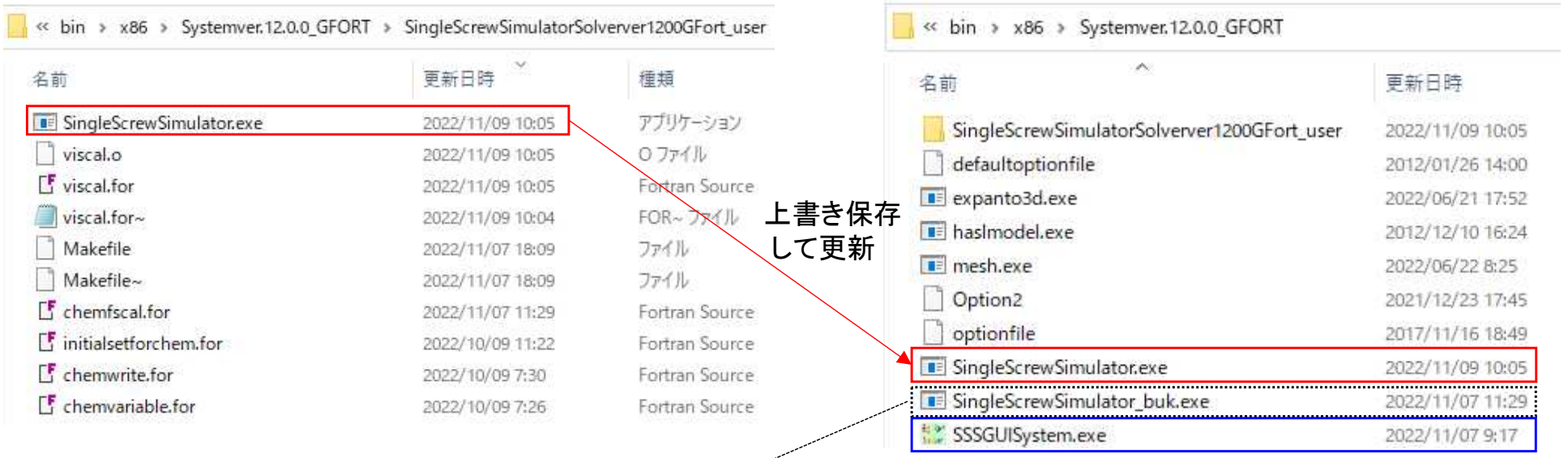
変更したソースコードのみ
コンパイルされます.

コンパイルに成功すると,
フォルダ内に実行プログラム
SingleScrewSimulator.exe
が作成されます.

コンパイルに失敗した場合は
エラーメッセージが出力される
ので, ソースコードを修正
後に 再度 nmake32 を実施して
ください.

開発環境の設定例　② GFortran

9) ¥SingleScrewSimulatorSolverver1200GFort_user フォルダ内の SingleScrewSimulator.exe の更新日時がコンパイルした日時に変更されていることを確認後, Systemver.12.0.0_GFORT フォルダ内に存在する SingleScrewSimulator.exe を上書き保存して更新すると, SSSのGUIから解析実行した際に更新された SingleScrewSimulator.exeが実行されます.



(参考) 更新前のSingleScrewSimulator.exe を別名でコピーしておく, または別の場所にコピーしておくと, 更新前の実行プログラムを残しておくことができます.

SSS(GUI)から解析実行すると, Systemver.12.0.0_IFORT フォルダ内に存在する SingleScrewSimulator.exe が実行されます.

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

表1 ユーザが自由にカスタマイズ可能なサブルーチン

ユーザ定義ルーチン名	機能
1) initialsetforchem	化学反応種の初期設定及び解析条件の設定
2) viscal	粘度計算
3) tempcal	温度計算
4) chemfscal	化学反応式の左辺及び右辺荷重ベクトルの設定
5) chemvariable	化学反応成分の代数的関係式の計算
6) chemwrite	化学反応解析結果のファイル出力

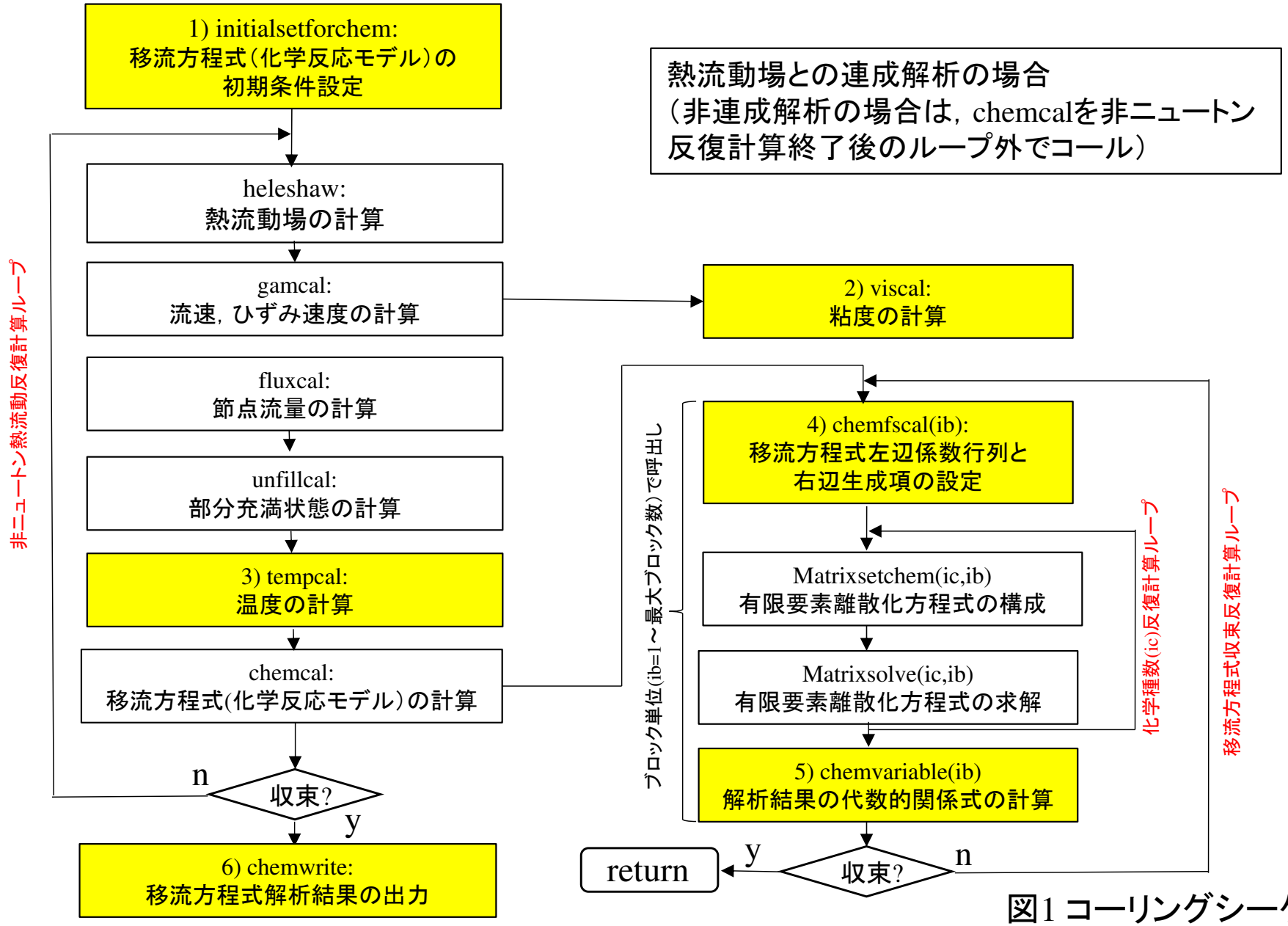


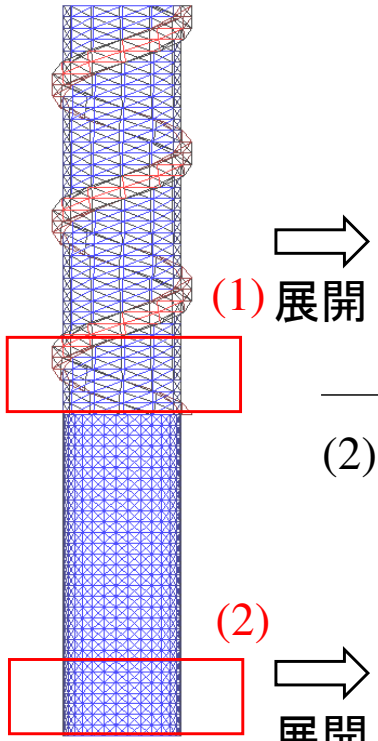
図1 コーリングシーケンス

表2 解析モデル要素情報 (ib: ブロック数)

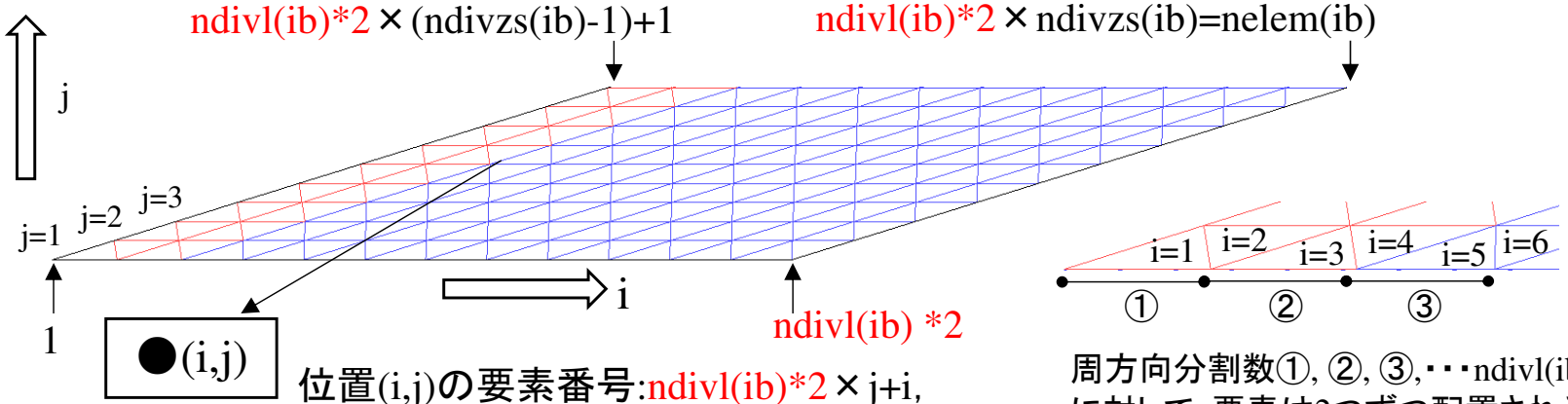
変数名	内容
nelem(ib)	要素数
ndivl(ib)	周方向要素分割数
ndivzs(ib)	軸方向要素分割数
ibtype(ib)	スクリュモデル定義(0: 標準定義, 1:矩形領域定義)
inqc(ie,ib)	要素構成節点数 (SSSは三角形要素で構成されるため 3)
ndiv	肉厚方向の要素分割数
ientab(ie,ib)	要素ieを構成する節点番号リスト(ローカル)
entab(ientab(ie,ib),ib)	要素ieを構成する節点番号リスト(グローバル) (例) 要素ieを構成する節点番号は以下で抽出できる. entab(ientab(ie,ib)+ii-1,ib), ii=1〜3(inqc(ie,ib))
height(ie,ib)	要素ieの肉厚(ie=1~nelem(ib),単位cm)
vol(ie,ib)	要素ieの体積(ie=1~nelem(ib),単位cm^3)

要素情報

(1) 標準定義（フライトあり）



(1) 展開

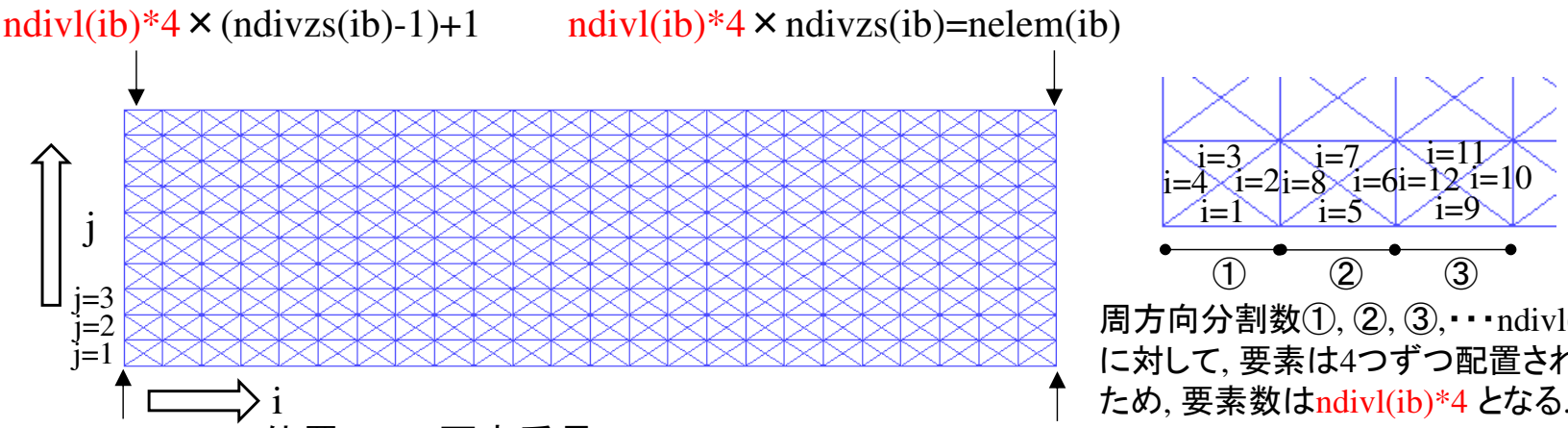


位置(i,j)の要素番号:ndivl(ib)*2 × j+i,
i=1~ndivl(ib)*2, j=0~ndivzs(ib)-1

周方向分割数①, ②, ③,・・・ndivl(ib)に対して, 要素は2つずつ配置されるため, 要素数はndivl(ib)*2 となる.

(2) 矩形領域定義

(2) 展開



位置(i,j)の要素番号:ndivl(ib)*4 × j+i,
i=1~ndivl(ib)*4, j=0~ndivzs(ib)-1

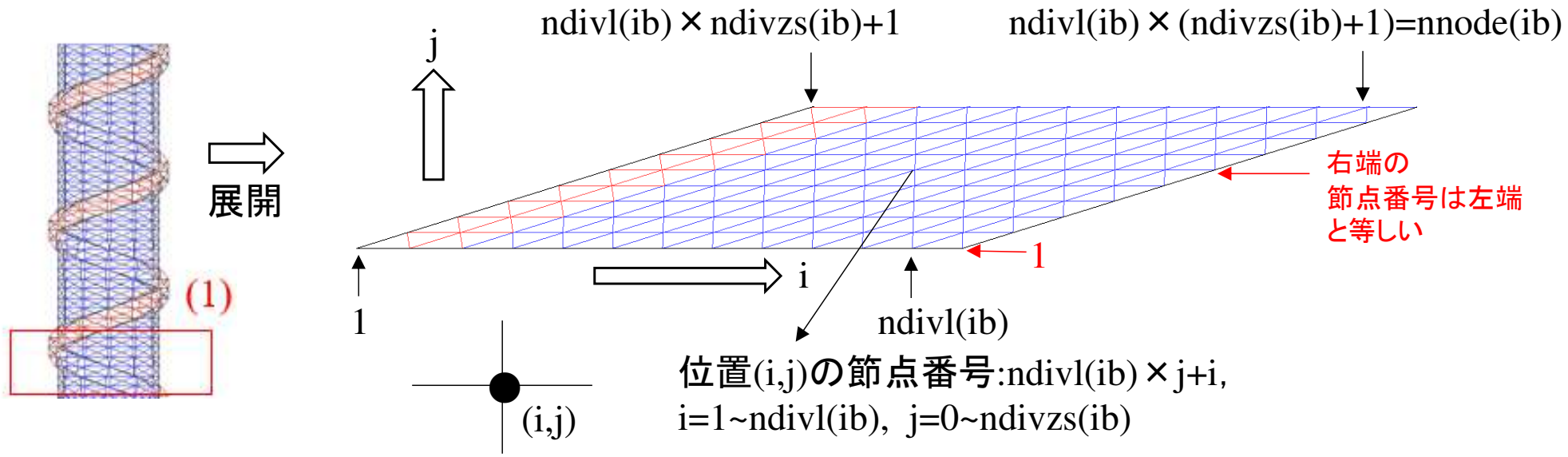
周方向分割数①, ②, ③,・・・ndivl(ib)に対して, 要素は4つずつ配置されるため, 要素数はndivl(ib)*4 となる.

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

表3 解析モデル節点情報 (ib: ブロック数)

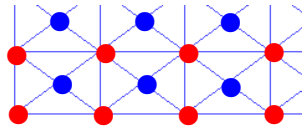
変数名	内容
nnode(ib)	節点数
xnode(in,ib),ynode(in,ib),znode(in,ib)	節点inのx,y,z座標(in=1~nnode(ib),単位cm)
nren(in,ib)	節点inを含む(隣接する)要素数
nrelem(inrelem(in,ib)+ii-1,1)	節点inを含む(隣接する)要素番号 (ii=1~nren(in,ib))

(1) 標準定義(フライトあり)



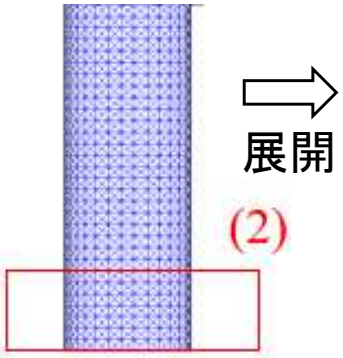
節点情報

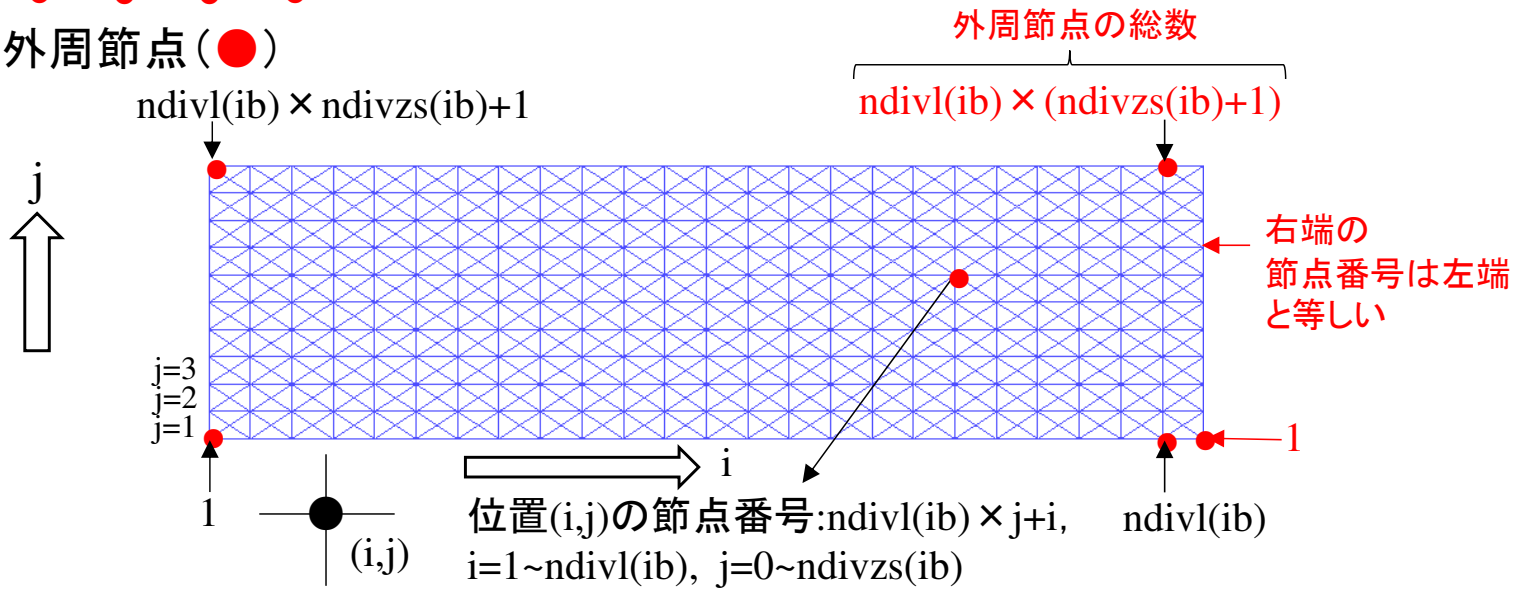
(2) 矩形領域定義



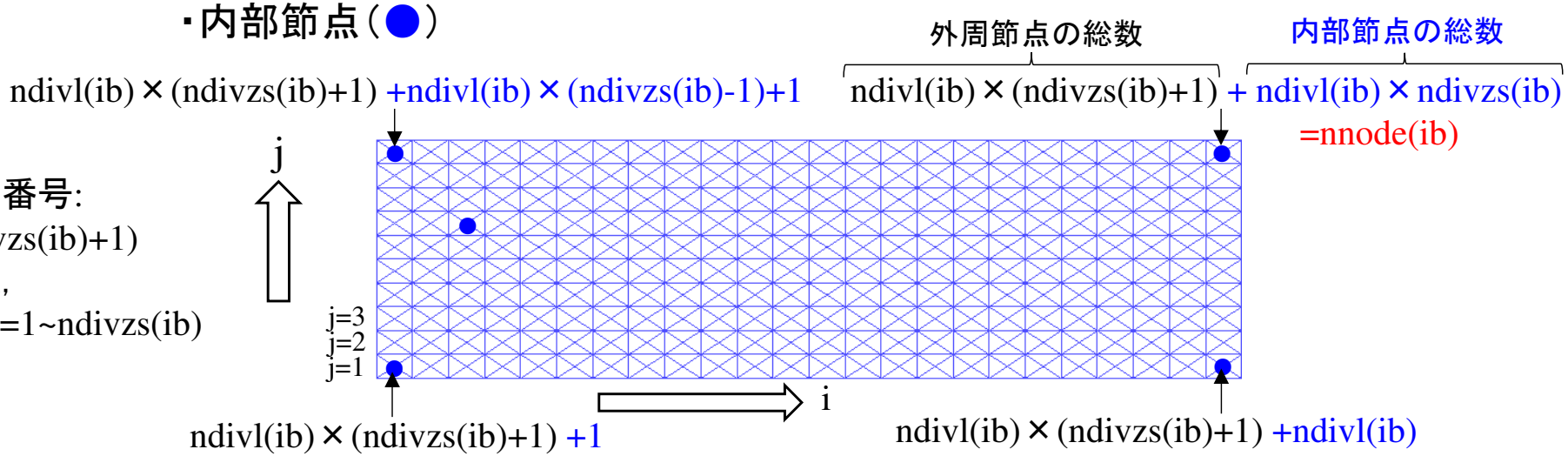
外周節点(●)と内部節点(●)に分けて，
以下のように定義されます．

・外周節点(●)





・内部節点(●)



位置(i,j)の節点番号:
ndivl(ib)×(ndivzs(ib)+1)
+ ndivl(ib)×j+i,
i=1~ndivl(ib), j=1~ndivzs(ib)

表4　境界条件,成形条件情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
tempinlet	流入温度(℃)
pprescribedinlet	流入口設定圧力(MPa)
pprescribed	流出口圧力(MPa)
qprescribed	押出量(kg/h)
flowrateinlet	流入口設定流量(cc/s)
rpm	スクリュ回転数(rpm)
href(1,ie,ib)	要素ieのスクリュ面熱伝達係数(W/cm^2/K)
tbound(1,ie,ib)	要素ieのスクリュ面境界温度(℃)
href(2,ie,ib)	要素ieのバレル面熱伝達係数(W/cm^2/K)
tbound(2,ie,ib)	要素ieのバレル面境界温度(℃)
iboundt(in,ib)	節点inの温度境界条件(0:拘束，非0:自由)
ibound(in,ib)	節点inの圧力境界条件(0:拘束，非0:自由)

表5　物性情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
rhoh(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の密度(g/cm^3)
cph(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の比熱(J/g/K)
vish(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の粘度(Pa･s)

i=1 : スクリュ表面,i=ndiv+1 : バレル表面

表6　解析結果要素情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
temh(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の温度(℃)
gam(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)のひずみ速度(J/g/K)
uh(i,ie,ib),vh(i,ie,ib),wh(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の流速ベクトル成分(cm/s)
tempe(ie,ib)	要素ieの温度
fille(ie,ib)	要素ieの充満率
filleavb(ie,ib)	要素ieの平均充満率（濃度計算用）

表7　解析結果節点情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
pres(in,ib)	節点inの圧力(Pa)
temp(in,ib)	節点inの温度(℃)
visn(in,ib)	節点inの粘度(Pa･s)
gamn(in,ib)	節点inのひずみ速度(s^{-1})

表8　ユーザ定義変数 (ib: ブロック数)

変数名	内容
chemcnumber	解析対象とする移流方程式の本数（化学種数）
chemvnumber	解析で考慮する配列変数の数
commonvnumber	ルーチン間で共用するスカラー変数の数
chemcname(i)	化学種の名称（i=1~chemcnumber)
chemvname(i)	配列変数の名称（i=1~chemvnumber)
chemc(i,ie,ib)	化学種の要素濃度(i=1~chemcnumber,ie=1~nelem(ib))
chemcn(i,in,ib)	化学種の節点濃度(i=1~chemcnumber,ie=1~nelem(ib))
chempar(i,ie,ib)	化学種依存の要素変数(i=1~chemvnumber,ie=1~nelem(ib))
chemparn(i,in,ib)	化学種依存の節点変数(i=1~chemvnumber,ie=1~nelem(ib))
commonvpar(i)	ルーチン間で共用するスカラー変数(i=1~commonvnumber)

① 濃度計算（フォルダ名:conc）

Initialsetforchem の内容

```
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c+    User define variable number
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c
c     Number of chemical species
c
      chemcnumber=1
c
c     Number of chemical variable
c
      chemvnumber=0
c
c
c     Number of common varialble
c
      commonvnumber=0
c
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
```

単一成分濃度

```
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c     User define initial/boundary condition
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
      chemcname(1)='test sample 1'
c
      do ib=1,iblock
c
      do ie=1,nelem(ib)
      chemc(1,ie,ib)=0.0
      end do
c
      do in=1,nnode(ib)
      chemcn(1,in,ib)=0.0
      end do
c
      if(ib.eq.1) then
c
       qsumtotal=0.0
       do in=1,ndivl(ib)
       qsumtotal=qsumtotal+qfluxb(in,ib)
       end do
c
       qsumhalf=0.0
       do in=1,ndivl(ib)/2
       qsumhalf=qsumhalf+qfluxb(in,ib)
       end do
c
       do ii=1,ndivl(ib)/2
       chemcn(1,ii,ib)=0.5*qsumtotal/qsumhalf
       end do
c
      end if
c
      end do
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
```

ポストタイトル

全ブロックに設定

要素濃度の初期設定

節点濃度の初期設定

1ブロック目に流入境界条件を設定

流入口に設定されている全流量の計算

流入口境界(in=1~iinletnodenum/2)の半領域に設定されている流量の計算

流入口境界(in=1~iinletnodenum/2)の半領域に濃度を設定，残りの半領域の濃度は0(当設定によって濃度平均値は0.5に漸近)

chemfscal の内容

```
      subroutine chemfscal(ib)
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c+    User define left hand side coefficient & right hand source
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
      do ie=1,nelem(ib)
c
      chemf(1,ie,ib)=0.0
      chems(1,ie,ib)=0.0
c
      end do
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
```

ブロック毎に呼出される

比較

$$\boldsymbol{u}\bullet\nabla f = 0$$

$$\left(A_i + \boldsymbol{u}\bullet\nabla\right) f_i = B_i$$

TSSが解析対象とする移流方程式:

$$\left(chemf\,(ic,ie,ib) + \boldsymbol{u}\bullet\nabla\right) f\,(ic,ie,ib) = chems(ic,ie,ib)$$

ic=1, f (1,ie)=chemc(1,ie,ib)

chemf(1,ie,ib)=0.0

chems(1,ie,ib)=0.0

A_i, B_i：ユーザ定義任意関数(i=1~n)

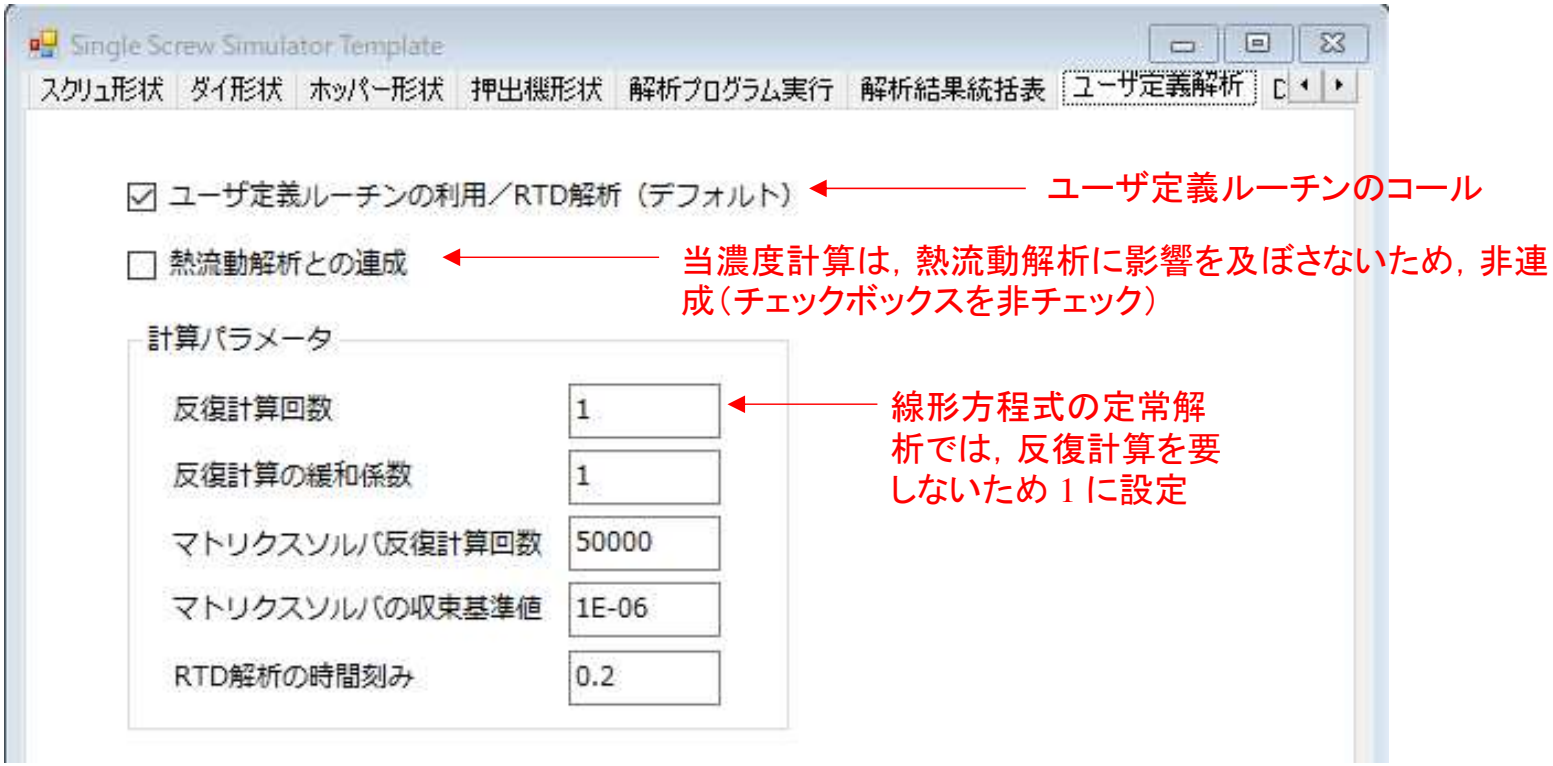
f_i：ユーザ定義未知関数(i=1~n)

n：ユーザ定義方程式数

$\boldsymbol{u}$：流速ベクトル

∇：ナブラ演算子

User define model タブメニューの設定



② 滞留時間分布（RTD）計算（フォルダ名:rtd）

Initialsetforchem の内容

```
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c+    User define variable number
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c
c     Number of chemical species
c
      chemcnumber=1
c
c     Number of chemical variable
c
      chemvnumber=0
c
c
c     Number of common varialble
c
      commonvnumber=2
c
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
```

単一成分濃度

非定常計算刻みとシミュレーション時間として利用する変数の数

各種配列変数のダイナミックアロケーション
（ユーザ定義不要の固定構文）

```
c
c     Definition of common number variable
c
      commonvpar(1)=rtdtime
      commonvpar(2)=0.0
```

時間刻み:0.2 sec, GUIから入力可能

シミュレーション時刻

```
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c     User define initial/boundary condition
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
      chemcname(1)='test sample 1'
c
      do ib=1,iblock
c
      do ie=1,nelem(ib)
      chemc(1,ie,ib)=0.0
      end do
c
      do in=1,nnode(ib)
      chemcn(1,in,ib)=0.0
      end do
c
      if(ib.eq.1) then
c
      do ii=1,ndivl(ib)
      chemcn(1,ii,ib)=1.0
      end do
c
      end if
c
      end do
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
```

ポストタイトル

全ブロックに設定

要素濃度の初期設定

節点濃度の初期設定

1ブロック目を指定

流入口に配置された節点に対する境界条件(濃度:1) の設定

chemfscal の内容

```
subroutine chemfscal(ib)
```

← ブロック毎に呼出される

```
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c+    User define left hand side coefficient & right hand source
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
      do ie=1,nelem(ib)
c
      chemf(1,ie,ib)=1.0/commonvpar(1)
      chems(1,ie,ib)=chemc(1,ie,ib)/commonvpar(1)
c
      end do
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
```

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{u}\bullet\nabla f = 0$$

後退差分

$$\frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta t} + \boldsymbol{u}\bullet\nabla f^n = 0$$

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \boldsymbol{u}\bullet\nabla\right) f^n = \frac{1}{\Delta t} f^{n-1}$$

ic=1, f(1,ie,ib)=chemc(1,ie,ib),Δt=commonvpar(1)

chemf(1,ie,ib)=1/Δt=1/commvpar(1)

chems(1,ie,ib)=f^{n-1}/Δt=chemc(1,ie,ib)/commonvpar(1)

比較

TSSが解析対象とする移流方程式:

$$\left(chemf(ic,ie,ib) + \boldsymbol{u}\bullet\nabla\right) f(ic,ie,ib) = chems(ic,ie,ib)$$

chemvariable の内容

```
      subroutine chemvariable(ib)
        volout=0.0
        csum=0.0
        iz=ndivzs(ib)-4
C
        if(ibtype(ib).eq.0) then
C
         do i=1,2*ndivl(ib)
          ie=i+iz*2*ndivl(ib)
          volout=volout+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)
          csum=csum+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*chemc(1,ie,ib)
         end do
C
        else
C
         do i=1,4*ndivl(ib)
          ie=i+iz*4*ndivl(ib)
          volout=volout+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)
          csum=csum+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*chemc(1,ie,ib)
         end do
C
        end if
```

ブロック毎に呼出される

流出口境界条件の影響を緩和するための境界層数: 4

ブロック ib のスクリュメッシュが標準定義の場合

周方向要素数分のループ

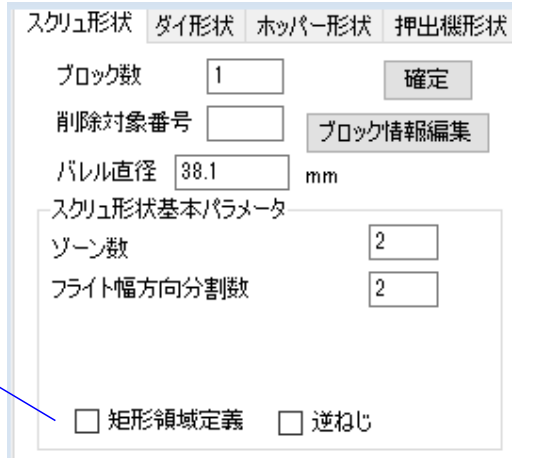
流出口境界位置の要素番号に変換

ブロック ib のスクリュメッシュが矩形領域定義の場合

周方向要素数分のループ

流出口境界位置の要素番号に変換

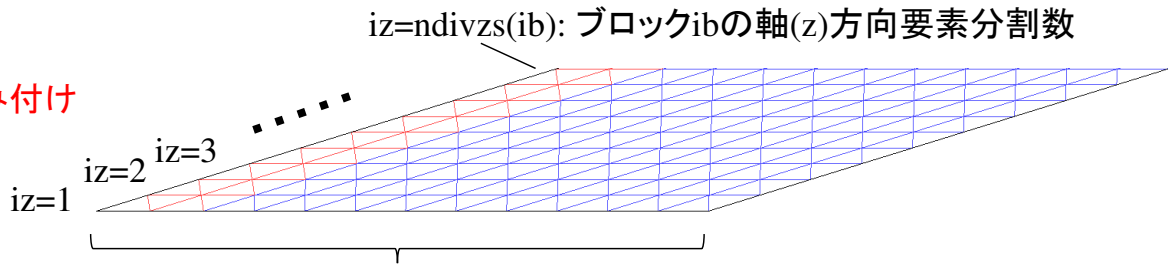
流出口境界で計算される濃度の周方向体積重み付け平均値:csum/volsum の計算



filleavb(ie,ib):ブロックibの要素ieの充満率
vol(ie,ib):ブロックibの要素ieの体積
chemc(1,ie,ib):ブロックibの要素ieの濃度

$$volsum = \sum_{ie=ns}^{ne} filleavb(ie,ib) * vol(ie,ib)$$

$$csum = \sum_{ie=ns}^{ne} filleavb(ie,ib) * vol(ie,ib) * chemc(1,ie,ib)$$



ndivl(ib): ブロックibの周方向要素分割数
標準定義の場合(ibtype(ib)=0), 周方向要素数は 2*ndivl(ib)
矩形領域定義の場合(ibtype(ib)=1), 周方向要素数は 4*ndivl(ib)

chemvariable の内容（続き）

```
if(ib.eq.1) then
commonvpar(2)=commonvpar(2)+commonvpar(1)
end if

if(ib.eq.iblock) then
write(99,*) ib,',',commonvpar(2),',',csum/volout
end if

write(*,*) ib,',',commonvpar(2),',',csum/volout
```

1ブロック目の場合
$t=t+\Delta t$

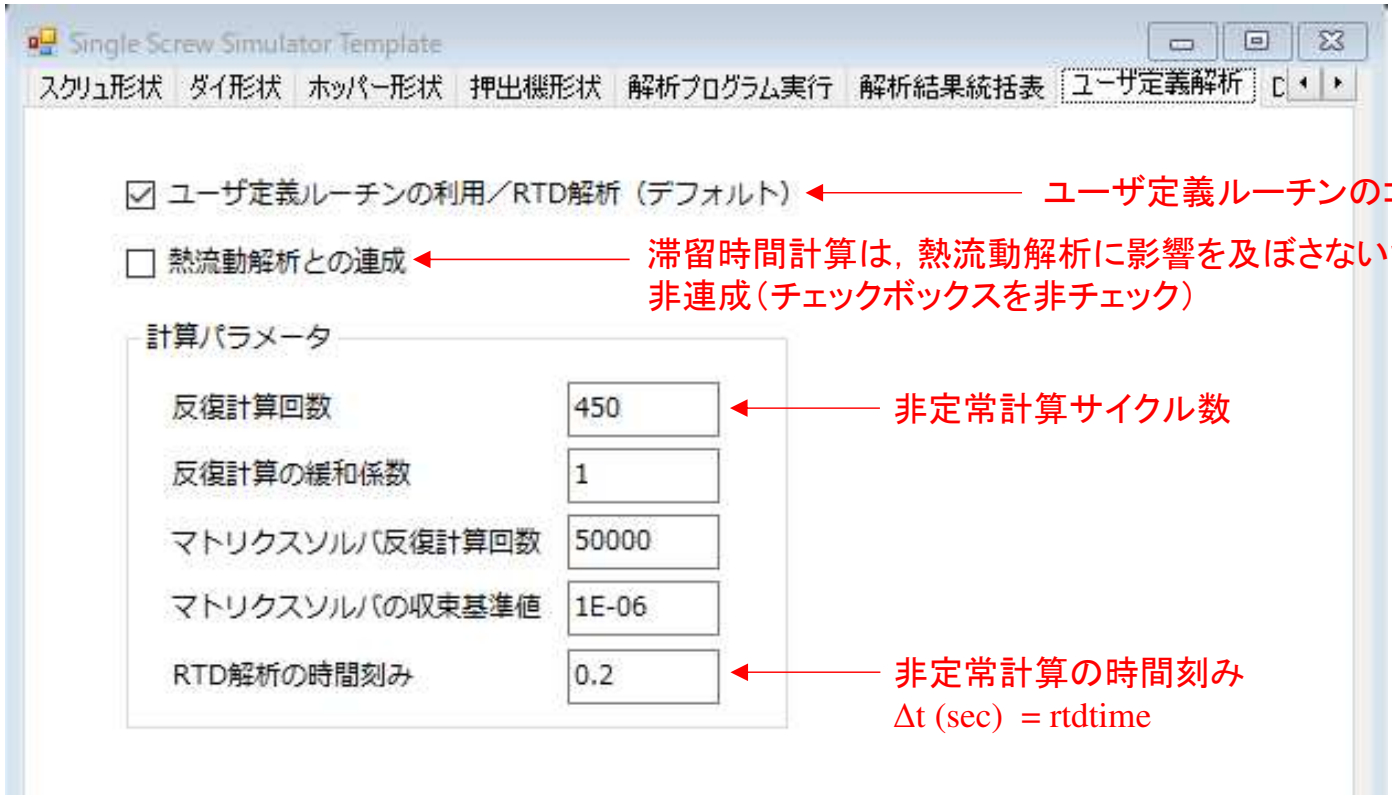
スクリュモデルの最終ブロック(iblock)の場合

cheminf ファイル (出力番号:99)へのシミュレーション時刻と流出口平均濃度のエコープリント

cheminf ファイルの出力内容は, 解析終了後に解析結果ファイル名.rtd に自動コピーされます.

実行ウィンドウ(出力番号: *)へのシミュレーション時刻と流出口平均濃度のエコープリント

User define model タブメニューの設定



SSS出力ファイル
（xxx.rtd, xxx:プロジェクト名; rtd**）

rtd_straight.rtd - メモ帳

ファイル(F)　編集(E)　書式(O)　表示(V)　ヘルプ(H)

```
3 ,  0.2000000 ,  0.0000000E+00
3 ,  0.4000000 ,  0.0000000E+00
3 ,  0.6000000 ,  0.0000000E+00
3 ,  0.8000000 ,  1.4012985E-45
3 ,  1.000000 ,  1.8216880E-44
3 ,  1.200000 ,  2.9427268E-43
3 ,  1.400000 ,  3.9698785E-42
3 ,  1.600000 ,  4.6304506E-41
3 ,  1.800000 ,  4.7561331E-40
3 ,  2.000000 ,  4.3710381E-39
3 ,  2.200000 ,  3.6392262E-38
3 ,  2.400000 ,  2.7726071E-37
3 ,  2.600000 ,  1.9490346E-36
3 ,  2.800000 ,  1.2729759E-35
3 ,  3.000000 ,  7.7706462E-35
3 ,  3.200001 ,  4.4559510E-34
3 ,  3.400001 ,  2.4109729E-33
3 ,  3.600001 ,  1.2356626E-32
3 ,  3.800001 ,  6.0194333E-32
3 ,  4.000000 ,  2.7956876E-31
3 ,  4.200000 ,  1.2413390E-30
3 ,  4.400000 ,  5.2824407E-30
3 ,  4.600000 ,  2.1592047E-29
3 ,  4.800000 ,  8.4947955E-29
3 ,  5.000000 ,  3.2227038E-28
3 ,  5.199999 ,  1.1809667E-27
```

流出口（スクリュ出口）のブロック番号

シミュレーション時刻

流出口平均濃度

コンマ区切りで
エクセルに読み込み

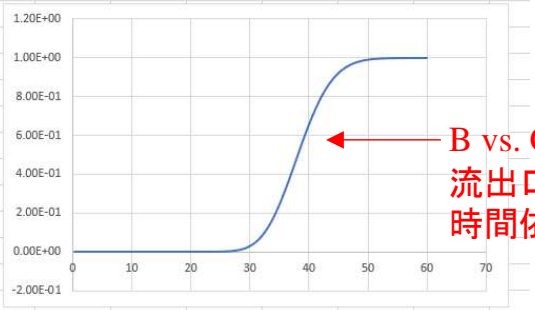
A:流出口（スクリュ出口）のブロック番号

B:シミュレーション時刻

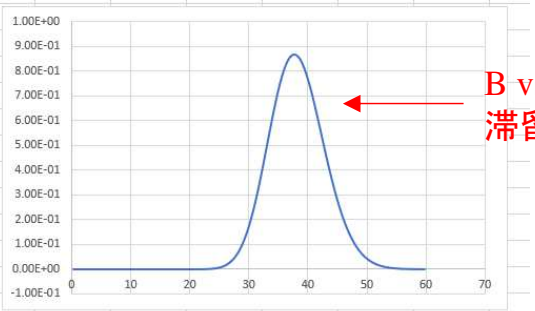
C:流出口平均濃度

D:滞留時間分布（B vs. C情報より作成）

	A	B	C	D
1	3	0.2	0.00E+00	0.00E+00
2	3	0.4	0.00E+00	0.00E+00
3	3	0.6	0.00E+00	7.01E-44
4	3	0.8	1.40E-45	8.41E-43
5	3	1	1.82E-44	1.38E-41
6	3	1.2	2.94E-43	1.84E-40
7	3	1.4	3.97E-42	2.12E-39
8	3	1.6	4.63E-41	2.15E-38
9	3	1.8	4.76E-40	1.95E-37
10	3	2	4.37E-39	1.60E-36
11	3	2.2	3.64E-38	1.20E-35
12	3	2.4	2.77E-37	8.36E-35
13	3	2.6	1.95E-36	5.39E-34
14	3	2.8	1.27E-35	3.25E-33
15	3	3	7.77E-35	1.84E-32
16	3	3.200001	4.46E-34	9.83E-32
17	3	3.400001	2.41E-33	4.97E-31
18	3	3.600001	1.24E-32	2.39E-30
19	3	3.800001	6.02E-32	1.10E-29
20	3	4	2.80E-31	4.81E-29
21	3	4.2	1.24E-30	2.02E-28
22	3	4.4	5.28E-30	8.15E-28
23	3	4.6	2.16E-29	3.17E-27
24	3	4.8	8.49E-29	1.19E-26
25	3	5	3.22E-28	4.29E-26



B vs. C：
流出口平均濃度の
時間依存性

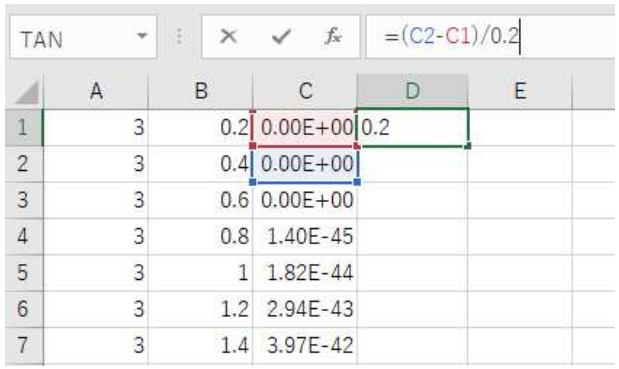


B vs. D：
滞留時間分布

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

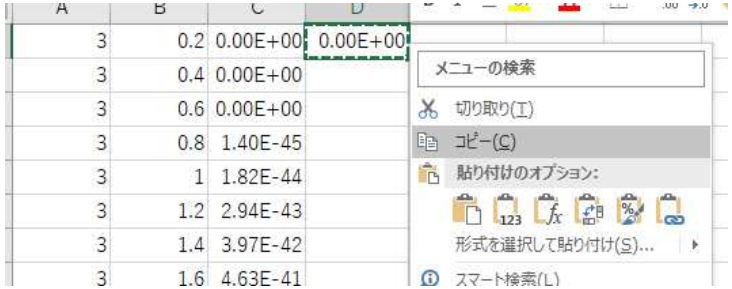
滞留時間分布情報の作成方法

1) Dカラムの1行目に数式=(C2-C1)/0.2を入力してリターンキーを押す．((C2-C1)/計算時間刻み：Δt=0.2の場合)



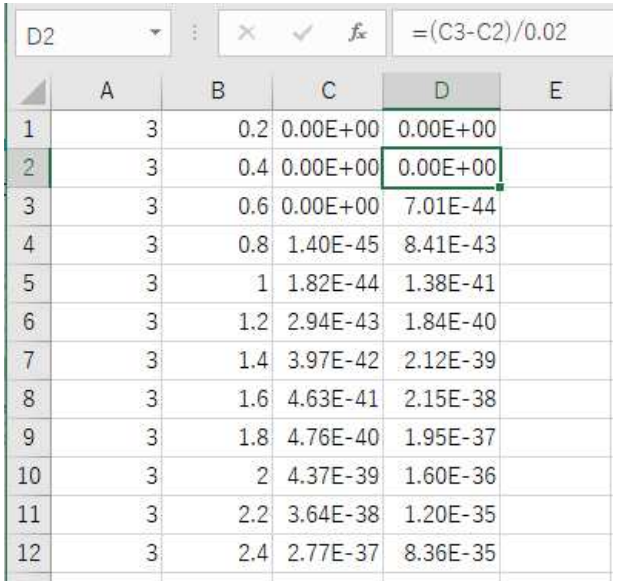
	A	B	C	D	E
1	3	0.2	0.00E+00	0.2	
2	3	0.4	0.00E+00		
3	3	0.6	0.00E+00		
4	3	0.8	1.40E-45		
5	3	1	1.82E-44		
6	3	1.2	2.94E-43		
7	3	1.4	3.97E-42		

2) Dカラムの1行目をマウスクリックし，マウス右ボタンを押してコピーを選択．



	A	B	C	D
	3	0.2	0.00E+00	0.00E+00
	3	0.4	0.00E+00	
	3	0.6	0.00E+00	
	3	0.8	1.40E-45	
	3	1	1.82E-44	
	3	1.2	2.94E-43	
	3	1.4	3.97E-42	
	3	1.6	4.63E-41	

3) Dカラムの2行目から末尾行までをマウスドラッグ選択し，再度マウス右ボタンを押して形式の貼り付けをマウスクリック選択．



	A	B	C	D	E
1	3	0.2	0.00E+00	0.00E+00	
2	3	0.4	0.00E+00	0.00E+00	
3	3	0.6	0.00E+00	7.01E-44	
4	3	0.8	1.40E-45	8.41E-43	
5	3	1	1.82E-44	1.38E-41	
6	3	1.2	2.94E-43	1.84E-40	
7	3	1.4	3.97E-42	2.12E-39	
8	3	1.6	4.63E-41	2.15E-38	
9	3	1.8	4.76E-40	1.95E-37	
10	3	2	4.37E-39	1.60E-36	
11	3	2.2	3.64E-38	1.20E-35	
12	3	2.4	2.77E-37	8.36E-35	

4) Dカラムの一番最後の行のみ削除する

296	3	59.20015	0.999934	2.35E-04
297	3	59.40015	0.999938	2.00E-04
298	3	59.60015	0.999942	1.75E-04
299	3	59.80016	0.999946	1.55E-04
300	3	60.00016	0.999949	
301				

③ PP分解反応計算（フォルダ名:pp）

Initialsetforchemの内容

```
      double precision dio,q0o,q1o,q2o,q3o,dm0
c
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c+    User define variable number
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c
c     Number of chemical species
c
      chemcnumber=4
c
c     Number of chemical variable
c
      chemvnumber=6
c
c     Number of common varialble
c
      commonvnumber=2
c
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
```

当ルーチン内で利用する変数の型宣言

解析対象とする移流方程式の数＝4

代数的関係式の数＝6

コモン変数の数＝2

```
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
c     User define Initial/Boundary condition set
c+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
      dio=1.0d-03
      q0o=1.0081d-02
      q1o=1.7857d+04
      q2o=1.5136d+11
      q3o=2.0*q2o*(2.0*q2o*q0o-q1o**2.0)/q1o/q0o
      dm0=4.2D-02
c
      chemcname(1)='Peroxide (moles/kg)'
      chemcname(2)='Q0 (moles/m3)'
      chemcname(3)='Q1 (moles/m3)'
      chemcname(4)='Q2 (moles/m3)'
c
      chemvname(1)='Q3 (moles/m3)'
      chemvname(2)='Mn (kg/m3)'
      chemvname(3)='Mw (kg/m3)'
      chemvname(4)='Mz (kg/m3)'
      chemvname(5)='Mw/Mn (-)'
      chemvname(6)='Mz/Mw (-)'
c
      dmn=dm0*q1o/q0o
      dmw=dm0*q2o/q1o
      dmz=dm0*q3o/q2o
c
      commonvpar(1)=dmw
      commonvpar(2)=dmz/dmw
c
```

化学反応計算の初期値（境界値）設定

ポスト項目の見出し

各種平均分子量の初期値設定

Viscalと共用する変数定義

```
c
      do ib=1,iblock
c
      do ie=1,nelem(ib)
c
      chemc(1,ie,ib)=dio
      chemc(2,ie,ib)=q0o
      chemc(3,ie,ib)=q1o
      chemc(4,ie,ib)=q2o
c
      chempar(1,ie,ib)=q3o
      chempar(2,ie,ib)=dmn
      chempar(3,ie,ib)=dmw
      chempar(4,ie,ib)=dmz
      chempar(5,ie,ib)=chempar(3,ie,ib)/chempar(2,ie,ib)
      chempar(6,ie,ib)=chempar(4,ie,ib)/chempar(3,ie,ib)
      end do
c
      do in=1,nnode(ib)
      chemcn(1,in,ib)=dio
      chemcn(2,in,ib)=q0o
      chemcn(3,in,ib)=q1o
      chemcn(4,in,ib)=q2o
c
      chemparn(1,in,ib)=q3o
      chemparn(2,in,ib)=dm0*q1o/q0o
      chemparn(3,in,ib)=dm0*q2o/q1o
      chemparn(4,in,ib)=dm0*q3o/q2o
      chemparn(5,in,ib)=chemparn(3,in,ib)/chemparn(2,in,ib)
      chemparn(6,in,ib)=chemparn(4,in,ib)/chemparn(3,in,ib)
c
      end do
```

全ブロックに設定

化学種要素変数の初期設定

化学種節点変数の初期設定

```
c
      if(ib.eq.1) then

      do ii=1,ndivl(ib)
      chemcn(1,ii,ib)=dio
      chemcn(2,ii,ib)=q0o
      chemcn(3,ii,ib)=q1o
      chemcn(4,ii,ib)=q2o
      end do
      end if
c
      end do
```

ブロック1の流入口
(in=1~iinletnodenum)に
濃度境界値を設定

chemfscalの内容

```
      subroutine chemvariable(ib)
c
      double precision dk0,actv,dkd,th
      fc=1.0
corg  te=200.0+273.15
      dk0=1.98d+012
      actv=1.4947d+04
corg  dkd=dk0*dexp(-actv/te)
c
      do ie=1,nelem(ib)|
c
      te=tempe(ie,ib)+273.15
      dkd=dk0*dexp(-actv/te)
c
c     Peroxide implicit difference
c
      chemf(1,ie,ib)=dkd
      chems(1,ie,ib)=0.0
c
      th=2.0*fc*dkd*chemc(1,ie,ib)
c
c     Moment q0,q1,q2 explicit difference
c
c     q0
      chemf(2,ie,ib)=0.0
      chems(2,ie,ib)=th*(chemc(3,ie,ib)-3.0*chemc(2,ie,ib))
     &           /(chemc(3,ie,ib)-chemc(2,ie,ib))
c     q1
      chemf(3,ie,ib)=0.0
      chems(3,ie,ib)=-2.0*th*chemc(2,ie,ib)
     &           /(chemc(3,ie,ib)-chemc(2,ie,ib))
c     q2
      chemf(4,ie,ib)=0.0
      chems(4,ie,ib)=th*(-chempar(1,ie,ib)/3.0
     &           +chemc(3,ie,ib)/3.0-2.0*chemc(2,ie,ib))
     &           /(chemc(3,ie,ib)-chemc(2,ie,ib))
c
      end do
c
      return
      stop
      end
```

ブロック毎に呼出される

当ルーチン内で利用する変数の型宣言

Initiator efficiency

ペルオキシド分解速度定数パラメータ

ペルオキシド分解速度定数の計算

tempe(ie, ib): ブロックibの要素ieの温度

TSSが解析対象とする移流方程式:

$$\left(chemf(ic,ie,ib)+\frac{D}{Dt}\right)f(ic,ie,ib)=chems(ic,ie,ib)$$

$$\frac{D[I]}{Dt}=-\kappa_d[I]\Rightarrow\left(\kappa_d+\frac{D}{Dt}\right)[I]=0$$

$$\frac{DQ_0}{Dt}=2f\kappa_d[I]\left(\frac{Q_1-3Q_0}{Q_1-Q_0}\right)$$

$$\frac{DQ_1}{Dt}=-2f\kappa_d[I]\left(\frac{Q_0}{Q_1-Q_0}\right)$$

$$\frac{DQ_2}{Dt}=2f\kappa_d[I]\left(\frac{-\frac{1}{3}Q_3+\frac{1}{3}Q_1-2Q_0}{Q_1-Q_0}\right)$$

変数対応関係

$[I]: chemc(1,ie,ib)$

$Q_0: chemc(2,ie,ib)$

$Q_1: chemc(3,ie,ib)$

$Q_2: chemc(4,ie,ib)$

chemvariableの内容

```
      subroutine chemvariable(ib)
c
      double precision q0o,q1o,q2o,dm0
c
      dm0=4.2D-02
c
      do ie=1,nelem(ib)
c
      q0o=chemc(2,ie,ib)
      q1o=chemc(3,ie,ib)
      q2o=chemc(4,ie,ib)
c
c     Closure relation
c
      q3o=2.0*q2o*(2.0*q2o*q0o-q1o**2.0)/q1o/q0o
c
      chempar(1,ie,ib)=q3o
      chempar(2,ie,ib)=dm0*q1o/q0o
      chempar(3,ie,ib)=dm0*q2o/q1o
      chempar(4,ie,ib)=dm0*q3o/q2o
      chempar(5,ie,ib)=chempar(3,ie,ib)/chempar(2,ie,ib)
      chempar(6,ie,ib)=chempar(4,ie,ib)/chempar(3,ie,ib)
c
      end do
c
      return
      stop
      end
```

ブロック毎に呼出される

当ルーチン内で利用する変数の型宣言

プロピレンの分子量:4.2D-02 kg/m^3

Closure relation

変数対応関係

Chempar(1,ie,ib) : Q_3

Chempar(2,ie,ib) : 数平均分子量M_n

Chempar(3,ie,ib) : 重量平均分子量M_w

Chempar(4,ie,ib) : Z平均分子量M_z

Chempar(5,ie,ib) : M_w/M_n

Chempar(6,ie,ib) : M_z/M_w

viscalの内容

```
c***  (6) Cross Model
c
      if(nonnew.eq.6) then
      eta0=bcoef*exp(tref/(temhi+273.15))
c     eta=eta0/(1.0+(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
c     vish(i,ie,ib)=eta
c
c     Molecular weight average eta0 shift proposed by Fukuoka & Min
c
      eta0=(chempar(3,ie,ib)/commonvpar(1))**3.7*eta0
c
c     MWD shift of shear thinning
c
      dc=chempar(6,ie,ib)/commonvpar(2)
corg  eta=eta0/(1.0+(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
      eta=eta0/(1.0+dc*(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
c
      vish(i,ie,ib)=omgc*eta+(1.0-omgc)*vishold
      end if
c
```

nonnew : 非ニュートン識別番号
1:Newtonian
2:Power law
3:Log polynomial
4:Carreau
5:Carreau Yasuda
6:Cross

$$\eta_0 = a \exp\left(\frac{T_b}{T + 273.15}\right)$$

a→bcoef (Material fit パラメータ),
T_b→tref (Material fit パラメータ),
T→temhi:要素ieの層iの温度

$$\eta_0(t) = \left(\frac{M_w(t)}{M_w(0)}\right)^{3.7} \eta_0(0)$$

$$dc = \frac{M_z(t)/M_w(t)}{M_z(0)/M_w(0)}$$

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + dc * \exp\left(\frac{\eta_0 * gamm}{rcoef}\right)^{1-dn}}$$

chemwriteの内容

```
      subroutine chemwrite

      dimension chemcon(4,20),chemparameter(6,20)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      open(110,File='CHEMCON',access='sequential',status='unknown',
     &     recl=220)
      open(111,File='CHEMPAR',access='sequential',status='unknown',
     &     recl=220)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      do ib=1,iblock
       if(chemcnumber.gt.0) then
       do in=ndivl(ib)+1,nnode(ib)
       do ic=1,chemcnumber
       volsum=0.0
       csum=0.0
       do ii=1,nren(in,ib)
       ine=nrelem(inrelem(in,ib)+ii-1,ib)
       if(unfillmask.eq.1) then
       volsum=volsum+vol(ine,ib)*fille(ine,ib)
       csum=csum+vol(ine,ib)*chemc(ic,ine,ib)*fille(ine,ib)
       else
       volsum=volsum+vol(ine,ib)
       csum=csum+vol(ine,ib)*chemc(ic,ine,ib)
       end if
       end do
       chemcn(ic,in,ib)=csum/volsum
       end do
       end do
       end if
```

ローカル変数の定義：化学種4成分，代数関係式6成分

出力ファイルオープン
機番110: ファイル名CHEMCON, 化学種4成分出力用
機番111: ファイル名CHEMPAR, 代数関係式6成分

ブロックのループ

境界節点を除く，節点番号ループ

化学種ループ

節点inを含む要素数ループ

ine:節点inを含む要素番号

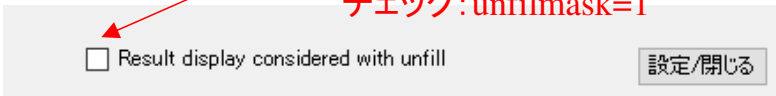
unfilmask:0 ; 未充満領域も計算量を表示
:1 ; 未充満領域の計算量を非表示

流入口境界を除く節点の化学種濃度を体積重み付けの要素濃度より計算

unfilmask:1の場合は，要素充満率を考慮した体積重み付け平均，
unfilmask:0の場合は，要素充満率を無視した体積重み付け平均

nren(in,ib):ブロックibの節点inを含む要素数
nrelem(inrelem(in,1)+ii-1,ib):ブロックibの節点inを含むii番目の要素番号
fille(ine,ib) : ブロックibの要素ineの充満率（0 or 1）

非チェック：unfilmask=0
チェック：unfilmask=1



＊Surface Renewal Model パラメータ設定フォーム下部

```
c
      if(chemvnumber.gt.0) then
      do in=ndivl(ib)+1,nnode(ib)
      do ic=1,chemvnumber
      volsum=0.0
      csum=0.0
      do ii=1,nren(in,ib)
      ine=nrelem(inrelem(in,ib)+ii-1,ib)
      if(unfillmask.eq.1) then
      volsum=volsum+vol(ine,ib)*fille(ine,ib)
      csum=csum+vol(ine,ib)*chempar(ic,ine,ib)*fille(ine,ib)
      else
      volsum=volsum+vol(ine,ib)
      csum=csum+vol(ine,ib)*chempar(ic,ine,ib)
      end if
      end do
      chemparn(ic,in,ib)=csum/volsum
      end do
      end do
      end if
```

境界節点を除く，節点番号ループ

代数関係式数ループ

節点inを含む要素数ループ

ine:節点inを含む要素番号

unfilmask:0 ; 未充満領域も計算量を表示

:1 ; 未充満領域の計算量を非表示

流入口境界を除く節点の代数関係式を体積重み付けの要素濃度より計算

unfilmask:1の場合は，要素充満率を考慮した体積重み付け平均（未充満領域を非表示），
unfilmask:0の場合は，要素充満率を無視した体積重み付け平均（未充満領域も表示）

```
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
        if(chemcnumber.ne.0) then
        if(ibtype(ib).eq.0) then
        do iz=0,ndivzs(ib)
        ntops=ndivl(ib)*iz+1
        ntope=ndivl(ib)*(iz+1)

        do ic=1,chemcnumber
        chemcon(ic,ib)=0.0
        end do
        do ic=1,chemcnumber
        countn=0.0
        do in=ntops,ntope
        countn=countn+1.0
        chemcon(ic,ib)=chemcon(ic,ib)+chemcn(ic,in,ib)
        end do
        chemcon(ic,ib)=chemcon(ic,ib)/countn
        end do
        write(110,*) znode(ntops,ib)*10.0,',',
     &                                  chemcon(1,ib),',',
     &                                  chemcon(2,ib),',',
     &                                  chemcon(3,ib),',',
     &                                  chemcon(4,ib)
        end do
        else
ccccccccc↑ibtype(ib).eq.1
```

ブロック ib のスクリュメッシュが標準定義の場合

軸方向分割数ループ

軸方向分割数iz断面内の開始節点番号

軸方向分割数iz断面内の終了節点番号

化学種 ic の数平均値の計算

軸方向分割数iz断面のz座標と各種数平均化学種計算値のファイルCHEMCON への出力

ブロック ib のスクリュメッシュが矩形領域定義の場合

以下の矩形領域定義のコードは省略（詳細は直接ソースコードを参照ください）

軸垂直断面内の化学種平均値の計算

化学種変数と数平均値対応関係

$[I]$: $chemcon(1)$

Q_0 : $chemcon(2)$

Q_1 : $chemcon(3)$

Q_2 : $chemcon(4)$

```
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      if(chemvnumber.ne.0) then
      if(ibtype(ib).eq.0) then
      do iz=0,ndivzs(ib)
      ntops=ndivl(ib)*iz+1
      ntope=ndivl(ib)*(iz+1)

      do ic=1,chemvnumber
      chemparameter(ic,ib)=0.0
      end do
      do ic=1,chemvnumber
      countn=0.0
      do in=ntops,ntope
      countn=countn+1.0
      chemparameter(ic,ib)=chemparameter(ic,ib)+chemparn(ic,in,ib)
      end do
      chemparameter(ic,ib)=chemparameter(ic,ib)/countn
      end do
      write(111,*) znode(ntops,ib)*10.0,',',
     &                                  chemparameter(1,ib),',',
     &                                  chemparameter(2,ib),',',
     &                                  chemparameter(3,ib),',',
     &                                  chemparameter(4,ib),',',
     &                                  chemparameter(5,ib),',',
     &                                  chemparameter(6,ib)
      end do
c
      else
ccccccccccc↑ ibtype(ib).eq.1
```

ブロック ib のスクリュメッシュが標準定義の場合

軸方向分割数ループ

軸方向分割数iz断面内の開始節点番号

軸方向分割数iz断面内の終了節点番号

代数関係式 ic の数平均値の計算

軸方向分割数iz断面のz座標と各種数平均代数的関係式計算値のファイルCHEMPARへの出力

軸垂直断面内の代数的関係式平均値の計算

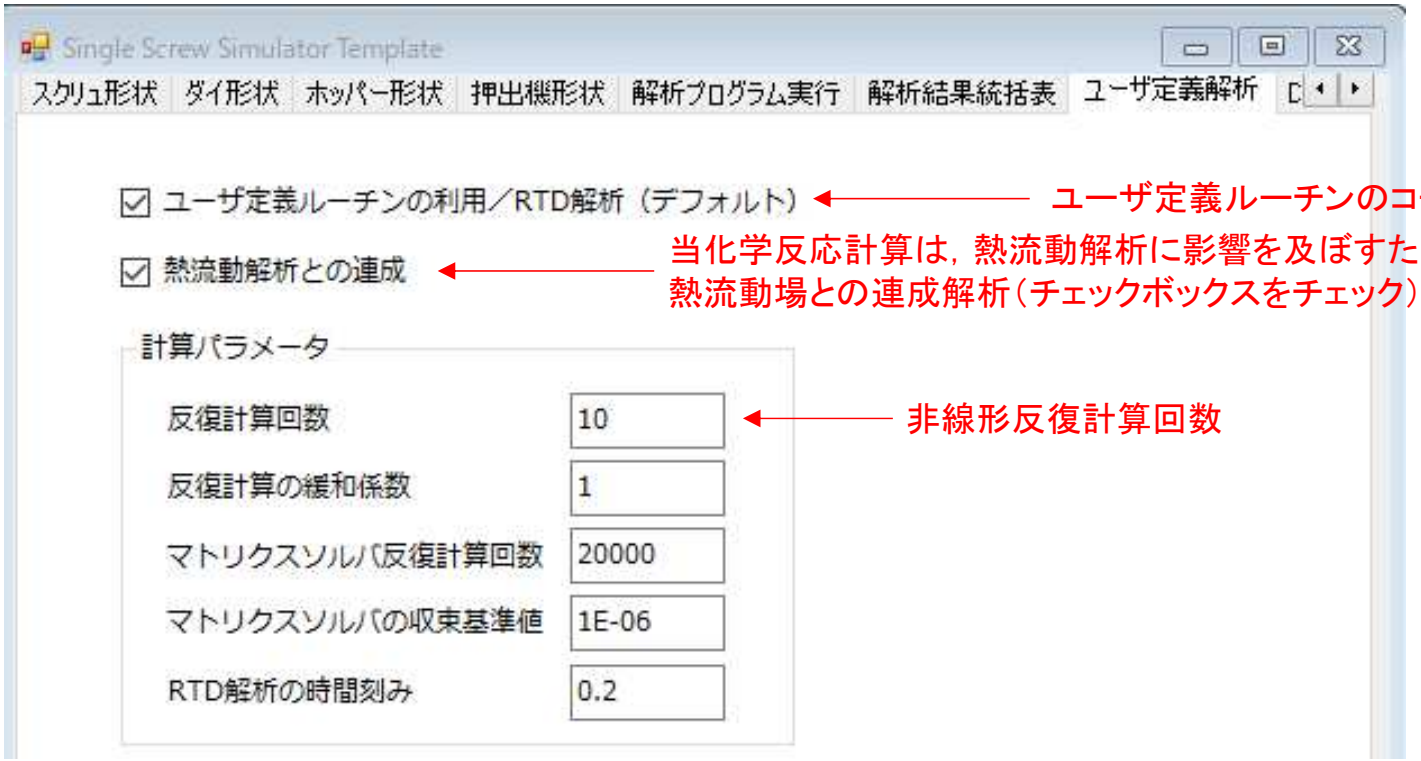
ブロック ib のスクリュメッシュが矩形領域定義の場合

以下の矩形領域定義のコードは省略（詳細は直接ソースコードを参照ください）

数平均値と代数的関係式対応関係

- chemparameter(1) : Q_3
- chemparameter(2) : 数平均分子量M_n
- chemparmeter(3) : 重量平均分子量M_w
- chemparameter(4) : Z平均分子量M_z
- chemparameter(5) : M_w/M_n
- chemparameter(6) : M_z/M_w

User define model タブメニューの設定



SSS出力ファイル
（CHEMCON, プロジェクト名; pp**）

CHEMCON - メモ帳

ファイル(F)　編集(E)　書式(O)　表示(V)　ヘルプ(H)

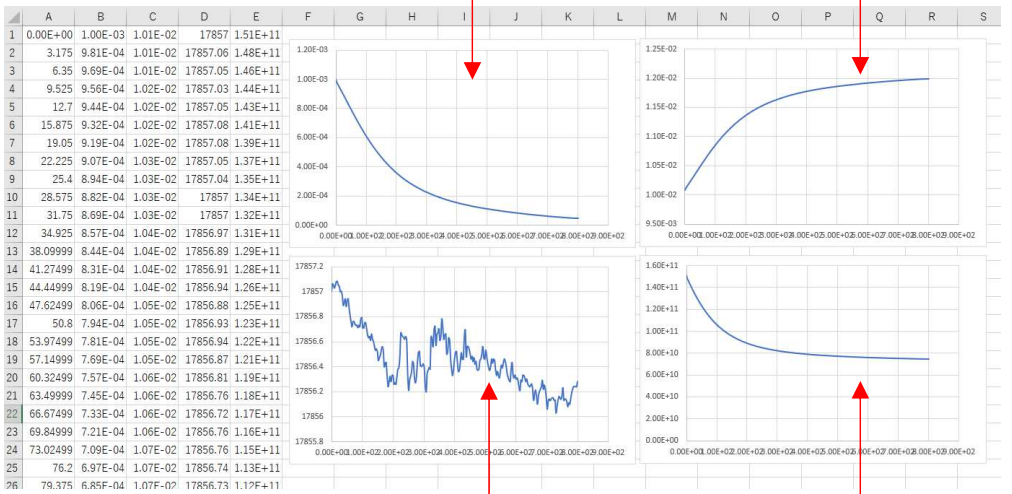
0.0000000E+00	1.0000000E-03	1.0081000E-02	17857.00	1.5136000E+11
3.175000	9.8075939E-04	1.0119480E-02	17857.00	1.4818532E+11
6.350000	9.6868741E-04	1.0143602E-02	17856.96	1.4625820E+11
9.525000	9.5648953E-04	1.0167991E-02	17856.96	1.4436337E+11
12.70000	9.4420608E-04	1.0192607E-02	17857.03	1.4250644E+11
15.87500	9.3183777E-04	1.0217361E-02	17857.05	1.4068644E+11
19.05000	9.1939484E-04	1.0242223E-02	17857.02	1.3890388E+11
22.22500	9.0689218E-04	1.0267206E-02	17856.99	1.3715976E+11
25.40000	8.9434226E-04	1.0292271E-02	17856.93	1.3545447E+11
28.57500	8.8176149E-04	1.0317413E-02	17856.91	1.3378898E+11
31.75000	8.6916424E-04	1.0342623E-02	17856.93	1.3216374E+11
34.92500	8.5655990E-04	1.0367843E-02	17856.95	1.3057835E+11
38.09999	8.4395875E-04	1.0393035E-02	17856.93	1.2903259E+11
41.27499	8.3137600E-04	1.0418214E-02	17856.95	1.2752682E+11
44.44999	8.1882108E-04	1.0443344E-02	17856.98	1.2606056E+11
47.62499	8.0630137E-04	1.0468346E-02	17856.92	1.2463292E+11
50.80000	7.9383160E-04	1.0493253E-02	17856.88	1.2324413E+11
53.97499	7.8142365E-04	1.0518066E-02	17856.87	1.2189402E+11
57.14999	7.6908356E-04	1.0542703E-02	17856.81	1.2058146E+11
60.32499	7.5682235E-04	1.0567162E-02	17856.71	1.1930616E+11
63.49999	7.4465183E-04	1.0591458E-02	17856.65	1.1806785E+11
66.67499	7.3258067E-04	1.0615569E-02	17856.60	1.1686593E+11
69.84999	7.2061876E-04	1.0639503E-02	17856.62	1.1570001E+11
73.02499	7.0877076E-04	1.0663196E-02	17856.62	1.1456886E+11
76.20000	6.9704576E-04	1.0686655E-02	17856.62	1.1347205E+11
79.37500	6.8545277E-04	1.0709904E-02	17856.72	1.1240918E+11
82.55000	6.7398982E-04	1.0732799E-02	17856.67	1.1137814E+11
85.72501	6.6266622E-04	1.0755382E-02	17856.58	1.1037875E+11
88.90001	6.5149489E-04	1.0777768E-02	17856.64	1.0941148E+11
92.07501	6.4047478E-04	1.0799855E-02	17856.71	1.0847457E+11
95.25002	6.2960945E-04	1.0821632E-02	17856.78	1.0756716E+11
98.42502	6.1889872E-04	1.0843026E-02	17856.74	1.0668778E+11
101.6000	6.0834904E-04	1.0864089E-02	17856.69	1.0583619E+11

Z座標　[I]　Q_0　Q_1　Q_2

コンマ区切りで
エクセルに読み込み

A vs. B：
z座標 vs. ペルオキシド濃度

A vs. C：
z座標 vs. Q_0



A vs. D：
z座標 vs. Q_1

A vs. E：
z座標 vs. Q_2

HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory

SSS出力ファイル
（CHEMPPAR, プロジェクト名;pp**）

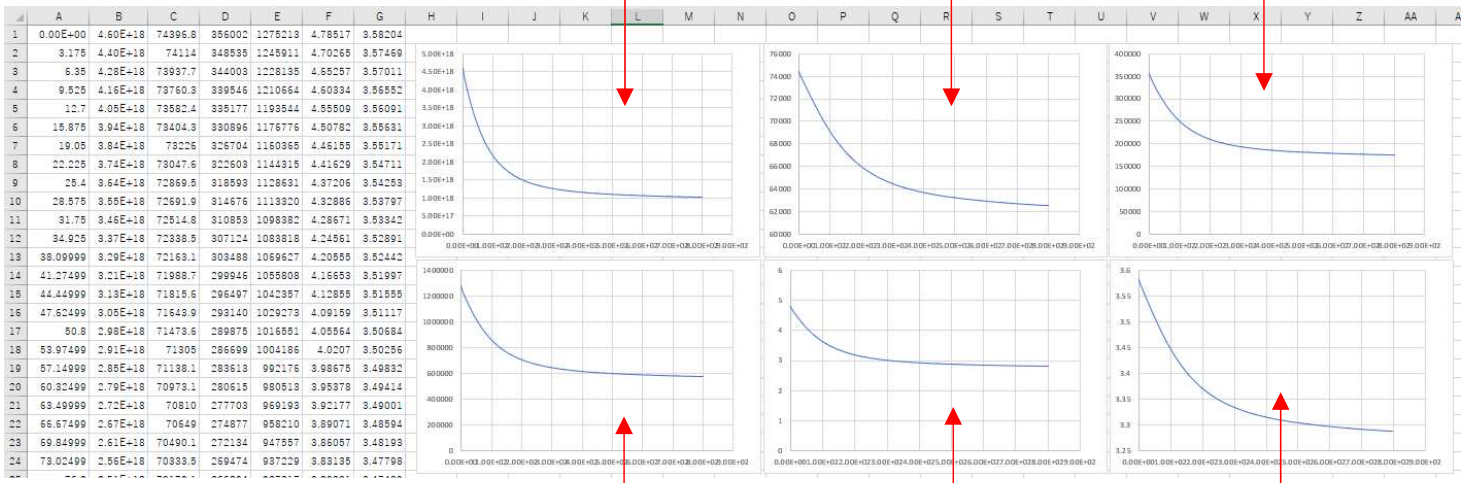
CHEMPAR - メモ帳

ファイル(F)　編集(E)　書式(O)　表示(V)　ヘルプ(H)

0.0000000E+00	4.5956216E+18	74396.82	356001.8	1275213.	4.785177	3.582043
1.250000	4.5499855E+18	74334.25	354310.3	1268573.	4.766447	3.580399
2.500000	4.5320531E+18	74309.46	353643.6	1265956.	4.759066	3.579749
3.750000	4.5131555E+18	74283.17	352939.6	1263192.	4.751271	3.579059
5.000000	4.4937689E+18	74256.06	352215.5	1260350.	4.743255	3.578348
6.250000	4.4741599E+18	74228.47	351481.8	1257470.	4.735132	3.577625
7.500000	4.4544627E+18	74200.62	350743.0	1254571.	4.726953	3.576894
8.750000	4.4346146E+18	74172.35	349996.9	1251642.	4.718694	3.576152
10.00000	4.4145884E+18	74143.70	349242.2	1248682.	4.710341	3.575402
11.25000	4.3946020E+18	74114.91	348487.7	1245721.	4.701990	3.574647
12.50000	4.3746327E+18	74085.95	347731.9	1242755.	4.693624	3.573890
13.75000	4.3545924E+18	74056.73	346971.6	1239773.	4.685211	3.573125
15.00000	4.3344692E+18	74027.23	346206.4	1236771.	4.676743	3.572352
16.25000	4.3142481E+18	73997.35	345435.7	1233748.	4.668214	3.571570
17.50000	4.2938999E+18	73967.11	344658.2	1230699.	4.659612	3.570780
18.75000	4.2733976E+18	73936.45	343872.9	1227619.	4.650923	3.569977
20.00000	4.2526971E+18	73905.29	343078.0	1224502.	4.642128	3.569162
21.25000	4.2318685E+18	73873.72	342276.4	1221358.	4.633260	3.568337
22.50000	4.2110550E+18	73841.96	341473.1	1218209.	4.624375	3.567508

Z座標　Q_3　Mn　Mw　Mz　Mw/Mn　Mz/Mw

コンマ区切りでエクセルに読み込み



HASL Hyper Advanced Simulation Laboratory