

令和元年度

文部科学省 国家課題対応型研究開発推進事業

原子力システム研究開発事業

革新的ナトリウム冷却高速炉における
マルチレベル・マルチシナリオプラント
シミュレーションシステム技術の
研究開発

成果報告書

令和2年3月

国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構

本報告書は、文部科学省のエネルギー対策特別会計
委託事業による委託業務として、国立研究開発法人
日本原子力研究開発機構が実施した平成 28 年度－
2019 年度「革新的ナトリウム冷却高速炉におけるマル
チレベル・マルチシナリオプラントシミュレーション
システム技術の研究開発」の成果を取りまとめたもの
です。

目次

概略	xiii
1. はじめに	1-1
2. 業務計画	2-1
2.1 全体計画	2-1
2.1.1 マルチレベルシミュレーションシステム開発	2-1
2.1.2 シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発	2-1
2.1.3 コード V&V のための実験データベース構築	2-1
2.1.4 研究推進	2-3
3. 業務の実施内容及び成果	3-1
3.1 マルチレベルシミュレーションシステム開発	3-1
3.1.1 はじめに	3-1
3.1.2 統合プラットフォームの開発【H28】	3-1
3.1.3 統合プラットフォーム上での連成解析手法の開発【H29-H30】	3-6
3.1.4 システムの総合的な妥当性評価【R1】	3-23
3.2 シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発	3-36
3.2.1 はじめに	3-36
3.2.2 基本モジュールの構築【H28-29, R1】	3-36
3.2.2.1 炉内基本モジュール【H28-29, R1】	3-36
3.2.2.2 炉外基本モジュール【H28-29】	3-44
3.2.2.3 数値計算高速化【H29-30】	3-48
3.2.3 個別物理モデルモジュールの構築【H28-30】	3-50
3.2.3.1 炉内側及び炉外側物理モデルの選定【H28-29】	3-50
3.2.3.2 炉内側物理モジュールの構築【H30】	3-56
3.2.3.3 炉外側物理モジュールの抽出【H29-30】	3-57
3.2.4 炉内基本モジュールへの物理モジュール組み込み【R1】	3-59
3.2.5 マルチシナリオシミュレーションシステム構築【R1】	3-62
3.2.6 総合妥当性検証【R1】	3-66
3.3 コード V&V のための実験データベース構築	3-69
3.3.1 ナトリウム燃焼に係る基礎実験	3-69
3.3.2 燃焼生成エアロゾル性状計測	3-109
(再委託先：徳島大学)【H28-R1】	
3.3.3 ナトリウムとコンクリートとの反応性に係る熱分析実験【H28~H29】 ...	3-142
3.3.4 ナトリウム - コンクリート反応の熱的挙動解析	3-146
(再委託先：広島大学)【H28~R1】	
3.4 研究推進	3-167

4. 結言	4-1
4.1 マルチレベルシミュレーションシステム開発.....	4-1
4.2 シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発.....	4-1
4.3 コード V&V のための実験データベース構築.....	4-1
4.3.1 ナトリウム燃焼に係る基礎実験	4-1
4.3.2 燃焼生成エアロゾル性状計測.....	4-2
4.3.3 ナトリウムとコンクリートとの反応性に係る熱分析実験	4-2
4.3.4 ナトリウム - コンクリート反応の熱的挙動解析	4-2
4.4 研究推進.....	4-3

表一覧

表 3. 1. 2-1	高速炉の炉心熱流動・炉物理に関連する解析コードと・・・ モデル詳細度レベル	3-4
表 3. 1. 2-2	既往研究で採用されているカップリング方法・・・・・・・ (先行事例)	3-4
表 3. 1. 2-3	統合プラットフォームの主要な要求機能・・・・・・・	3-4
表 3. 1. 3-1	主要な熱流動評価課題における連成解析・・・・・・・	3-13
表 3. 1. 3-2	CFD コードの解析オプション設定・・・・・・・	3-14
表 3. 1. 3-3	1D-サブチャンネル連成解析の妥当性確認における・・・・・・ 解析体系	3-14
表 3. 1. 3-4	1D-サブチャンネル連成解析の妥当性確認における・・・・・・ 解析条件（主循環系一巡の熱流動問題）	3-15
表 3. 1. 3-5	1D-サブチャンネル連成解析の妥当性確認における・・・・・・ 解析条件（燃料集合体間径方向熱移行問題）	3-15
表 3. 1. 4-1	炉上部プレナム及び Z 型配管の CFD モデルの概要・・・・・・	3-27
表 3. 1. 4-2	炉上部プレナム内熱流動を対象とした解析ケース・・・・・・	3-27
表 3. 1. 4-3	SHRT-45R 試験の解析条件・・・・・・・	3-28
表 3. 1. 4-4	炉心部熱流動を対象とした解析ケース・・・・・・・	3-28
表 3. 1. 4-5	核計算モデルの設定内容・・・・・・・	3-28
表 3. 1. 4-6	核 - 熱連成挙動を対象とした SHRT-45R 試験条件の・・・・・・ 解析ケース	3-28
表 3. 1. 4-7	制御棒誤引抜き事象の解析条件・・・・・・・	3-29
表 3. 1. 4-8	制御棒誤引抜き事象の解析ケース・・・・・・・	3-29
表 3. 2. 3. 1-1	既存類似コード比較による開発システムに・・・・・・・ 必要な物理モデル（機能）	3-51
表 3. 2. 3. 1-2	確率論的リスク評価への包絡性を考慮した・・・・・・・ 開発システムに必要な物理モデル（機能）	3-52
表 3. 2. 3. 1-3	炉内事象及びモデルの物理的重要度と組み込み方針・・・・・・	3-53
表 3. 2. 3. 1-4	炉外事象及びモデルの物理的重要度と組み込み方針・・・・・・	3-54
表 3. 3. 1-1	適用性確認の実験条件・・・・・・・	3-76
表 3. 3. 1-2	各配置における実験条件・・・・・・・	3-77
表 3. 3. 1-3	水平配置における実験の解析条件・・・・・・・	3-77
表 3. 3. 1-4	垂直配置における実験の解析条件・・・・・・・	3-78
表 3. 3. 1-5	熱印加時の垂直配置における実験の解析条件・・・・・・・	3-78
表 3. 3. 2-1	試験条件・・・・・・・	3-115
表 3. 3. 2-2	ラマン散乱法で用いたレーザ装置・・・・・・・	3-115
表 3. 3. 2-3	r=15mm のラマン散乱光計測試験条件・・・・・・・	3-115
表 3. 3. 2-4	ミー散乱計測で使用したダイオードレーザー一覧・・・・・・・	3-116
表 3. 3. 2-5	計測値と理論値との誤差を最小とする粒径、複素屈折率・・	3-116
表 3. 3. 2-6	粒径として LII 計測値を使用した場合の複素屈折率・・・・	3-116

表 3.3.2-7	ラテックス粒子の仕様.....	3-117
表 3.3.2-8	ナトリウム-水反応モデル.....	3-117
表 3.3.2-9	ナトリウム-酸素反応モデル.....	3-118
表 3.3.2-10	粒子生成反応モデル.....	3-118
表 3.3.4-1	二酸化炭素雰囲気中でのパーライトコンクリートの..... 加熱した際の多段階反応の各反応段階の速度論的パラメータ	3-159
表 3.3.4-2	ナトリウム - コンクリート反応に係る化学変化..... 及び物理変化についての基礎的情報	3-163

図一覧

図 2.1-1	全体計画.....	2-4
図 3.1.2-1	高速炉プラントの炉心部の物理現象に対応する..... 解析モデルとその詳細度	3-5
図 3.1.2-2	シーケンシャル Two-way カップリング法による..... データ同期方法	3-5
図 3.1.2-3	統合プラットフォームの概要.....	3-5
図 3.1.3-1	ナトリウム冷却高速炉における主要な熱流動評価課題....	3-15
図 3.1.3-2	2次元「閉」ループ体系.....	3-16
図 3.1.3-3	1D-CFD 連成解析時のデータ同期.....	3-16
図 3.1.3-4	1D-CFD 連成解析の妥当性確認用モデル.....	3-16
図 3.1.3-5	ポンプ駆動流れ問題の流量（層流ケース）.....	3-17
図 3.1.3-6	ポンプ駆動流れ問題の流量（乱流ケース）.....	3-17
図 3.1.3-7	密度差駆動問題の温度と入熱・除熱量.....	3-18
図 3.1.3-8	密度差駆動問題の流量とポンプ回転速度.....	3-18
図 3.1.3-9	1D-サブチャンネル連成解析手法の妥当性確認用の..... 解析体系	3-19
図 3.1.3-10	主循環系一巡熱流動問題の解析モデル.....	3-19
図 3.1.3-11	サブチャンネル解析コードのメッシュ設定.....	3-19
図 3.1.3-12	主循環系一巡熱流動問題でのデータ同期方法.....	3-20
図 3.1.3-13	等温解析（Case1）での燃料集合体燃料..... ピンバンドル部の流量配分	3-20
図 3.1.3-14	非等温解析（Case2）での燃料集合体燃料..... ピンバンドル部の流量配分	3-20
図 3.1.3-15	燃料集合体間径方向熱移行問題の解析モデルと..... データ同期方法	3-21
図 3.1.3-16	発熱上端高さ位置における中心燃料集合体と..... 周辺燃料集合体の水平断面温度分布の解析結果	3-21
図 3.1.3-17	核一熱連成解析の同期方法.....	3-22
図 3.1.3-18	核一熱連成解析妥当性評価のための解析モデル.....	3-22
図 3.1.3-19	核一熱連成解析の結果.....	3-22

図 3.1.4-1	EBR-II の系統構成と炉上部プレナム構造	3-30
図 3.1.4-2	炉心構成と試験集合体 XX09	3-30
図 3.1.4-3	炉上部プレナム及び Z 型配管の熱流動解析モデルの概要 ..	3-30
図 3.1.4-4	炉心核出力の時間変化	3-31
図 3.1.4-5	1 次冷却系 No.2 ループ流量の時間変化	3-31
図 3.1.4-6	Z 配管入口温度の時間変化	3-31
図 3.1.4-7	代表的な位置での炉心出口温度の時間変化	3-32
図 3.1.4-8	CFD モデルによる炉上部プレナム内温度分布の解析結果 ..	3-32
図 3.1.4-9	炉上部プレナム内高さ方向温度分布の時間変化	3-32
図 3.1.4-10	燃料集合体モデルの概要	3-33
図 3.1.4-11	試験集合体 XX09 水平温度分布の時間変化	3-33
図 3.1.4-12	多次元核動特性モデルの反応度計算メッシュ体系	3-33
図 3.1.4-13	核出力の時間変化	3-34
図 3.1.4-14	反応度の時間変化	3-34
図 3.1.4-15	炉心出口温度の時間変化	3-34
図 3.1.4-16	核出力の時間変化	3-35
図 3.1.4-17	反応度の時間変化	3-35
図 3.1.4-18	中性子束分布形状（多次元核動特性モデルの解析結果） ..	3-35
図 3.2.2.1-1	ナトリウム冷却高速炉の 1 次系を模擬した解析体系	3-40
	(VOF 法)	
図 3.2.2.1-2	解析結果概要 (VOF 法)	3-40
図 3.2.2.1-3	ナトリウム冷却高速炉の 1 次系を模擬した解析体系	3-41
	(多流体 1 圧力モデル)	
図 3.2.2.1-4	定格運転時解析結果 (多流体 1 圧力モデル)	3-42
図 3.2.2.1-5	LORL 解析 (1 ループ、多流体 1 圧力モデル)	3-42
図 3.2.2.1-6	LORL 解析 (2 ループ、多流体 1 圧力モデル)	3-43
図 3.2.2.2-1	炉外基本モジュールの妥当性解析体系 (温度変化なし) ..	3-46
図 3.2.2.2-2	部屋間通気流量の時間変化	3-46
図 3.2.2.2-3	炉外基本モジュールの妥当性解析体系 (温度変化あり) ..	3-47
図 3.2.2.2-4	部屋 2 における雰囲気温度の時間変化	3-47
図 3.2.2.3-1	壁面熱輸送解析におけるタイムステップの影響	3-49
図 3.2.3.3-1	浸食深さの時間変化	3-58
図 3.2.4-1	粒子法-CFD 妥当性解析 (単一粒子自由落下)	3-61
図 3.2.4-2	粒子法-CFD 妥当性解析 (単一粒子熱伝達)	3-61
図 3.2.4-3	燃料溶融を模擬した CFD-粒子法連成解析	3-61
図 3.2.5-1	デブリーコンクリート反応時の雰囲気温度、	3-64
	モル分率、浸食界面形状	
図 3.2.5-2	スプレイ燃焼時の雰囲気温度及びエアロゾル質量変化	3-65
	(ケース 1)	

図 3.2.5-3	プール燃焼時の雰囲気温度変化（ケース 2）	3-65
図 3.2.6-1	総合妥当性検証体系	3-67
図 3.2.6-2	総合妥当性検証結果	3-68
図 3.3.1-1	多セル区画実験装置の全景	3-79
図 3.3.1-2	実験セル構造	3-79
図 3.3.1-3	矩形型連通管構造	3-80
図 3.3.1-4	矩形型連通管外観	3-80
図 3.3.1-5	エアロゾルジェネレータ	3-81
図 3.3.1-6	多セル区画実験装置の改造後全景	3-81
図 3.3.1-7	CT-TDLAS 装置の全景	3-82
図 3.3.1-8	解析結果（ヒータ高さ 50mm）	3-82
図 3.3.1-9	解析結果（ヒータ高さ 100mm）	3-82
図 3.3.1-10	解析結果（ヒータ高さ 150mm）	3-83
図 3.3.1-11	計測温度との比較	3-83
図 3.3.1-12	多セル区画実験装置の全体系統（水平配置）	3-83
図 3.3.1-13	水平配置における実験での基準セル模擬粒子噴出状況	3-84
図 3.3.1-14	水平配置における実験での移行粒子状況	3-84
図 3.3.1-15	水平配置における実験の基準セル底面の 模擬粒子沈降分布	3-85
図 3.3.1-16	水平配置における実験の隣接セル底面の 模擬粒子沈降分布	3-85
図 3.3.1-17	多セル区画実験装置の全体系統（垂直配置）	3-86
図 3.3.1-18	垂直配置における実験での基準セル内 模擬粒子噴出状況	3-87
図 3.3.1-19	垂直配置における実験での移行状況（連通管）	3-88
図 3.3.1-20	垂直配置における実験での移行状況（隣接セル下部）	3-88
図 3.3.1-21	垂直配置における実験の基準セル底面の 模擬粒子沈降分布	3-89
図 3.3.1-22	垂直配置における実験の隣接セル底面の 模擬粒子沈降分布	3-89
図 3.3.1-23	多セル区画実験装置の全体系統（垂直配置・熱印加）	3-90
図 3.3.1-24	垂直配置における熱印加実験での基準セル内 模擬粒子噴出状況	3-91
図 3.3.1-25	垂直配置における熱印加実験での移行粒子状況 （連通管）	3-92
図 3.3.1-26	垂直配置における熱印加実験での移行粒子状況 （隣接セル下部）	3-92
図 3.3.1-27	垂直配置における熱印加実験の基準セル底面の 模擬粒子沈降分布	3-93
図 3.3.1-28	垂直配置における熱印加実験の隣接セル底面の 模擬粒子沈降分布	3-93

図 3.3.1-29	水平配置における実験の解析モデル.....	3-93
図 3.3.1-30	水平配置における実験の解析結果（濃度コンター）.....	3-94
図 3.3.1-31	水平配置における実験の解析結果..... （連通管における空気の流れベクトル）	3-96
図 3.3.1-32	水平配置における実験の解析結果..... （24 時間後の沈降分布）	3-97
図 3.3.1-33	垂直配置における実験の解析モデル.....	3-97
図 3.3.1-34	垂直配置における実験の解析結果（濃度コンター）.....	3-98
図 3.3.1-35	垂直配置における実験の解析結果..... （連通管における空気の流れベクトル）	3-100
図 3.3.1-36	垂直配置における実験の解析結果..... （24 時間後の沈降分布）	3-102
図 3.3.1-37	熱印加時の垂直配置における実験の解析モデル.....	3-102
図 3.3.1-38	熱印加時の垂直配置における実験の解析結果..... （空気の流れコンター）	3-103
図 3.3.1-39	熱印加時の垂直配置における実験の解析結果..... （濃度コンター）	3-104
図 3.3.1-40	熱印加時の垂直配置における実験の解析結果..... （連通管における空気の流れベクトル）	3-106
図 3.3.1-41	熱印加時の垂直配置における実験の解析結果..... （2,000 秒後の沈降分布）	3-108
図 3.3.2-1	対向型ナトリウム反応装置.....	3-119
図 3.3.2-2	レーザ計測装置配置.....	3-119
図 3.3.2-3	レーザ計測光学系.....	3-120
図 3.3.2-4	可視化計測結果 （ナトリウム温度の影響、酸素濃度：2%）.....	3-120
図 3.3.2-5	可視化計測結果 （酸素濃度の影響、ナトリウム温度：820K）.....	3-121
図 3.3.2-6	酸化剤の違いによる燃焼形態変化 （ナトリウム温度：820K）.....	3-121
図 3.3.2-7	ラマン散乱法で用いた光学系写真.....	3-121
図 3.3.2-8	酸化ナトリウムのラマンスペクトル.....	3-122
図 3.3.2-9	過酸化ナトリウムのラマンスペクトル.....	3-123
図 3.3.2-10	水酸化ナトリウムのラマンスペクトル.....	3-124
図 3.3.2-11	ナトリウム-酸素燃焼におけるラマン散乱光（ $r=0\text{mm}$ ）.....	3-125
図 3.3.2-12	条件 3 におけるラマン散乱光計測結果.....	3-126
図 3.3.2-13	415nm における発光強度比の 2 次元画像（条件 1）.....	3-127
図 3.3.2-14	LII 計測結果（条件 1、酸素濃度 2%-No.1）.....	3-127
図 3.3.2-15	LII 計測結果（条件 1、酸素濃度 2%-No.2）.....	3-129
図 3.3.2-16	LII 計測結果（条件 1、酸素濃度 2%-No.3）.....	3-130

図 3.3.2-17	LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No.1)	3-131
図 3.3.2-18	LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No.2)	3-132
図 3.3.2-19	LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No.3)	3-134
図 3.3.2-20	粒径、複素屈折率とミー散乱光強度の関係 (1.5-0.4i) ..	3-135
図 3.3.2-21	ミー散乱光計測画像 (条件 1、酸素濃度 : 2%)	3-135
図 3.3.2-22	実験結果とミー散乱理論との比較	3-136
図 3.3.2-23	直径、複素屈折率における誤差分布	3-137
	(誤差最小値 : 0.76)	
図 3.3.2-24	実験結果とミー散乱理論との比較	3-137
	(粒径として LII 計測値を使用)	
図 3.3.2-25	複素屈折率における誤差分布	3-137
	(粒径として LII 計測値を使用、最小値 : 7.36)	
図 3.3.2-26	ラテックス粒子のミー散乱光計測画像	3-138
図 3.3.2-27	ラテックス粒子のミー散乱光強度波長依存性	3-138
	(レーザ光使用)	
図 3.3.2-28	ラテックス粒子のミー散乱光強度波長依存性	3-139
	(ランプ光使用)	
図 3.3.2-29	ナトリウムの蒸気圧と温度の関係	3-140
図 3.3.2-30	ナトリウム-酸素反応解析結果	3-140
	(粒子生成反応モデルなし)	
図 3.3.2-31	ナトリウム-水蒸気反応解析結果 (水蒸気濃度 2%) ...	3-141
図 3.3.2-32	粒子生成反応モデルを付加したナトリウム-酸素	3-141
	反応解析結果 (条件 2、酸素濃度 4%)	
図 3.3.3-1	試験装置概要	3-144
図 3.3.3-2	グローブボックス内に設置された試験装置	3-145
図 3.3.4-1	種々の二酸化炭素分圧 (全圧: 101.3kPa) の	3-157
	窒素-二酸化炭素混合気流 (流速: 300cm ³ min ⁻¹) 中で 測定したパーライトコンクリート (試料量: 10.0mg) の TG/DTG-DTA 曲線 (昇温速度: 5Kmin ⁻¹)	
図 3.3.4-2	二酸化炭素分圧 20kPa の窒素-二酸化炭素混合気流	3-157
	(流速: 100cm ³ min ⁻¹) 中でパーライトコンクリートを 段階的に加熱した際の XRD パターンの変化	
図 3.3.4-3	二酸化炭素分圧 15kPa の窒素-二酸化炭素気流	3-158
	(流速: 300cm ³ min ⁻¹) 中、種々の昇温速度で測定した パーライトコンクリート (試料量: 10.0mg) の TG/DTG-DTA 曲線	
図 3.3.4-4	二酸化炭素分圧 15kPa の窒素-二酸化炭素気流	3-158
	(流速: 300cm ³ min ⁻¹) 中でパーライトコンクリートを 加熱した際の多段階反応に対する速度論的分離解析の例 (昇温速度: 5Kmin ⁻¹)	
図 3.3.4-5	二酸化炭素分圧 15kPa の窒素-二酸化炭素気流	3-159
	(流速: 300cm ³ min ⁻¹) 中でパーライトコンクリートを加熱した 際の各反応段階の実験母曲線	
図 3.3.4-6	雰囲気水蒸気圧を制御した条件での TG-DTG 測定の	3-160

	ための装置構成の概略	
図 3.3.4-7	雰囲気水蒸気圧を制御した条件でのパーライト..... コンクリートの熱分解反応に対する TG-DTG 測定例	3-160
図 3.3.4-8	種々の水蒸気分圧(全圧: 101.3kPa)の窒素-水蒸気..... 混合気流(流速: 300cm ³ min ⁻¹)中で測定した パーライトコンクリート(試料量: 10.0mg)の TG-DTG 曲線(昇温速度: 5Kmin ⁻¹)	3-161
図 3.3.4-9	水蒸気分圧 4.2kPa(全圧: 101.3kPa)の窒素-水蒸気..... 混合気流(流速: 300cm ³ min ⁻¹)中、種々の昇温速度で 測定したパーライトコンクリート(試料量: 10.0mg)の TG-DTG 曲線	3-161
図 3.3.4-10	種々の水蒸気分圧(全圧: 101.3kPa)の窒素-水蒸気..... 混合気流(流速: 300cm ³ min ⁻¹)中で測定したパーライト コンクリート(試料量: 10.0mg)の TG-DTG 曲線 (昇温速度: 5Kmin ⁻¹)	3-162
図 3.3.4-11	ナトリウム-コンクリート反応に係る事象の..... 進展モデル	3-162
図 3.3.4-12	温度軸上で整理した反応進展モデルの概略.....	3-164
図 3.3.4-13	400~500K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート .. 反応の反応進展の概略	3-164
図 3.3.4-14	600K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート..... 反応の反応進展の概略	3-165
図 3.3.4-15	700K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート..... 反応の反応進展の概略	3-165
図 3.3.4-16	600K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート..... 反応の速度論的シミュレーションの例	3-166
図 3.3.4-17	700K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート..... 反応の速度論的シミュレーションの例	3-166

略語一覧

OD	: 0 Dimensional	(0 次元)
1D	: 1 Dimensional	(1 次元)
ANL	: Argonne National Laboratory	(アルゴンヌ国立研究所、米国)
ATWS	: Anticipated Transient without Scram	(原子炉停止機能喪失)
CEA	: Alternative Energies and Atomic Energy Commission	(原子力・代替エネルギー庁、仏国)
CFD	: Computational Fluid Dynamics	(計算流体力学)
CT	: Computed Tomography	(コンピュータ断面撮影)
DSC	: Differential Scanning Calorimetry	(示差走査熱量測定)
DPD	: Dissipative Particle Dynamics	(散逸粒子動力学)
EMPA	: Electron Probe Micro-analyzer	(電子プローブマイクロアナライザ)
FP	: Fission Products	(核分裂生成物)
GRS	: Global Research for Safety	(原子炉安全協会、独国)
I/O	: Input/Output	(入出力)
IAE	: Institute of Applied Energy	(エネルギー総合工学研究所、日本)
IAEA	: International Atomic Energy Agency	(国際原子力機関)
IHX	: Intermediate Heat eXchanger	(中間熱交換器)
JAEA	: Japan Atomic Energy Agency	(日本原子力研究開発機構、日本)
JNES	: Japan Nuclear Energy Safety Organization	(原子力安全基盤機構、日本)
LII	: Laser Induced Incandescence	(レーザ誘起灼熱法)
LOHRS	: Loss of Heat Removal System	(除熱機能喪失)
LORL	: Loss of Reactor Level	(原子炉容器液位確保機能喪失)
MICCG	: Modified Incomplete Cholesky Conjugate Gradient method	(修正不完全コレスキー分解前処理付き共役勾配法)
MPI	: Message Passing Interface	(メッセージパッシングインターフェース)
NEAMS	: Nuclear Energy Advanced Modeling and Simulation	(NEAMS プロジェクト、米国)
NRA	: Nuclear Regulation Authority	(原子力規制委員会、日本)
PIRT	: Phenomena Identification and Ranking Table	(重要度ランク表)
PRA	: Probabilistic Risk Assessment	(確率論的リスク評価)
PLOHS	: Protected Loss of Heat Sink	(崩壊熱除去機能喪失)
Re	: Reynolds Number	(レイノルズ数)
SA	: Severe Accident	(シビアアクシデント)
SEM	: Scanning Electron Microscope	(走査型電子顕微鏡)

SIMPLER	: Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations - Revised	(改良型圧力結合方程式の半陰解法)
SNL	: Sandia National Laboratories	(サンディア国立研究所、米国)
SOR	: Successive Over Relaxation	(逐次緩和法)
TDLAS	: Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy	(可変半導体レーザ吸収分光法)
TG-DTG	: Thermogravimetry-Derivative TG	(熱重量・微分熱重量測定)
UDF	: User-Defined Function	(ユーザ定義関数)
ULOF	: Unprotected Loss of Flow	(炉心流量喪失時原子炉停止機能喪失)
V&V	: Verification and Validation	(検証並びに妥当性評価)
VOF	: Volume Of Fluid	(流体占有率)
XRD	: X-ray Diffraction	(X線回折法)

概略

高い安全性と経済性を両立できる発電システムの開発は、様々な革新技術の導入とプラント全体での安全裕度最適化を可能とする高精度・高信頼の設計技術が鍵となるが、従来技術（大規模実験とマクロモデル解析の組み合わせ）ではシビアアクシデント（SA: Severe Accident）などの複雑な現象の再現性が不十分である。そこで本業務では、高い安全性と経済性を両立させる設計最適化・革新技術開発を支える安全基盤技術として、マルチレベル・マルチシナリオシミュレーションシステムの構築並びに、ナトリウム冷却高速炉に特有で安全上重要となるナトリウム燃焼及びナトリウムと構造物コンクリートとの反応性に関する基礎的なコード検証並びに妥当性評価（V&V: Verification and Validation）のための実験データベースの構築を行うことを目的とする。

以下に、4 ヵ年の本業務における実施内容を示す。

(1) マルチレベルシミュレーションシステム開発

基本フレームとなる高速炉プラント動特性解析コードをベースとした統合プラットフォームの設計及び、基本的なプログラミングを実施した。また、統合プラットフォームの内部メモリ上でのデータ間通信方式等を検討した。

既存解析コードについてそのモデリングレベルの整理、マルチレベルシミュレーションの基本となる 1 次元プラント動特性解析コードと 3 次元数値流体力学（CFD: Computational Fluid Dynamics）コードのカップリングの調査を行い、統合プラットフォームに対する要求項目の整理を行うと共に具体的なシステムの構築を行った。また、核特性解析モジュールについてもシステムへの反映（カップリング）を行った。開発したシステムの総合的な検証として、核熱カップリングを含めた炉内熱流動現象に関する妥当性確認を行った。

(2) シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発

類似解析コードの比較、並びに、リスク評価に対する包絡性の検討を実施し、本業務で開発するシミュレーションシステムに必要な物理モデル（機能）を抽出すると共にシステム概念の構築（炉内側は CFD、炉外側は質点系動特性解析）を行うと共に、基本システムを構築した。また構築したシステムに炉内、炉外事象で重要度の高い物理モデルの組み込みを行った。

開発したシステムの総合的な検証として、原子炉容器液位確保機能喪失事象を対象とした解析を実施し、炉内側での冷却材沸騰、溶融燃料の落下、炉外側での冷却材や燃料の落下に伴うナトリウム燃焼、コンクリート及びデブリとの反応について一貫して評価できることを確認した。

(3) コード V&V のための実験データベース構築

① ナトリウム燃焼に係る基礎実験（ナトリウム燃焼に係る熱移行、燃焼生成エアロゾル物質移行模擬実験）

ナトリウム燃焼時の多区画（多セル）への熱移行、燃焼生成エアロゾル物質移行を模擬した実験装置の設計、製作を行うと共に、燃焼生成エアロゾル模擬物質を選定した。

また、策定した試験計画に基づき、多セル間の熱・物質移行試験を実施すると共に、データ分析を実施し、コード V&V に資するデータベースを構築した。

② 燃焼生成エアロゾル性状計測（再委託先：徳島大学）

既存装置の改良を行うと共に、レーザアクセスシステムの追設、ナトリウム燃焼過程と生成するエアロゾルの光学計測系の構築を行い、試験装置を改良した。

改良した試験装置における、実験基本パラメータ（基本条件）を決定し、ナトリウム燃焼形態及びエアロゾルの生成状況を把握した。またこれまでに実施したレーザ計測試験の結果を整理・分析すると共に特徴的な条件を選定し、その再現性を確認するため、同条件下で3回以上の試験を行い、試験値のばらつきを確認した。更に、計測値の精度を評価するために必要な基礎データを取得し、試験に対する誤差要因を評価した。

また、ナトリウムと酸素、水蒸気との素反応解析を行い、上記で整理したナトリウム燃焼計測結果との比較・検討を行った。これにより、ナトリウム燃焼における主反応経路の同定を行った。

③ ナトリウムとコンクリートとの反応性に係る熱分析実験

日本原子力研究開発機構（JAEA: Japan Atomic Energy Agency）で所有している既存試験設備を用い、構造コンクリートの主要な構成成分（カルシウム化合物）とナトリウムもしくはナトリウム化合物との反応性を把握するための熱分析実験を実施した。また、試験で得られたデータを基に簡易的な速度論的評価を実施し、既往知見との比較検討をすると共に、反応過程を推定するために反応後残渣物の化学分析と平衡状態図による評価を実施した。

特に炭酸カルシウムとナトリウムとの反応においては、予備試験で実施した粉末形状の知見を踏まえて、ペレット形状の試料調整を実施する等の試験体系を改善し、試験後の分析や反応メカニズムの評価精度の向上を図った。

④ ナトリウム－コンクリート反応の熱的挙動解析（再委託先：広島大学）

③で実施する熱分析試験について、試料形状、試料量、加熱条件及び反応雰囲気等の観点から系統的な検証を行い、測定実験のための基盤を構築した。また、加熱条件下においてナトリウム－コンクリート反応と競合関係にあるコンクリートの熱分解反応の総括反応への関与を想定した反応挙動解析のための基礎的知見を得た。

ナトリウム－コンクリート反応の反応モデル構築と速度論的挙動解析のための基礎的情報を得る目的で、ナトリウム－代替カルシウム化合物反応についての熱的、形態学

的及び結晶学的データを基に、それぞれの反応様式を明らかにすると共に、物理幾何学的な観点からの反応機構モデルを提案した。更に、速度論的挙動を数理的に解析するための論理と解析手法を提案し、それによって得られる速度論的パラメータの物理化学的意義について議論した。

これまでに得られた熱分析データについて、速度論的データに変換し、結晶学的解析、形態学的解析、及び熱力学的解析の結果を考慮して、物理化学及び物理幾何学的な観点から反応速度的挙動の解析を行うと共に、多段階反応の速度論的解析のための数値解析法の開発を行った。

更に、反応雰囲気依存した構造コンクリートの反応挙動の変化に関する追加実験を実施し、一連の実験結果を解析する手法の定式化を図り、シビアアクシデントの想定シナリオに沿ってナトリウムもしくはナトリウム化合物－構造コンクリート反応の反応挙動を評価するシステムの骨格構造の提案、評価手法の実用性と得られる結果の意義に関する分析を行った。

(4) 研究推進

本業務全般について、研究の方向性や進捗状況を確認するため、再委託先を含めた全体会議を適宜実施し、外部有識者によるアドバイザー委員会を設置し、成果レビュー及び今後の展開について討議した。

本業務中、全体会議を 11 回実施し効率的な研究実施をマネジメントした。また外部有識者によるアドバイザー委員会を 6 回実施し、研究成果のレビュー、今後の研究開発に反映し得る貴重な意見を得た。

本業務で開発したマルチレベル・マルチシナリオシミュレーション手法により、革新的原子力システムの設計・運用時における俯瞰的、統一的な数値解析評価が可能となり、安全設計の最適化並びに効果的な SA 対策の検討が、タイムリーな最新知見の数値シミュレーションシステムへの反映を含め可能となり、我が国が有するナトリウム冷却高速炉開発技術の国際的優位性を更に高めることとなる。また、本業務で構築した数値シミュレーション手法の基本的フレームは、計算資源の高速化に伴い、様々な個別事象へと拡張することが可能となり、最終的には高速炉システム全体をマルチレベルで評価可能なバーチャルプラントへと発展することが可能となる。

また、本業務で得られた、模擬エアロゾル移行挙動、エアロゾルの輻射物性並びにナトリウム－コンクリート反応時の様々な基礎的挙動に関する実験データは、数値解析技術開発における重要な V&V 項目であり、実験データベースの確保は我が国が有する関連計測技術の国際的優位性に深く貢献する。

今後、JAEA では本業務で開発した数値シミュレーション手法を軸とし、ナトリウム冷却高速炉を含めた革新炉システムにおける先進的設計評価・支援手法としての革新炉ライフサイクル最適化手法の開発を予定している。

1. はじめに

エネルギー供給安定性確保（エネルギーセキュリティ強化）、地球温暖化抑制（クリーンエネルギー）、高レベル放射性廃棄物低減を同時に達成できる技術として、ナトリウム冷却高速炉の実用化研究開発が世界的に進められている（仏・露・印・中・米など）。高い安全性と経済性を両立できる発電システムの開発は、様々な革新技術の導入とプラント全体での安全裕度最適化を可能とする高精度・高信頼の設計技術が鍵となるが、従来技術（大規模実験とマクロモデル解析の組み合わせ。）ではシビアアクシデント（SA: Severe Accident）などの複雑な現象の再現性が不十分である。このため、計算科学を駆使したシミュレーションシステムとそのモデル化を支える基礎・部分モデル実験を組み合わせた研究開発が世界的に推進されている（例えば米国の NEAMS プロジェクト（Nuclear Energy Advanced Modeling and Simulation））。ナトリウム冷却高速炉分野の数値計算技術にアドバンテージを有する日本においても、同様な次世代数値シミュレーションシステムの構築は重要である。

ナトリウム冷却高速炉で用いられている液体ナトリウムは沸点が高く（約 880℃）、全電源喪失時においても受動的に自然循環で炉心での崩壊熱が除去できるため、既存軽水炉に比べ燃料溶融、炉外流出の可能性は低く、基本的に炉内で SA は収束するよう設計されている。しかしながら深層防護の観点から、万が一の可能性に備えた炉外事象の数値解析技術開発は、合理的な SA 対策を含め継続的安全性向上の鍵となる。軽水炉では炉内・炉外を統一的に扱える数値解析コードとして、MAAP, MELCOR, IMPACT/SAMPSON 等が開発されているが、ナトリウム冷却高速炉における開発実績は世界的に少ない（米国では、MELCOR コードにナトリウム冷却高速炉特有の物理モデルの導入が検討されている。）。また、原子力規制委員会（NRA: Nuclear Regulation Authority）では旧原子力安全基盤機構（JNES: Japan Nuclear Energy Safety Organization）時代から炉内・炉外事象の評価として AZORES コードの開発が行われているが、MAAP, MELCOR と同様に炉内に関する熱流動は簡易的なものとなっており、炉内・炉外の連続的な事象をより高い精度で評価することが困難である。また、軽水炉では独立した技術検討によるより高い安全性確保の観点から、規制側（MELCOR）と事業者側（MAAP）で独自に解析技術を構築している。

加えて近年の数値解析技術の設計へのより高度な援用を受け、数値解析コードの検証並びに妥当性評価（V&V: Verification and Validation）は国際的に重要な戦略となっている（例えば、米国では米国機械学会標準として V&V30 において原子力システムに対する V&V 基準の策定を実施中である。）。この中で、実験結果の果たす役割は大きく、単にデータを取得するだけでなく、実験装置、測定技術の精度（不確かさ）が要求される。従って、V&V を考慮した実験データベースの拡充は実験（特に計測技術）に優位性を持つ我が国にとって国際戦略上の鍵となる。更に最近欧米では、より高い信頼性向上のため、放射線被ばくに係る安全性に加え、ナトリウムの化学的環境影響としてのナトリウム燃焼生成エアロゾル挙動に着目している。

そこで本業務では、革新的原子力システムであるナトリウム冷却高速炉を対象とし、高い安全性と経済性を両立させる設計最適化・革新技術開発を支える安全基盤技術として、マルチレベル・マルチシナリオシミュレーションシステムの構築に関する研究開発を実施する。ここでは、高精度・高信頼性設計技術に資する数値計算科学技術の開発を行うと共に、ナトリウム冷却高速炉特有の現象に関する基礎的な実験を実施し、従来知見の整理と合わせて、数値解析モデル化とその

検証・妥当性評価に不可欠な実験データベースの構築を行う。

研究開発では、炉心損傷開始以前については、動特性解析コードをベースとした統合プラットフォームを構築すると共に、これにリンクする熱流動連成及び核熱連成を含めた炉心部多次元詳細解析サブシステムを開発する（マルチレベルシミュレーションシステム）。また、炉心損傷開始以降については、SA 事象に至る炉内事象及び炉外事象の物理モデルを整備し、これらを統合するアルゴリズムを構築することで、炉心損傷から炉外事象に至るまでの様々な SA シナリオを統一的に扱える数値計算手法（シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム）の開発を行う。これらによりナトリウム冷却高速炉のシステム運用時の安全性評価を網羅的に取り扱える数値シミュレーションシステムを構築する。

また、ナトリウム冷却高速炉特有の重要現象として、ナトリウム燃焼時の多部屋間対流通気やナトリウムエアロゾルの基礎的物性の把握、並びにナトリウムと構造物コンクリートとの反応に係る基礎実験を実施し、数値解析モデルの開発・検証・妥当性評価に資すると共に V&V に適した形でのデータベース化を行う。

2. 業務計画

2.1 全体計画

本業務の全体計画を図 2.1-1 に示す。

2.1.1 マルチレベルシミュレーションシステム開発

平成 28 年度（以下、H28 年度とする。）では、基本フレームとなる高速炉プラント動特性解析コードをベースとした統合プラットフォームの設計及び基本的なプログラミングを実施する。また、統合プラットフォームの内部メモリ上でのデータ間通信方式等の検討を行う。

H29 年度では、基本フレームのプログラミングを終了し、妥当性評価を行うと共に、炉内詳細熱流動解析モジュールについて、JAEA で開発された解析コード群をベースにその構築に着手し、カップリングの基本プログラミングを実施する。

H30 年度では、統合プラットフォームと炉内詳細熱流動解析モジュールのカップリングを完了し妥当性評価を行う。また核特性解析モジュールについて、原子力機構で開発された解析コード群をベースにその構築に着手し、カップリングの基本プログラミングを実施する。

令和元年度（以下、R1 年度とする。）では、核熱カップリングを含め炉内熱流動現象に着目したマルチレベルシミュレーションシステム開発を完了し、総合的な妥当性を確認する。

2.1.2 シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発

H28 年度、基本モジュールとなる炉内及び炉外熱流動モジュールにおいて用いられる支配方程式の選定を行い、モジュールの基本設計及び基本的なプログラミングを実施する。

H29 年度では、基本モジュールのプログラミング終了並びに妥当性評価を実施する。また、炉内及び炉外事象における重要な物理モデルの選定を行い、炉外事象については該当する既存解析コード群からの一部モジュールの抽出を行う。更に数値計算全体を高速化する手法に関する設計検討を行う。

H30 年度では、選定された物理モデルのうち、炉外事象についてモジュールの具体的な組み込みを実施し、妥当性評価を行う。また、炉内事象に関しては既存コード群からの物理モデルの抽出を行う。更に炉内・炉外事象を含めた数値計算全体について高速化を検討する。

R1 年度では、炉内における物理モデルモジュールの組み込みを完了し、マルチシナリオシミュレーションシステムの基本フレームを完成させ、総合的な妥当性を確認する。

2.1.3 コード V&V のための実験データベース構築

(1) ナトリウム燃焼に係る基礎実験

H28 年度では、ナトリウム燃焼時の多区画（多セル）への熱移行、燃焼生成エアロゾル物質移行を模擬した実験装置の設計検討を実施する。また、燃焼生成エアロゾル模擬物質の選定に関する検討を行う。

H29 年度では、多セル間の熱・物質移行試験での試験装置の製作並びに機能確認を実施すると共に試験計画を検討し、必要計測機器を準備する。また、再委託で実施されたナトリウム燃焼場の計測結果を基に、試験計画を検討する。

H30 年度では、実施計画を基に多セル間の熱・物質移行試験及びデータ分析を実施する。また、実験条件変更のための装置改良を実施する。

R1 年度では、H30 年度に引き続き多セル間の熱・物質移行試験及びデータ分析を実施し、コード V&V に資するデータベースを構築する。

(2) 燃焼生成エアロゾル性状計測（再委託先：徳島大学）

H28 年度では、既存試験装置に酸素などのガスを導入できるよう、既存装置の改良を行うと共に、レーザアクセスシステムを追設、ナトリウム燃焼過程と生成するエアロゾルの光学計測系を構築し、試運転を実施する。

H29 年度では、前年度に改良した装置を用いて、反応の持続時間、安定性などを評価し、ナトリウム燃焼における基本パラメータ（基本条件）を決定する。決定した基本条件において、燃焼状態を可視化し、ナトリウム燃焼形態やエアロゾルの生成状況を把握する。また、収集した燃焼形態に関する実験情報に基づいて、必要な計測項目の選定を行い、前年度構築した光学計測系を用いたナトリウム燃焼場の計測を行う。

H30 年度では、反応条件（導入ガス温度、流速、ナトリウム温度、酸素濃度）を変更し、各条件での反応状態を可視化計測すると共に、その反応安定性、反応形態などを明確化し、ナトリウム燃焼状態や生成するエアロゾルを評価できる燃焼条件の設定を行うと共に、酸化剤（酸素、水蒸気など）の差による燃焼形態変化などを観察する。上記設定を用い、ナトリウム濃度、酸素濃度、燃焼温度、エアロゾル粒径、エアロゾル組成などの計測を行い、反応条件の燃焼状態への影響を評価する。また、前年度検討した生成するエアロゾルの光学物性値測定方法の適用性を評価する。

R1 年度では、レーザ計測試験結果を整理すると共に、その再現性を確認するため、特徴ある計測条件において、試験値のばらつきを確認する。また、計測値の精度を評価するために必要な基礎データを取得し、試験に対する誤差要因を評価する。更に、ナトリウムと酸素、水蒸気との素反応解析を行い、上記で整理したナトリウム燃焼計測結果との比較・検討を行う。

(3) ナトリウムとコンクリートとの反応性に係る熱分析実験

H28 年度では、既存試験設備を利用し、専用ステンレス容器の製作並びにグローブボックスの再生を行い、構造コンクリートの主要な構成成分とナトリウムもしくはナトリウム化合物との反応性を把握するための予備的な熱分析実験を実施する。

H29 年度では、前年度に引き続き、構造材コンクリートの主要成分の 1 つであるカルシウム化合物に着目した熱分析実験を実施し、実験データを再委託先である広島大学にて詳細に評価・分析する。

H30 年度では、これまでに実施した実験結果について V&V に適したデータ整理、データ

ベース構築を行うと共に、反応挙動評価法構築のための事前検討を実施する。

R1 年度では、(4)で広島大学にて実施される反応挙動評価法の構築を共同で行い、反応挙動評価システムの骨格構造を構築する。

(4) ナトリウム - コンクリート反応の熱的挙動解析（再委託先：広島大学）

H28 年度では、ナトリウムもしくはナトリウム化合物－構造コンクリート反応の挙動を熱力学的及び動力学的に解析するためのデータの測定方法について、試料形状、試料量、加熱条件及び反応雰囲気等の観点から系統的な検証を行い、測定実験のための基盤を構築する。

H29 年度では、ナトリウムもしくはナトリウム化合物－構造コンクリート反応のモデル反応として、試薬の水酸化カルシウム及び炭酸カルシウムを構造コンクリートの代替反応物として用いた反応について、熱分析データの解析、反応挙動の顕微鏡観察、反応中間生成物の形態観察及び結晶相解析を行う。これらの実験・解析の結果を総括し、反応の熱力学的及び速度論的特徴を明らかにし、反応機構のモデリングを試みる。

H30 年度では、(3)で取得した示差走査熱量測定の結果を基にして、それぞれの反応の熱力学的特徴とその反応条件に依存した変化を明らかにする。また、熱力学データベース（現有品）を活用した反応シミュレーションとの比較により、熱力学的観点からの反応挙動のモデリングを試みる。加えて、反応に対する熱分析データを速度論的データに変換し、上述の結晶学的解析、形態学的解析及び熱力学的解析の結果を考慮して、物理化学及び物理幾何学的な観点から反応速度的挙動の解析を行う。

R1 年度では、ナトリウムもしくはナトリウム化合物－構造コンクリート反応の反応性と反応挙動を、結晶学的、形態学的、熱力学的及び動力学的観点から多面的並びに包括的に評価するためのテストメソッドの実験的手法と実験項目の精査と選定を行う。更に、それらの実験結果の解析手法の定式化を図り、反応挙動評価システムの骨格構造を構築する。

2.1.4 研究推進

各年度における本業務全般について、研究の方向性や進捗状況を確認するため、再委託先を含めた全体会議を適宜実施すると共に、外部有識者によるアドバイザー委員会を設置し、成果レビュー及び今後の展開について討議する。また、R1 年度では、公募 4 ヶ年の全体成果のとりまとめを実施する。

業務項目 \ 年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	令和元年度
①マルチレベルシミュレーションシステム開発 (JAEA)	基本フレーム構築、データ処理 法検討	基本フレーム完成、炉心詳細熱 流動コードカップリング検討	熱流動カップリング妥当性評 価、核特性カップリング検討	妥当性総合評価
②シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発 (JAEA)	基本モジュール設計、一部プログラミング	基本モジュール構築、抽出物理 モデル選定	炉外物理モデル組み込み、妥当 性確認、高速化検討	炉内物理モデル組み込み、妥当 性総合評価
③コードV&Vのための実験 データベース構築 a. ナトリウム燃焼に係る 基礎実験 (JAEA)	実験装置設計、 模擬エアロゾル 物質選定検討	試験装置製作、 実験計画策定 模擬エアロゾル 物質選定	燃焼に係る実験 実施、装置改良 データ整理、 データベース構築	燃焼に係る試験 実施 データ整理、 データベース構築
b. 燃焼生成エアロゾル性 状計測 (徳島大学)	計測システム構築及び燃焼試験	基本パラメータ 影響評価、レー ザ計測試験	ナトリウム反応 試験、レーザ計 測試験	レーザ計測試験、素反応解析 との比較
c. ナトリウムとコンク リートとの反応性に係る 熱分析実験 (JAEA)	コンクリート反応熱分析試験実施	コンクリート反応熱分析試験実施	データ整理、 データベース構築 反応挙動評価法の 事前検討	反応挙動評価法の構築
d. ナトリウム - コンク リート反応の熱的挙動解 析 (広島大学)	熱分析測定条件 の最適化、反応 解析のための基 礎的情報収集	反応挙動の結晶 学的解析、反応 挙動の形態学的 解析	反応挙動の熱力 学的解析、反応 挙動の動力学的 解析	反応挙動評価法の構築
④研究推進	アドバイザー委員会、全体会議 研究成果とりまとめ	アドバイザー委員会、全体会議 研究成果とりまとめ	アドバイザー委員会、全体会議 研究成果とりまとめ	アドバイザー委員会、全体会議 公募期間の研究 成果とりまとめ

図 2.1-1 全体計画

3. 業務の実施内容及び成果

3.1 マルチレベルシミュレーションシステム開発

3.1.1 はじめに

高い安全性と経済性を両立できる発電システムの開発では、様々な革新技術の導入とプラント全体での安全裕度最適化を可能とする高精度・高信頼の設計技術が鍵となる。従来、炉心損傷開始以前（いわゆる設計基準事象に相当する。）のプラント評価においては、プラント全体の挙動を1次元（1D：1 Dimensional）プラント動特性解析コード（以下、1Dコードとする。）で、炉心部や炉上部などにおける局所的な挙動については専用の多次元解析コードでそれぞれ解析し、保守的な境界条件の設定により相互の影響を考慮した評価が行われてきた。このため、最終的な評価結果には過度な保守性を含む可能性があった。

本業務では、この課題を解決すべく、高速炉プラントの設計オプションに柔軟に対応し、想定される運転状態（異常・事故事象を含む。）に対して、高効率解析（パラメータ感度解析など）から高精度予測解析（安全裕度の適正化に係る確認解析など）までを1つのシステムで実現することを目指す。具体的には、システムの基本フレームとなるプラント動特性解析を含む統合プラットフォームを構築し、原子炉システムの安全性の観点で炉心部に着目して燃料集合体と炉上部プレナムに対する多次元熱流動解析モジュール並びに核特性解析モジュールを整備し、統合プラットフォーム上でカップリングすることで、炉心損傷開始前までの範囲で、解析モデルの詳細度レベルを変えた解析（マルチレベルシミュレーション）によるプラント全体の動特性解析の実施を目標とする。

3.1.2 統合プラットフォームの開発【H28】

(1) マルチレベルシミュレーションの適用範囲

マルチレベルシミュレーションシステムでは、複数分野の物理現象の連成挙動を評価するため、それぞれの分野の物理現象を対象とした既存の解析コードを組み合わせで解析する。はじめに、基本フレームである統合プラットフォームの開発に際して、高速炉プラントの炉心部の物理現象に着目し、関連する解析コードとモデル詳細度レベルを表 3.1.2-1 及び図 3.1.2-1 に整理した。図 3.1.2-1 の水色で示した部分は、統合プラットフォームのベースとする 1D コードで対応可能な解析モデルの組み合わせである。

本業務における統合プラットフォームの整備では、1D コードと桃色で示した炉上部プレナム熱流動の CFD モデル、燃料集合体燃料ピンバンドル部のサブチャンネル解析モデル、多次元核動特性モデルとのカップリングによる解析（以下、「連成解析」とする。）を可能とすることを目標とする。

(2) 解析コード間の連成方法の検討

1D コードと CFD コードとの連成解析の先行事例として、仏原子力・代替エネルギー庁（CEA：Alternative Energies and Atomic Energy Commission）の CATHARE/TRIO_U [3.1.2-5]、独原子炉安全協会（GRS：Global Research for Safety）の ATHLET/ANSYS-CFX [3.1.2-6]、米アルゴンヌ国立研究所（ANL：Argonne National Laboratory）の SAS4A-SASSYS-1/STAR-

CD [3.1.2-7]及びSAS4A-SASSYS-1/SAM [3.1.2-8]について調査し、「解析領域の割り当て方法（各解析コードの解析範囲）」、「データ同期及び転送方法」、「連成解析の実装方法」の項目で表3.1.2-2にまとめた。以下に、本業務で採用した方法を項目ごとに示す。

① 解析領域の割り当て方法

各解析コードへの解析領域の割り当ては、解析コード間で解析領域を重複させて割り当てる方法（「重複方法」）と、各解析コードの解析領域を分離して（境界面での値を交換して）割り当てる方法（「分離方法」）がある。本業務では、複数の解析コードを同時に連成させるため、物理量の交換方法がシンプルな「分離方法」を採用することとした。

② データ同期及び転送方法

解析コード間のデータ同期方法には、「シーケンシャル Two-way カップリング法」と「タイトカップリング法」があるが[3.1.2-9]、計算負荷が抑えられる前者を採用し、高精度化が期待されるが計算負荷の高い「タイトカップリング法」の採用は今後の課題とした。図3.1.2-2に「シーケンシャル Two-way カップリング法」のデータ同期方法の概要を示す。1DコードとCFDコードの解析体系が上下2箇所接続された閉じた体系を考える。2箇所の境界で両コードはデータを交換する。1DコードはCFDコードが直前のタイムステップ(n)の解析結果から境界条件を得て解析を行い、CFDコードはその結果を境界条件として解析を行う。

解析コード間のデータ転送方法は、ファイル入出力（I/O: Input/Output）（データ交換用の中間ファイルの入出力）、メモリ共有、メッセージ通信（MPI: Message Passing Interface）が挙げられる。1回のデータ転送時間は僅かであるが、過渡解析あるいは定常解析の収束過程で必要な反復回数に応じて積算され、実行速度に影響を及ぼす可能性があることから、高速処理が可能な順でメモリ共有、MPI、ファイルI/Oの利用が望まれる。ソースを入手可能な解析コードではメモリ共有とMPIを利用した方法を採用し、ソースの入手が不可能な商用コードでは「ユーザ定義関数（UDF: User-Defined Function）」等の機能により利用可能なファイルI/Oによる方法で実行できるように整備した。

③ 連成解析の実装方法

連成解析を実行する方法には、“Master-Slave”方法（一方の解析コードを主（Master）として、もう一方を従（Slave）とする。）と、“外部コントローラ”方法（外部にコントローラを設置して複数の解析コードの実行を制御する。）がある[3.1.2-9]。“外部コントローラ”方法は、各解析コードと連成解析の実行部分を明確に分離でき、複数の解析コードの連成解析に有利となることから、本業務では“外部コントローラ方法”を採用した。

(3) 統合プラットフォームの要求項目及び基本プログラミング

3.1.2(2)での検討結果を基に、統合プラットフォームの主要な要求機能を表3.1.2-3に整理した。要求項目に従って設計した統合プラットフォームの概略を図3.1.2-3に示す。

統合プラットフォームでは、C/C++言語やFortran 言語で書かれた複数の解析コードをカップリングさせ、データ同期等を行いながら、外部からそれぞれの解析コードの実行をコントロールする。そのため、異言語で記述される解析コードの結合やメンテナンス（書き換え）が容易で、豊富なライブラリ（制御機能等）が利用可能である Python 言語[3.1.2-10]を用い、基本プログラミングを行った。

【参考文献】

- [3.1.2-1] F.Yamada, et al., “Development of natural circulation analytical model in super-COPD code and evaluation of core cooling capability in Monju during a station blackout”, Nuclear Technology, 188(3), pp.292-321, 2014.
- [3.1.2-2] <http://www.ansys.com/ja-JP/products/fluids/ansys-fluent>
- [3.1.2-3] H. Ohshima, et al., “Thermal-hydraulic analysis of fast reactor fuel subassembly with porous blockages”, Fourth international seminar on subchannel analysis, 1997.
- [3.1.2-4] K.Yokoyama, et al., “Development of comprehensive and versatile framework for reactor analysis, MARBLE”, Annals of Nuclear Energy, 66, pp.51-60, 2014.
- [3.1.2-5] R.Vaviere, et al., “A first system/CFD coupled simulation of a complete nuclear reactor transient using CATHARE2 and TRIO_U. Preliminary validation on the Phénix Reactor Natural Circulation Test”, Nucl. Eng. Des., 277, pp.124-137, 2014.
- [3.1.2-6] Papukchiev, A. et al., “Development and Implementation of Different Schemes for the Coupling of the System Code ATHLET with the 3D CFD Program ANSYS CFX”, In Proc. of the NUTHOS-8 Conference, Shanghai, China, 2010.
- [3.1.2-7] T.H.Fanning, et al., Advances in Coupled Safety Modeling Using Systems Analysis and High-Fidelity Methods, ANL-GENIV-134, 2010.
- [3.1.2-8] R.Hu, et al., Status Report on NEAMS System Analysis Module Development, ANL/NE-15/41, 2015.
- [3.1.2-9] R.Hu, et al., Strategy for Multi-Scale Single-Phase Flow Coupling, ANL/NE-13/4, 2013.
- [3.1.2-10] <https://www.python.org/>

表 3.1.2-1 高速炉の炉心熱流動・炉物理に関連する解析コードとモデル詳細度レベル

解析コード	対象とする物理現象	モデル詳細度レベル	引用文献
Super-COPD	核動特性	1 点近似モデル	[3.1.2-1]
	プラント全体熱流動	0D モデル（完全混合）	
	燃料集合体内熱流動	1D モデル（熱移流）	
	燃料集合体間ギャップ部熱流動		
Fluent	炉上部プレナム部熱流動、他	CFD モデル	[3.1.2-2]
ASFRE	燃料集合体内熱流動	サブチャンネル解析モデル	[3.1.2-3]
MARBLE	中性子束分布	3 次元拡散近似モデル	[3.1.2-4]
	反応度分布	3 次元摂動モデル	

表 3.1.2-2 既往研究で採用されているカップリング方法（先行事例）

解析コード (1D/CFD)	解析領域の 割り当て方法	データ 同期方法	データ 転送方法	連成解析の実行方 法
CATHARE /TRIO_U	重複	タイトカップリング	共有メモリ	連成プラットフォームを利用
ATHLET /ANSYS-CFX	分離	タイトカップリング	共有メモリ	CFD (ANSYS-CFX) の UDF を利用
SAS4A-SASSYS-1 /STAR-CD	分離	シーケンシャル Two- way カップリング	ファイル I/O	CFD (STAR-CD) の UDF を利用
SAS4A-SASSYS-1 /SAM	分離	シーケンシャル Two- way カップリング	ファイル I/O	連成プラットフォームを利用

表 3.1.2-3 統合プラットフォームの主要な要求機能

項目	機能
データ同期	・シーケンシャル Two-way カップリング
データ加工（変換）	・異なるメッシュ配置（データ定義点の変換） ・異なる物理変数の変換
データ転送	・ファイル入出力（I/O）利用 ・共有メモリ利用 ・メッセージ通信利用（MPI）
処理の分散	・クラスタ計算機 ・PC（マルチコア、メニーコア）

簡易モデル ←-----→ 詳細モデル						
物理現象			Lv1	Lv2	Lv3	Lv4
プラント全体熱流動			フローネットワークモデル			
炉上部プレナム熱流動			完全混合モデル	フローネットワークモデル	CFD	
炉心部	燃料集合体内熱流動	上部遮蔽体部	チャンネルモデル			CFD
		燃料ピン束部	チャンネルモデル (代表ピン)	チャンネルモデル (7温度領域)	サブチャンネル解析 モデル (一部の燃料集合体に適用)	CFD
	燃料集合体間ギャップ部熱流動		等価熱伝導モデル	フローネットワークモデル	CFD	
	炉物理	動特性	1点近似 (時間非依存-反応度マップ)	1点近似 (時間依存-反応度マップ)	準静的近似	厳密計算
		中性子束分布 ・反応度分布	3次元拡散近似+3次元摂動 (代表燃料集合体)	3次元拡散近似+3次元摂動 (全燃料集合体)	輸送計算+摂動	モンテカルロ
		炉心 変形	熱膨張モデル	ビーム要素モデル	シェル要素モデル	ソリッド要素モデル
	炉下部プレナム熱流動		完全混合モデル	フローネットワークモデル	CFD	

水色: 統合プラットフォームのベースとなるプラント動特性解析コードで選択可能なモデル群
 桃色: 公募研究で新たに選択可能として構築するモデル群

図 3.1.2-1 高速炉プラントの炉心部の物理現象に対応する解析モデルとその詳細度

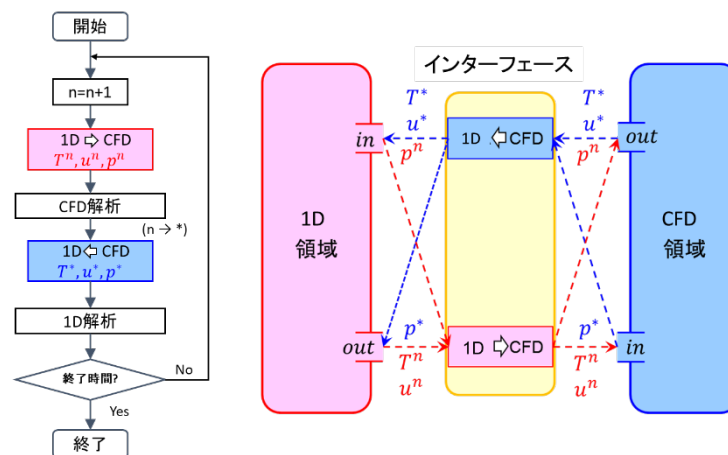


図 3.1.2-2 シーケンシャル Two-way カップリング法によるデータ同期方法

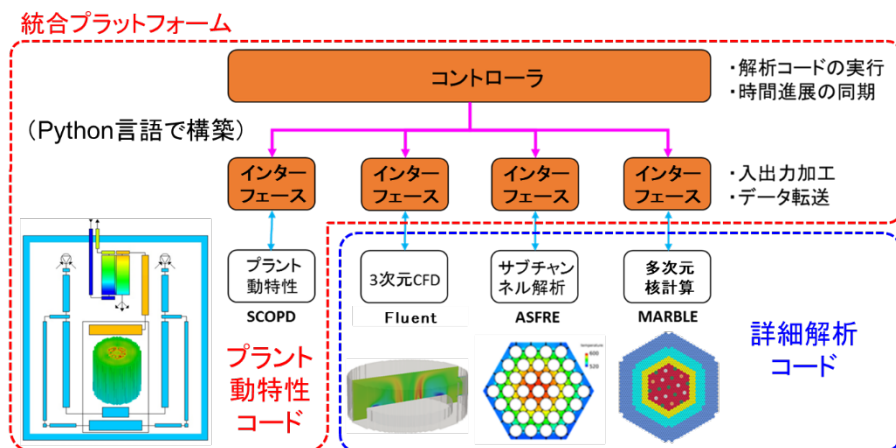


図 3.1.2-3 統合プラットフォームの概要

3.1.3 統合プラットフォーム上での連成解析手法の開発【H29-H30】

高速炉プラント設計における炉心熱流動及び炉物理に関する主要な評価項目のうち、3.1.2 で開発した統合プラットフォームを用いた評価に必要な連成解析手法を開発した。

熱流動分野については、図 3.1.3-1 に示す高速炉プラント炉心部周辺における主要な熱流動課題の評価項目とその評価に必要な連成解析を表 3.1.3-1 に整理し、これに基づいて冷却系の評価に必要な 1D コードと炉上部プレナム等の多次元熱流動現象に対する CFD コードとの 1D-CFD 連成解析手法と、炉心部に着目した 1D コードの炉心モデルと燃料集合体内の熱流動現象に対するサブチャンネル解析コードとの 1D-サブチャンネル連成解析手法を開発することとした。

炉物理分野については、大型炉心では無視することができない核動特性の多次元効果を考慮した評価を実施するため、1D コードと多次元核計算コードとの核-熱連成解析手法を開発することとした。

(1) 1D-CFD 連成解析手法の開発【H29】

① 解析コードの連成方法

主循環系等のループ側を 1D コードで、炉上部プレナム内の熱流動現象を CFD コードでそれぞれ解析し、境界条件でデータ（物理量）を交換して両解析コードの流速、圧力、温度を一致させながら解析を行う「1D-CFD 連成解析手法」を構築した。CFD コードの解析では、問題によっては出入口の少なくとも 1 ヶ所で流速を境界条件としないと解が収束しない、もしくは非物理的な解へ収束してしまうことがある。1D コードの解析では流路の出入口間差圧が与えられれば流動場は一意に決まる。そこで、基本方針として、1D コードが受け持つ解析領域の両端の境界条件を圧力条件とし、CFD コードが受け持つ解析領域の一方を流速及び温度が与えられる境界条件として、もう一方の境界を圧力境界として 1D コードと CFD コードを直列に接続し、2 つの解析領域を境界面で接続することで解析対象である閉じた領域を構成することとした。

② 1D-CFD 連成解析手法の妥当性確認

1D-CFD 連成解析手法の妥当性は、共通の解析体系を対象に 1D モデルのみで解析した結果、CFD モデルのみによる解析結果、1D-CFD 連成解析による結果の 3 者が同等の値となることで確認した。対象とした例題は、表 3.1.3-1 から、1) 等温条件での強制循環によるポンプ駆動流れ、2) 非等温条件での自然循環の密度差駆動流れの 2 つの熱流動現象を対象とした。

解析体系は、図 3.1.3-2 に示すように、プラントの構成を簡易的に模擬した単純体系として、高さ 0.4m、幅 0.1m の壁面断熱の 2 次元「閉」ループで、4 カ所の曲がり部（流動安定性の観点から曲率半径は流路幅の 3 倍となるロングエルボとした。）と、右側直線部上半分に除熱部（クーラ）、左側直線部下半分に加熱部（ヒータ）、左側直線部上部にポンプを設置した。作動流体はナトリウムとした。図 3.1.3-3 にシーケンシャル Two-way 法[3.1.2-9]でのデータ同期方法を示す。1D コードは前タイムステップで計算された CFD 領域の出入

口差圧 Δp_{CFD}^{n-1} 及び出口温度 ΔT_{CFD}^{n-1} を 1D 領域の流路差圧及び入口温度の境界条件として 1 タイムステップ分の計算を進める。次に、これで得られた境界の流量 w_{1D}^* 及び 1D 領域の出口温度 T_{1D}^* を CFD 領域の入口流速及び入口温度の境界条件として 1 タイムステップ分の計算を進める。これを順番に繰り返し過渡計算を進める。ここで、圧力について、1D コードの質量及び運動量の保存式に対する境界条件となる両端の圧力差は CFD コードの出入口差圧 Δp_{CFD} に等しいとし、CFD 解析で得られた出入口境界面での断面平均圧力差 Δp_{CFD} (静圧(静水圧を含める。))に動圧を加えた全圧)を 1D コードへ受け渡す。CFD コードの入口境界条件である流速及び温度に関しては、1D コードで計算された質量流量から境界面での流路断面積、流体密度、流速分布形状を用いて流速分布を算出して受け渡す。図 3.1.3-4(a)に 1D 解析用のフローネットワークモデルを示す。図 3.1.3-4(b)に CFD 解析用のメッシュ配置を示す。また、図 3.1.3-4(c)に 1D-CFD 連成解析時の領域分割について併せて示す。表 3.1.3-2 に CFD コードでの解析オプションの設定を示す。1D コードとして Super-COPD を、CFD コードとして Fluent を用いた。

1) ポンプ駆動流れ

全系を対象に 1D コード及び CFD コードでのそれぞれ単独の解析を行い、次に、上半分の流路を 1D コード、下半分の流路を CFD コードで領域分割した 1D-CFD 連成解析を実施した。なお、1D-CFD 連成解析時は、全系を 1D コードで定常解析した結果(流量)を初期状態として、数 10 秒間の境界一定での過渡計算を実施した後に過渡解析へ移行させた。解析条件は、初期状態でレイノルズ数(Re: Reynolds Number)が約 2,000 となる層流ケースと、Re 数が約 100,000 となる乱流ケースを設定し、流量を変化させた過渡解析を行った。ここで Re 数は流路幅を代表長さ、断面平均流速を代表流速として定義した。作動流体は 400℃のナトリウムの物性値[3.1.3-1]を設定した。層流ケースでは初期状態から 10 秒から 20 秒にかけて Re 数が約 2,000 から約 2,600 に変化するように回転速度を一定の割合で増加させた。乱流ケースでは Re 数が約 100,000 から約 2,000 になるように回転速度を一定の割合で減少させた。1D コードの入口圧力及び出口圧力には、それぞれ CFD コードの出口部全圧と入口部全圧を与えた。タイムステップ幅は 1D コード、CFD コード、同期タイミングで共通で 0.1 秒とした。CFD コードの入口境界において、層流ケースでは一様流速分布(平均流速)と放物線分布(ハーゲンポアズイユ流れ)を与えた場合、乱流ケースでは一様流速分布と 1/7 乗則に従って 2 次元流れ場の発達した流速分布を与えた場合で比較した。

図 3.1.3-5 に層流ケースでの流量変化についての解析結果を示す。1D モデル及び CFD モデルの解析結果は、流体慣性によってポンプ回転速度の増加に若干遅れて上昇し、定常に達している。1D-CFD 連成解析の CFD 解析領域入口の流速分布を一様とした場合、入口境界面から下流で流れが発達するまでに圧力が損失することにより系統全体の圧力損失が大きくなり、入口流速分布を考慮した場合に比べて、差が大きくなった。CFD 解析の入口境界での流速分布を考慮した連成解析の結果は妥当であることを確認した。

図 3.1.3-6 に乱流ケースでの流量変化の解析結果を示す。1D モデル及び CFD モデルの解析結果はポンプ回転速度の低下に伴い、流量が低下し、流体慣性によって流量変化がポン

プ回転速度変化から若干遅れる様子を再現している。連成解析の結果（発達した流速分布を仮定した。）は、1D モデルと CFD モデルの解析結果との間で推移し、乱流ケースに対しても連成解析結果は妥当であることを確認した。

2) 密度差駆動流れ

解析体系は図 3. 1. 3-3 及び図 3. 1. 3-4(a)～(c)に示すように、全系を対象に 1D コード及び CFD コードで、それぞれ単独の解析を行うと共に、上半分の流路を 1D コードとし、下半分の流路を CFD コードで領域分割した 1D-CFD 連成解析を実施した。1D-CFD 連成解析時は、全系を 1D コードで定常解析した結果を初期状態として、境界一定での過渡計算を数 10 秒間実施した後に過渡解析へ移行した。まずは、ポンプを一定速度で運転して Re 数が約 16,000 となる流量で 120 秒間継続した後、ヒータ及びクーラを作動させ、入熱量と除熱量を所定の状態（入熱量と除熱量について、10 秒から 70 秒まで一定割合で増加、70 秒以降は一定とした。）とし、その後フローコーストダウンを模擬して 120 秒後から 50 秒間でポンプ回転速度が 0 となるまで一定の加速度で減少させ、ポンプを停止して自然循環に移行する過渡条件とした。なお、クーラでの除熱及びヒータの加熱は、冷却部流路で一様に行われるものとして、流体のエネルギー方程式のソース項で設定した。1D-CFD 連成解析での CFD コードの入口境界では 1D コードの流量から算出した $1/7$ 乗則による発達した乱流流速分布と出口温度を与えた。タイムステップ幅は、1D コード、CFD コード、同期タイミングで共通とし、0.01 秒とした。

図 3. 1. 3-7 に温度及び入熱・除熱量の時間変化と、図 3. 1. 3-8 に質量流量の時間変化をそれぞれ示す。ここでは物理的な説明は省略するが、連成解析の結果は 1D モデルと CFD モデルの解析結果との間で推移していることから、本手法が妥当であることを確認した。

(2) 1D-サブチャンネル連成解析手法【H30】

① 解析コードの連成方法

全燃料集合体をそれぞれ個別にモデル化できる Super-COPD コードの炉心熱流動モデル（炉心モデル）と、任意の燃料集合体について燃料集合体のエントランスノズル部出口からハンドリングヘッド上端までの領域をサブチャンネル解析コードでそれぞれ解析し、集合体出入口及び集合体ラップ管側面を境界としてデータ（物理量）を交換して両解析コードの流速、圧力、温度を一致させながら解析を行う「1D-サブチャンネル連成解析手法」を構築した。境界面での取り扱いは、1D-CFD 連成解析手法と同様に、質量及び運動量の保存については 1D コード側の境界条件は圧力とし、サブチャンネル解析コード側の境界条件は入口流量を与えた。

② 1D-サブチャンネル連成解析の妥当性確認

1D-サブチャンネル連成解析手法の妥当性を確認するため、共通の解析対象を 1D モデルのみで解析した結果と、1D-サブチャンネル連成解析による結果との差を評価することとした。図 3. 1. 3-9 に解析体系の概略を示す。まずは、図 3. 1. 3-9(a)に示すように集合体の基

本構成として 7 本の模擬燃料ピンで構成される仮想の燃料集合体 1 体をループに接続した体系とし、等温条件でのポンプ駆動の強制循環時と、入熱及び除熱のある自然循環時の主循環系一巡の熱流動挙動に対する妥当性を確認した。次に、図 3.1.3-9(b)に示すように炉心基本構成として燃料集合体（7 本燃料ピンで構成）を、中心に 1 体とその周辺に 6 体設定した 7 体の模擬炉心体系を設定し、自然循環除熱時の炉心発熱及び炉心流量条件における燃料集合体間の径方向熱移行挙動も含めた炉心部の熱流動現象に対する妥当性を確認した。表 3.1.3-3 にそれぞれの体系での各部寸法を示す。作動流体はナトリウムである。

1) 主循環系一巡の熱流動問題

図 3.1.3-10(a)に示すように、1D-サブチャンネル連成解析ではサブチャンネル解析コードで対象とする燃料集合体を、1D コードでその他の上部プレナム、中間熱交換器(除熱源)、ポンプ、下部プレナムをモデル化した。図 3.1.3-10(b)に 1D コードでのモデル化を示す。1D コードのみでの解析では、炉心燃料集合体について、集合体内のサブチャンネル流路をそれぞれ 1 つの独立したチャンネルモデルとして設定した。このモデルでは、チャンネル間（サブチャンネル間）の運動量及びエネルギーの交換は行われない。図 3.1.3-11 に示すように、サブチャンネル解析では燃料集合体内のサブチャンネルをセンター、サイド、コーナーに分けてモデル化する。また、サブチャンネル解析の解析領域は燃料集合体のエントランスノズル以外の領域で、入口プレナム部、燃料ピンバンドル部、上部遮蔽体部の領域に区別する。サブチャンネル解析において、1D コードでのチャンネルモデルと等価な解析とするために、本来の機能とは異なるが、燃料ピンバンドル部内の隣接サブチャンネル間の運動量及びエネルギー交換が行われないようソース上で設定した。燃料ピンバンドル部の軸方向圧力損失には Cheng らの相関式[3.1.3-2]を用いた。

図 3.1.3-12 にデータ同期方法を示す。1D コード（Super-COPD）では、1 時刻前のタイムステップにおいてサブチャンネル解析コード（ASFRE）で計算された燃料集合体の出入口差圧、出口ナトリウム温度を境界条件として、1 タイムステップ分の計算を進める。次に、サブチャンネル解析コードは、1D コードで得られた燃料集合体通過流量、ナトリウム温度を境界条件として、1 タイムステップ分の計算を進める。この計算を順番に繰り返し、連成解析によって時間発展を計算する。

Case1 として等温状態でポンプ吐出圧のみを変化させることで定格運転時からのポンプコストダウンを模擬したケース、Case2 として温度変化を考慮するためスクラム後の炉心発熱の減少（崩壊熱減衰を設定）を模擬したケースを設定して、妥当性確認解析を実施した。各ケースの解析条件を表 3.1.3-4 に示す。

Case1（等温解析）の解析結果

図 3.1.3-13 に燃料集合体内のセンター、サイド、コーナーの各サブチャンネルの通過流量の解析結果を示す。等温解析であるため、各サブチャンネルの圧力損失特性に従って各サブチャンネルの通過流量が配分される。1D コードと 1D-サブチャンネル連成解析の流量（それぞれ、 W_{1D} 及び W_s とする。）を比較し、各サブチャンネルにおける流量の相対誤差

$(w_s - w_{1D})/w_{1D}$ は初期定常で 0.01%、初期定常の 10% 流量となる時点での過渡時は 2% となり、初期定常から過渡において概ね一致することを確認した。

Case2 (非等温解析)

図 3.1.3-14 に、燃料集合体内のセンター、サイド、コーナーの各サブチャンネルの通過流量の温度の解析結果をそれぞれ示す。各サブチャンネルの流量は圧力損失と浮力のバランスに従って配分される。1D コードと 1D-サブチャンネル連成解析の各サブチャンネルの流量及び温度（それぞれ、流量は w_{1D} 及び w_s 、温度は T_{1D} 及び T_s とする。）の時間変化について比較した。各サブチャンネルにおける流量の相対誤差 $(w_s - w_{1D})/w_{1D}$ は初期定常で 0.5%、過渡の初期定常 10% 流量時で 2% となり、また温度については初期の炉心出入口温度差 (T_0 : 150°C) に対する相対誤差 $(T_s - T_{1D})/T_0$ は初期定常で 0.2%、初期定常 10% 流量となる時点での過渡時で 1.0% となった。非等温解析となる本ケースにおいても、初期定常から過渡において 1D コードの結果と概ね一致することを確認した。

2) 燃料集合体間径方向熱移行問題

自然循環崩壊熱除熱時における炉心槽内での燃料集合体間の径方向熱移行挙動に着目した条件を設定した。図 3.1.3-9(b) に解析体系の概略を示す。図 3.1.3-15(a) に示すように、1D-サブチャンネル連成解析では 7 体の模擬燃料集合体のうち周辺 6 体と集合体間のギャップ部（インターラップ部）を 1D コードの炉心モデルで模擬し、中心集合体についてサブチャンネル解析コードでモデル化した。サブチャンネル解析とした中心集合体のサブチャンネルの配置は、図 3.1.3-11 に示した主循環系一巡の熱流動問題と同じである。サブチャンネル解析の領域は燃料集合体のエントランスノズル以外の領域である。また、図 3.1.3-15(b) に 1D コード（炉心モデル）でのモデル化を示す。1D コード（炉心モデル）のみでの解析では、全ての燃料集合体及びインターラップ部を取り扱うことのできる炉心モデルを採用し、燃料集合体内の温度場をラップ管と最外周燃料ピンが囲う周辺 6 領域とその内側の中心領域の計 7 領域に分割してモデル化した（ただし、炉心モデルではサイドとコーナーのサブチャンネルの区別をしていない）。解析条件として、径方向熱移行現象を強調するため、仮想的な条件として、崩壊熱レベルの発熱量である定格時の 3% を周辺 6 体に、中心の 1 体のみ発熱量を 33% 増加させ、中心から周辺への径方向熱移行が定常的に発生する条件とした。解析条件を表 3.1.3-5 に示す。

図 3.1.3-15(c) にデータ同期方法を示す。1D コード（Super-COPD）では、1 時刻前のタイムステップにおいてサブチャンネル解析コード（ASFRE）で計算された燃料集合体の出入口差圧、出口ナトリウム温度、ラップ管壁外面での熱流束を境界条件として、1 タイムステップ分の計算を進める。次に、サブチャンネル解析コードは、1D コードで得られた、最新の燃料集合体流量、入口ナトリウム温度、周囲のインターラップ部ナトリウム温度を境界条件として、1 タイムステップ分の計算を進める。この計算を順番に繰り返し、連成解析によって時間発展を計算する。

図 3.1.3-16 に中心燃料集合体と周辺燃料集合体の発熱上端高さ位置における水平断面

温度分布の解析結果を示す。1D コードと 1D-サブチャンネル連成解析の中心燃料集合体内温度（それぞれ、 T_{1D} , T_s ）は概ね一致することが確認された。炉心入口温度 400℃からの温度上昇幅（150℃）で規格化した相対誤差（ $(T_s - T_{1D})/150$ ）の最大値は、中心集合体の中心領域で 2.5%であった。連成解析の妥当性について、径方向熱移行を評価し、径方向温度分布が再現できることを確認した。

(3) 核特性解析モジュールとの連成解析手法の開発【H30】

① 核-熱連成解析手法の構築

従来の高速炉設計における核動特性評価及び炉心熱流動評価では、炉心出力変動について炉心内の中性子束分布が定格時から変化しないと仮定した 1 点近似核動特性解析を、炉心温度分布については炉心出力分布が定格時から変化しないと仮定した熱流動解析を実施してきた。しかしながら、核動特性の多次元効果が顕著となる事象の評価については課題があるため、核動特性の多次元効果を考慮できる核-熱連成解析手法を構築した。

燃料集合体、炉心槽を含めた熱流動解析モジュール並びに核特性解析モジュールを用いて統合プラットフォーム上で連成解析手法を構築する。核-熱連成解析手法における 3 次元核動特性解析の方法として中性子束分布の時間依存性を考慮できる断熱近似[3.1.3-3]を採用した。断熱近似式を計算するため MARBLE コード[3.1.2-4]の拡散近似ソルバを用い核特性解析モジュールとして、連成解析に必要な整備を実施した。核特性解析モジュールでは、炉心の燃料、被覆管、冷却材、ラップ管の各温度分布を入力として拡散近似方程式を解き、動特性パラメータ（即発中性子寿命、遅発中性子割合、反応度算出のための温度係数）と炉心出力分布を出力することができる。

図 3.1.3-17 に、核-熱連成解析の計算フローを示す。まず、1D コードの 1 点近似動特性計算で、前の時間ステップの炉心温度分布、反応度マップを境界条件として炉心出力を算出し、次の熱流動計算で、炉心出力及び炉心出力分布形状を境界条件として炉心温度分布を算出する。次に、核特性解析モジュールにより、3 次元拡散近似方程式を、炉心温度分布を境界条件として解き、次の時間ステップにおける炉心出力分布形状、反応度マップを算出する。これを順番に繰り返す。

② 核-熱連成解析の基本機能確認

核-熱連成解析の妥当性を評価するためには、核特性の空間依存性が大きい体系が望ましいが、そのような実験データはほとんど公開されていない。核特性の多次元効果は顕著ではないが、多くの解析事例が存在する国際原子力機関（IAEA: International Atomic Energy Agency）でのベンチマーク問題として採用された米国の高速実験炉「EBR-II」の SHRT-45R 試験[3.1.3-4]を対象に妥当性評価を実施した。この試験では、制御棒挿入が行われずに主冷却系ポンプ全 2 台が同時トリップすることで、冷却材流量喪失時の炉停止失敗事象が発生し、炉心の温度上昇から生じる負のフィードバックにより炉出力が低下し、自然循環により炉心が冷却されることになる。核特性を多次元モデルにて連成解析を行った結果が 1 点近似動特性の解に近づくことを確認し、連成解析手法の機能確認を行うことと

した。

図 3.1.3-18(a)に燃料集合体 721 体で構成された「EBR-II」炉心の核計算モデルの炉心体系を、図 3.1.3-18(b)に「EBR-II」に対する 1D コードの熱流動モデルの解析体系をそれぞれ示す。核-熱連成解析の妥当性を評価するため、1D コードのみでの解析結果と比較することとした。ここで、1D コードとモデル詳細度を統一するため、フィードバック反応度の計算は内側炉心と外側炉心の 2 領域で行うものとした。解析はポンプトリップから炉心が安定的に冷却されるまでの 900 秒間を対象とした。IAEA ベンチマークでの設定に従って境界条件を設定した。

図 3.1.3-19(a)に核出力と流量の時間変化について、核-熱連成解析の結果を 1D コード単独での解析結果と比較して示す。核-熱連成解析の結果は 1D コードの結果と概ね一致した。一方で、図 3.1.3-19(b)に示す反応度の温度係数について、初期値（1D コードの値）から時間変化することを確認した。本試験解析では、前述の通り核特性の多次元効果が小さい試験を対象としたため、1D コードの結果との差が現れにくい結果となったが、連成解析に必要な機能に問題がないことを確認し、更に多次元効果を考慮した解析が実施できることを確認した。

【参考文献】

- [3.1.3-1] Fink, J. K., and L. Leibowitz, Thermodynamic and transport properties of sodium liquid and vapor, ANL/RE-95/2, 1995.
- [3.1.3-2] Cheng, S. K., and N. E. Todreas, Hydrodynamic models and correlations for wire-wrapped LMFBR bundles and subchannel friction factors and mixing parameters, Nucl. Eng. Des. Vol.92, pp.227-251, 1985.
- [3.1.3-3] Ott, K.O. et al., Accuracy of the quasistatic treatment of spatial reactor kinetics, Nucl. Sci. Eng., Vol.36, No.3, pp.402-411, 1969.
- [3.1.3-4] IAEA, Benchmark Analysis of EBR II Shutdown Heat Removal, IAEA-TECDOC-1819, International Atomic Energy Agency Vienna, 2017.

表 3.1.3-1 主要な熱流動評価課題における連成解析

課題 No. 1 (強制循環-① ^(*))	評価項目 (着目現象)	定格運転時や原子炉トリップ時の炉心構成要素の温度評価 (燃料集合体間熱移行、流量再配分)	
	領域	モデル化	カップリングする解析コード
	1 次主冷却系	1 次元フローネットワークモデル	1D コード (Super-COPD)
	炉心全体 (集合体間ギャップ部含む)	チャンネルモデル (フローネットワークモデル)	1D コード (Super-COPD)
	燃料集合体内	サブチャンネル解析モデル	サブチャンネル解析コード (ASFRE)
課題 No. 2 (強制循環-② ^(*))	評価項目 (着目現象)	1 次主冷却系ポンプ 1 台トリップ等の非対称運転時の炉心支持構造物等の健全性評価 (下部プレナム多次元熱流動混合)	
	領域	モデル化	カップリングする解析コード
	1 次主冷却系	1 次元フローネットワークモデル	1D コード (Super-COPD)
	原子炉容器内プレナム部	多次元熱流動モデル	商用 CFD コード (FLUENT)
	炉心全体 (集合体間ギャップ部含む)	チャンネルモデル (フローネットワークモデル)	1D コード (Super-COPD)
課題 No. 3 (自然循環-① ^(*))	評価項目 (着目現象)	自然循環崩壊熱除去時の炉心最高温度評価 (炉心内での流量再配分及び径方向熱移行、燃料集合体間ギャップ部流れ (インターラップフロー))	
	領域	モデル化	カップリングする解析コード
	1 次主冷却系	1 次元フローネットワークモデル	1D コード (Super-COPD)
	原子炉容器内プレナム	多次元熱流動モデル	商用 CFD コード (FLUENT)
	炉心全体 (集合体間ギャップ部含む)	チャンネルモデル (フローネットワークモデル)	1D コード (Super-COPD)
	燃料集合体	サブチャンネル解析モデル	サブチャンネル解析コード (ASFRE)
課題 No. 4 (自然循環-② ^(*))	評価項目 (着目現象)	炉上部プレナム浸漬型熱交換器による崩壊熱除去時のインターラップフローによる炉心冷却効果の評価 (炉心-プレナム相互作用、温度成層化)	
	領域	モデル化	カップリングする解析コード
	1 次主冷却系	1 次元フローネットワークモデル	1D コード (Super-COPD)
	原子炉容器内プレナム	多次元熱流動モデル	商用 CFD コード (FLUENT)
	炉心全体 (集合体間ギャップ部含む)	チャンネルモデル (フローネットワークモデル)	1D コード (Super-COPD)
	燃料集合体内	サブチャンネル解析モデル	サブチャンネル解析コード (ASFRE)

(*)H29 年度 成果報告書 (3.1.2 項参照)

表 3.1.3-2 CFD コードの解析オプション設定

設定項目		ポンプ駆動流れ		密度差駆動流れ
		層流ケース	乱流ケース	
壁面		ノンスリップ	標準壁関数	標準壁関数
乱流モデル		－	RNG $k-\epsilon$	RNG $k-\epsilon$
重力項		－	－	Bousinessq 近似
ナトリウム物性値		一定値 (400℃)		温度の関数
ソース 項	運動量式	あり (ポンプ)	あり (ポンプ)	－ (自然循環条件)
	エネルギー式	－ (等温条件)	－ (等温条件)	あり (発熱及び吸熱)

表 3.1.3-3 1D-サブチャンネル連成解析の妥当性確認における解析体系

領域	項目	単位	燃料集合体 1 体系	燃料集合体 7 体系
燃料集合体	本数	本	1	7
	全長	m	3.070	3.070
	ラッパ管内対面間距離	m	0.063	0.063
	ラッパ管肉厚	m	－	0.004
	集合体間ピッチ	m	－	0.078
	集合体間ギャップ幅	m	－	0.007
燃料ピン	本数	本	7	
	燃料ピンピッチ	m	0.0224	
	燃料ピン直径	m	0.0208	
	ワイヤースペーサ直径	m	0.0015	
	ワイヤースペーサ巻きピッチ	m	0.165	

表 3. 1. 3-4 1D-サブチャンネル連成解析の妥当性確認における解析条件

(主循環系一巡の熱流動問題)

項目		Case1 (等温解析)	Case2 (非等温解析)
流量	初期条件	燃料集合体ピンバンドル部 $Re \sim 30,000$ 相当流量	
	過渡条件	初期 5 秒間は定常状態。その後流量半減時間が 6.5 秒となるようポンプ吐出圧を減少	
炉心発熱量	初期条件	—	炉心出入口温度差が 150°C となる炉心発熱量
	過渡条件	—	初期 5 秒間は定常状態。その後指数関数的に減少。
除熱量	初期・過渡条件	—	炉心発熱と同一の熱量
ポンプ吐出圧	初期条件	初期の全系圧力損失と一致するポンプ吐出圧	
	過渡条件	初期 5 秒間は一定。流量半減時間が 6.5 秒となるポンプ吐出圧	

表 3. 1. 3-5 1D-サブチャンネル連成解析の妥当性確認における解析条件

(燃料集合体間径方向熱移行問題)

項目	設定値
流量	定格 3% の 33% 増 (中心燃料集合体 : 1 体) 定格 3% (周辺燃料集合体 : 6 体)
炉心発熱量	定格 3%

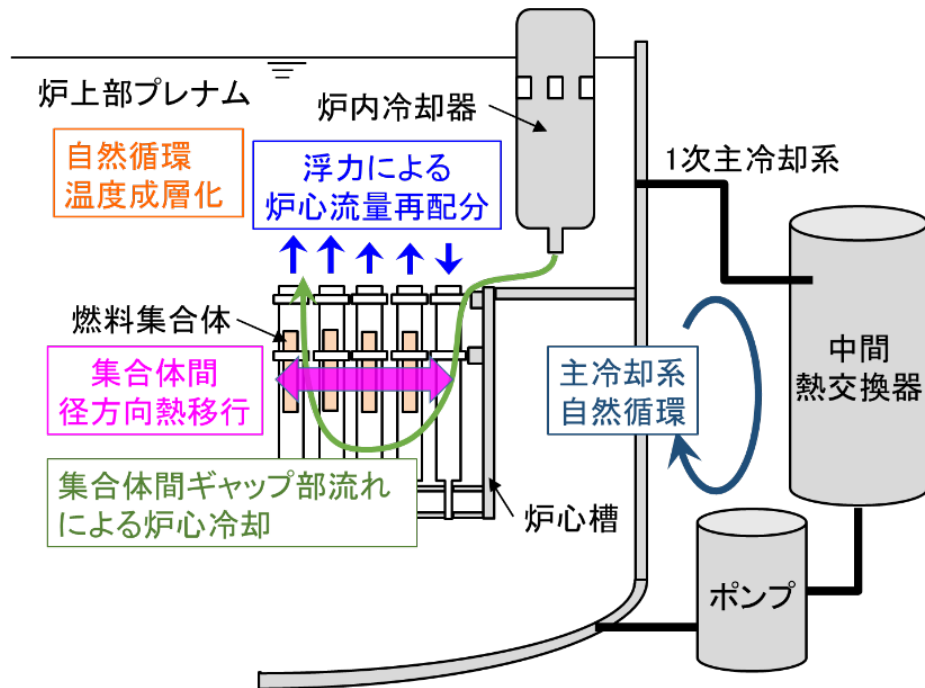


図 3. 1. 3-1 ナトリウム冷却高速炉における主要な熱流動評価課題

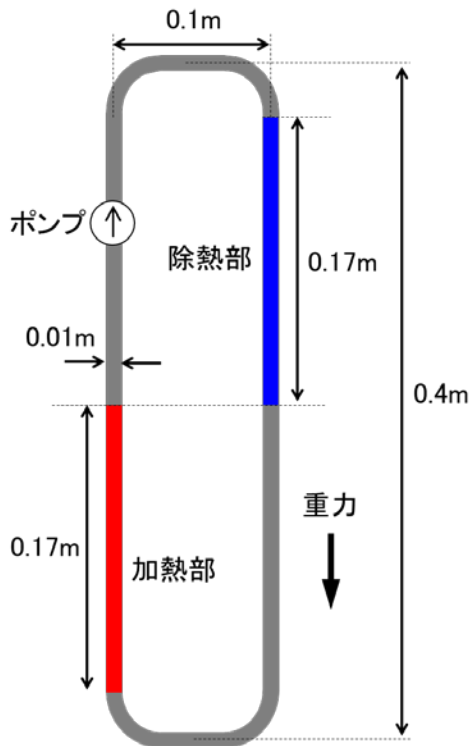


図 3.1.3-2 2次元「閉」ループ体系

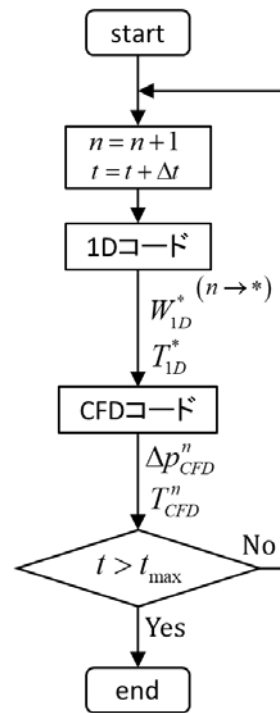


図 3.1.3-3 1D-CFD 連成解析時のデータ同期

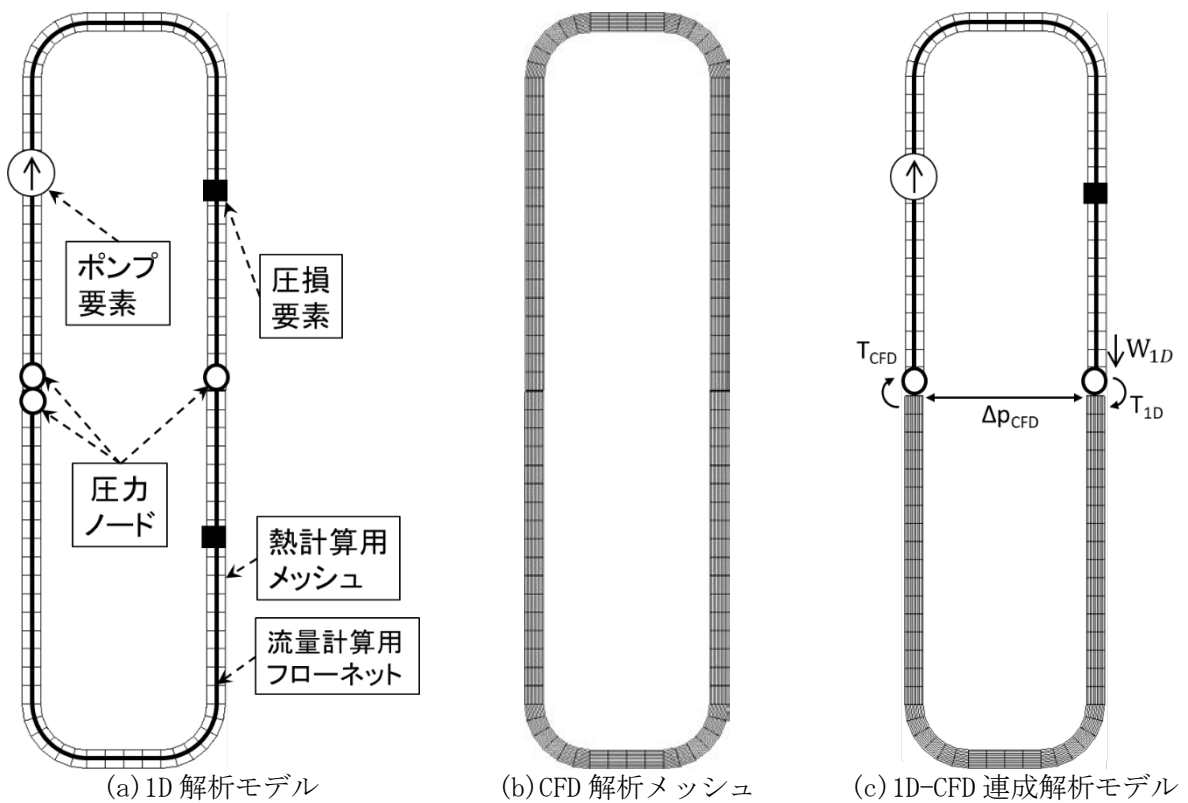


図 3.1.3-4 1D-CFD 連成解析の妥当性確認用モデル

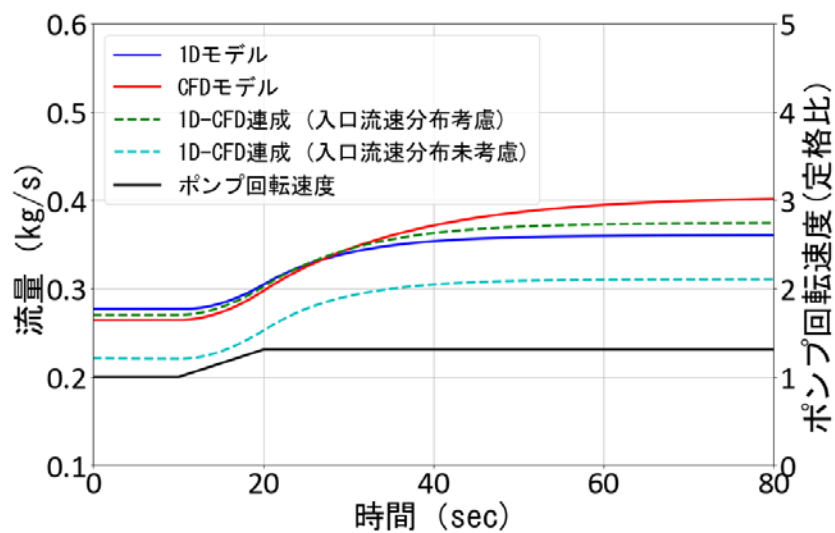


図 3.1.3-5 ポンプ駆動流れ問題の流量（層流ケース）

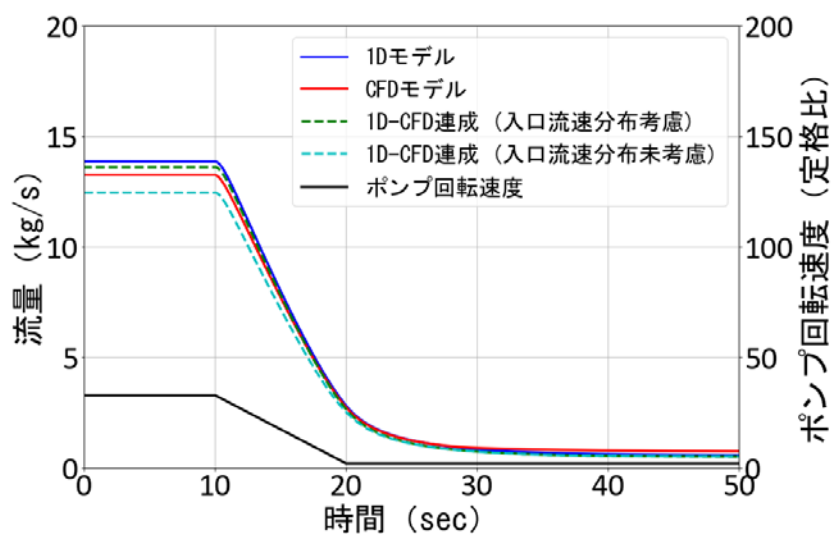


図 3.1.3-6 ポンプ駆動流れ問題の流量（乱流ケース）

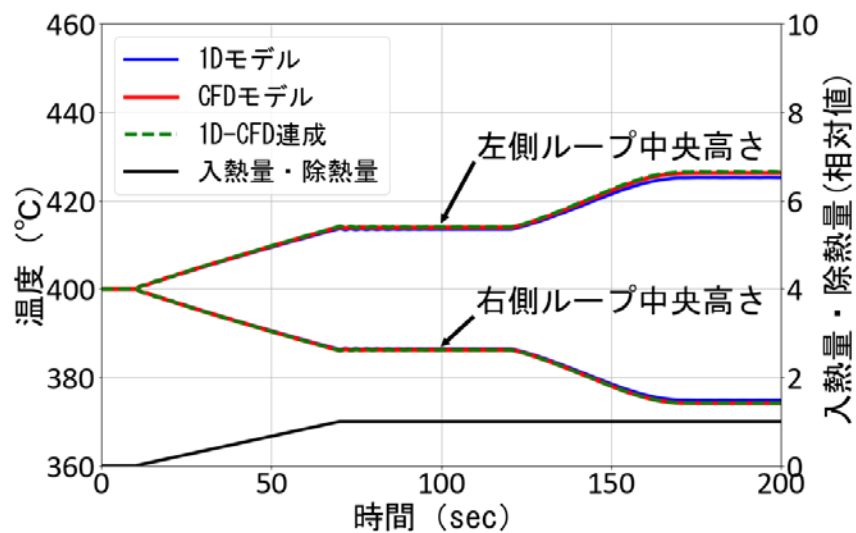


図 3.1.3-7 密度差駆動問題の温度と入熱・除熱量

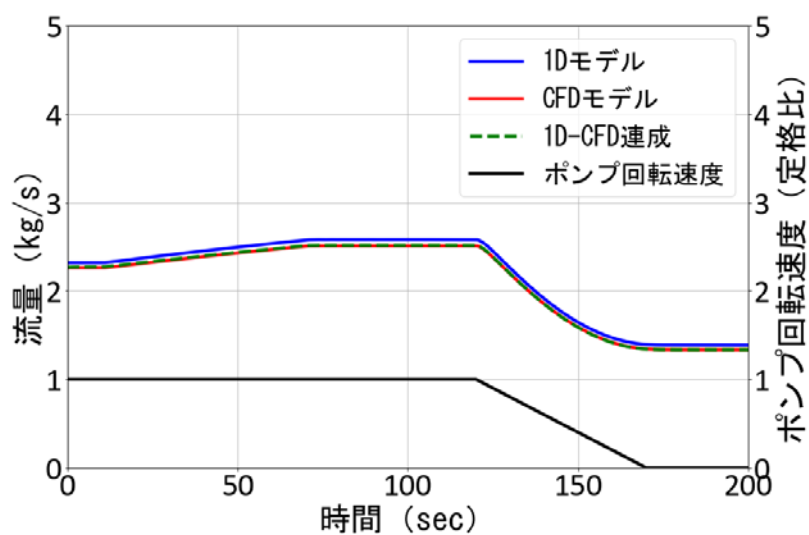


図 3.1.3-8 密度差駆動問題の流量とポンプ回転速度

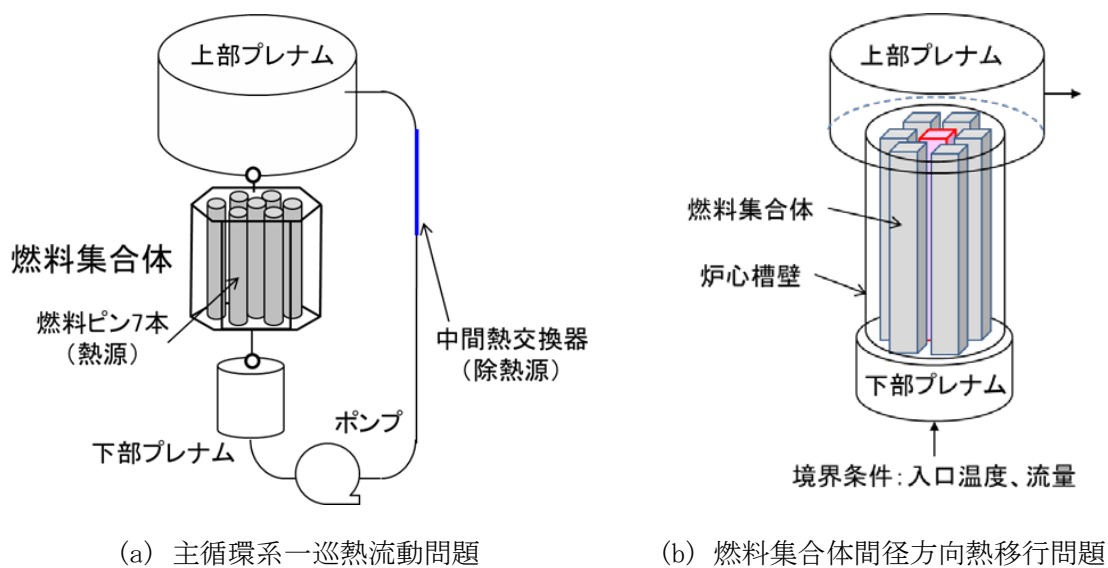


図 3.1.3-9 1D-サブチャンネル連成解析手法の妥当性確認用の解析体系

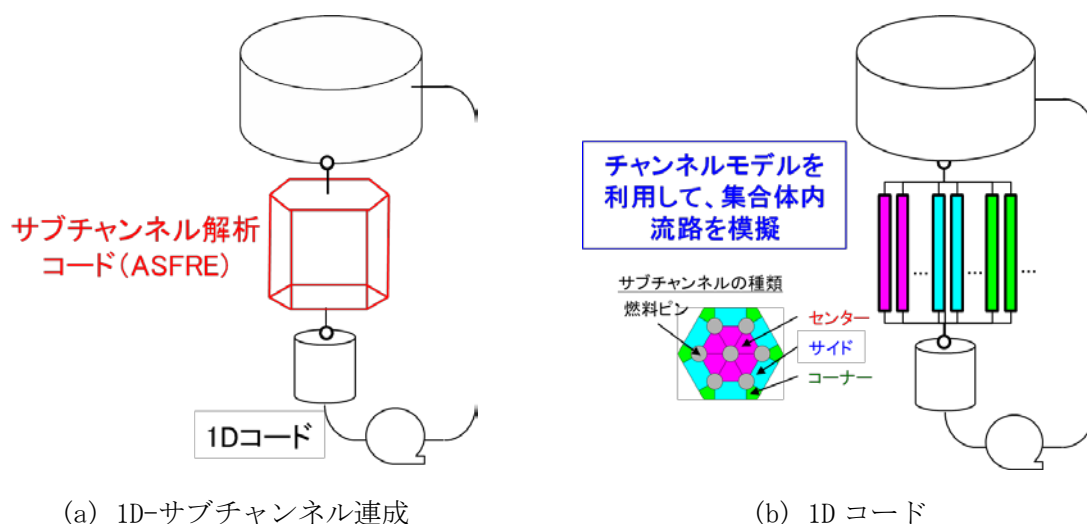
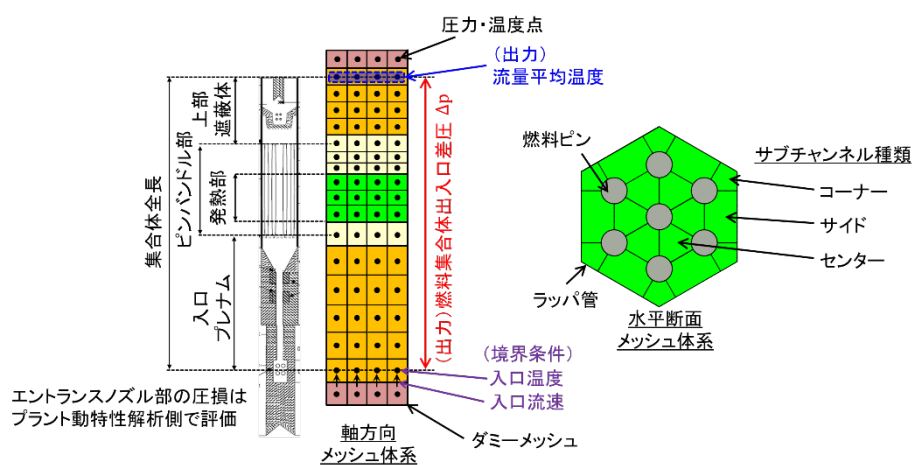


図 3.1.3-10 主循環系一巡熱流動問題の解析モデル



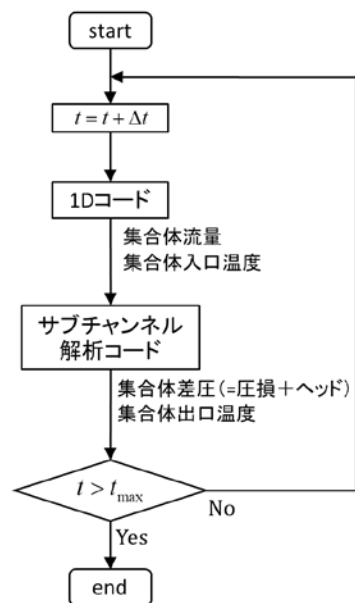


図 3. 1. 3-12 主循環系一巡熱流動問題でのデータ同期方法

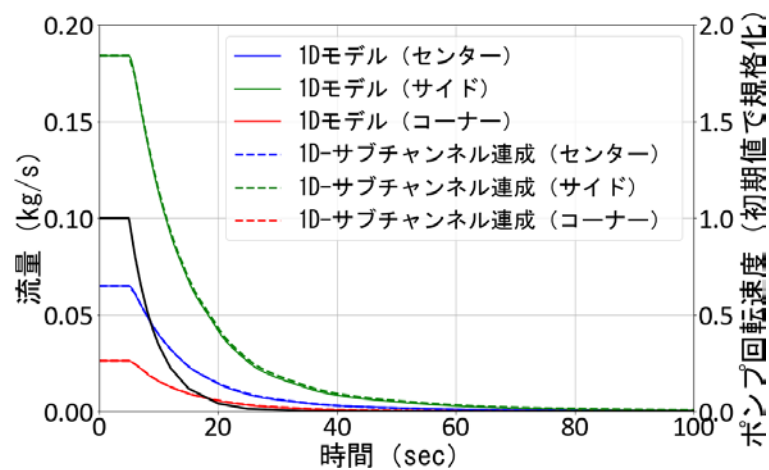


図 3. 1. 3-13 等温解析 (Case1) での燃料集合体燃料ピンバンドル部の流量配分

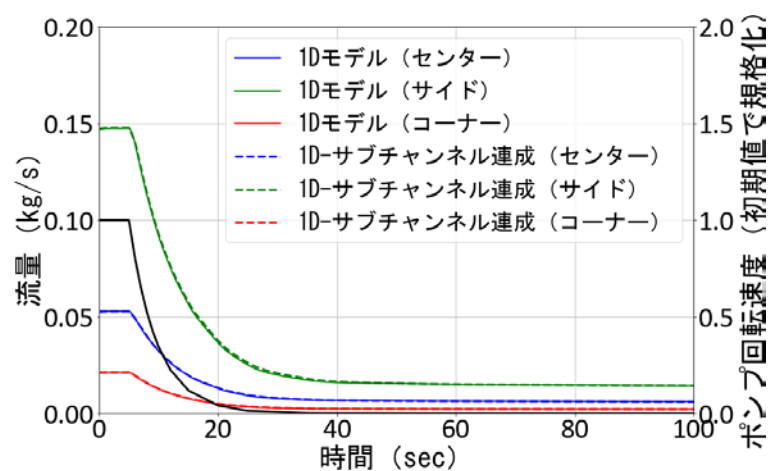
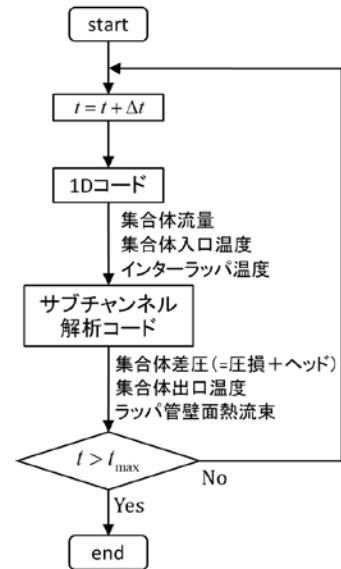
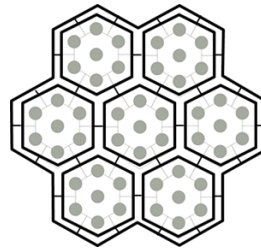
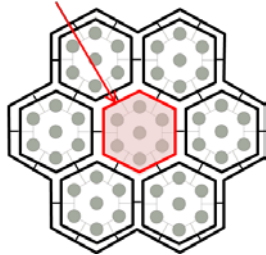


図 3. 1. 3-14 非等温解析 (Case2) での燃料集合体燃料ピンバンドル部の流量配分

サブチャンネル解析コード
(ASFRE)を適用



(a) 1D-サブチャンネル連成

(b) 1D モデル

(c) データ同期方法

図 3. 1. 3-15 燃料集合体間径方向熱移行問題の解析モデルとデータ同期方法

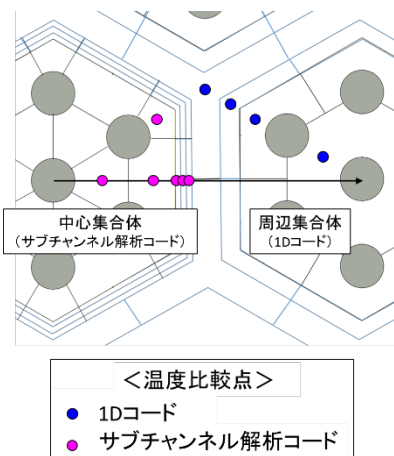
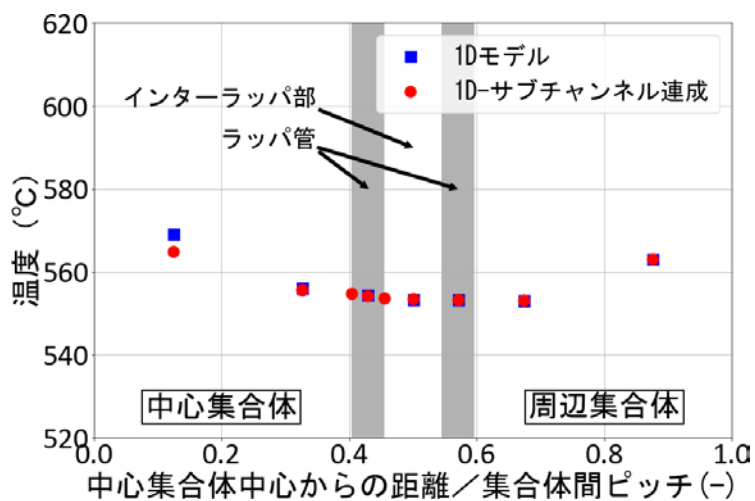


図 3. 1. 3-16 発熱上端高さ位置における中心燃料集合体と
周辺燃料集合体の水平断面温度分布の解析結果

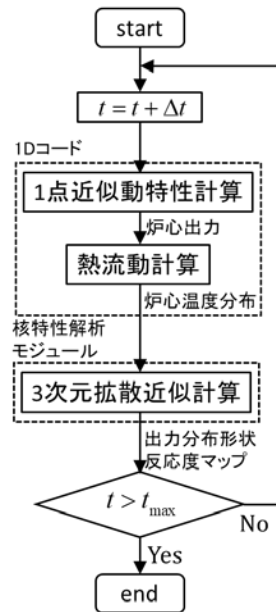
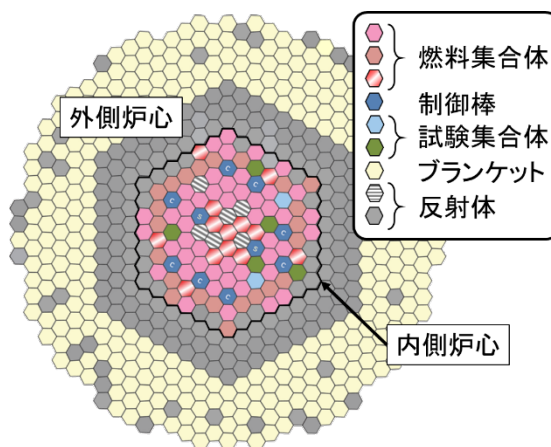
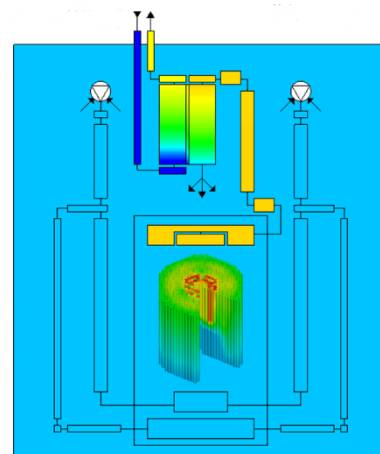


図 3. 1. 3-17 核－熱連成解析の同期方法

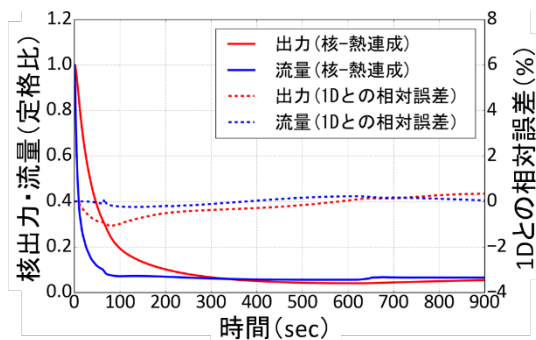


(a) 核計算モデルの炉心体系

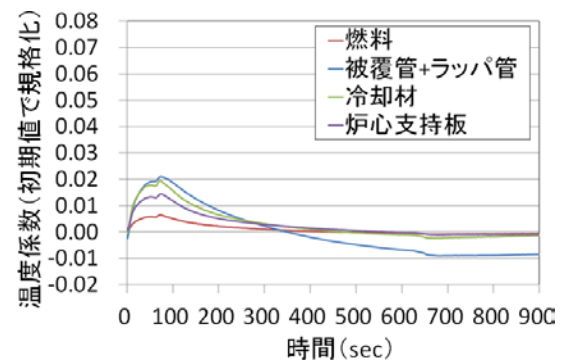


(b) 1D コードの熱流動モデルの解析体系

図 3. 1. 3-18 核－熱連成解析妥当性評価のための解析モデル



(a) 核出力と流量の時間変化



(b) 反応度温度係数の時間変化

図 3. 1. 3-19 核－熱連成解析の結果

3.1.4 システムの総合的な妥当性評価【R1】

「1D-CFD 連成解析手法」、「1D-サブチャンネル連成解析手法」、「核-熱連成解析手法」を用いたマルチレベルシミュレーションシステムの開発を完了した。その総合的な妥当性評価を実施するため、IAEA ベンチマークとして実施された米国の高速実験炉「EBR-II」の SHRT-45R 試験条件[3. 1. 3-4]を例題として選定した。SHRT-45R 試験は、100%出力(60MWth)時にスクラムなしで 2 台のポンプを同時にトリップさせ、1 次冷却材喪失時スクラム失敗事象を模擬した試験である。図 3.1.4-1 に「EBR-II」の系統構成と炉上部プレナム構造を示す。炉心から流出した冷却材は、炉上部プレナム及び Z 型配管を経由して中間熱交換器に流入する。炉上部プレナムには、円筒状の垂直バッフルプレートが Z 型配管と反対側の 90° 分を開口して設置されている。また、炉上部プレナムの上面には上蓋への熱衝撃を緩和するために水平熱遮蔽板が設置されている。中間熱交換器で冷却されたナトリウムはコールドプールに流出する。コールドプールから炉心へは 2 ループで接続され、各ループに設置されたポンプによりナトリウムが炉心に供給される。Z 型配管の途中にも非常用電磁ポンプが 1 台設置されている。図 3.1.4-2 に炉心構成を示す。炉心は主に燃料集合体で構成される内側炉心と主にブランケット集合体及び反射体で構成される外側炉心で構成され、内側及び外側炉心はそれぞれ高圧及び低圧の下部プレナムに接続されている。SHRT-45R 試験では、核出力、2 ループ構成の 1 次冷却系 No.2 ループ流量、Z 型配管の入口温度（配管中心 1 点）、炉心出口温度（代表 21 点）、そして炉上部プレナムでは熱電対をツリー状に配置した熱電対ツリーにより鉛直方向の温度分布が計測されている。また、炉心内局所熱流動挙動に関して、試験燃料集合体 XX09 の内部温度分布と集合体流量が計測されている。これら計測結果について解析結果と比較することで妥当性を確認する。

1D-CFD 連成解析手法による「炉上部プレナム内熱流動挙動」、1D-サブチャンネル連成解析手法による「炉心槽内熱流動挙動」、核-熱連成解析手法による「核-熱連成挙動」に関連する解析モデルの詳細度レベルを変化させた解析を行い、各解析結果を試験での計測結果と比較して本シミュレーションシステムの妥当性を確認した。なお、「核-熱連成解析手法」については、SHRT-45R 試験では空間依存性が顕著に現れないことから、EBR-II 体系で制御棒誤引抜き事象を設定し、核特性の空間依存性が大きくなる仮想条件として解析を実施して、その結果を 1D コードの結果と比較することで本システムの機能確認を行った。

(1) 炉上部プレナム内熱流動挙動を対象としたマルチレベルシミュレーション

EBR-II (SHRT-45R) 試験を対象に、1D コードにてプラント全体の挙動を捉えつつ、CFD モデルにより炉上部プレナム内の局所挙動を詳細に解析評価するマルチレベルシミュレーションを行い、炉上部プレナム内熱流動挙動に対する本システムの妥当性を評価した。マルチレベルシミュレーションとして、炉上部プレナム及びその下流に位置する Z 型配管について、それぞれを温度の異なる流体が瞬時に混合すると仮定した完全混合モデル (0D モデル: 0 Dimensional モデル) と流体の移流を考慮した混合モデル (1D モデル) の組み合わせとした場合 (0D/1D モデル) と、双方を詳細な CFD モデルでモデル化した場合 (CFD モデル) で解析結果を比較した。なお、炉上部プレナム及び Z 型配管以外の構成要素は 1D

コードにてモデル化し、解析ケース（0D/1D モデル、CFD モデル）によらず共通である。炉上部プレナム及び Z 型配管の熱流動解析モデルの概要を図 3.1.4-3 及び表 3.1.4-1 に示す。表 3.1.4-2 に示すように解析モデルの詳細度レベルをパラメータとして解析ケース（0D/1D モデル、CFD モデル）を設定した。解析で与えた初期条件及び境界条件を表 3.1.4-3 に示す。

妥当性を確認するため、プラント全体挙動に関して核出力、1 次冷却系 No. 2 ループ流量、炉心出口温度、Z 型配管入口温度と、炉上部プレナム内の局所挙動に関して炉上部プレナム内に設置された熱電対ツリーでの高さ方向の温度分布について、解析結果と試験結果で比較した。図 3.1.4-4 に核出力の比較を示す。約 150 秒以降の解析結果は核出力を高め評価するものの、全体として計測結果の時間変化の傾向を再現できた。後半の乖離は 3.1.4(3) でも示すように、連成手法に限らず今後の課題である。図 3.1.4-5 に示す 1 次冷却系 No. 2 ループ流量については、炉上部プレナムのモデル詳細度レベルによらず時間変化の傾向を再現した。図 3.1.4-6 に、炉上部プレナム出口に接続されている Z 型配管入口温度についての解析結果と計測結果との比較を示す。計測結果は 300 秒間のうちの 75 秒から 200 秒までのデータの信頼性が低いため比較対象から除外した[3.1.3-4]。前半部（75 秒まで）については、炉上部プレナムを完全混合モデルとした場合（0D/1D モデル）は、モデルの特性として輸送遅れを考慮する CFD モデルよりも炉上部プレナム出口部の温度応答が速くなるため、計測結果よりも高い温度を示した。一方、CFD モデルでは温度上昇の傾向をより正確に再現している。後半部の 200 秒以降では、CFD モデルと完全混合モデルを用いた 0D/1D モデルの解析結果と計測結果との差は小さくなった。図 3.1.4-7 に炉心出口温度について、CFD モデルによる解析結果と計測結果の比較を 2 列目～9 列目の代表位置で示す。全体的には過渡変化をよく再現しているが、約 30 秒以降は全体的に解析結果の方が計測結果よりも温度を高く評価した。この主な理由は、前述したように 150 秒以降で解析は炉心核出力を高く、炉心流量を低く評価しているためであるが、この差の解消については、今後の課題である。図 3.1.4-8 に CFD モデルによる炉上部プレナム内温度分布の解析結果を代表時刻で示す。ポンプトリップ（時刻 0 秒）からフローコーストダウン終了までの約 100 秒間は、炉上部プレナム内に燃料集合体が多く配置されている炉心中央部から高温ナトリウムが流れ込み、また、プレナム中央部及びプレナム上部の温度は、プレナム周辺部及びプレナム下部よりも高く、多次元的な温度分布（温度成層）の形成が見られた。200 秒ではプレナム内温度分布の差はほとんどなくなった。図 3.1.4-9 に炉上部プレナム内に設置された熱電対ツリー位置での高さ方向温度分布について解析結果と計測結果を比較して示す。過渡の初期において、炉心からの流出速度が速い約 30 秒まで、炉上部プレナム上方（TC5）では CFD モデルによる解析結果の温度が高く、炉上部プレナム中央（TC1）では解析結果の方が温度は低い。これは、CFD モデルでは炉心中央部の出口付近に林立するホールドダウンフィンガー（炉心出口温度計測用熱電対を固定するための柱状構造物）[3.1.3-4]の形状を模擬していないことから、炉心中央部から流出した高温ナトリウムがホールドダウンによって周囲の低温ナトリウムと混合されずに、炉上部プレナム上部に直接到達してしまうためと考えられる。50 秒以降、約 100 秒で温度はピークに達し、その後は徐々に降温する傾向は

再現できている。炉上部プレナムの上部に設置された熱電対（TC5）での 90 秒から 100 秒までの 10 秒間の平均は約 569℃であるのに対し、解析では約 577℃となり、その差は約 8℃であった。290 秒から 300 秒までの 10 秒間については計測値が約 498℃に対して、解析は約 501℃となり、その差は約 3℃であった。これらの温度差は定格時（0 秒）の温度（約 443℃）からのそれぞれの上昇幅に対して約 6%と約 5%と十分小さい。これより、本シミュレーションシステムの妥当性を確認した。

(2) 炉心内熱流動挙動を対象としたマルチレベルシミュレーション

EBR-II（SHRT-45R）試験を対象に、1D コードにてプラント全体の挙動を捉えつつ、炉心部を構成する燃料集合体のうち、特定の集合体として計測結果のある試験燃料集合体 XX09 に対してサブチャンネル解析モデルを適用して局所熱流動挙動を詳細に解析するマルチレベルシミュレーションを行い、炉心内熱流動挙動に対する本シミュレーションシステムの妥当性を評価した。

マルチレベルシミュレーションでは、炉上部プレナムと Z 型配管について瞬時に混合すると仮定した 0D モデルと流体の移流を考慮した 1D モデルでそれぞれ模擬し、特定の燃料集合体（XX09）内の局所熱流動挙動については詳細度が低い順に、①集合体内を水平断面で均質化し、代表ピンで評価する「チャンネルモデル（代表ピン）」、②集合体ラップ管に接する周辺 6 領域と中心領域で分割した 7 温度領域で評価する「チャンネルモデル（7 温度領域）」、③3 本の燃料ピンまたは燃料ピンとラップ管壁で囲まれた領域（サブチャンネル）ごとに領域分割した「サブチャンネル解析モデル」でモデル化した。以上 3 つの燃料集合体モデルの概要を図 3.1.4-10 に示す。燃料集合体の解析モデルの詳細度レベルをパラメータとして解析ケースを表 3.1.4-4 のように設定した。①と②には 1D コード Super-COPD を用い、③にはサブチャンネル解析コード ASFRE を用いた。

妥当性評価として、XX09 内温度分布について、解析結果と試験結果で比較した。燃料ピン発熱上端の高さにおけるナトリウム水平温度分布を図 3.1.4-11 に示す。図より、燃料集合体モデルの詳細度レベルを上げることによって、集合体内水平方向温度分布をより忠実に再現可能となることが分かる。炉心の各集合体の温度は流量配分、出力配分、集合体種類の違いによりそれぞれ異なるため、集合体内温度分布は隣接する集合体との温度差によって非対称となるが、その傾向も再現できている。300 秒で解析結果の温度は計測結果に比べて高くなるが、これは図 3.1.4-4 及び図 3.1.4-5 で示したように解析が核出力を高め、流量を低めに評価するためである。ピーク温度評価という観点で、100 秒における集合体内最高温度に着目すると、計測結果の 658.9℃に対し、サブチャンネル解析モデルによる解析結果は 654.8℃であった。その差 4.1℃は炉心入口温度（344.0℃）からの温度上昇幅 314.9℃に対して十分小さい。これより、本シミュレーションシステムの妥当性を確認した。

(3) 核－熱連成挙動を対象としたマルチレベルシミュレーション

SHRT-45R 試験を対象に、1D コードによりプラント全体の挙動を捉えつつ、炉心の核と熱流動との連成挙動（核－熱連成挙動）を解析するマルチレベルシミュレーションを行い、

核－熱連成挙動に対する本システムの妥当性を評価した。マルチレベルシミュレーションでは、プラント全体及び炉心の熱流動は 1D コードにてモデル化した。炉心の核動特性は、過渡時の核出力分布形状が定格運転時から変化しないと仮定する 1 点近似動特性モデル（1 点近似モデル）と、核出力分布形状の時間変化を考慮できる多次元核動特性モデル（多次元核モデル）を用いた。ここで、1 点近似モデルで用いる核出力分布形状は、多次元核モデルで計算した初期の核出力分布形状とした。核動特性モデルの概要と設定内容を図 3. 1. 4-12 と表 3. 1. 4-5 に示す。解析ケースは、表 3. 1. 4-6 に示すように核動特性解析モデルの詳細度レベルをパラメータとして設定した。

妥当性評価として、プラント全体の挙動に関しては核出力を、炉心内の核と熱の連成挙動に関しては炉心出口温度を対象に、解析結果と試験結果を比較した。核出力の解析結果を図 3. 1. 4-13 に示す。いずれの解析ケースも 150 秒までは試験結果と約 3% 以内で一致した。150 秒以降の乖離については連成手法に限らず今後の課題である。その上で、1 点近似モデルと多次元核モデルの約 20～150 秒における差は、図 3. 1. 4-14 に示すように多次元核モデルによる冷却材温度及び燃料温度に係るフィードバック反応度の解析結果が 1 点近似モデルの解析結果よりも負の値として大きいために発生したものである。フィードバック反応度の差の影響は、図 3. 1. 4-15 に示す炉心出口温度にも現れている。反射体ではほとんど差がないが、燃料集合体の炉心出口温度は多次元核モデルの方が 1 点近似モデルよりも低くなった。以上の結果から、本シミュレーションシステムの妥当性を確認した。

しかしながら、対象とした試験では核動特性の 3 次元効果が小さいため、核動特性の 3 次元効果がより顕著に現れる制御棒誤引抜き事象の仮想条件での解析を実施し、本システムの機能確認を行った。解析条件は、SHRT-45R 試験の定格運転状態から制御棒 1 体（図 3. 1. 4-12(a) に示す。）を駆動機構の数倍の速度で 7 秒間引抜くことにした（反応度投入率は約 8¢/s、反応度の総投入量は約 54¢ になる。）。

解析では、引抜かれる制御棒の移動に応じて 3 次元核計算の該当する計算メッシュにおける材料を制御棒の構成材料である B₄C から冷却材ナトリウムに置き換えた。ただし、タイムステップ当たりの制御棒の移動距離に合わせて核計算メッシュ幅を細かく設定することは現実的でないため、計算メッシュ内で占める制御棒とナトリウムの体積割合に応じて計算メッシュ内の構成材料の数密度を与え、比較的粗い計算メッシュで制御棒引抜きによる投入反応度を考慮した。表 3. 1. 4-7 に解析条件をまとめて示す。表 3. 1. 4-8 に示すように、解析ケースは核動特性解析モデルの詳細度レベルをパラメータとして設定した。

核出力及び反応度の解析結果を図 3. 1. 4-16 及び図 3. 1. 4-17 に示す。7 秒間の制御棒引抜きによって正の反応度が投入される。これにより核出力が増加し、炉心温度が上昇すると、冷却材、構造材、燃料の温度上昇に伴う負のフィードバック反応度が投入され、核出力の増加は減速し、約 6 秒で減少に転じた。核動特性モデルの違いによって、主に燃料温度上昇に伴う燃料ペレットの軸方向膨張の効果（燃料温度）とドップラ効果（ドップラ）によるフィードバック反応度に違いが生じ、核出力に 2～3% 程度の差が生じた。図 3. 1. 4-18 に示すように、制御棒引抜き時には燃料が配置されている炉心中心の中性子束が周辺に比べて高くなった。そのため、制御棒が引抜かれる過程の中性子束分布形状の時間変化を

考慮する多次元核モデルでは燃料の温度上昇幅を 1 点近似モデルよりも大きく評価し、負のフィードバック反応度を大きく評価した。以上の結果より、本シミュレーションシステムによって核動特性の 3 次元効果を評価できることを確認した。

表 3.1.4-1 炉上部プレナム及び Z 型配管の CFD モデルの概要

項目		設定
モデル化	垂直バッフル板、水平熱遮蔽板	多孔板の口径に合せた圧力損失を考慮
	炉上部プレナム天井面	上蓋への放熱を考慮
	炉上部プレナム側面	断熱を仮定
	炉上部プレナム底面（炉心出口）	集合体流量から断面平均流速を境界条件として付与 集合体出口温度を境界条件として付与
	Z 型配管	コールドプールへの伝熱を考慮
	メッシュ分割	約 106 万
計算法	時間進展	1 次精度 Euler 陰解法
	空間的離散化	2 次精度風上（対流項）
	（ナビエ・ストークス、 k 、 ϵ 方程式）	2 次精度中心（その他）
	乱流モデル	Realizable $k-\epsilon$
	壁条件	標準壁関数

表 3.1.4-2 炉上部プレナム内熱流動を対象とした解析ケース

Case	炉上部プレナム	Z 型配管	炉上部プレナム、 Z 型配管以外の プラント全体	タイムステップ (sec)
Ref	0D モデル (完全混合)	1D モデル (熱移流)	0D/1D モデル	0.1
1-1	CFD モデル			0.1

表 3. 1. 4-3 SHRT-45R 試験の解析条件

初期条件	
熱出力 (MW)	60. 0
炉心流量 (kg/s)	471. 0
初期炉心流量配分	テーブルデータ [3. 1. 3-4]
試験集合体 XX09 流量 (kg/s)	2. 21
炉心入口温度 (°C)	344. 0
2 次系流量 (kg/s)	303. 7
2 次系入口温度 (°C)	288. 9
境界条件	
ポンプ回転数 (rpm)	時系列データ [3. 1. 3-4]
2 次系流量 (kg/s)	
2 次系入口温度 (°C)	
電磁ポンプ (Pa)	

表 3. 1. 4-4 炉心部熱流動を対象とした解析ケース

Case	炉心		炉心以外の プラント全体	全タイムステップ (sec)
	試験集合体 XX09	その他の集合体		
Ref	チャンネルモデル (7 温度領域)		1 次元フローネット ワークモデル	0. 01
2-1	チャンネルモデル (代表ピン)			0. 01
2-2	サブチャンネル解析 モデル	チャンネルモデル (7 温度領域)		0. 01

表 3. 1. 4-5 核計算モデルの設定内容

中性子エネルギー離散化		7 群
空間メッシュ分割 (拡散方程式、反応度係数)	軸方向	41
	径方向	637 (集合体数)

表 3. 1. 4-6 核 - 熱連成挙動を対象とした SHRT-45R 試験条件の解析ケース

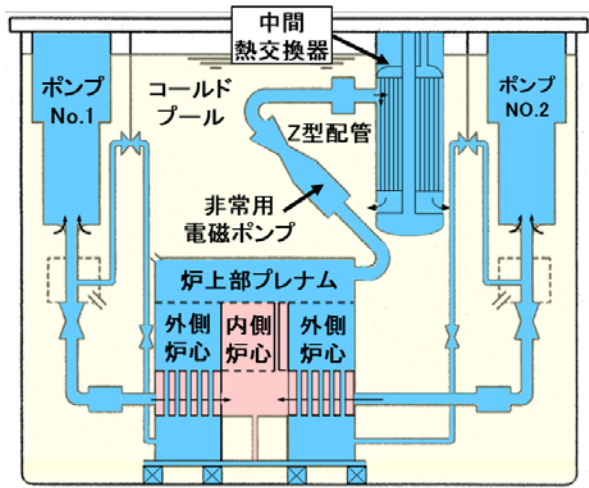
Case	核動特性 モデル	1D コード		核計算コード	コード間の同期 タイムステップ (sec)
		熱計算の タイムステップ (sec)	核出力計算の タイムステップ (sec)	出力分布計算のタ イムステップ (sec)	
Ref	1 点近似	0. 01	0. 001	初期のみ計算	—
3-1	多次元核			10	10

表 3. 1. 4-7 制御棒誤引抜き事象の解析条件

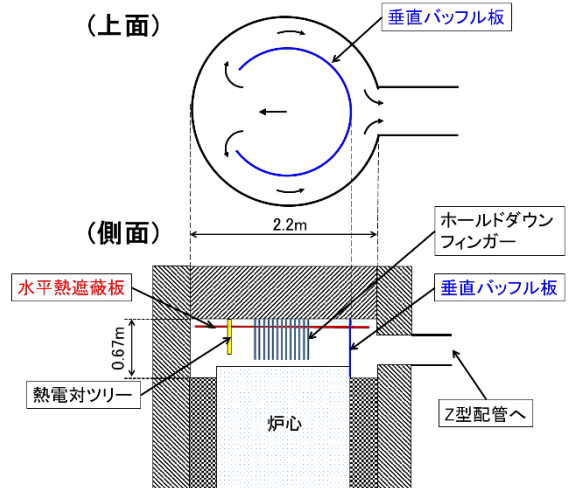
制御棒の構造	EBR-II の制御棒の構造は B_4C ピンの下に燃料ピンが配置されている。 本解析では B_4C ピンの引抜き効果を対象にするため、燃料ピン部分の材料をナトリウムに置き換えた。
引抜き条件	制御棒 1 本を約 $8 \text{ } \phi / \text{s}$ に相当する 49 cm/s の速度で 7 秒間引抜き、合計約 $0.54 \$$ の反応度を投入した。

表 3. 1. 4-8 制御棒誤引抜き事象の解析ケース

Case	核動特性 モデル	1D コード		核計算コード	コード間の同期 タイムステップ (sec)
		熱計算の タイムステップ (sec)	核出力計算の タイムステップ (sec)	出力分布計算の タイムステップ (sec)	
4-1	1 点近似	0. 01	0. 001	初期のみ計算	—
4-2	多次元核			0. 1	0. 1

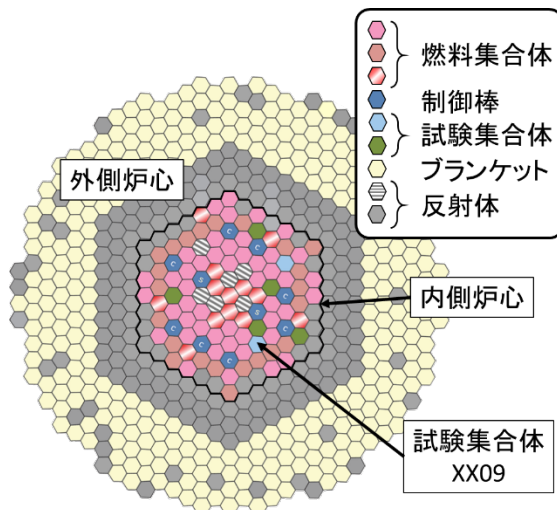


(a) EBR-II の系統構成

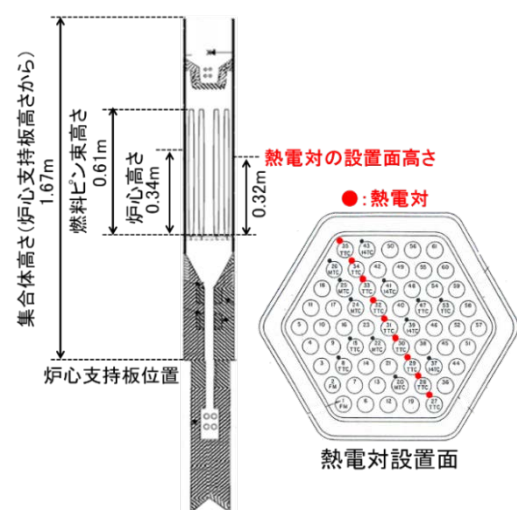


(b) 炉上部プレナム構造

図 3.1.4-1 EBR-II の系統構成と炉上部プレナム構造

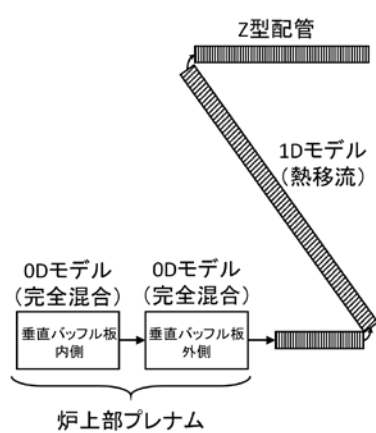


(a) 炉心構成

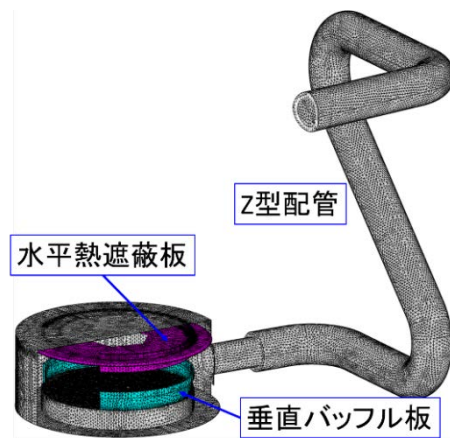


(b) 試験集合体 XX09

図 3.1.4-2 炉心構成と試験集合体 XX09



(a) 0D/1D モデル



(b) CFD モデル

図 3.1.4-3 炉上部プレナム及び Z 型配管の熱流動解析モデルの概要

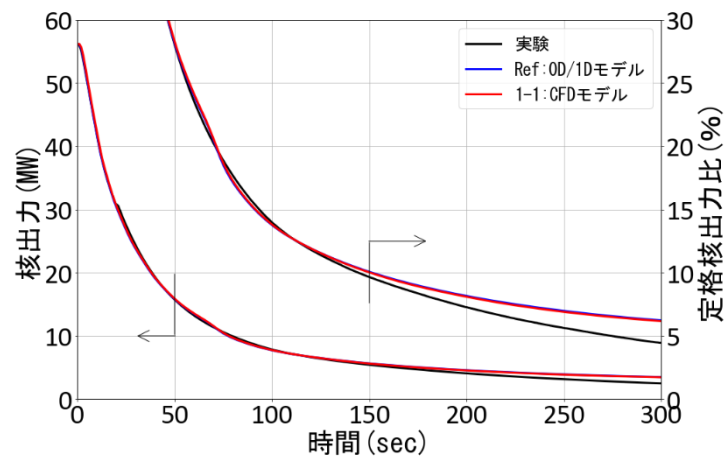


図 3. 1. 4-4 炉心核出力の時間変化
(右軸は左軸を定格比で示した。)

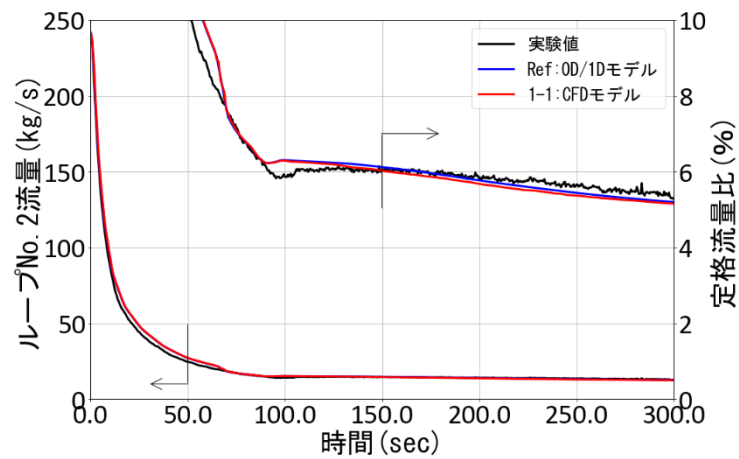


図 3. 1. 4-5 1 次冷却系 No. 2 ループ流量の時間変化
(右軸は左軸を定格比で示した。)

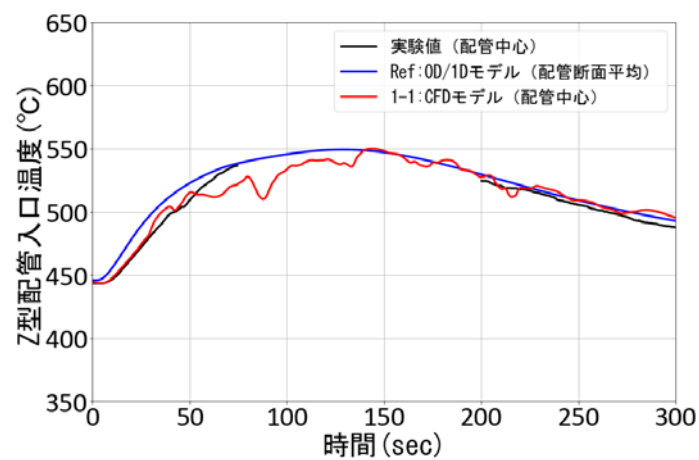


図 3. 1. 4-6 Z 配管入口温度の時間変化

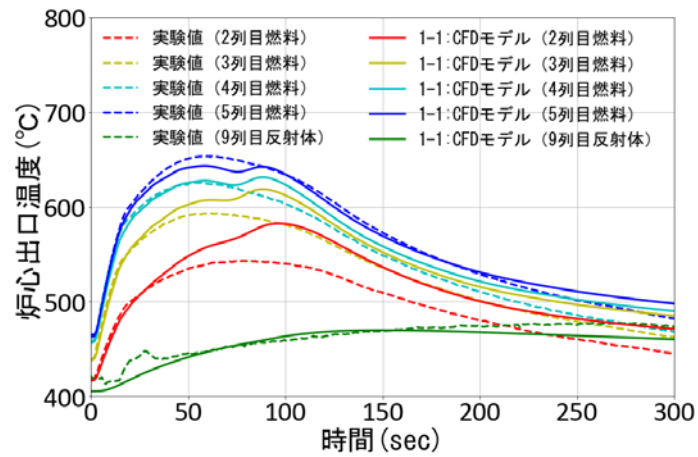


図 3. 1. 4-7 代表的な位置での炉心出口温度の時間変化

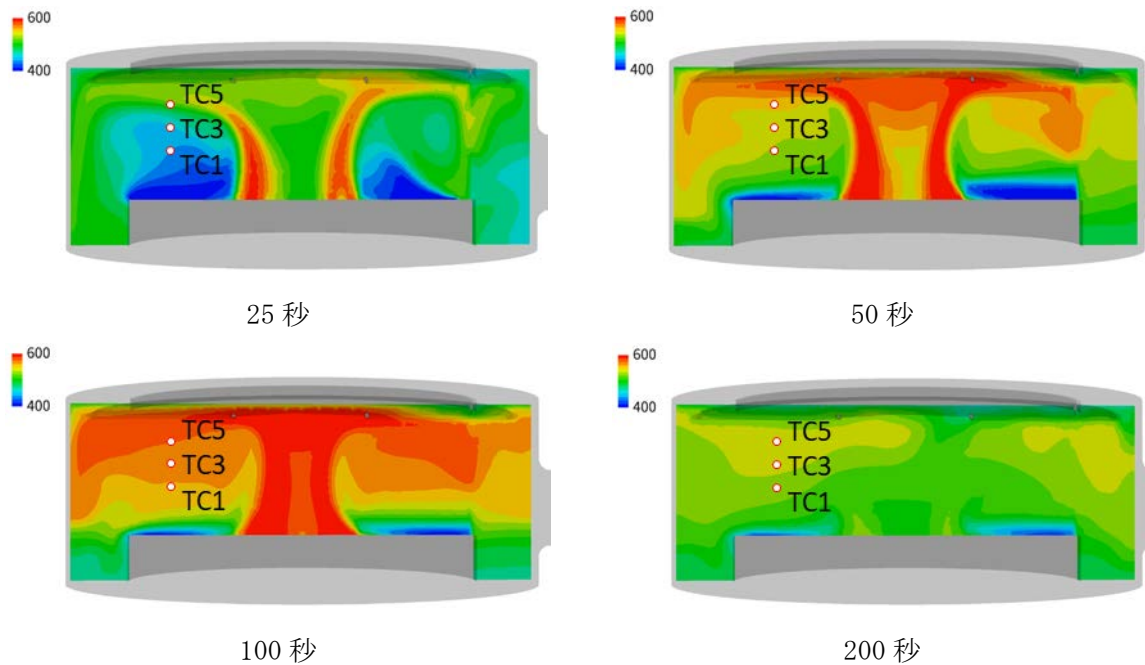


図 3. 1. 4-8 CFD モデルによる炉上部プレナム内温度分布の解析結果

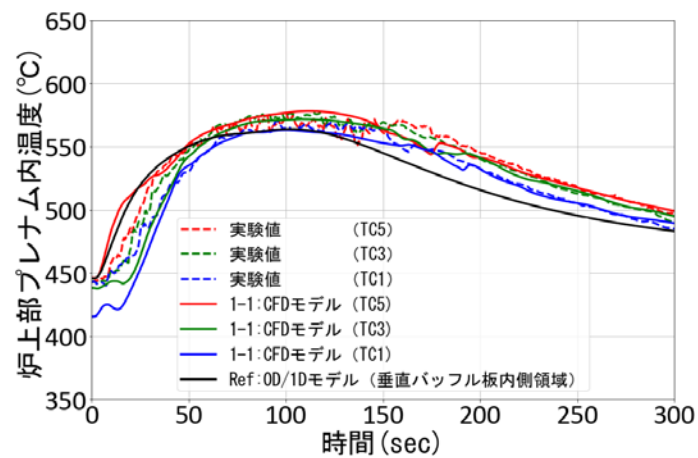


図 3. 1. 4-9 炉上部プレナム内高さ方向温度分布の時間変化

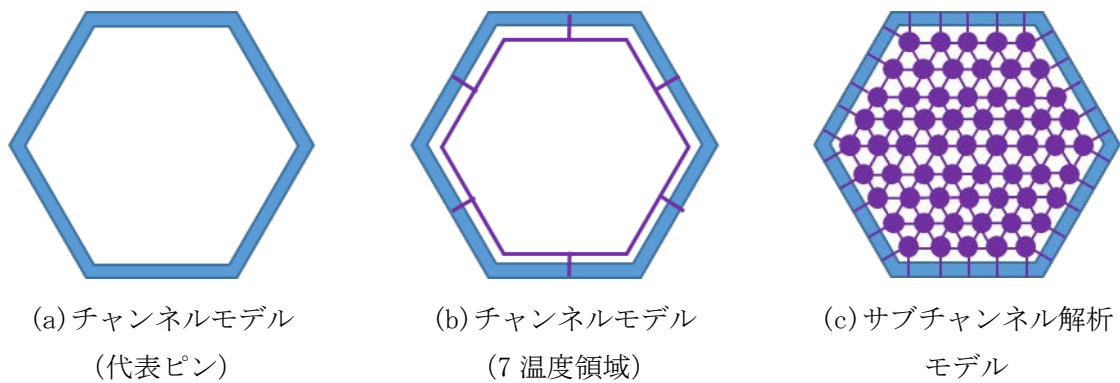


図 3.1.4-10 燃料集合体モデルの概要

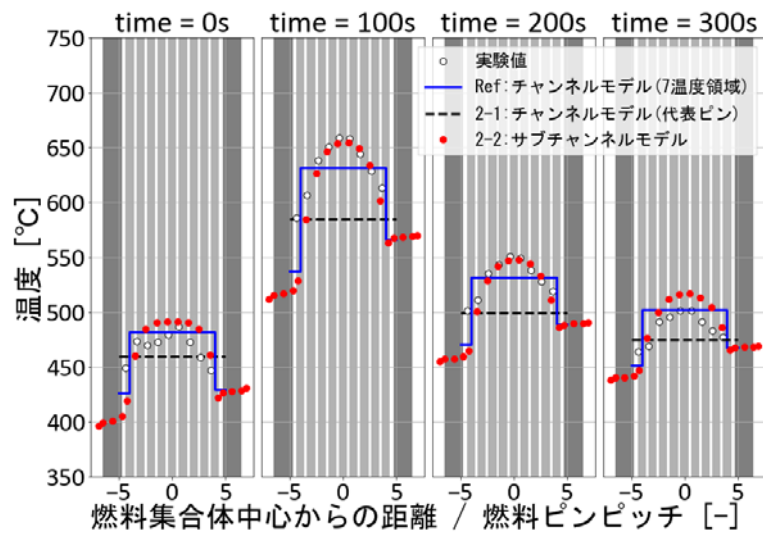


図 3.1.4-11 試験集合体 XX09 水平温度分布の時間変化

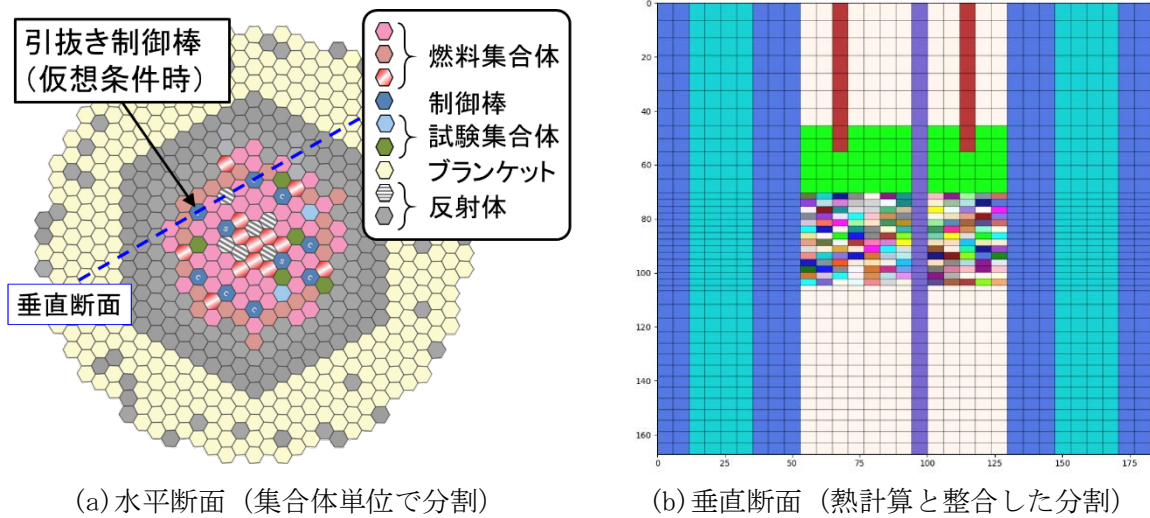


図 3.1.4-12 多次元核動特性モデルの反応度計算メッシュ体系

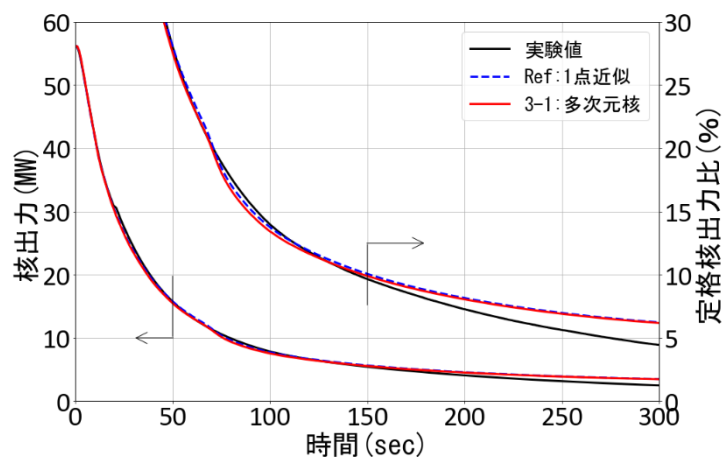


図 3.1.4-13 核出力の時間変化
(右軸は左軸を定格比で示した。)

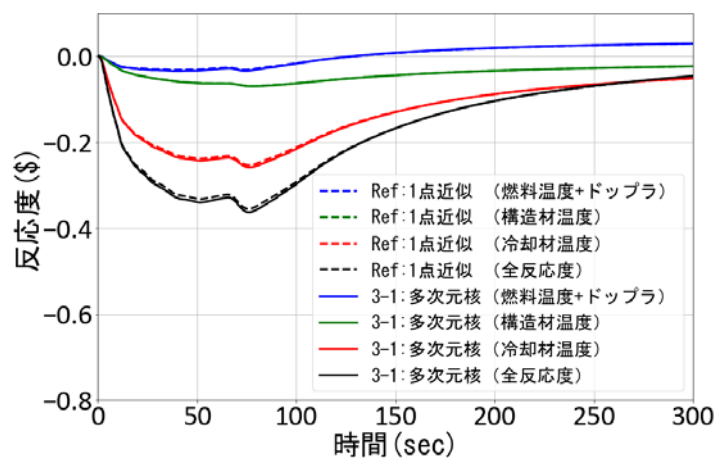


図 3.1.4-14 反応度の時間変化

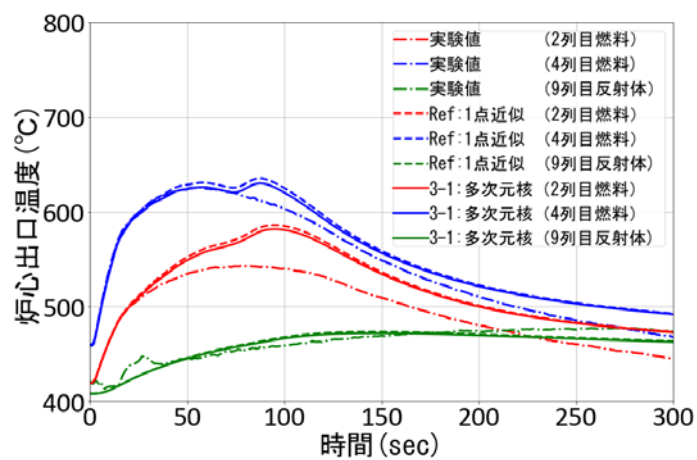


図 3.1.4-15 炉心出口温度の時間変化

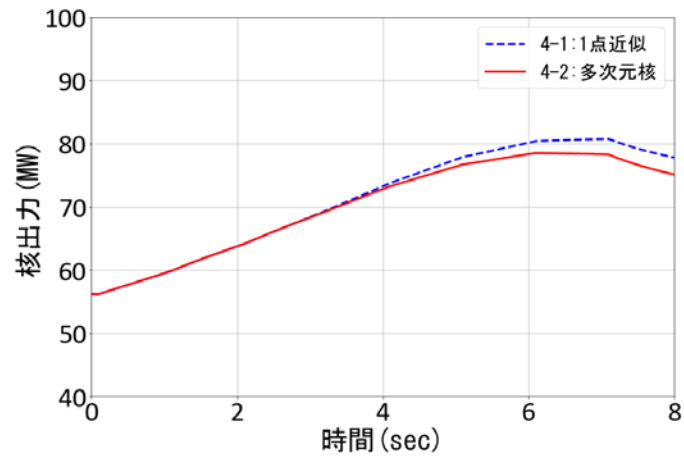


図 3. 1. 4-16 核出力の時間変化

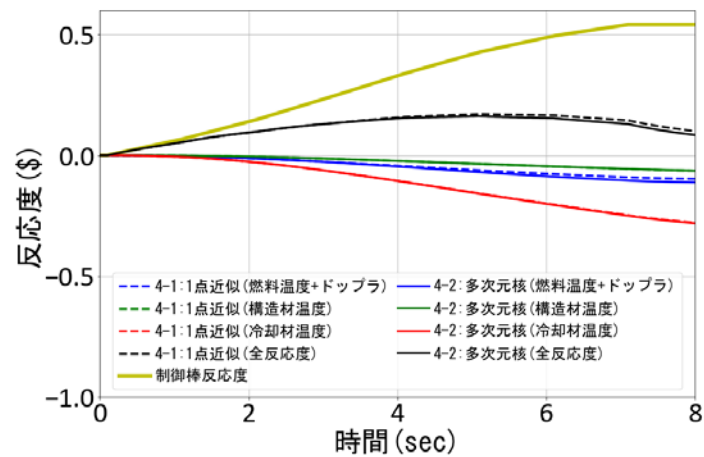


図 3. 1. 4-17 反応度の時間変化

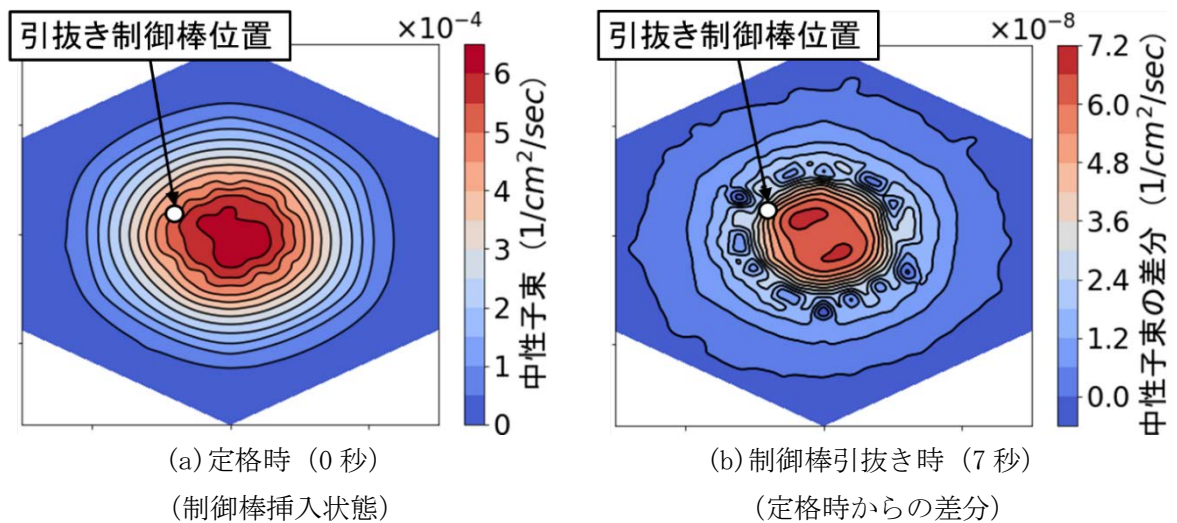


図 3. 1. 4-18 中性子束分布形状 (多次元核動特性モデルの解析結果)

3.2 シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発

3.2.1 はじめに

東京電力福島第一原子力発電所の事故以降、SA（一般に著しい炉心損傷を伴う事故を指す。）の評価、対策が重要となっている。SA 事象は、複雑かつ不確かさが大きい領域であり、ナトリウム冷却高速炉では、一部多次元解析が行われているものの、そのほとんどの領域ではいくつかの領域に応じた質点系動特性解析コードを組み合わせる形でその進展が評価されてきた。この場合、個別コード間を境界条件として接続させることの妥当性、不連続性が課題である。一方、軽水炉の SA 評価では、炉内、炉外で発生する事象を一貫して取り扱う解析手法が構築されている。

本業務では、ナトリウム冷却高速炉炉心溶融から炉外事象までを一貫して解析できるシミュレーションシステムの実現を目指す。ここでは、システムのベースとなる炉内・炉外熱流動解析モジュールを構築すると共に、ナトリウム冷却高速炉の SA 評価に重要な個々の物理モデルのモジュール化とベースモジュールへの実装を行い、様々な SA シナリオを统一的に解析可能とすることを目標とする。本件で開発するシステムの名称を SPECTRA (Severe-accident Phenomenological computational Code for Transient Assessment) とする。

3.2.2 基本モジュールの構築【H28-29, R1】

3.2.2.1 炉内基本モジュール【H28-29, R1】

本業務では、高速炉 SA 時の炉内において生じる複雑な挙動（冷却材熱流動、炉心溶融、リロケーション、炉容器破損など）を、前節で述べた通り計算負荷と精度（モデル詳細度）の両者を考慮しながら解析することが求められている。その観点から、これまで主として用いられてきた集中乗数系コードによる解析は得られる精度の面から適切ではないと考え、流体の基礎方程式に基づいて炉内流動を解析する手法を構築することを選択した。

また、重要な解析対象の 1 つとして原子炉容器液位確保機能喪失事象（LORL: Loss of Reactor Level）を想定しているため、気液界面の取り扱いが重要となる。また加えて冷却材の沸騰も考慮する必要がある。このため複数流体を取り扱う必要があり、支配方程式が単相流と同等となる流体占有率（VOF: Volume of Fluid）法[3.2.2-1]並びに、将来的な動特性とのカップリングを考慮した場合、計算高速化の観点では多流体 1 圧力モデルに利点があるため、両方の開発を行うものとする。

(1) VOF 法【H28-29】

① 支配方程式及び離散化

低マッハ数近似に基づき、圧縮性（多相）流れの解析を行う。基礎方程式は、質量保存式(3.2.2.1-1)、運動量保存式(3.2.2.1-2)、エネルギー保存式(3.2.2.1-3)、化学種（核分裂性物質(FP: Fission Products)含む。）の輸送方程式(3.2.2.1-4)及び状態方程式(3.2.2.1-5)である。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v} = 0 \quad (3.2.2.1-1)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p' + \nabla \mathfrak{I} + \rho \bar{g} + \bar{F} \quad (3.2.2.1-2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \bar{v}) = -\nabla \cdot (\bar{j}_q + \bar{j}_R) + \beta T \frac{dp_0}{dt} \quad (3.2.2.1-3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \bar{v}) = -\nabla \cdot \bar{j}_k + \rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} \right)_R \quad (3.2.2.1-4)$$

$$p_0 = p - p' = E(\rho, T) \quad (3.2.2.1-5)$$

ただし、 ρ は密度、 $\bar{v}$ は速度、 p_0 は空間的に一様な平均圧力、 p' は圧力の空間的な変動部分、 $\mathfrak{I}$ は速度勾配テンソル、 $\bar{g}$ は重力、 $\bar{F}$ は外力（表面張力等）、 h はエンタルピー、 $\bar{j}_q$ は対流熱流束、 $\bar{j}_R$ は輻射熱流束、 β は体積膨張率、 γ は比熱比、 Y_k は化学種 k の濃度、 $\bar{j}_k$ は化学種 k のフラックス、 E は密度と温度の関数である。

気液界面の運動はVOF法によって計算する。このため、流体率 f （各計算セルにおける液相の体積割合）の輸送方程式(3.2.2.1-6)を用いる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla f = 0 \quad (3.2.2.1-6)$$

計算手順

低マッハ数近似式に基づく基礎式を離散化し、陰解法に基づく時間進行を行う。実際の計算手順は以下の通りである。

- i) 流体率の輸送方程式(3.2.2.1-6)を計算して流体率を更新；
- ii) 質量保存式(3.2.2.1-1)を用いて仮の密度を計算；
- iii) 化学種（FP）の輸送方程式(3.2.2.1-4)を計算して化学種の質量分率を更新；
- iv) 平均圧力を更新；
- v) エネルギー保存式(3.2.2.1-3)を計算して温度を更新；
- vi) 状態方程式(3.2.2.1-5)及び蒸発・凝縮を計算して密度を更新；
- vii) 運動量保存式(3.2.2.1-2)を計算して仮の速度を計算；
- viii) 変動圧力を更新；
- ix) 更新した変動圧力を用いて速度を更新；
- x) 各物理量に対する収束判定を実施して未収束なら手順 i から再度計算を実施；
- xi) 収束値を次の時刻における物理量として時間を更新。

支配方程式(3.2.2.1-1)～(3.2.2.1-6)を上記の計算手順に従って解くプログラムを、炉内熱流動解析（基本）モジュールとして新規に構築した。

② 妥当性解析

炉内熱流動解析モジュールの機能検証として、ナトリウム冷却高速炉[3.2.2-2]を参考とした体系を用い、1次主冷却系からの冷却材流出事象の解析を実施した。ナトリウム冷却高速炉の1次系を簡易的に表した2次元解析体系（直径約11m、高さ約25m）を図3.2.2.1-1

に示す。なお、総セル数は 4775 (1 ループ構成)、格子サイズは約 0.25m である。

解析結果概要を図 3.2.2.1-2 に示す。図に示す通り液位低下も概ね補足できており、構築モデルの妥当性が確認された。

(2) 多流体 1 圧力モデル【R1】

① 支配方程式及び離散化

多流体 1 圧力モデルでは、圧力は共通であるものの各支配方程式は独立しており、相関の運動量交換、エネルギー交換に関する構成方程式が必要となる。以下に気相を例に支配方程式を示す。

【質量保存】

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \alpha_g \rho_g d\Omega + \int_S \alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} \Gamma d\Omega \quad (3.2.2.1-7)$$

【運動量保存】

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g d\Omega + \int_S \alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS = & \int_S \alpha_g \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} dS - \int_S \alpha_g p \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} dS \\ & + \int_{\Omega} \alpha_g \rho_g \mathbf{g} d\Omega \mp \int_{\Omega} F_{ph} d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \Gamma \mathbf{u}_g d\Omega \end{aligned} \quad (3.2.2.1-8)$$

【多成分ガス移流・拡散】

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \alpha_g \rho_g Y_i d\Omega + \int_S \alpha_g \rho_g Y_i \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS = & \int_S \alpha_g \rho_g D_{mi} \text{grad} Y_i \cdot \mathbf{n} dS \\ & + \int_{\Omega} \gamma_i d\Omega \end{aligned} \quad (3.2.2.1-9)$$

【エネルギー保存】

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \alpha_g \rho_g h_g d\Omega + \int_S \alpha_g \rho_g h_g \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS = & \int_S \alpha_g \lambda_g \text{grad} T \cdot \mathbf{n} dS \\ & + \int_{\Omega} Q_{gl} d\Omega + \int_{\Omega} Q_{ch} d\Omega \end{aligned} \quad (3.2.2.1-10)$$

【状態方程式】

$$p = z \frac{\rho_g}{M} R T_g \quad (3.2.2.1-11)$$

ここで、 ρ ：密度、 α ：体積分率、 $\mathbf{u}$ ：速度ベクトル、 p ：動圧、 T ：温度、 $\boldsymbol{\tau}$ ：粘性応力テンソル、 F_{ph} ：単位体積当たりの相関摩擦力、 $\mathbf{g}$ ：重力加速度ベクトル、 h ：エンタルピー、 λ ：熱伝導率、 Q_{gl} ：相間交換熱量、 Y ：質量分立、 D_m ：有効拡散係数、 M ：分子量、 R ：一般ガス定数、 γ_i ：成分種 i の生成項、 Γ ：気相生成項、 z ：圧縮係数、 $\mathbf{n}$ ：界面の単位法線ベクトルである。

離散化は有限体積法を用い、時間については 1 次の Euler 法を、空間については移流項 1 次の風上法を、拡散については 2 次の中心差分を用いる。混相流の発散を以下と定義する。

$$-D = \sum_j \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} \quad (3.2.2.1-12)$$

各相の質量保存並びに運動量保存を(3.2.2.1-12)式に代入することで圧力方程式が得られる。数値解法としては完全陰解型 (SIMPLER: Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations-Revised) を用い、行列計算には修正不完全コレスキー分解による前処理付き共役勾配法 (MICCG: Modified Incomplete Cholesky Conjugate Gradient Method) を用いた。支配方程式(3.2.2.1-7)～(3.2.2.1-11)を上記の数値解法及び行列計算法により解くプログラムを、炉内熱流動解析 (基本) モジュールとして新規に構築した。

② 妥当性解析

開発したモジュールの妥当性確認として、高速増殖原型炉もんじゅ相当の体系 (炉容器直径約 7m、全長約 18m) [3.2.2-3]を用いた。解析体系及びメッシュ分割を図 3.2.2.1-3 に示す。解析は 2 次元とし、1 ループと 2 ループ構成について評価を行った。なお、炉容器と 1 次系配管では断面積が異なるため、それぞれのメッシュに異なる多孔率及び透過率とすることで、体積の関係が 3 次元と等価となるよう設定した。同様に、炉心部分についても燃料ピン等による流路断面積の変化を多孔率及び透過率で模擬している。

解析では、まず定常状態としてもんじゅと同様な炉心出入口温度差、1 次系平均速度となるように、炉心発熱量、中間熱交換器 (IHX: Intermediate Heat eXchanger) 除熱量及びポンプ駆動力を設定した。解析結果を図 3.2.2.1-4 に示す。1 ループ体系では上部プレナムで若干温度分布が生じ、流れ場もループ側に偏った形となっている。一方で 2 ループ体系では流れ場はほぼ対象となり、上部プレナムで均一な温度分布になるものの、発熱が比較的小さい周辺チャンネルでの低温の影響がループ側にも及んでいる。なお実際のもんじゅでは内筒が設置されているため、解析のような温度分布がつきにくい構造となっている。

VOF 法と同様に、上記定格状態から、1 次系配管破断 (図 3.2.2.1-3 解析体系における破断箇所 (案 1)) の解析を行った。破断口径は約 50cm で漏えい箇所の外圧を 1 気圧とし、内外圧差により漏えい量は計算される。また破断と同時にスクラムが成功し、ポンプ駆動力を 0、炉心発熱量は定格の 8%、IHX の除熱量を 0 としている。なお 2 ループ体系では健全側については IHX の除熱量を定格の 10%としている。解析はタイムステップを 2.5×10^{-2} s とし、漏えい開始から 1000 秒までの解析を行った。

それぞれの解析結果を図 3.2.2.1-5 及び-6 に示す。漏えい開始後約 100s で 1 次系配管にガスが流入し循環が停止する。これ以降では炉容器内部のナトリウム温度が徐々に上昇し、約 500s 以降で周期的な沸騰が見られている。2 ループ体系でも図 3.2.2.1-6 に示すように、健全側での除熱が約 100s で途絶えるため、これ以降の傾向は 1 ループと同様となる。いずれのケースにおいても液位低下に伴う 1 次系循環の停止、炉心部での温度上昇に伴うナトリウムの沸騰が再現されており、構築したツールの妥当性が確認された。

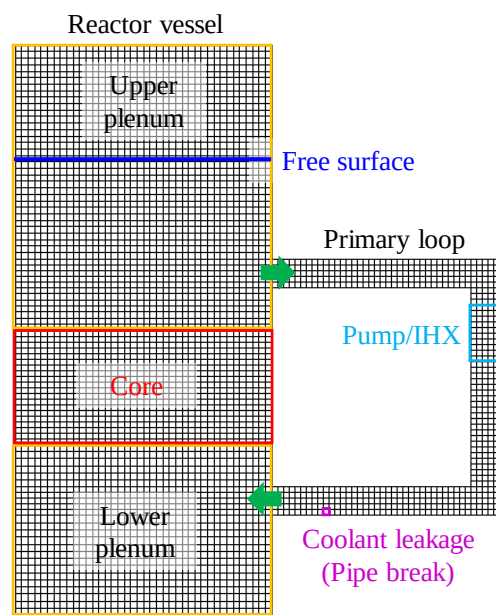


図 3. 2. 2. 1-1 ナトリウム冷却高速炉の 1 次系を模擬した解析体系（VOF 法）

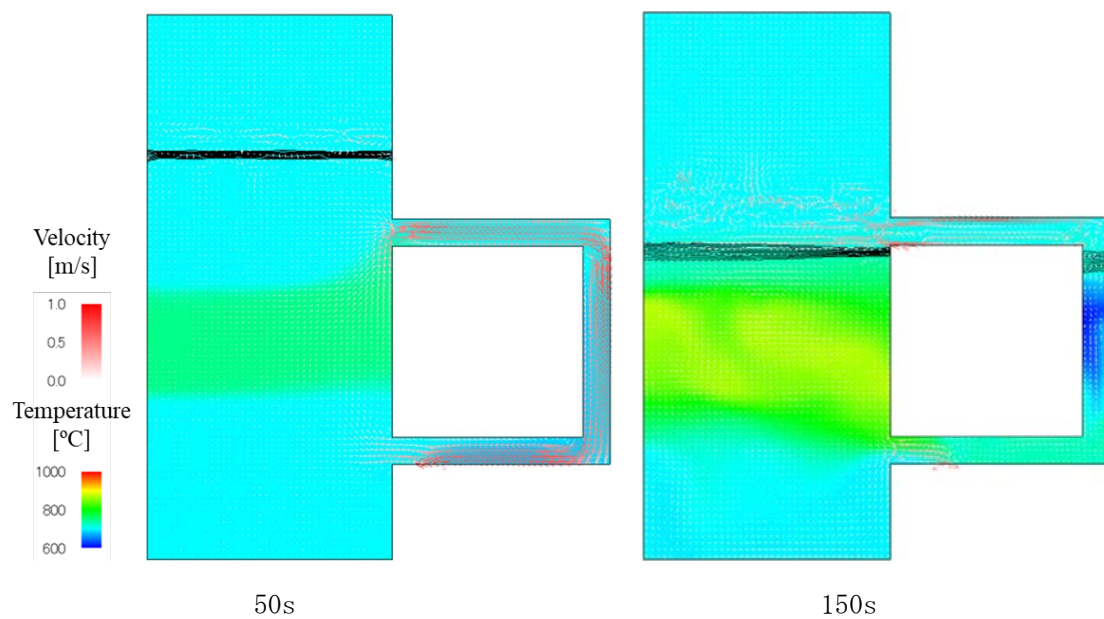
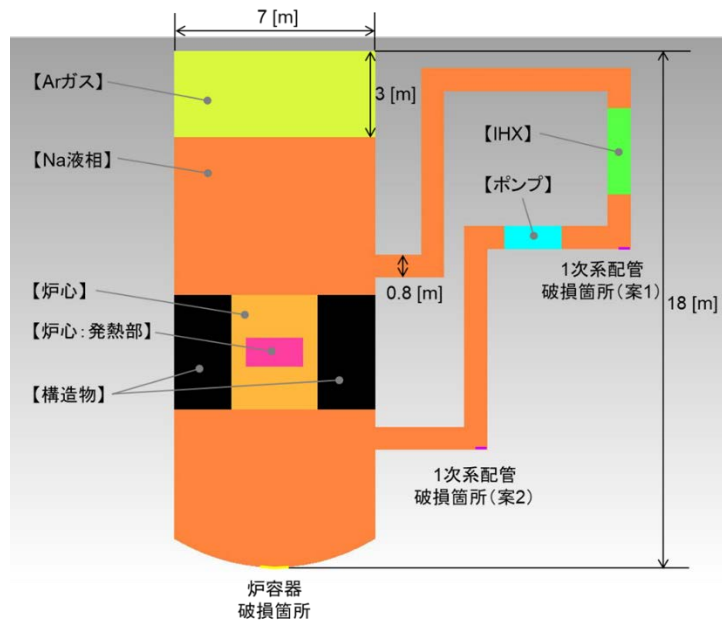
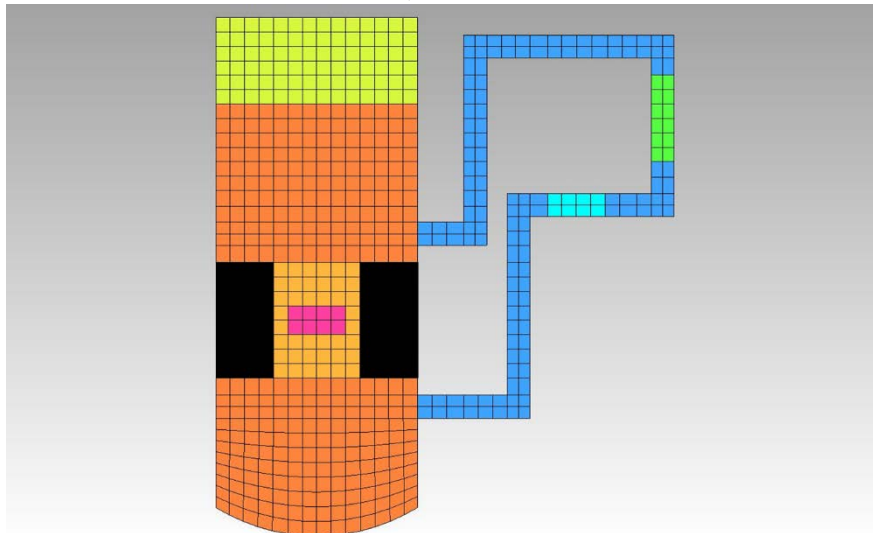


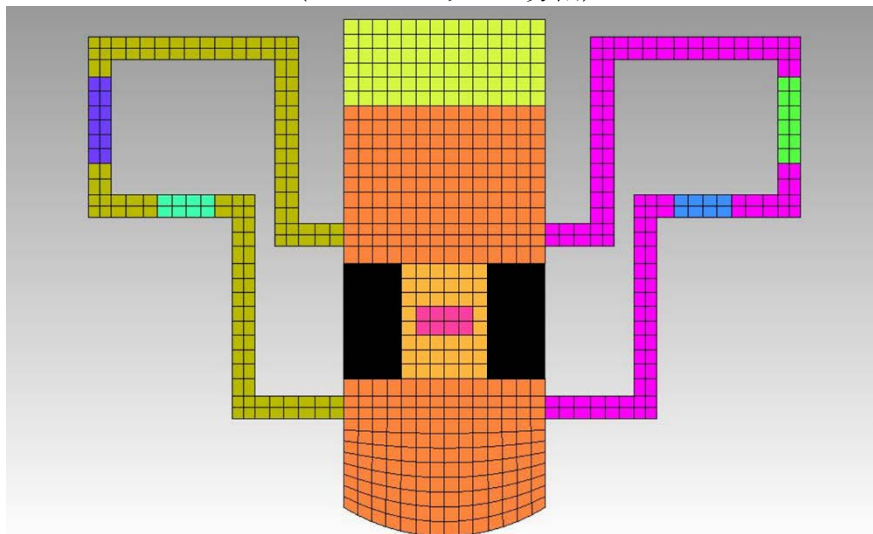
図 3. 2. 2. 1-2 解析結果概要（VOF 法）



(解析体系)

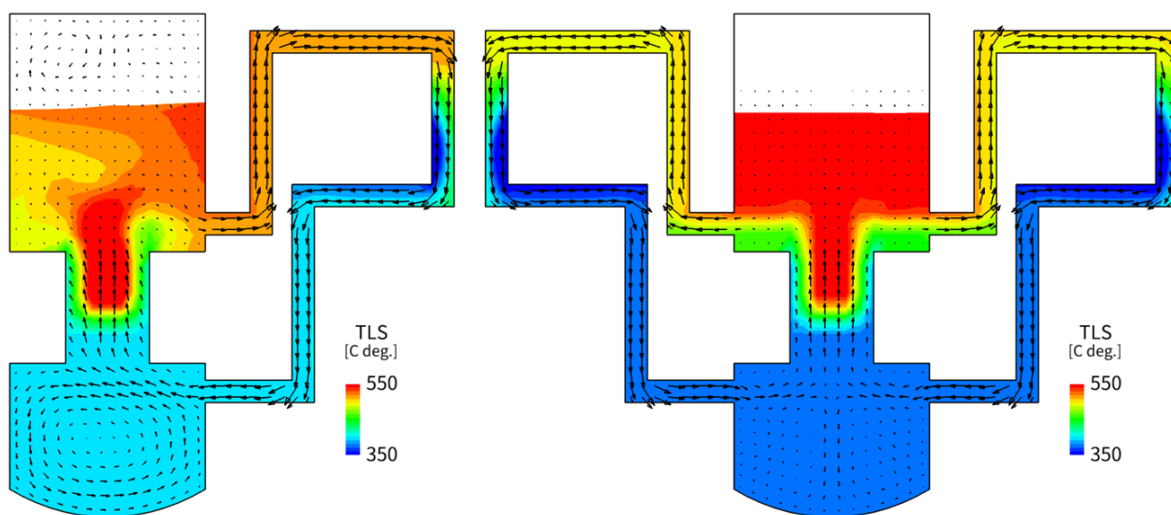


(1 ループメッシュ分割)



(2 ループメッシュ分割)

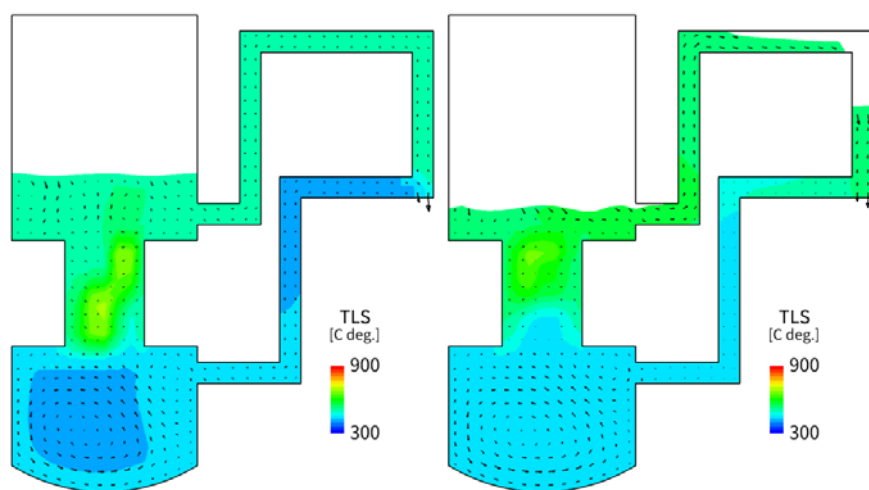
図 3. 2. 2. 1-3 ナトリウム冷却高速炉の 1 次系を模擬した解析体系 (多流体 1 圧力モデル)



(1 ループ体系)

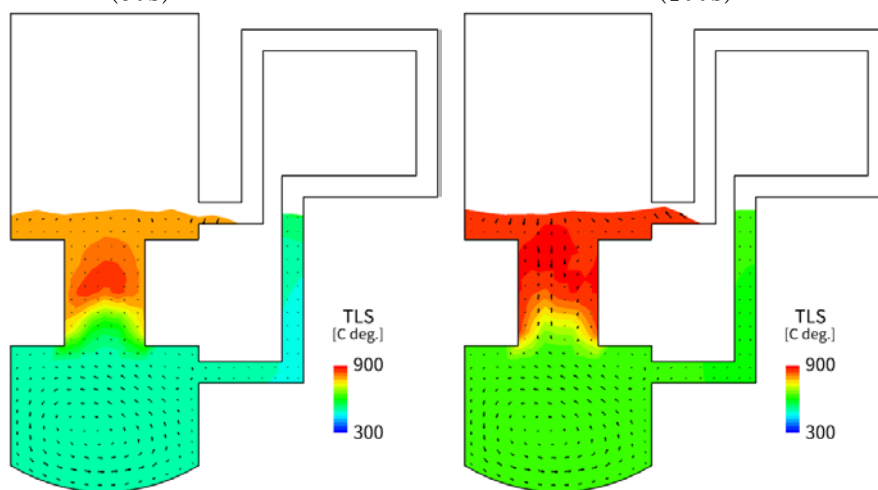
(2 ループ体系)

図 3. 2. 2. 1-4 定格運転時解析結果 (多流体 1 圧力モデル)



(50s)

(100s)



(500s)

(1000s)

図 3. 2. 2. 1-5 LORL 解析 (1 ループ、多流体 1 圧力モデル)

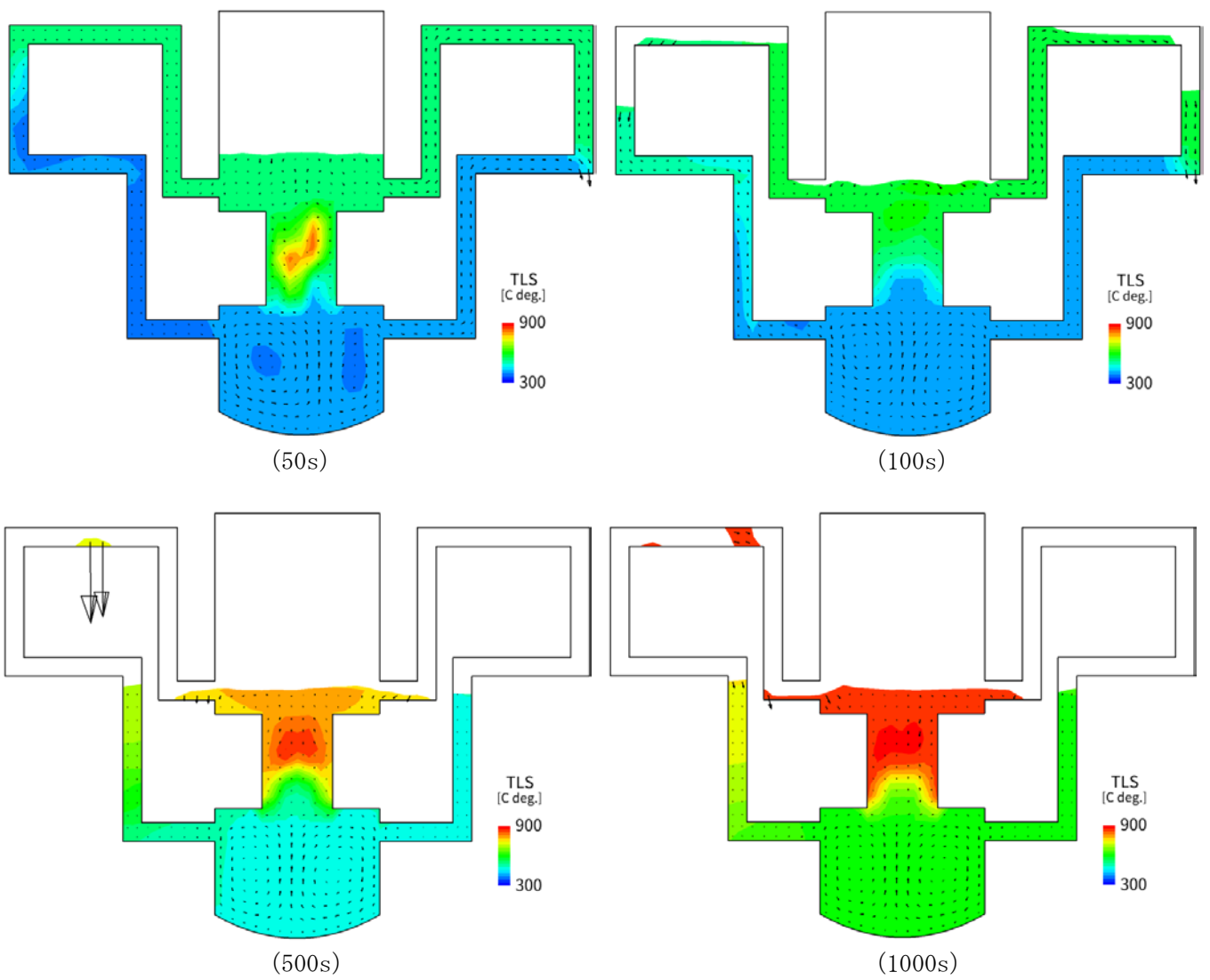


図 3. 2. 2. 1-6 LORL 解析 (2 ループ、多流体 1 圧力モデル)

3.2.2.2 炉外基本モジュール【H28-29】

(1) 支配方程式及び離散化

炉外基本モジュールでは、複数の部屋が流路や構造部を介して連結した体系を質点系として扱い、気相、気相成分、エアロゾルの輸送に関する支配方程式を解くことで、各部屋の圧力、温度、気相成分種質量分率、エアロゾル濃度、部屋間通気速度等を評価する。以下に支配方程式を示す。

【気相質量保存】

$$\int \frac{\partial \beta_i \beta_i^V \bar{\rho}_{g,i}}{\partial t} dV_i + \sum_j^{\text{path}} \int \langle \beta_i \bar{\rho}_{g,j} \rangle u_{j,i} |\mathbf{n}_j| dS_{j,i} = \sum_m^{\text{source}} \int \beta_i^V G_{g,m,i} dV_i \quad (3.2.2.2-1)$$

$$u = u^P + u^B \quad (3.2.2.2-2)$$

【気相運動量保存】

$$\begin{aligned} & \int \frac{\partial \langle \beta \bar{\rho}_g \rangle_j u_j^P}{\partial t} dV_j \\ &= - \int (p_{j+} - p_j - P_{\text{pump}}) |\mathbf{n}_j| dS_j \\ &+ \int \langle \beta (\bar{\rho}_g - \rho_g^o) \rangle_j g_{u,j} dV_j - \int \frac{1}{2} f_j \langle \bar{\rho}_g \rangle_j |u_j^P| u_j^P |\mathbf{n}_j| dS_i \end{aligned} \quad (3.2.2.2-3)$$

$$P = p + \rho_g^o g_h \Delta z \quad (3.2.2.2-4)$$

【気相成分種移流・拡散】

$$\int \frac{\partial \beta_i \beta_i^V \bar{\rho}_{g,i} Y_{l,i}}{\partial t} dV_i + \sum_j^{\text{path}} \int \langle \beta \bar{\rho}_{g,j} Y_{l,j} \rangle u_{j,i} |\mathbf{n}_j| dS_{j,i} = \int \beta_i^V G_{g,i}^l dV_i \quad (3.2.2.2-5)$$

【エアロゾル移流・拡散】

$$\int \frac{\partial \beta_i^V \gamma_{sl,i}}{\partial t} dV_i + \sum_j^{\text{path}} \int \langle \gamma_{sl,i} \rangle u_{j,i} |\mathbf{n}_j| dS_{j,i} = \int \beta_i^V G_{sl,i}^l dV_i \quad (3.2.2.2-6)$$

【気相エネルギー保存】

$$\begin{aligned} & \int \frac{\partial \beta_i^V \rho_i \bar{h}_i}{\partial t} dV_i + \sum_j^{\text{path}} \int \langle \rho_i \bar{h}_i \rangle u_{j,i} |\mathbf{n}_j| dS_{j,i} \\ &= \int \frac{\partial \beta_i^V P_i}{\partial t} dV_i + \sum_j^{\text{path}} \int \langle P_i \rangle u_{j,i} |\mathbf{n}_j| dS_{j,i} \\ &+ \sum_m^{\text{source}} \int \beta_i^V Q_{g,m,i} dV_i + \sum_{m'}^{\text{source}} \int \beta_i^V Q_{sl,m',i} dV_i + \sum_b^{\text{boundary}} \int q_{b,i} dS_{b,i} \end{aligned} \quad (3.2.2.2-7)$$

【状態方程式】

$$\bar{\rho}_{g,i} = \frac{P \bar{M}_g}{\bar{z}_m RT} \bigg|_i \quad (3.2.2.2-8)$$

ここで、 β : 気相占有率(-)、 β^V : 炉内側からの流出ナトリウム等に伴う空間体積占有率(-)、 ρ_g : 混合気体密度(kg/m³)、 u : 部屋間の通気速度(m/s) (u^P : 圧力差起因、 u^B : 浮力起因、ただし浮力起因は双方向の通気速度となる)、 G_{gm} : 気相成分種 m の質量生成速度(kg/m³/s)、 p : 動圧(Pa)、 P_{pump} : ブロー等による入力(Pa)、 P : セル内全圧(Pa)、 ρ_g^o : 基準密度(kg/m³)、 g_u : 重力加速度の流れ方向成分(m/s²)、 Δz : 圧力基準位置からの距離(m)、 f : 開口部間の圧力損失係数(-)、 Y_l : 気相成分種 l の質量分率(-)、 γ_{sl} : エアロゾル成分種 l の濃度、 G_{sl} : エアロゾル成分種 l の質量生成速度(kg/m³/s)、 $\bar{h}$: 気相成分、エアロゾル成分を含めた平均エンタルピー、 Q_{gm} : 気相成分種 m に伴う熱生成速度(J/m³/s)、 Q_{slm} : エアロゾル成分種 m に伴う熱生成速度(J/m³/s)、 S : 開口部面積(m²)、 V : 部屋体積(m³)、 $\bar{M}_g$: 平均分子量(kg/mol)、 $\bar{z}_m$: 平均状態における気相圧縮係数(-)、 R : 一般ガス定数(=8.3144J/mol/K)、 T : セル内温度(K)である。〈 〉は境界面での値であり、風上側とする。 $|\mathbf{n}_j|$ は部屋 i の開口部 j に対する法線方向ベクトル成分である。各支配方程式の時間項には 1 次の Euler 法を適用して離散化した。質量保存式及び運動量保存式を離散化し、速度 u を消去することで圧力方程式が得られる。圧力方程式等個々の方程式の解法として逐次緩和法 (SOR: Successive Over Relaxation) 法を適用した。支配方程式(3.2.2.2-1)～(3.2.2.2-8)を上記の数値解法及び行列計算法により解くプログラムを、炉内熱流動解析モジュールとして新規に構築した。

(2) 妥当性解析

炉外基本モジュールにより基礎的な問題を解析し、理論値との比較及び既開発の質点系ナトリウム燃焼解析コード SPHINCS[3.2.2-4]とのクロスチェックを実施した。

まず 2 部屋が流路で接続された体系において、部屋間の圧力差により空気が移行する問題(図 3.2.2.2-1)を解析対象とした。この問題では部屋体積が十分に大きいことから、各部屋の圧力、温度変化は微小である。図 3.2.2.2-2 に示す通り、タイムステップ Δt を 1.0×10^{-4} s とした場合、部屋間通気流量の時間変化について炉外基本モジュールと SPHINCS の解析結果は互いに一致し、更に定常状態における通気流量の理論値と炉外基本モジュールの解析結果が相対誤差 7.09×10^{-12} で一致した。また、タイムステップ Δt を大きく取った場合 (1.0×10^{-3} , 1.0×10^{-2} , 1.0×10^{-1} s) でも安定に計算可能であることを確認した。

次いで 2 部屋が流路で接続された体系において、部屋間の圧力差により窒素が移行することに加え、密度変化(圧縮性)と共に温度変化が生じる問題(図 3.2.2.2-3)を解析対象とした。図 3.2.2.2-4 に示す通り、部屋 2 における雰囲気温度の時間変化について炉外基本モジュールと SPHINCS コードの解析結果は互いに一致し、定常状態での理論値と炉外基本モジュールの解析結果が相対誤差 2.94×10^{-6} K/K で一致した。

以上により、炉外基本モジュールの妥当性を確認した。

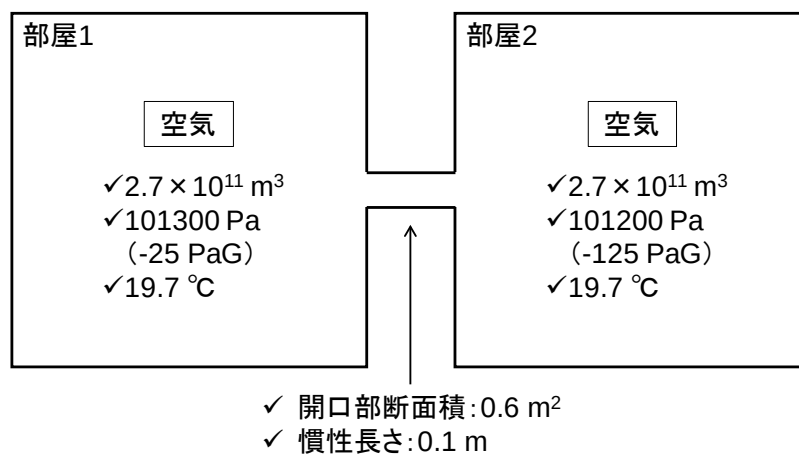


図 3. 2. 2. 2-1 炉外基本モジュールの妥当性解析体系（温度変化なし）

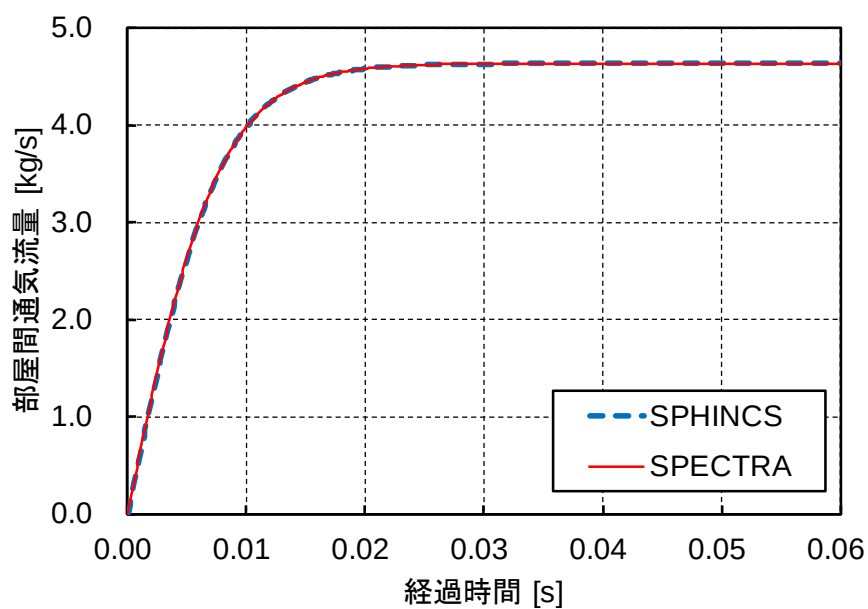


図 3. 2. 2. 2-2 部屋間通気流量の時間変化

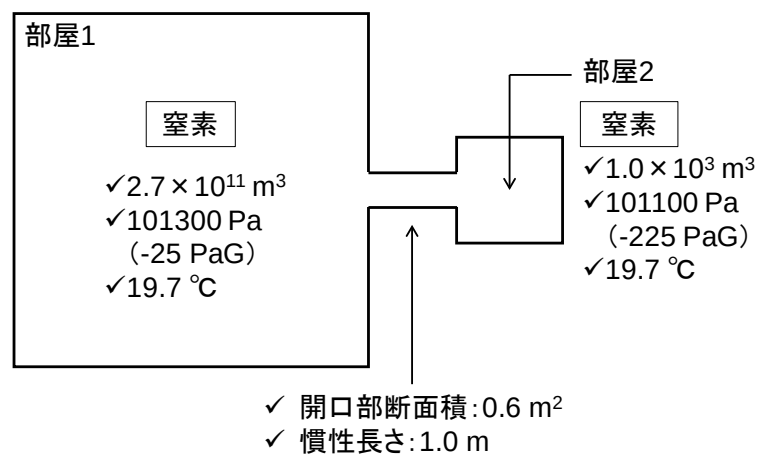


図 3. 2. 2. 2-3 炉外基本モジュールの妥当性解析体系（温度変化あり）

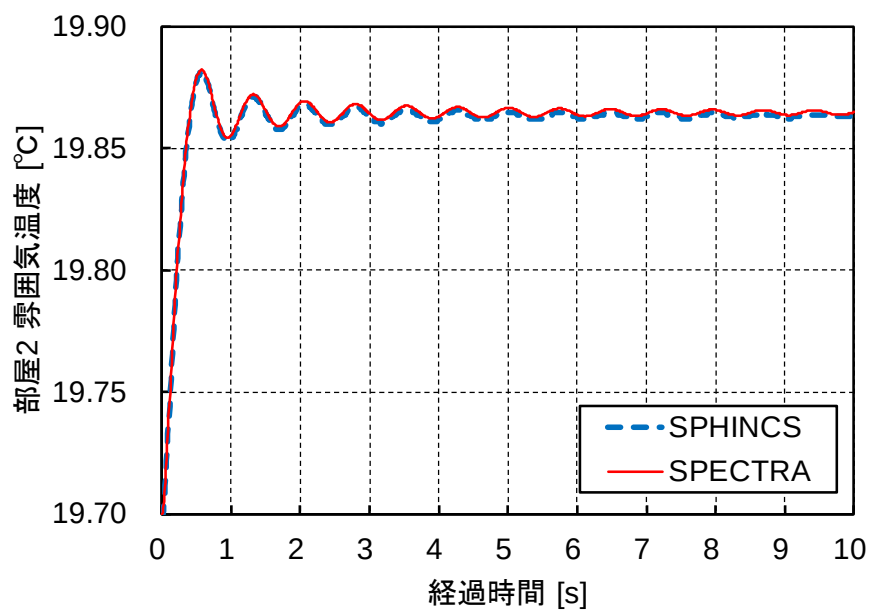


図 3. 2. 2. 2-4 部屋 2 における雰囲気温度の時間変化

3.2.2.3 数値計算高速化【H29-30】

3.2.2.1 及び 3.2.2.2 節に述べた通り、各基本モジュールでは数値計算高速化のため完全陰解法を採用した。3.2.2.2 節では、完全陰解法の採用によりタイムステップを大きく取った場合でも計算不安定は発生せず、高速な計算を行えることを述べた。

完全陰解法を用いた反復計算では、移流項について開口部を挟む両セルでの保存は厳密でなく、収束誤差に起因した誤差が発生する。すなわち、保存性を厳密に確保するためにはその分反復回数を要するが、その高速化方策として、反復計算で得られた収束解を既知量として、再度陽的に各保存式を解き、n+1 値を算出する方法を採用した。

炉外の壁面における熱輸送については、雰囲気ガスとの熱移行を考慮し、独立変数を温度とした非定常熱伝導方程式を解くことで評価する。1 つの部屋に対して壁面の設定数は自由とし、各壁面では 1 次元もしくは 2 次元円筒座標系 (r-z) を設定する。壁面数及び座標系の設定によっては、壁面熱輸送の計算負荷が他の計算に比べて大きくなる可能性もある。そこで、炉外側数値計算の全体的な高速化に寄与する方策の 1 つとして、壁面熱輸送計算にも完全陰解法を適用した。2 次元 r-z 座標系の基礎方程式を以下に示す。

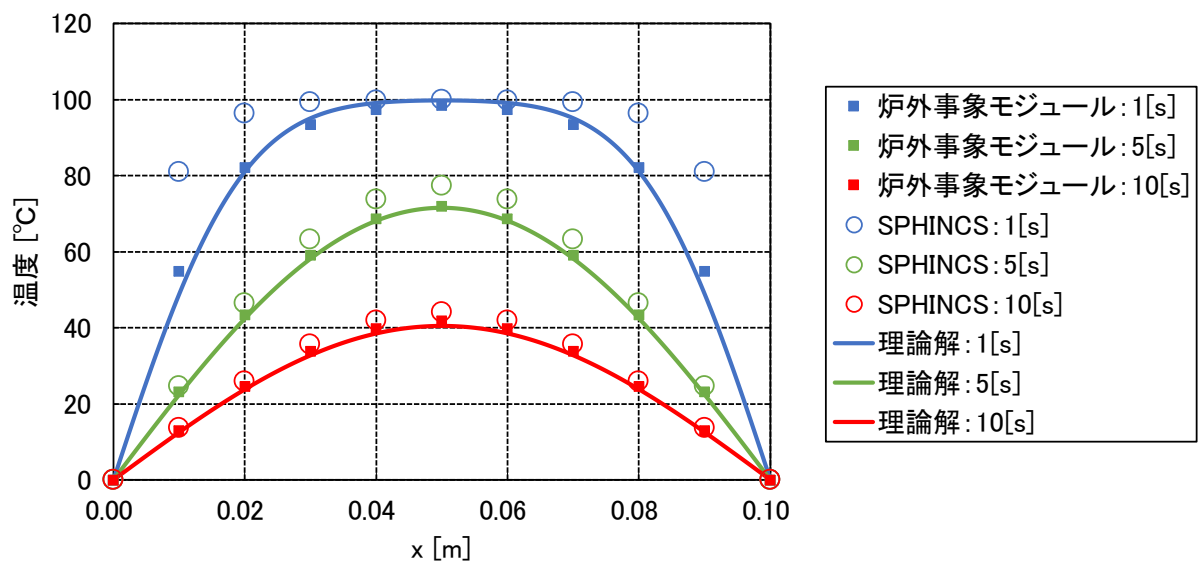
$$\int \frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} dV = \int \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \bigg|_{\mathbf{n}_j} dS + Q_s \quad (3.2.2.3-1)$$

ここで、 ρ : 密度、 C_p : 定圧比熱 (J/kg/K)、 T : 温度 (K)、 λ : 熱伝導率 (W/m/K)、 Q_s : 発熱量 (W/m³) であり、 n は r , z の各方向を表す。壁面と雰囲気ガスとの熱移行として熱伝達及び輻射伝熱を考慮する。

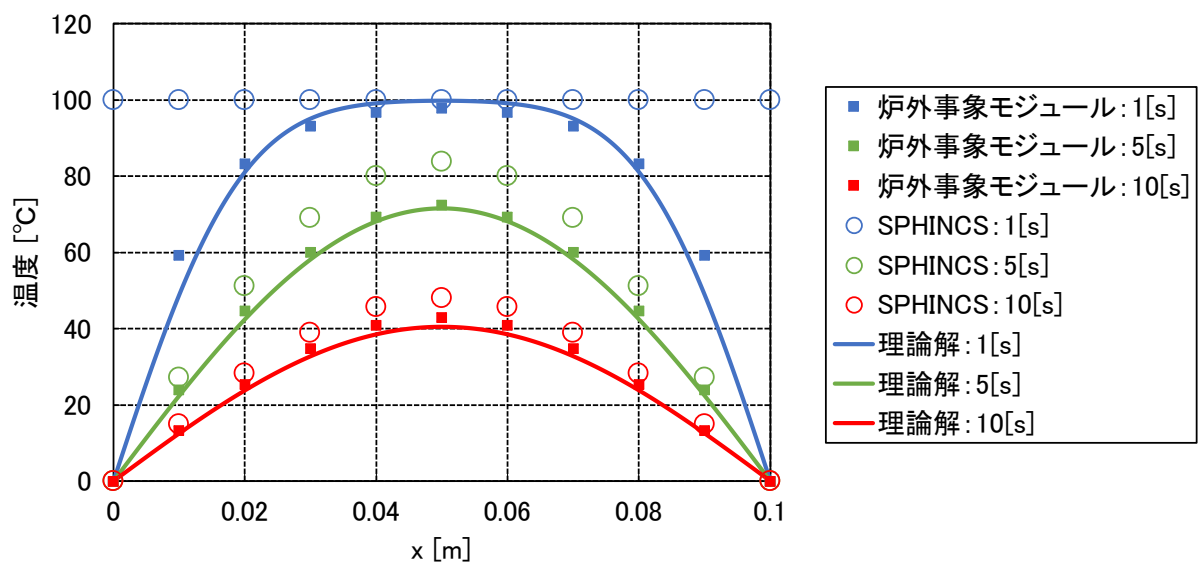
以上の手法により、半径 0.1m の円柱 (2 次元 r-z 座標系) で初期温度を一様に 100℃、円柱外周を 0℃に保った問題を解析した。タイムステップを 0.5 秒、1.0 秒と変更した場合、図 3.2.2.3-1 に示す通り、Crank-Nicolson 法を採用している SPHINCS コードではタイムステップの増大により理論解を正しく再現できなくなることに対し、炉外モジュールでは妥当な結果が得られている。高速化に寄与する方策として完全陰解法を適用し、その妥当性及び高速化効果を確認した。

【参考文献】

- [3.2.2-1] C. W. Hirt, D. B. Nichols, Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, J. Comput. Phys., Vol.39, pp.201-205, 1981.
- [3.2.2-2] K. Aoto, N. Uto, Y. Sakamoto, T. Ito, M. Toda, S. Kotake, Design study and R&D progress on Japan sodium-cooled fast reactor, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.48, No.4, pp.463-471, 2011.
- [3.2.2-3] 動力炉・核燃料開発事業団, “基礎 高速炉工学”, 日刊業新聞社, 1993.
- [3.2.2-4] A. Yamaguchi and Y. Tajima, “Validation study of computer code SPHINCS for sodium fire safety evaluation of fast reactor”, Nucl. Eng. Des., 219, pp. 19-34, 2003.



(a) タイムステップ 0.5 s



(b) タイムステップ 1.0 s

図 3.2.2.3-1 壁面熱輸送解析におけるタイムステップの影響

3.2.3 個別物理モデルモジュールの構築【H28-30】

3.2.3.1 炉内側及び炉外側物理モデルの選定【H28-29】

炉内側及び炉外側物理モデルの選定では、まず類似既存手法の比較を行った。軽水炉については MELCOR（米国サンディア国立研究所（SNL: Sandia National Laboratories））、IMPACT/SAMPSON（エネルギー総合工学研究所（IAE: Institute of Applied Energy）, JPN）を、ナトリウム冷却高速炉については AZORES（NRA, JPN）、CONTAIN-LMR（SNL, USA ただし原子力機構にてモデル改良を継続中。）を対象とした。なお AZORES, CONTAIN-LMR は格納容器施設応答（炉外事象）解析という位置付けである。比較の結果、シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステムに必要とされる物理モデル（機能）を表 3.2.3.1-1 にまとめる。

次に原子力機構内の内部資料を基に、確率論的リスク評価に対する包絡性を検討した。SA 対策を行わない場合、炉心損傷に至る支配要因は崩壊熱除去機能喪失（PLOHS: Protected Loss of Heat Sink）及び炉心流量喪失時原子炉停止機能喪失（ULOF: Unprotected Loss of Flow）となる。また、SA 対策を実施した場合では、原子炉容器液位確保機能喪失（LORL: Loss of Reactor Level）、PLOHS, ULOF が代表的な事象となる。PLOHS 及び LORL は除熱機能喪失型（LOHRS: Loss of Heat Removal System）として分類され、また、ULOF は原子炉停止機能喪失型（ATWS: Anticipated Transient without Scram）に分類される。LORL 及び PLOHS では同様な炉外事象推移となるため、検討対象の代表として、LOHRS (PLOHS) 及び ATWS (ULOF) 事象とし、最終的に新規システムで考慮すべき物理モデル（機能）を表 3.2.3.1-2 に示す。表中の赤字が確率論的リスク評価への包絡性として新たに追加されたものである。

最後にこれらの各物理モデルについて、その重要度を判定すると共に、本業務内で組み込む物理モデル及びその組み込み方針を策定した。評価結果を表 3.2.3.1-3, -4 に、また方針の概要を以下に述べる。

炉内事象において、1-① 炉内熱流動は現象の基本となるものであることから組み込みは必須であり、H29 年度に基本モジュールとして構築した。1-④ 溶融物移行は炉外事象進展への影響が大きく、重要度が高であり、溶融物を Lagrange 粒子で表すモデルを新規に構築する方針とした。1-⑤ FP 挙動（炉内）の重要度は中～高であり、簡易モデル化も含め組み込みは必要であるが、本業務内での組み込み可否はリソースに依存する。炉外事象において、2-① 炉外熱流動については、炉内熱流動と同様に H29 年度に基本モジュールとして構築した。2-② 溶融物等放出挙動については、炉内側溶融物移行と同様に、溶融物を Lagrange 粒子で表すモデルを新規に構築することを基本方針とするが、簡易モデルで対応することも代替オプションとした。2-③ ナトリウム燃焼、2-④ ナトリウム-コンクリート反応、2-⑤ デブリー-コンクリート反応については、いずれも炉外事象における重要現象であり、SPHINCS もしくは CONTAIN コードから該当するモデルを抽出し、組み込むこととした。2-⑩ FP 挙動（炉外）は最終的な評価項目である系外への FP 放出量に直結するものであることから重要度は高であり、SPHINCS コードのエアロゾル挙動モデルで代替する方針とした。一方、1-② 炉心過熱、1-③ 炉心溶融、1-⑥ 炉容器破損、2-⑧ 格納容器破損について、

本業務内では入力データとして与えるなど簡易モデルで対応する方針とした。以上に述べた以外の事象は、重要度が「中～高」、「中」、もしくは「低～中」であり、本業務内では組み込みなしとし、本業務終了後の高度化における課題とした。

表 3.2.3.1-1 既存類似コード比較による開発システムに必要な物理モデル（機能）

事象及びモデル	
炉内事象	炉内熱流動（含通常運転）
	炉心過熱
	炉心溶融
	溶融物移行
	圧力（原子炉）容器破損
	FP 挙動 （燃料からの放出、炉内挙動）
炉外事象	炉外熱流動
	溶融物放出
	デブリコンクリート反応
	FP 挙動（炉外）
	水素燃焼
	格納容器過圧・破損
ナトリウム 特有	ナトリウム燃焼
	ナトリウム－ コンクリート反応
工学的安全系	

表 3.2.3.1-2 確率論的リスク評価への包絡性を考慮した開発システムに必要な物理モデル（機能）

事象及びモデル	
炉内事象	炉内熱流動（含通常運転）
	炉心過熱
	炉心溶融
	溶融物移行 (ATWS 事象に対するモデル の詳細度検討)
	圧力（原子炉）容器破損
	その他構造的破損 (圧力容器破損と 統一化は要検討)
	FP 挙動 (燃料からの放出、炉内挙動)
炉外事象	炉外熱流動
	溶融物放出
	デブリコンクリート反応 (ナトリウムの影響は注意)
	FP 挙動（炉外）
	水素燃焼
	格納容器過圧・破損
	その他バウンダリ破損等の破損 (格納容器過圧・破損と 統一化は要検討)
ナトリウム 特有	ナトリウム燃焼 (水素燃焼との住み分けは 要検討)
	(タンク室ダクト等を介した) ナトリウム－水反応
	ナトリウム－コンクリート反応
工学的安全系	

注) 赤字が確率論的リスク評価への包絡性の観点で追記されたもの

表 3.2.3. 1-3 炉内事象及びモデルの物理的重要度と組み込み方針

事象及びモデル	物理的重要度	組み込み方針
1-① 炉内熱流動	高	H29 年度構築
	現象の基本となるものであり、必須となる事象。	基本モジュール
1-② 炉心過熱	高	簡易モデルで対応
	シビアアクシデント事象へのトリガーとなるため重要。	発熱を入力とすることで簡易的に対応（本業務中に炉心計算を含めるのは困難）。
1-③ 炉心溶融	高	簡易モデルで対応
	シビアアクシデント事象における炉内燃料挙動へのトリガーとなるため重要。	融点、比熱、発熱量を基に簡易的に対応。
1-④ 溶融物移行	高	H30 年度組み込み
	炉外事象への進展への影響大。	Lagrange 系を用いた解析モデルの構築（H29 年度先行検討開始）。
1-⑤ FP 挙動（炉内）	中～高	H31 年度組み込み （ただしリソースによる。）
	炉内での FP 挙動はバイパス事象に対して重要であるが、炉外に燃料が放出される事象では、その影響は限定的と考えられる。	現在先行的に既存コード（TRACER）の調査を開始。 現象的には重要なので、簡易モデル化も含め組み込みは必要と考えられる。
1-⑥ 炉容器破損	高	簡易モデルで対応
	炉外事象への進展、事象規模への影響大。ただし大きな不確かさを有する。	本業務の範囲内では、破損口等の形状入力として対応。将来的には材料、構造的モデル化を目指す。
1-⑦ その他破損	中	組み込みなし
	2 次破損、バイパス事象等を検討する際には重要となる。ただし大きな不確かさを有する。	将来的には原子炉容器破損モデルとの統一化を含め検討。

表 3. 2. 3. 1-4 炉外事象及びモデルの物理的重要度と組み込み方針（1/2）

事象及びモデル	物理的重要度	組み込み方針
2-① 炉外熱流動	高	H29 年度構築
	現象の基本となるものであり、必須となる事象。	基本モジュール
2-② 溶融物等放出挙動	高	H31 年度組み込み
	炉外へのナトリウムや燃料の堆積に影響大であるが、現状確立されたモデルは存在しない。	溶融燃料挙動と同様に Lagrange 系でのモデル化を検討するが、全体の進捗次第では簡易モデル化もあり得る。
2-③ ナトリウム燃焼	高	H31 年度構築
	炉外事象における重要現象。	エアロゾル移行挙動も含め H29 年度先行的に SPHINCS からのモデル抽出を開始。
2-④ ナトリウム－コンクリート反応	高	H30 年度組み込み
	炉外事象における重要現象。	CONTAIN コードからの物理モデルの抽出を H29 年度実施。
2-⑤ デブリーコンクリート反応	高	H31 年度組み込み
	炉外事象における重要現象。	CONTAIN コードからの物理モデルの抽出を H30 年度実施予定。
2-⑥ ナトリウム－水反応	低～中	組み込みなし
	レベル 2PRA におけるヘディング項目の 1 つであるが、リスク全体に対する寄与は小さい。	本業務での開発終了後のモデル高度化における課題として認識。
2-⑦ 水素燃焼	低～中	組み込みなし
	軽水炉と異なり炉心での水素発生はないが、ナトリウムと水（水蒸気）との反応で発生するため、蓄積量の評価は必要。	水素燃焼についてはナトリウム燃焼モデルでひとまず代替する。
2-⑧ 格納容器破損	高	簡易モデルで対応
	最終的な評価項目である系外への FP 放出量評価への影響大。ただし大きな不確かさを有する。	本業務範囲内では、破損口等の形状入力として対応。将来的には材料、構造的モデル化を目指す。
2-⑨ その他バウンダリ破損	中	組み込みなし
	2 次破損、バイパス事象等を検討する際には重要となる。ただし大きな不確かさを有する。	将来的には格納容器過圧・破損並びに原子炉容器破損モデルとの統一化を含め検討。

表 3.2.3.1-4 炉外事象及びモデルの物理的重要度と組み込み方針（2/2）

事象及びモデル	物理的重要度	組み込み方針
2-⑩ FP 挙動（炉外）	高	H31 年度組み込み
	最終的な評価項目である系外への FP 放出量評価への影響大。	SPHINCS におけるエアロゾル挙動 モデルで代替できる見通し。 （CONTAIN でもそれほど複雑なモ デル化はされていない様子。）
工学的安全系	中～高	組み込みなし
	SA 対策の有効性評価の観点では 重要となる。	本業務での開発終了後のモデル高 度化における課題として認識。

3.2.3.2 炉内側物理モジュールの構築【H30】

炉内の事象進展解析において溶融燃料挙動の模擬は極めて重要であるが、基本モジュールにおけるメッシュを使用した CFD 計算では、溶融燃料挙動における燃料デブリの落下や堆積の扱いが困難となっている。そのため、炉内側モジュールにおける溶融燃料挙動の解析については粒子法を採用し、炉内事象における燃料が溶融した後の落下や堆積等の挙動を模擬する。粒子法の中でも散逸粒子動力学 (DPD: Dissipative Particle Dynamics) [3.2.3-1] と呼ばれるランダムな粒子間相互作用力を与えることを特徴とした手法を用いて計算を行う。本手法は、複数の原子や分子を 1 つの粒子に粗視化し、分子スケールと連続体スケールの中間的な空間スケールであるメゾスケールの現象の解析（高分子ミセル構造等）に対して主に用いられており、他の計算手法と比較して計算量が比較的少ないという特徴がある。

DPD 法における運動方程式では以下の式(3.2.3.2-1)で示す通り、2 粒子間の相互作用が 3 種類に分類される。 $\mathbf{F}_{ij}^C$ は 2 粒子間の距離 r_{ij} でのみ決定される Conventional force の式(3.2.3.2-2)、 $\mathbf{F}_{ij}^D$ は 2 粒子間の速度 $\mathbf{v}_{ij}$ に依存し散逸力を表現する Dissipative force の式(3.2.3.2-3)、 $\mathbf{F}_{ij}^R$ は分子運動によるランダム運動を模擬する Random force の式(3.2.3.2-4)で表される。[3.2.3-2]

$$m \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{F}_{ij}^C + \sum_j \mathbf{F}_{ij}^D + \sum_j \mathbf{F}_{ij}^R \quad (3.2.3.2-1)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^C = a_{ij} \omega_C(r_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (3.2.3.2-2)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma \omega_D(r_{ij}) (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (3.2.3.2-3)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \sigma \omega_R(r_{ij}) \zeta_{ij} \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (3.2.3.2-4)$$

$$\omega_C = \begin{cases} (1 - r_{ij}) & (r_{ij} < r_c) \\ 0 & (r_{ij} \geq r_c) \end{cases} \quad (3.2.3.2-5)$$

$$\omega_C = \omega_D = \omega_R^2 \quad (3.2.3.2-6)$$

ここで、 m は粒子の質量、 $\mathbf{v}$ は速度ベクトル、 t は時刻、 $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ は単位ベクトルである。

カットオフ距離 r_c より外側では式(3.2.3.2-5)及び式(3.2.3.2-6)に従い係数 ω が 0 となり、粒子間の相互作用は考慮されない。各パラメータの強度である a_{ij}, γ, σ は経験的に定められる。また、 ζ_{ij} はガウス分布に従うランダム変数であり、分子運動論的には熱運動を模擬している。分子運動が無視できるようなマクロスケールでは拡散を模擬する。 $\omega_C, \omega_D, \omega_R$ の関係式(3.2.3.2-6)は平衡状態において次式で与えられる揺動散逸定理が成立するように定められている。[3.2.3-2]

$$\sigma^2 = 2\gamma k_B T \quad (3.2.3.2-7)$$

粒子の座標を更新する際の時間積分には 2 次の Verlet 積分法を使用する。Verlet 積分はシンプレクティック性を持ち、エネルギーが保存するため分子動力学では主に用いられ

る。粒子生成は必ずしも全てのタイムステップでは実施せず、炉心部の溶融条件を満たした任意のタイムステップごとに実施する。続いて、位置座標の更新を行う。その後、相互作用計算用のメッシュ更新と相互作用の計算を行い、その後に相互作用も考慮した速度更新を行う。最後に壁反射を行い、壁面に到達した粒子の鉛直方向速度を反転させる。今回、壁面には鉛直方向速度を逆転する単純な反射を用いた。

3.2.3.3 炉外側物理モジュールの抽出【H29-30】

(1) 解析手法

炉外側物理モジュールの1つとして、既存コード CONTAIN-LMR に組み込まれているナトリウム-コンクリート反応に関するモジュール (SLAM: Sodium-Limestone Concrete Ablation Model) [3.2.3-3]を抽出し、基本モジュールへの組み込みを行った。本モジュールでは、ナトリウムプールからコンクリートの深さ方向への状態変化を考慮した1次元モデルを用い、ナトリウム-コンクリート反応による浸食挙動を評価する。具体的には、反応界面より上部のナトリウム領域 (Pool 領域)、コンクリートと反応生成物が存在する領域及び水分を放出しているコンクリート領域 (Dry 領域)、健全なコンクリート領域 (Wet 領域) の3領域に対して、質量、運動量、エネルギーの保存式を適用する。反応界面の移動に応じて各領域の長さ及びノード長が変化するが、保存式にはその影響を考慮している。以上の保存式に加え、反応速度と発熱、拡散係数、可変熱伝導率、 CO_2 と H_2O のソースターム、コンクリート侵食率 (溶解による侵食及び化学反応による侵食)、Wet/Dry 境界面温度、Wet 領域後退率を評価するモデルが用いられる。

(2) 妥当性解析

ナトリウム-コンクリート反応モジュールの妥当性確認として、テスト用の問題を解析し、CONTAIN-LMR による解析結果と比較した。本解析では、下方より 45.0kg、302.0K のコンクリート (高さ 0.57933m)、20.0kg、900.0K の液体ナトリウム (高さ 0.770657m) が存在し、それより上部の領域には大気圧、302.0K の窒素が満たされた状態を初期状態とした。図 3.2.3.3-1 に示す通り、コンクリート浸食深さについて両コードの結果が互いに一致し、ナトリウム-コンクリート反応モジュールの抽出・組み込みが正しいことを確認した。

【参考文献】

- [3.2.3-1] P. Espanol, P. WARREN, Statistical mechanics of dissipative particle dynamics, EPL (Europhysics Letters), Vol.30, No.4, pp.191-196, 1995.
- [3.2.3-2] Z. Li, X. Bian, M. Deng, Y.-H. Tang, B. Caswell, G. E. Karniadakis, Dissipative Particle Dynamics: Foundation, Evolution, Implementation, and Applications, Particles in Flows, pp.255-326, 2017.
- [3.2.3-3] A. J. Suo-Anttila, "SLAM - A Sodium-Limestone Concrete Ablation Model", Sandia National Laboratories, NUREG/CR-3379 SAND83-7114, 1983.

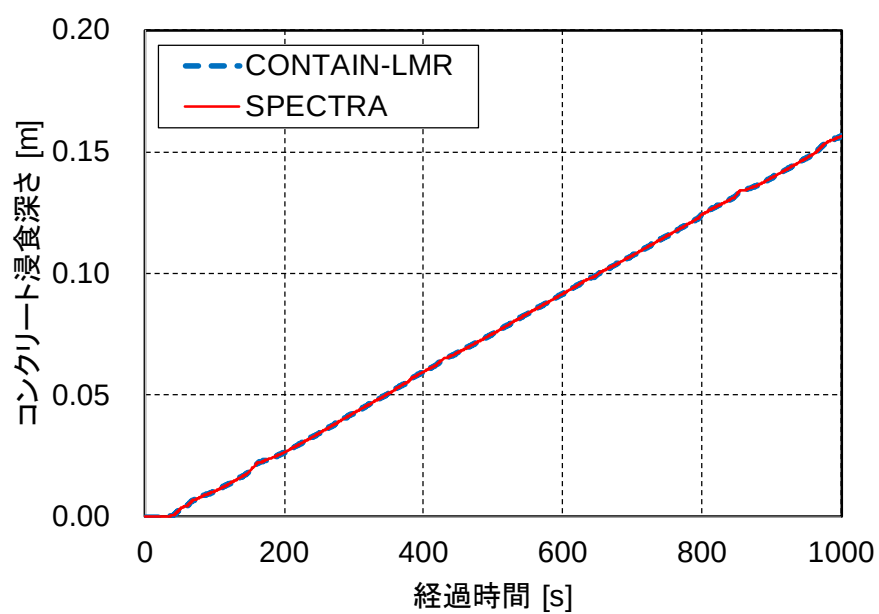


図 3. 2. 3. 3-1 浸食深さの時間変化

3.2.4 炉内基本モジュールへの物理モジュール組み込み【R1】

炉心において溶融した燃料が下部プレナムへ移行する過程において、溶融燃料はその周囲の冷却材ナトリウムやガスとの間で運動量移行や熱移行を伴う。この過程を適切に解析するには、冷却材ナトリウムやガスを扱う基本モジュール（CFD）での解析と溶融燃料を扱う DPD 法での解析を連成させる必要がある。

連成手法としては、CFD 側の 1 ステップごとに DPD 法側にて任意のステップ数の粒子計算を行い、粒子の抗力計算を行った結果を CFD 側に運動量交換の変化として反映させる。また、CFD 解析セル中の存在粒子量に基づきポロシティ、パーミアビリティの変化も考慮させる。

(1) 連成パラメータ計算式

粒子法-CFD 間の連成パラメータについて、以下のように定める。セル内のポロシティ β は粒子側の各ステップにおけるポロシティを CFD 側の時間長で相加平均した値として (3.2.4-1) 式で表す。

$$\beta = \frac{\sum_{\Delta t_p} \left(1 - \frac{nv_p}{V_c} \right) \Delta t_p}{\Delta t_c} \quad (3.2.4-1)$$

ここで、 n :セル内の粒子数、 v_p :1 粒子の体積、 V_c :セル体積、 Δt_p :粒子側時間長、 Δt_c :CFD 側時間長である。また、セル中に一辺の長さが $(1-\beta)^{1/3}$ の立方体状に粒子が占めていると仮定し、その断面積を引いた値をパーミアビリティとする。更に、隣接するセル間のポロシティを両者の相乗平均としてポロシティ β_i 、 β_{i+1} の 2 セル間のパーミアビリティ $\gamma_{i+1/2}$ を (3.2.4-2) 式で定める。

$$\gamma_{i+\frac{1}{2}} = \sqrt{\left\{ 1 - (1-\beta_i)^{\frac{2}{3}} \right\} \left\{ 1 - (1-\beta_{i+1})^{\frac{2}{3}} \right\}} \quad (3.2.4-2)$$

また、粒子-CFD 間の運動量交換を (3.2.4-3) 式で定める。

$$m \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = m\mathbf{g} - \mathbf{f}_l - \mathbf{f}_g \quad (3.2.4-3)$$

$\mathbf{f}_l$ は液相からの反力、 $\mathbf{f}_g$ は気相からの反力であり、粒子を球と仮定して計算する。また CFD へ渡される液相への反力項 $\mathbf{F}_l$ 、気相への反力項 $\mathbf{F}_g$ については、以下に示すように個々の粒子からの反力を力積として総和し平均化するものとする。

$$\mathbf{F}_l \cdot \Delta t_c = \frac{\sum_{\Delta t_s} \sum_k (\mathbf{f}_l \cdot \Delta t_p)}{V_c} \quad (3.2.4-4)$$

$$\mathbf{F}_g \cdot \Delta t_c = \frac{\sum_{\Delta t_s} \sum_k (\mathbf{f}_g \cdot \Delta t_p)}{V_c} \quad (3.2.4-5)$$

個々の粒子に対するエネルギーバランスは以下の式となる。

$$\frac{\pi D_p^3 \rho_p}{6} \frac{dC_p T_p}{dt} = Q_p - Q_l - Q_g \quad (3.2.4-6)$$

D_p : 粒子径、 T_p : 粒子温度、 Q_p : 粒子発熱量、 Q_c : CFD 側への熱移行量、 C_p : 粒子の比熱である。粒子発熱量は入力値として与え、CFD 側への熱移行量は Ranz-Marshall の式から与える。CFD へ移行する液相総熱移行量 Q_{lot} 、気相総熱移行量 Q_{gtot} は Δt_c 間の平均値として以下で与える。

$$Q_{lot} = \sum_{V_c} \sum_{\Delta t_c} Q_l \frac{\Delta t_p}{\Delta t_c} \quad (3.2.4-7)$$

$$Q_{gtot} = \sum_{V_c} \sum_{\Delta t_c} Q_g \frac{\Delta t_p}{\Delta t_c} \quad (3.2.4-8)$$

(2) 妥当性解析

上記の DPD 法計算コードを用い、一定流速場において解析体系の上部中央から粒子が自由落下する試解析を行い、理論解との比較を実施した。解析結果を図 3.2.4-1 に示す。一定流速場において、単一粒子の自由落下時の速度変化及び温度変化が理論解と一致することを確認した。

また、開発したモジュールの妥当性確認として、炉内基本モジュールと同様、高速増殖原型炉もんじゅ相当体系の 1 ループ構成について解析を行い、基本モジュール単体での結果に加えて粒子法の効果をカップリングさせる形で評価を行った。解析結果を図 3.2.4-2 に示す。

解析は CFD 側、粒子法側共にタイムステップを $2.5 \times 10^{-2} \text{s}$ とし、漏えい開始から 800 秒までの解析を行った。炉心部を構成するメッシュのナトリウム温度が 800°C 以上かつナトリウムボイド率が 0.8 以下となった場合に 0.5s ごとに燃料を模擬した粒子を生成し、CFD 側と相互作用の計算を行った。この際模擬粒子径を 0.1m、発熱量を 2.0W/m^3 とし、相互作用パラメータ強度 $a_{ij}=20.0$ 、 $\gamma=200$ 、 $\sigma=200$ と定めた。

解析結果を図 3.2.4-3 に示す。漏えい後 100s 程度で粒子の生成が開始し、容器下部に粒子が堆積する様子が見られる。600s 以降では堆積した粒子の発熱が顕著になり、容器下部でのナトリウムの沸騰を観測することができた。

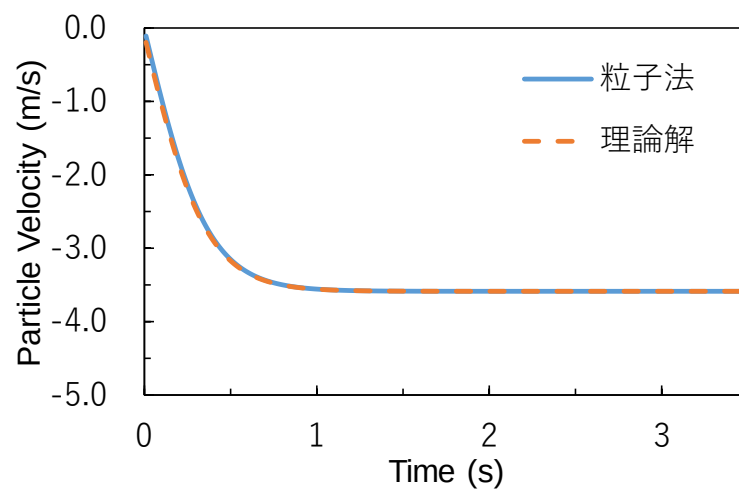


図 3. 2. 4-1 粒子法-CFD 妥当性解析 (単一粒子自由落下)

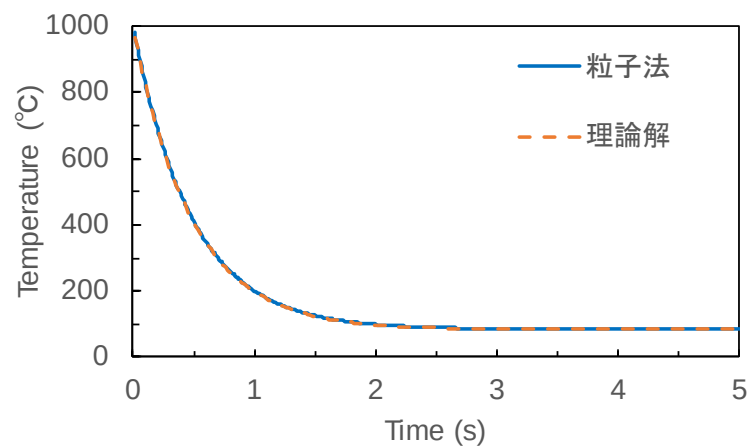


図 3. 2. 4-2 粒子法-CFD 妥当性解析 (単一粒子熱伝達)

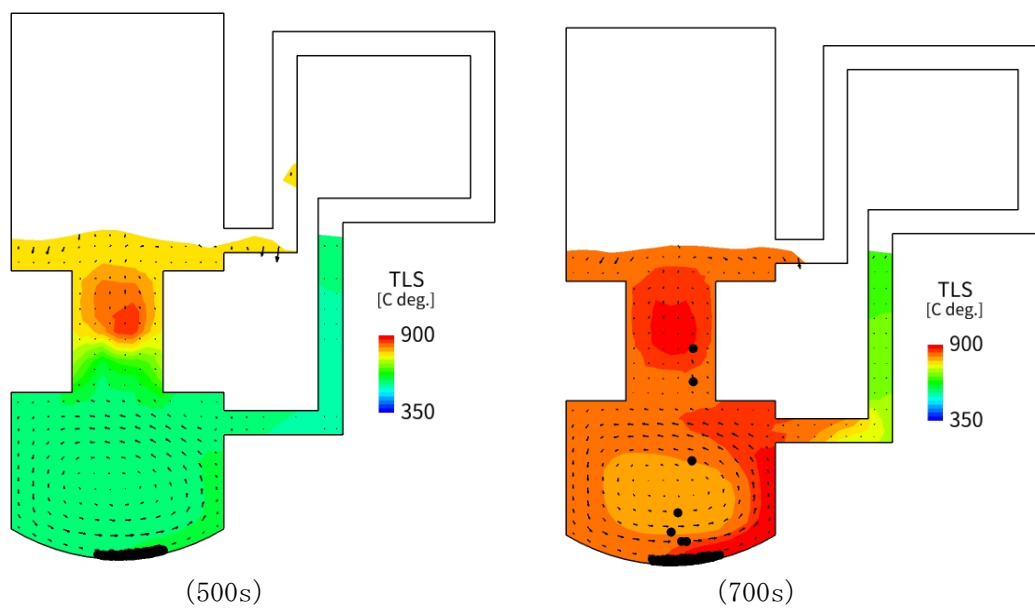


図 3. 2. 4-3 燃料溶融を模擬した CFD-粒子法連成解析

3.2.5 マルチシナリオシミュレーションシステム構築【R1】

マルチシナリオシミュレーションシステムの構築として、炉外物理モジュールの追加、及び、炉内及び炉外モジュールの接続を行い、マルチシナリオシミュレーションシステムの基本フレームを完成させた。追加した炉外物理モジュールとしてデブリーコンクリート反応モジュール及びナトリウム燃焼モジュールの解析手法、妥当性解析を以下に述べる。

(1) デブリーコンクリート反応モジュール

① 解析手法

既存コード CONTAIN-LMR に組み込まれているデブリーコンクリート反応に関するモジュール[3.2.5-1]を抽出し、基本モジュールへの組み込みを行った。本モジュールは、炉心デブリがコンクリートに接触した時に発生すると想定される物理現象の詳細な機構論的モデルから構成されている。具体的には、下方よりコンクリート層、デブリ層、ナトリウムプール層、雰囲気層が存在する状態を考える。デブリ層では、デブリとコンクリートの化学反応（浸食）、更にその浸食で生じるガスとデブリの反応によって生じる物質が含まれており、その組成は反応の進展と共に変化する。また、デブリーコンクリート接触界面での熱伝達を考慮し、接触界面では、コンクリートへの熱流束とコンクリート浸食遷移エネルギーがバランスするとしたモデルから2次元形状で浸食量を計算する。

② 妥当性解析

デブリーコンクリート反応モジュールの妥当性確認として、テスト用の問題を解析し、CONTAIN-LMR による解析結果と比較した。本解析では、下方より $2880.0 \times 10^3 \text{kg}$ 、353.15K のコンクリート、 $80.0 \times 10^3 \text{kg}$ 、1673.15K のデブリ、 $150.0 \times 10^3 \text{kg}$ 、873.15K の液体ナトリウムが存在し、それより上部の領域には大気圧、298.15K の窒素が満たされた状態を初期状態とした。図 3.2.5-1 に、雰囲気温度、雰囲気中気相成分種モル分率、コンクリート浸食深さ（中心部）の時間変化を示す。全ての量について両コードの結果が互いに一致し、デブリーコンクリート反応モジュールの抽出・組み込みが正しいことを確認した。

(2) ナトリウム燃焼モジュール

① 解析手法

炉外物理モジュールの1つとして、既存コードに組み込まれているナトリウム燃焼に関するモジュールを抽出し、基本モジュールへの組み込みを行った。ナトリウム燃焼モジュールは、スプレー燃焼モデル、プール燃焼モデル、雰囲気反応モデル、エアロゾル輸送モデルから構成されており、それぞれの解析手法を以下に述べる。

スプレー燃焼モデルは、既存の多次元ナトリウム燃焼解析コード AQUA-SF[3.2.5-2]に組み込まれているモデルをベースとし、SPECTRAへ組み込む際にはスプレー液滴の多次元方向挙動を無視する等、質点系モデルに整合するための修正を加えた。スプレー液滴の燃焼モデルは、着火前過程と着火後過程で区別される。着火前過程では、化学反応の進行が液滴表面への酸素もしくは水蒸気の質量流束に律速されるとした表面反応モデルにより評価

する。着火後過程では、燃焼率はよく知られた d^2 則に基づいて評価する。スプレー液滴について、雰囲気による抗力を考慮した運動方程式を解くことで落下速度を求めると共に雰囲気への熱伝達を評価し、これを雰囲気温度の計算に反映させる。化学反応による気相成分種とエアロゾルの発生量は雰囲気側のソース項として考慮する。

プール燃焼モデルは、既存の質点系ナトリウム燃焼解析コード SPHINCS に組み込まれているモデルをベースとして構築した。本モデルでは、ナトリウムプールと床を径方向及び深さ方向の 2 次元体系として扱うことで、空間的に詳細な熱移行評価を可能としている。プールの燃焼率はフレームシートモデルから評価する。本モデルでは、フレームシートでの質量・エネルギー保存式、雰囲気-フレームシート-プールに亘る領域でのナトリウム蒸気、酸素、水蒸気の移流拡散式、エネルギー輸送方程式を連立させて解き、燃焼率を算出する。

雰囲気反応モデルは、既存の BISHOP コードをベースに構築した。本モデルでは、気相とエアロゾル成分の化学平衡状態を仮定する。気相成分の組成をギブス自由エネルギーが最小化するように再構成させることで、雰囲気反応を評価する。

エアロゾル輸送モデルは、既存の ABC-INTG コードをベースに構築した。ABC-INTG コードの基本モデルは AQUA-SF や SPHINCS に組み込まれており、これと同様に SPECTRA にも基本モデルを組み込んだ。本モデルでは、エアロゾルの重力沈降、移流、ランダム運動（ブラウン運動と熱泳動）、凝集、構造部への沈着を評価する。

② 妥当性解析

ナトリウム燃焼モジュールの妥当性確認として、周囲が断熱であり、20℃の空気が満たされた 3×3×4m の部屋を対象とした解析を実施し、AQUA-SF もしくは SPHINCS による解析結果との比較を行った。ケース 1 は、スプレー燃焼、雰囲気反応、エアロゾル輸送モデルの確認を目的とした解析であり、ナトリウムのスプレー液滴（体積平均径 2mm）が 0.2kg/s の速度で部屋に供給される。図 3.2.5-2 に示す通り、雰囲気温度の時間変化について両コードの解析結果が一致していることから、スプレー燃焼モデルが適切であることを確認した。またエアロゾル質量も一致しており、雰囲気反応とエアロゾル輸送の両モデルも適切であると確認した。ケース 2 は、プール燃焼モデルの確認を目的として、初期状態として 2.4m² の面積を持つ 16kg のナトリウムプールが床上に存在する状態を設定した。図 3.2.5-3 に示す通り、本解析においても雰囲気温度の時間変化に関して両コードの解析結果が一致することを確認した。以上の通り、既存コードとの比較からナトリウム燃焼モジュールが正しく構築されていることを確認した。

[3.2.5-1] R. K. Cole, Jr., et al., “CORCON-Mod2: A Computer Program for Analysis of Molten-Core Concrete Interactions”, Sandia National Laboratories, NUREG/CR-3920 SAND84-1246, 1984.

[3.2.5-2] T. TAKATA, et al., “Numerical Investigation of Multi-Dimensional Characteristics in Sodium Combustion”, Nucl. Eng. Des. 220, pp. 37-50, 2003.

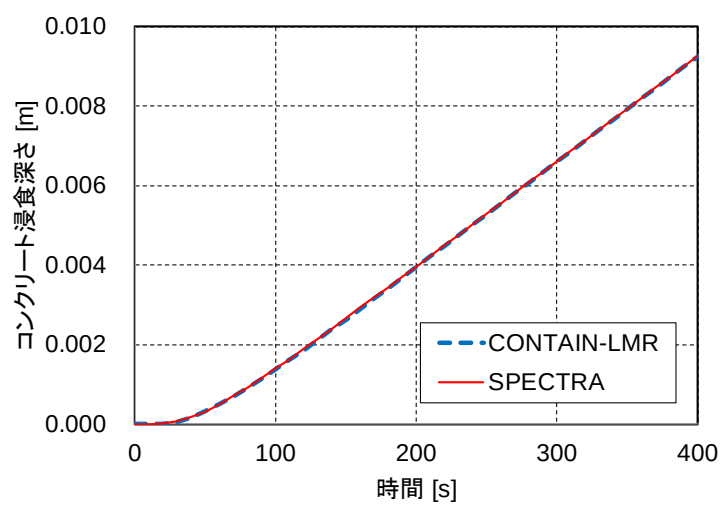
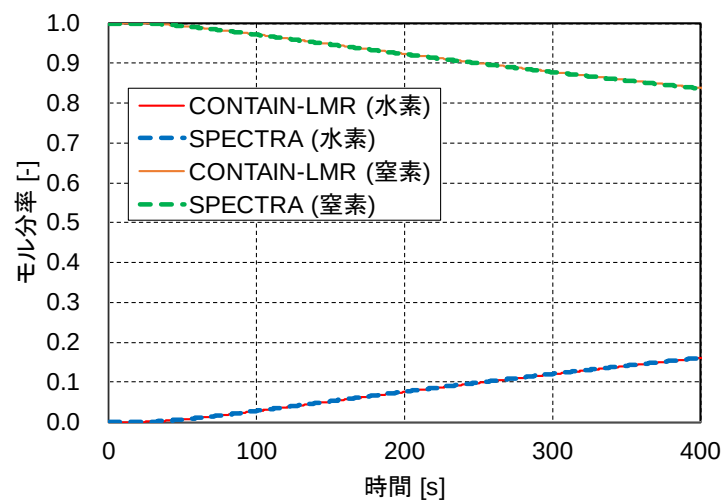
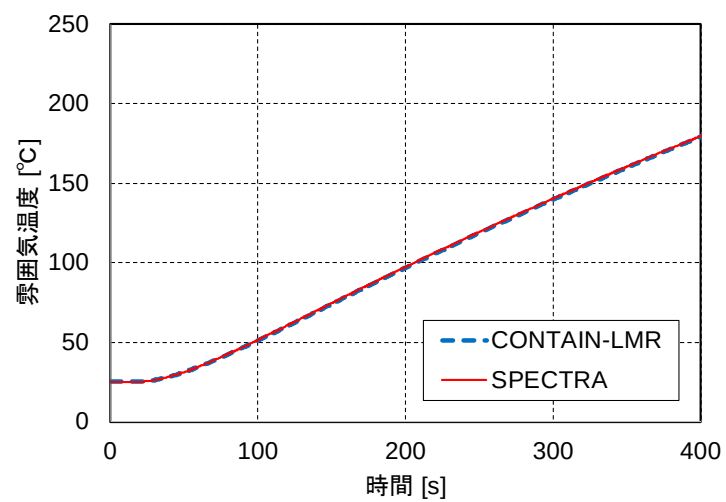


図 3.2. 5-1 デブリーコンクリート反応時の雰囲気温度、モル分率、浸食界面形状

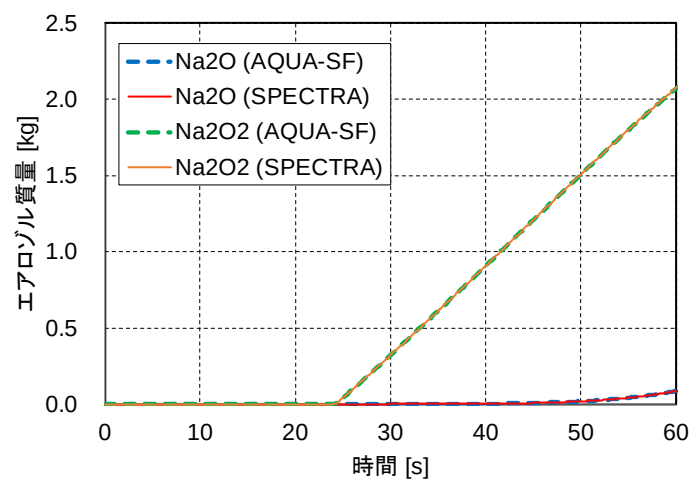
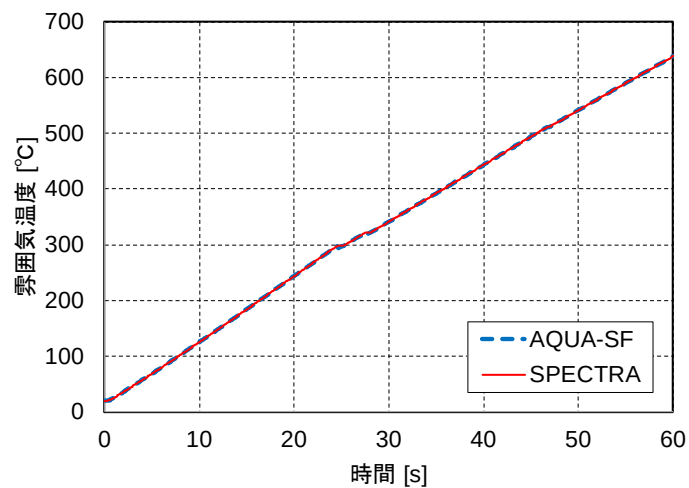


図 3. 2. 5-2 スプレー燃焼時の雰囲気温度及びエアロゾル質量変化（ケース 1）

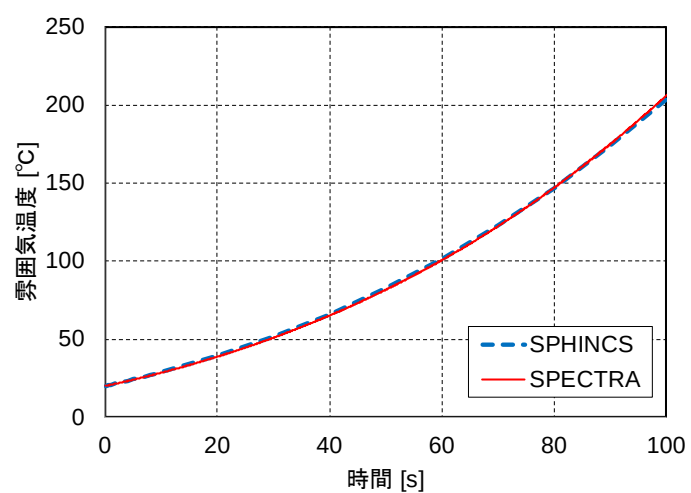


図 3. 2. 5-3 プール燃焼時の雰囲気温度変化（ケース 2）

3.2.6 総合妥当性検証【R1】

マルチシナリオシミュレーションシステムの基本フレームに関する総合的な妥当性検証として、高速炉での1次系配管破断によるLORL事象を対象とした解析を実施した。解析体系を図3.2.6-1に示す。炉内側は3.2.2.1節(2)②に述べた1ループ構成とし、多孔率及び透過率の設定、スクラム前後の炉心発熱量、IHX除熱量、ポンプ駆動力、1次系配管破断部条件、タイムステップは全て同じ設定とした。3.2.4節に述べた通り、熔融燃料は粒子によって表現する。本解析では、熔融燃料の発生条件を暫定的に炉心部流体温度800℃以上とした。一方炉外側は、格納容器下部及び上部区画、1次冷却系区画、2つの環境空間から構成される5セルとし、それぞれのセルは図に示す通り流路で接続されている。1次冷却系区画は窒素97mol%、酸素3mol%の混合気体が満たされており、炉内側からのナトリウム漏えい量が引き渡され、スプレイ燃焼及びプール燃焼が発生する。3.2.2.1節(2)②に述べた炉内モジュール単体の妥当性確認では、ナトリウム漏えい箇所の外圧を1気圧としたが、本解析では、炉外側で計算される1次冷却系区画の雰囲気圧力を用いた。格納容器下部区画は、1次冷却系区画と同じ混合気体が満たされており、ナトリウム-デブリーコンクリート反応が発生する。本解析では、ナトリウム及びデブリーの量を一定とした。まず炉内側のみをナトリウム漏えいなし、スクラム前の条件で解析し、定常に至った状態を0秒として、以降は炉内側にはスクラム後の条件を適用し、ナトリウム漏えい、ナトリウム燃焼、燃料溶解、ナトリウム-デブリーコンクリート反応の発生を考慮した解析を実施した。

図3.2.6-2に、炉内側のナトリウム温度及び流況（ナトリウム体積率0.5以上で表示）、格納容器下部区画及び1次冷却系区画の温度の時間変化を、格納容器内部を模擬した背景と共に表示している。0秒では、炉内側は事前の解析で得た定常状態での流況を引き継いでいる。計算開始後、スクラムの発生により除熱性能が喪失すると共に、1次系配管からナトリウムが漏えいする。100秒では、原子炉容器内の液位が低下すると共に、炉心部でのナトリウム温度が上昇し、その高温領域から熔融燃料粒子が発生している。また、100秒より前に発生、落下した熔融燃料粒子が圧力容器の底部に堆積している。1次冷却系区画及び格納容器下部区画では、それぞれナトリウム燃焼及びナトリウム-デブリーコンクリート反応の発生により雰囲気温度が上昇している。以降、炉内の液位は1次系配管破断部と同レベルまで低下し、1次冷却系区画ではナトリウム漏えいが停止、一方格納容器下部区画では雰囲気温度が上昇を継続している。

本解析に示した通り、液位低下を含む炉内冷却材熱流動、1次系配管からの漏えい、燃料の溶解から堆積、炉外でのナトリウム燃焼、ナトリウム-デブリーコンクリート反応等、SA時の炉内／炉外事象を一貫して解析可能であることを確認した。

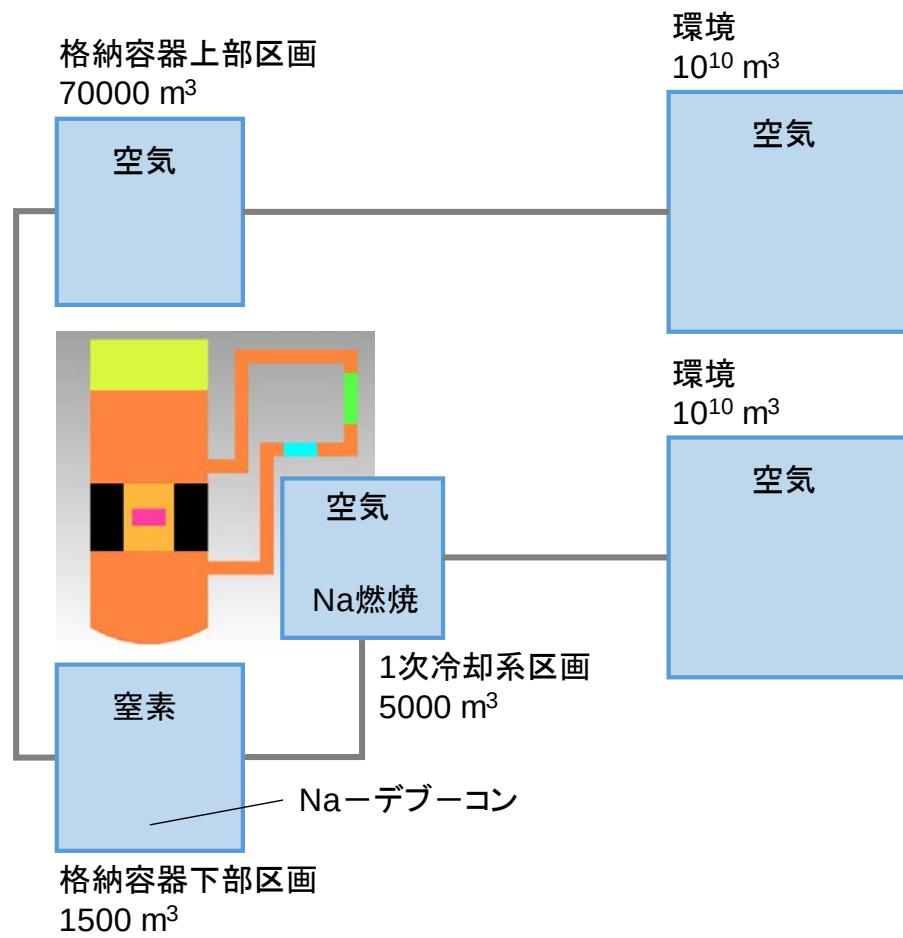
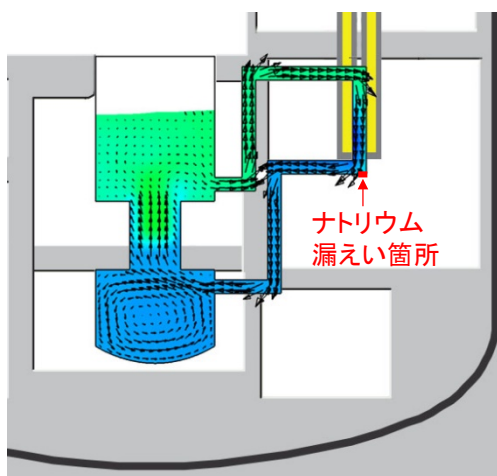
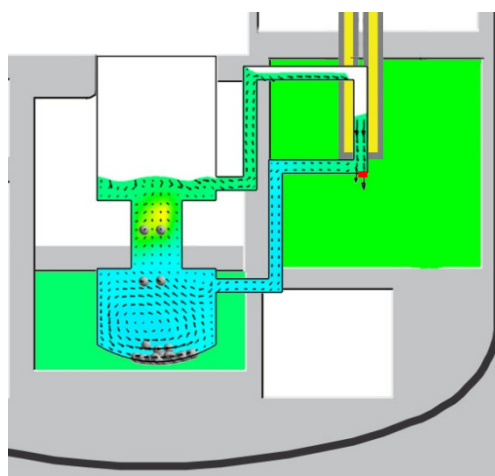


図 3. 2. 6-1 総合妥当性検証体系

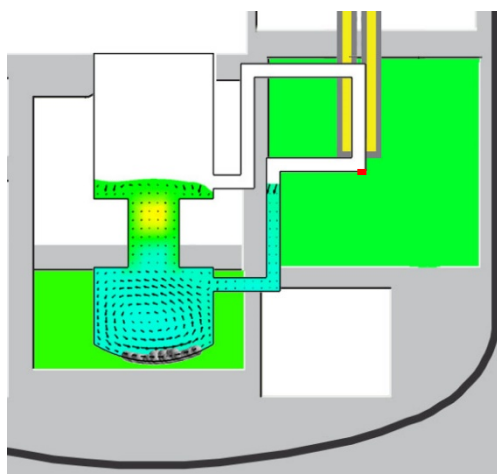
温度 900, 1000
[°C] 300, 25
(炉内) (炉外)



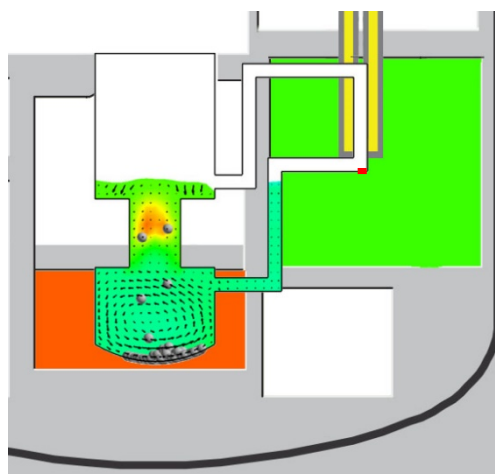
0秒



100秒



200秒



300秒

図 3. 2. 6-2 総合妥当性検証結果

3.3 コード V&V のための実験データベース構築

3.3.1 ナトリウム燃焼に係る基礎実験

(1) 多セル区画実験装置の整備【H28-R1】

① 設計、製作、改造【H28-H30】

ナトリウム燃焼時の多区画（多セル）間の熱移行や燃焼生成エアロゾル物質移行を模擬した実験装置（多セル区画実験装置）の設計検討を実施した。

H28 年度は、計測項目の検討として、ナトリウム漏えい事象における重要度ランク評価、コード V&V の観点での既存実験の整理（評価マトリクスの作成）を実施すると共に、実験装置のスケーリングに対する検討を行った。また、ナトリウム漏えい時のコンクリート区画内での伝熱流動や物質移行挙動を明らかにするため、後述する、非ナトリウム系の模擬エアロゾル（模擬粒子）を用いて、複数の連通管で連結された多区画部内での温度や粒子移行挙動等を計測可能な多セル区画実験装置を設計した。

H29 年度は、H28 年度に設計した多セル区画実験装置の製作や機能実験を実施すると共に、実験計画の策定及び必要計測機器の準備を実施した。

図 3.3.1-1 に、多セル区画実験装置の全景を示す。多セル区画実験装置は JAEA 大洗研究所の高速炉安全性第 3 実験室南側に設置され、H29 年度製作時の実験装置は 2 つの区画部（セル）、貫通部（連通管）、計測機器（機構物品）、エアロゾルジェネレータ（機構物品）及び計測室（機構物品）等で構成される。

図 3.3.1-2 に実験セルの構造を示す。セルは、角パイプ、パネル（アクリル板あるいはアルミ板）及び取り付け治具等で構成される。

図 3.3.1-3 及び図 3.3.1-4 に矩形型連通管の構造及び外観を示す。連通管はアクリル製の細長の矩形開口を採用した。

図 3.3.1-5 にエアロゾルジェネレータを示す。エアロゾルジェネレータは、本体（制御部含む）、模擬粒子リザーバ、ピストン、ディスパーションカバ及び回転ブラシ等で構成される。

H30 年度は、模擬粒子の垂直通気による移行挙動を把握するために装置改造を実施した。図 3.3.1-6 に改造後の全景を示す。改造では、模擬粒子の移行先のセル（隣接セル）を 1 基増設すると共に、漏えい部を模擬したセル（基準セル）の上部に隣接セルを置くための上乘せ架台を設置した。

② 模擬粒子の選定【H29-R1】

後述する再委託の徳島大学で実施された、ナトリウム燃焼に係る燃焼生成エアロゾル性状計測の結果において、ナトリウム燃焼にて生成されるエアロゾルの初期の粒子直径が $0.86 \sim 1.2 \mu\text{m}$ と評価された。また、密度や形状が異なる粒子状物質を議論する場合には、単位密度 ($1\text{g}/\text{cm}^3$) の完全球形粒子として統一的な取り扱いがなされるため、本実験では、個別要素実験である特性も踏まえ、できるだけ球形に近い模擬粒子として、アドマファインを選定した。アドマファインは、主成分 (99%) が二酸化ケイ素 (SiO_2)、粒子密度が $2.2\text{g}/\text{cm}^3$ 、平均粒径が $1.04 \mu\text{m}$ で、帯電性が少なく不燃性の粒子である。

③ 空間内 3 次元温度計測装置の導入と適用性確認【R1】

H30 年度までに実施した多セル区画実験では、ある定点に設置した熱電対でセル空間内の温度分布を計測してきたが、コード V&V のデータに資するにはセル空間内の温度分布をより広範囲に計測する必要がある。現状では、熱電対を多数配置しないとこの条件を満足できず、収録装置の増加によりコスト面にも課題が生じる。更に、空間内の熱電対等の構造物が実験中における模擬粒子の流況に影響を及ぼす可能性も考えられたため、非接触にて、温度分布計測が可能な空間内 3 次元温度計測装置の導入を検討した。空間内 3 次元温度計測装置[3.3.1-1]は、可変半導体レーザ吸収分光法 (TDLAS: Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy) にコンピュータ断面撮影 (CT: Computed Tomography) 画像再構成法を組み合わせ、温度を算出するものである。図 3.3.1-7 に CT-TDLAS 装置の全景を示す。CT-TDLAS 装置はレーザ発振器、複数のレーザ送受信機、アンプ、アナログ-デジタル変換器と計測したデータを解析するソフトウェア等で構成される。CT-TDLAS 装置の多セル区画実験装置への適用性確認を行うため、後述の熱印加実験の熱源に使用した、ボビンヒータとコンプレッサエアーを用い、ヒータ自体をトラバースすることにより、異なるヒータ高さでの気相温度を計測した。また、実際の計測温度と比較を行うため、同一のヒータ高さにおける熱電対を用いた気相温度の計測を実施し、多セル区画実験への適用性を確認した。表 3.3.1-1 に実験条件を示す。図 3.3.1-8～図 3.3.1-10 に各ヒータ高さ (50, 100, 150mm) における CT-TDLAS 装置による評価結果と実験解析の結果に基づき推算される CDF 解析結果を示す。実験解析では、ナトリウム燃焼解析コード (AQUA-SF: Advanced simulation using Quadratic Upstream differencing Algorithm-Sodium Fire version) を用いた (詳細は後述)。CT-TDLAS 装置による評価結果は、広範囲に温度が分布しており、理論計算で求めた CFD 解析結果に比べ、ヒータやコンプレッサエアーによる影響と考えられる気流の揺動が見られるが、ヒータからの高さが増大するとその傾向が顕著であることが分かる。しかし、ヒータからの高さが低い位置における CT-TDLAS 装置による温度分布は、CFD 解析結果の傾向と概ね一致していることが分かる。図 3.3.1-11 に各ヒータ高さにおける熱電対を用いた計測結果と CFD 解析及び CT-TDLAS 装置による評価結果との比較結果を示す。CT-TDLAS 装置による評価結果では、熱源であるヒータからの高さが増大すると、気相温度が低下する傾向が見られるが、この傾向は、熱電対を用いた計測結果及び CFD 解析の結果と概ね一致する。また、同評価結果は、実測値である熱電対を用いた計測結果により近いことから、CT-TDLAS 装置の多セル区画実験への適用が妥当であることを確認した。

(2) 多セル間の物質移行実験及びデータの分析【H30-R1】

① 噴出及び沈降挙動の把握【H30】

H29 年度に製作した実験装置の機能確認及びセル内での模擬粒子の噴出及び沈降挙動を把握するための第一段階として、基準セルのみを用いた、単セル実験を実施した。単セル実験では、高速度ビデオカメラ等を用いて模擬粒子の挙動を可視化すると共に、実験後の沈降量を計測し、多セル間の模擬粒子の移行挙動実験の基礎情報を取得した。以上の詳細は、H30 年度成果報告書にて報告済みである[3.3.3-2]。

② 多セル間の物質移行挙動の把握【H30-R1】

3.3.1(2)①で取得した基礎情報を踏まえ、表 3.3.1-2 に示す条件にて、多セル間の物質移行挙動を把握するための実験を実施した。以降、各実験の結果について述べる。

1) 水平配置における物質移行

水平セル間の物質移行挙動を把握するため、図 3.3.1-12 に示すように基準セルと隣接セルを連通管で水平に接続した体系で、基準セル底面中央部の噴出ノズル（外径 8mm、内径 6mm）より模擬粒子を噴出させた。隣接セルの上部に排気口（排気ブローは停止。）を設け、基準セルで噴出した模擬粒子が連通管を通して隣接セルへ移行する挙動を確認した。

図 3.3.1-13 に基準セルの模擬粒子噴出挙動を示す。模擬粒子が基準セル床面に設置された噴出ノズルより円錐状に上方へ噴出し、基準セルの上部に到達した模擬粒子が連通管側に浮遊している様子を確認した。図 3.3.1-14(a), (b) に隣接セル及び連通管の模擬粒子移行挙動をそれぞれ示す。図 3.3.1-14(b) に示す連通管内では連通管中央部から隣接セル側に模擬粒子が移行し、図 3.3.1-14(a) に示す隣接セルでは、移行してきた模擬粒子がセル入口下部よりセル中央付近まで浮遊している状況が分かる。また、模擬粒子を噴出させている間の連通管において、模擬粒子が隣接セル側に概ね一様に移行することを確認した。

模擬粒子の移行挙動評価の一助とするため、基準セル及び隣接セル底面に沈降した模擬粒子の質量を評価した。評価は、実験前に基準セル及び隣接セル底面に予め設置した内径 7.2mm のアルミ皿に、沈降した模擬粒子を捕集することにより実施した。後述する実験と比較するために、アルミ皿で捕集した模擬粒子をセル内に噴出した量で除算して規格化した。図 3.3.1-15 に基準セル底面における、図 3.3.1-16 に隣接セル底面における模擬粒子の沈降分布をそれぞれ示す。基準セルでは、噴出ノズル中心付近で捕集量が多く、噴出ノズルから径方向距離の増加に伴い捕集量が減少する傾向が分かる。一方、隣接セルでは連通管接続部（隣接セル入口）近傍で捕集量が多く、量は少ないものの入口から遠い位置においても捕集された。このように、水平配置における実験では、基準セルで噴出した模擬粒子が連通管を介して隣接セルへ移行する挙動が確認された。

2) 垂直配置における物質移行

垂直セル間の物質移行挙動を把握するため、図 3.3.1-17 に示すように基準セルと隣接セルを連通管で垂直に接続した体系で、基準セル底面中央部の噴出ノズル（外径 8mm、内径 6mm）より模擬粒子を噴出させた。隣接セルの上部に排気口（排気ブローは停止。）を設け、基準セルで噴出した模擬粒子が連通管を通して上方の隣接セルへ移行する挙動を確認した。レーザシートを隣接セルの上部から基準セル底面に向かって照射して、模擬粒子の移行状況を撮影した。

図 3.3.1-18 に基準セル、図 3.3.1-19 に連通管、図 3.3.1-20 に隣接セル下部における模擬粒子の移行挙動をそれぞれ示す。図 3.3.1-18(a) に示す基準セル内の模擬粒子の流況は単セル実験や 3.3.1(2)②1) の水平配置の実験と同様に、基準セル床面中央の噴出ノズルより円錐状に模擬粒子が噴流し、上方へ伸長することが分かる。図 3.3.1-19(a) 及び図 3.3.1-20(a) に示す連通管及び隣接セル下部では、基準セル上部に到達した模擬粒子が連通

管を通過して隣接セルへ移行する様子が確認された。噴出時間が経過するにつれて、図 3.3.1-18(b), (c) に示すように基準セルでは模擬粒子がセル全体に広がり、図 3.3.1-20(b), (c) に示すように隣接セル下部では中央部から下方にかけて移行する様子が確認された。また、同時にホームビデオカメラを用いて撮影した動画より (フレームレート: 60fps)、レーザシートの照射範囲である連通管の中央部で移行速度が大きく、その左右では移行速度が相対的に小さくなることを確認し、連通管から移行した模擬粒子が隣接セルの中央部から床面側へ移行する様子が見られた。図 3.3.1-21 に基準セル底面、図 3.3.1-22 に隣接セル底面における模擬粒子の沈降分布をそれぞれ示す。基準セルでは、前述の水平配置と同様に、噴出ノズル中心付近で捕集量が多く、ノズルから径方向距離の増加に伴い捕集量が減少する傾向が確認された。一方、上方の隣接セルでは、入口から排気口に向かう方向 (図 3.3.1-22 の左下部) の周辺で捕集量が多く、隣接セル入口付近の捕集量が相対的に多い傾向が確認された。水平配置の結果と比較して、隣接セルにおける各アルミ皿の規格化した捕集量が全体的に多いため、隣接セルへ移行した模擬粒子の総量も多いと推察された。

3) 熱印加による物質移行への影響

熱印加による物質移行挙動を把握するため、図 3.3.1-23 に示すように基準セルと隣接セルを連通管で垂直に接続した体系で、基準セル底面に設置したボビンヒータ (外径 24mm、内径 18mm、高さ 460mm) 内部の噴出ノズル (外径 12mm、内径 10mm、高さ 110mm) より模擬粒子を噴出させた。なお、熱印加による駆動力の割合を増やすため、前述の実験から噴出ノズルを太径ノズルに変更してノズル出口での流速を低下させた。ボビンヒータはスライダックで一定出力 600W に設定し加熱した状態で、熱印加のない垂直配置における実験と同様に、模擬粒子を上方へ噴出させた。隣接セル上部に排気口 (排気ブローは停止。) を設け、基準セルで噴出した模擬粒子が連通管を通して隣接セル側へ移行する挙動を確認した。レーザシートを隣接セルの上部から基準セル底面に向かって照射して、高速度ビデオカメラで模擬粒子の移行状況を撮影した。

図 3.3.1-24 に基準セル、図 3.3.1-25 に連通管、図 3.3.1-26 に隣接セル下部における模擬粒子の移行挙動をそれぞれ示す。図 3.3.1-24(a) に示すように、基準セル内の模擬粒子はヒータ上部よりセル上方へ移行している状況が確認できる。また、図 3.3.1-25(a) 及び図 3.3.1-26(a) に示す連通管及び隣接セル下部では、基準セル上部に到達した模擬粒子が連通管を通過して隣接セルへ移行している状況が確認できる。更に、図 3.3.1-25(b), (c)、図 3.3.1-26(b), (c) に示すように、連通管内及び隣接セル下部において模擬粒子が左右に揺動することが確認された。また、同時にホームビデオカメラを用いて撮影した動画より (フレームレート: 60fps)、連通管の左側において下降流が見られ、連通管内で対向流が形成される様子が見られた。

図 3.3.1-27 に基準セル底面における、図 3.3.1-28 に隣接セル底面における模擬粒子の沈降分布をそれぞれ示す。基準セルでは、前述の熱印加なしの条件の垂直配置と同様に噴出ノズル中心及びヒータ付近で捕集量が多い傾向にあるが、ノズルから径方向距離の増加に伴い捕集量が減少しつつ広範囲で捕集された。一方、隣接セルでは、熱印加なしの条件

の垂直配置と比較すると、底面での捕集量が全体的に広がっており、各アルミ皿における捕集量も増加していることから、熱印加による駆動力によってより多くの模擬粒子が上方の隣接セルに移行したと推察される。

(3) 多次元ナトリウム燃焼解析コードを用いた解析と検討【R1】

ここでは、実験で得られた結果を補完し、模擬粒子の移行挙動に関する現象理解を深めるために、ナトリウム燃焼解析コード AQUA-SF を用いた 3 次元 CFD 解析を実施した。AQUA-SF は、完全陰解法を用いた単相伝熱流動解析コード AQUA をベースにナトリウム燃焼解析に必要なスプレイ燃焼モデル、プール燃焼モデル、ガス輻射モデル、エアロゾル挙動モデル（拡散、熱拡散、凝集、重力沈降）が組み込まれている[3.3.1-3]。

なお、熱印加のない条件における多セル間の物質移行挙動を把握するため、前述の 3.3.1(2)②1), 2) の実験を対象に解析を実施すると共に、解析体系にヒータを追加した解析を実施して熱印加による物質移行への影響を確認した。

① 多セル間の物質移行挙動の把握

1) 水平配置における物質移行実験解析

3.3.1(2)②1) に示した水平配置における実験を対象に解析を実施した。図 3.3.1-29 に解析モデル（メッシュ）を示す。2 つのセル（1 辺 2.71m）と連通管（W1.5m×D0.0396m×H0.7m）は実験体系と寸法が等しくなるように設定し水平に配置した。また、円形の入口ノズルの開口部と出口ダクトは断面積が等しい矩形で模擬した。実験条件に基づく、境界条件及び計算条件を表 3.3.1-3 に示す。入口流速は実験に向けた予備実験で計測された模擬粒子の混入前の気流速度（18.0m/s）を設定した。模擬粒子の混入速度を一定と仮定し、実験でセル内に噴出した量（約 0.016kg）を噴出時間（685 秒）で除した値に設定した。幾何学平均半径、幾何標準偏差及び密度は、実験前に計測された模擬粒子の値を設定した。

図 3.3.1-30 に代表的な時間での模擬粒子の濃度コンターを示す。右側の基準セルの床面に設置された入口ノズルから模擬粒子が円錐状に吹き出す挙動が見られており、これは前述の実験結果と概ね一致している。その後、模擬粒子がセル内で拡散すると共に、約 200 秒時から連通管を通り左側の隣接セルに移行する様子が分かる。隣接セルに到達した粒子は重力により沈降しながらセル内に拡散する様子を確認できる（図 3.3.1-30（d））。噴出終了後は連通管の上部は右に下部は左に粒子が移行する対向通気の様子が確認できる（図 3.3.1-30（e）,（f））。対向通気はセル間の濃度差によって生じることが考えられ、基準セル内の濃度が低下するまで継続することを確認した。また、連通管内の空気の流れベクトルからも同様に、噴出中は一様に流れる様子（図 3.3.1-31(a)）が、噴出終了後は対向通気が発達し継続する様子（図 3.3.1-31(b), (c)）がそれぞれ見られ、3.3.1(2)②1) に示した実験と同様の傾向であることを確認した。

以上のように実験結果の傾向と定性的に一致することを確認すると共に、実験では計測されていない隣接セル内の流況を予測した。

図 3.3.1-32 に 24 時間後における模擬粒子の沈降量を示す。解析結果は実験結果に比べ

て沈降分布が平坦化する傾向が見られているものの、基準セル内の噴出ノズル近傍(1.35m)のピークでは重力沈降が支配的な粒子が噴出ノズル近傍に沈降し、隣接セルでは連通管付近(4.21m)で多く沈降する等、実験結果の傾向と概ね一致することを確認した。

2) 垂直配置における物質移行実験解析

3.3.1(2)②に示した垂直配置における実験を対象に解析を実施した。図3.3.1-33に解析モデル(メッシュ)を示す。実験体系と同じ寸法で、基準セルの上部に隣接セルを設置し連通管を接続した。水平配置と比べて、セルの形状及び連通管の開口部の形状は同じ寸法で、連通管の高さ方向の長さが短い体系である。入口ノズルと出口ダクトは3.3.1(3)①と同様に模擬した。実験条件に基づく、境界条件及び計算条件を表3.3.1-4に示す。模擬粒子の混入速度は3.3.1(3)①と同様に実験でセル内に噴出した量(約0.017kg)と噴出時間(657秒)を基に設定した。なお、粒子の条件は3.3.1(3)①と同じである。

図3.3.1-34に代表的な時間における模擬粒子の濃度コンターを示す。基準セルの床面に設置された入口ノズルから模擬粒子が円錐状に吹き出すのは3.3.1(3)①と同様であるが、基準セルの上部に連通管が存在するため、一部は隣接セルに直進するように移行するが、隣接セルでは上昇する勢いが弱く、隣接セルの天井まで到達しておらず、これらの挙動は実験結果と概ね一致している。模擬粒子の噴出終了(657秒)までの時間において、基準セル及び連通管の内部の模擬粒子の濃度が上昇したのに対して、隣接セルでは連通管出口近傍を除き、濃度が大きく上昇していないことが分かる。また、連通管出口近傍から径方向に粒子が拡散する様子が見られる。模擬粒子の噴出終了後は、隣接セルでは連通管出口近傍の濃度が高い領域が重力沈降によって平坦化した後に床面へ沈降し、基準セルではセル上部から徐々に濃度が低下していく傾向が確認できる。

図3.3.1-35に連通管内の空気の流れの速度ベクトルを示す。なお、700秒以降は流速が小さいため、大きさを16倍にして表示した。模擬粒子の噴出中において、連通管下部では基準セル内での対流によって放射状の流れになっているが、高さ中央より上の領域は比較的一様な上昇流が見られる。また、連通管上部では濃度コンターと同様に凹型の分布となっており、縦軸中心付近でやや流速が低下していることが分かる。また、噴出終了後は流速が大きく低下すると共に、連通管の左右壁面近傍から下降し旋回流が生じ、連通管の流れは時間と共に弱くなり、重力沈降が支配的となる。これらの傾向は3.3.1(2)②に示した実験結果と定性的に一致すると共に、実験では計測されていなかった隣接セル下部領域における模擬粒子の濃度の広がり予測した。

図3.3.1-36に24時間後における模擬粒子の沈降量の評価を示す。基準セルでは、3.3.1(3)①と同様にノズル近傍(1.35m)では重力沈降が支配的な粒子が噴出ノズル近傍に沈降し、連通管の開口部の領域(1.00-1.70m)に合わせて沈降量も増加していることを確認した。上部の隣接セルでは連通管開口部付近の沈降量が多いことを確認した。

3) 熱印加による物質移行への影響評価

熱印加による物質移行への影響を確認するため、3.3.1(3)②に示した解析体系にヒー

タを追加して解析を実施した。図 3.3.1-37 に解析モデル（メッシュ）を示す。3.3.1(2)②3)に示した実験体系と同じ寸法であり、基準セル、隣接セル、連通管、出口ダクトは3.3.1(3)①2)と同様である。実験で熱印加するためのボビンヒータを矩形で模擬し、入口ノズルの先端位置に矩形の入口境界を設定した。境界条件及び計算条件を表 3.3.1-5 に示す。入口ノズル断面積は実験のノズル変更に伴い内径 10mm 相当に変更し、入口流速は実験に向けた予備実験で計測された値（7.45m/s）に変更した。噴出時間は、実験ごとに異なるため、3.3.1(3)①1)と同じであると仮定した。また、ヒータの出力は実験条件（実験時の設定目標値）と同様に 600W に設定した。なお、粒子の条件は 3.3.1(3)①1)と同様である。

図 3.3.1-38 に代表的な時間における空気の温度コンターを示す。ボビンヒータを用いた熱印加によりヒータ内側及び上部領域が高温となっており、温められた空気はヒータ上部の領域を上昇し連通管を通り上部の隣接セルで拡散している。また、噴出中（50, 650 秒）は、基準セルから連通管に流入した温かい空気は連通管の右側から上昇しており、対向通気が生じているものと推察される。

図 3.3.1-39 に代表的な時間における模擬粒子の濃度コンターを示す。噴出開始から終了時（約 848 秒）まで基準セルの濃度が上部から徐々に上昇している。また、温度分布と同様に噴出中は、連通管にて対向通気と推察される濃度分布が確認できる。熱印加のない実験及び解析とは異なり、噴出終了後以降もヒータの熱印加によって上昇流が生じるため、連通管を通り基準セルから隣接セルへ模擬粒子が移行する様子が見られたが、噴出中とは異なる模擬粒子の左右の揺動が見られ、これらの挙動は実験結果と定性的に一致した。

図 3.3.1-40 に連通管内の空気の速度ベクトルを示す。3.3.1(2)②3)に示した実験結果と同様に、連通管内で対向通気が生じていることが分かる。また、噴出終了後の流れについても揺動しながら基準セルと隣接セルの間で通気する様子が継続していることが分かる。なお、熱印加のない実験及び解析では噴出終了後において、連通管の流れは低下し淀んだ状態となるが、熱印加のある本解析では、3.3.1(2)②3)に示した実験結果と同様に、噴出終了後も継続して基準セルから隣接セルへ流れが生じることを確認した。

図 3.3.1-41 に 2,000 秒後における模擬粒子の沈降量の評価を示す。噴出した模擬粒子の量に対して沈降した量は少ないが、その分布は熱印加のない 3.3.1(3)①2)と同様に基準セル側の沈降量が多くなる傾向は定性的に一致していることが分かる。

以上の研究期間全体を通じて得られた実験データについて、既往研究[3.3.1-4]において構築した知見データベースと同様に、JAEA の品質保証マネジメントに従い、コード V&V に資するデータベースを構築した。

【参考文献】

- [3.3.1-1] 出口 祥啓, 神本 崇博 : CT 半導体レーザ吸収法による 2 次元温度計測, 日本燃焼学会誌, Vol.55, No.173, pp.249-254, 2013.
- [3.3.1-2] 平成 30 年度 革新的ナトリウム冷却高速炉におけるマルチレベル・マルチシナリオプラントシミュレーションシステム技術の研究開発 成果報告書
- [3.3.1-3] T. Takata et al., Numerical investigation of multi-dimensional characteristics in sodium combustion, Nuclear Engineering and Design, Vol. 220, pp. 37-50, 2003.
- [3.3.1-4] 平成 25 年度 蒸気発生器伝熱管破損伝播に係るマルチフィジックス評価システムの開発 成果報告書

表 3.3.1-1 適用性確認の実験条件

項目	設定値
加熱出力	140W
ヒータの壁面温度	993K
ヒータからレーザまでの高さ	50, 100, 150mm
レーザ計測範囲	φ 70mm
実験計測時間	100ms
ガス流量	30L/min
室温	291K
湿度	56%RH

表 3.3.1-2 各配置における実験条件

項目	実験体系	水平配 置	垂直配 置	熱印加・垂直配 置
セル内圧力 [MPa-G]	基準セル	0	0	0
	隣接セル	0	0	0
セル内温度 [°C]	基準セル	26.7	18.5	45.6
	隣接セル	27.0	20.3	18.0
噴出ノズル内径 [mm]		6.0		10.0
模擬粒子噴出量 [g]		15.9	16.6	15.9
噴出時間 [s]		685	657	848
模擬粒子噴出流束 [kg/m ² /hr]		2953	3211	857

表 3.3.1-3 水平配置における実験の解析条件

項目	値
<u>境界条件</u>	
入口ノズル断面積(内径 6mm 相当)	$2.827 \times 10^{-5} \text{m}^2$
入口流速	18.0m/s
粒子の混入率	0～685s : $2.320 \times 10^{-5} \text{kg/s}$
	685～86,400s : 0.0kg/s
出口圧力	常圧 (一定)
壁面条件	ノンスリップ
<u>粒子の条件</u>	
幾何学平均半径	$5.093 \times 10^{-7} \text{m}$
幾何標準偏差	1.190
最小 / 最大半径	3.75×10^{-8} / $9.85 \times 10^{-6} \text{m}$
密度	2,200kg/m ³
<u>計算条件</u>	
メッシュ数	94,805
タイムステップ	0～2,000s : 0.5s
	2,000～6,400s : 40.0s
	6,400～86,400s : 80.0s
乱流モデル	標準 k-ε モデル
運動量、エネルギー、質量、乱流 対流項 / 時間項	1 次風上法 / Euler 陰解法

表 3.3.1-4 垂直配置における実験の解析条件

項目	値
<u>境界条件</u>	
入口ノズル断面積(内径 6mm 相当)	$2.827 \times 10^{-5} \text{m}^2$
入口流速	18.0m/s
粒子の混入率	0～657s : $2.522 \times 10^{-5} \text{kg/s}$ 657～86,400s : 0.0kg/s
出口圧力	常圧 (一定)
壁面条件	ノンスリップ
<u>計算条件</u>	
メッシュ数	96,312
タイムステップ	0～2,000s : 0.5s 2,000～6,400s : 5.0s 6,400～86,400s : 40.0s
乱流モデル	標準 k-ε モデル
運動量、エネルギー、質量、乱流 対流項 / 時間項	1 次風上法 / Euler 陰解法

表 3.3.1-5 熱印加時の垂直配置における実験の解析条件

項目	値
<u>境界条件</u>	
入口ノズル断面積(内径 10mm 相当)	$7.854 \times 10^{-5} \text{m}^2$
入口流速	7.45m/s
粒子の混入率	0～685s : $2.320 \times 10^{-5} \text{kg/s}$ 685～2,000s : 0.0kg/s
出口圧力	常圧 (一定)
壁面条件	ノンスリップ
ヒータ出力	600W (一定)
<u>計算条件</u>	
メッシュ数	147,212
タイムステップ	0～2,000s : 0.5s
乱流モデル	標準 k-ε モデル
運動量、エネルギー、質量、乱流 対流項 / 時間項	1 次風上法 / Euler 陰解法

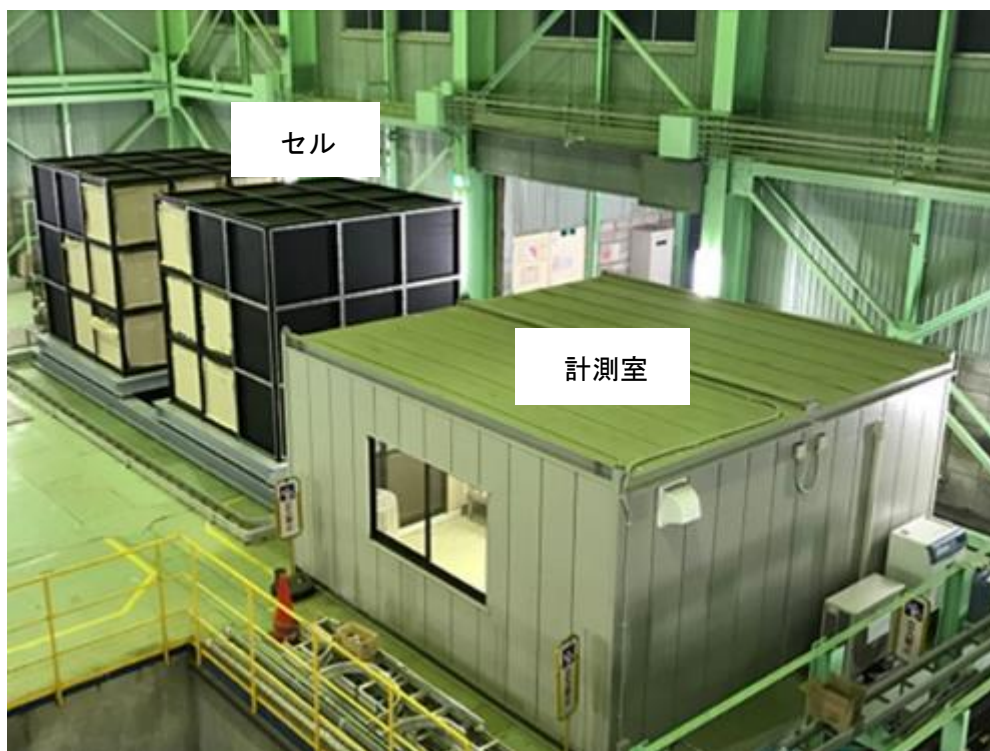


図 3. 3. 1-1 多セル区画実験装置の全景

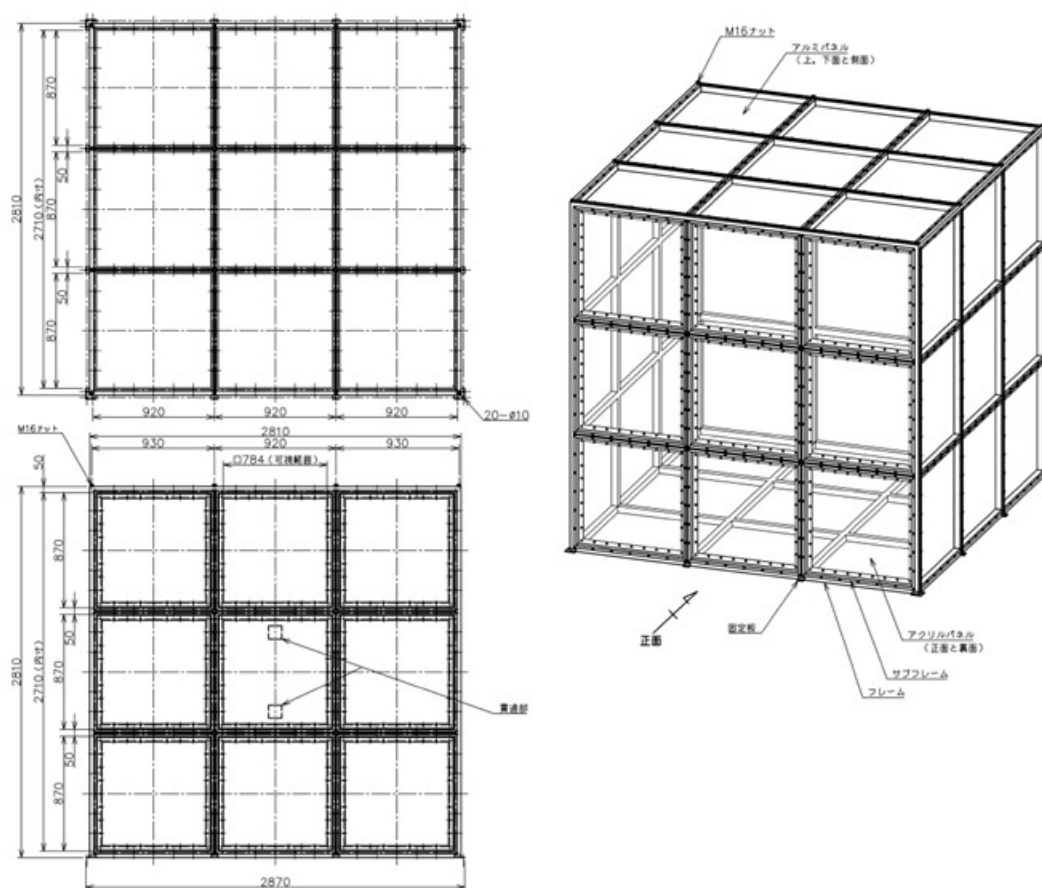


図 3. 3. 1-2 実験セル構造



図 3.3.1-5 エアロゾルジェネレータ

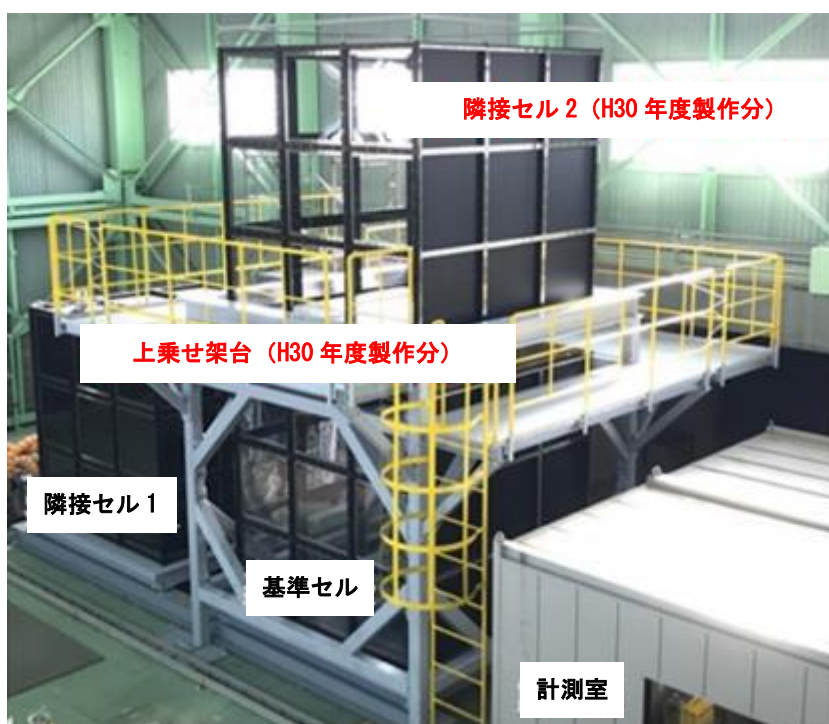


図 3.3.1-6 多セル区画実験装置の改造後全景

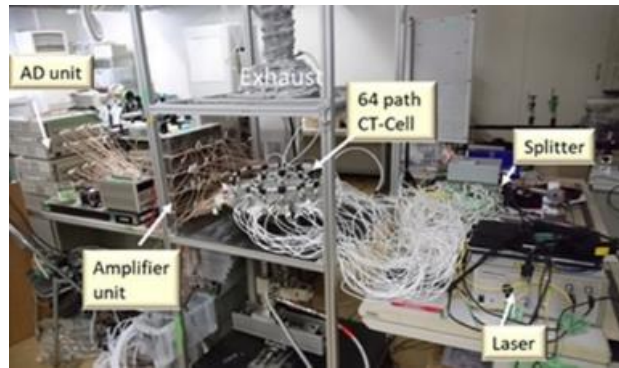


図 3. 3. 1-7 CT-TDLAS 装置の全景

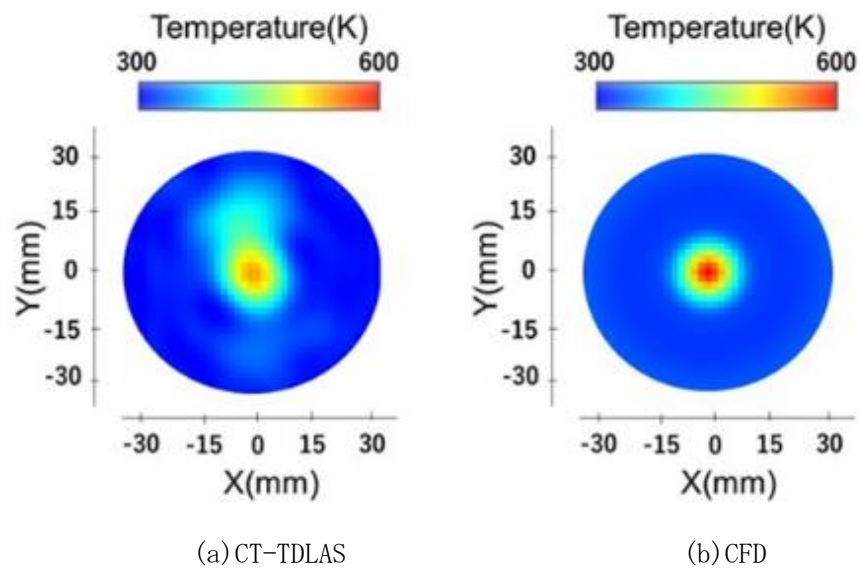


図 3. 3. 1-8 解析結果（ヒータ高さ 50mm）

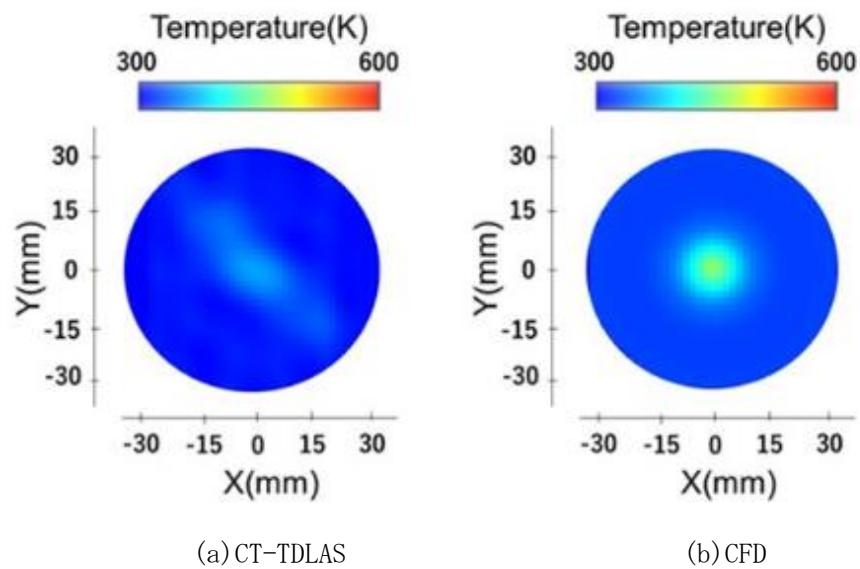
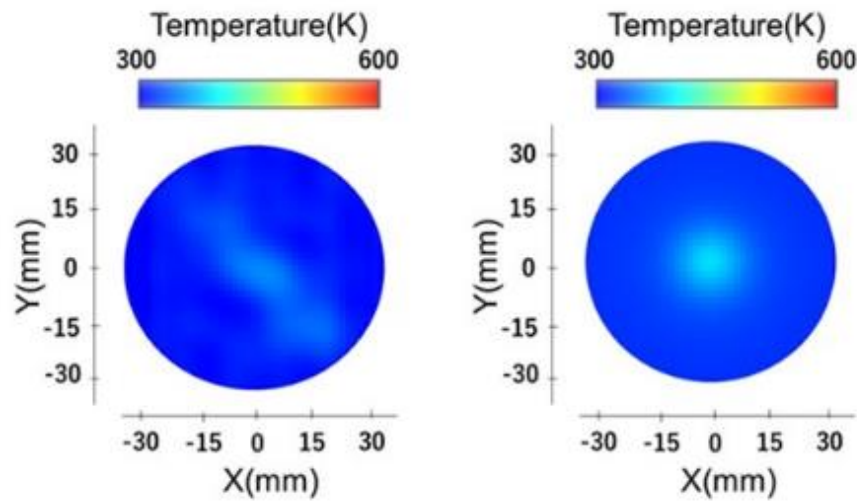


図 3. 3. 1-9 解析結果（ヒータ高さ 100mm）



(a) CT-TDLAS

(b) CFD

図 3.3.1-10 解析結果（ヒータ高さ 150mm）

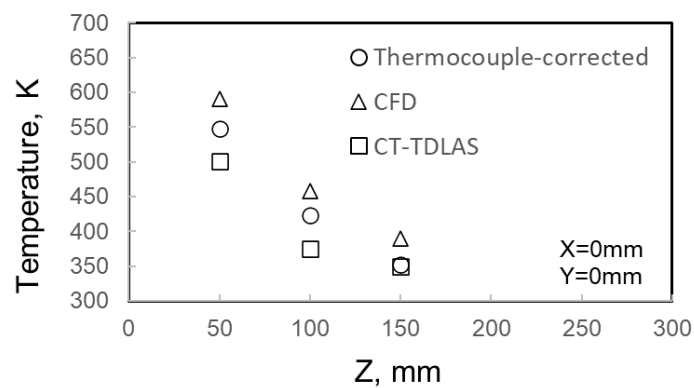


図 3.3.1-11 計測温度との比較

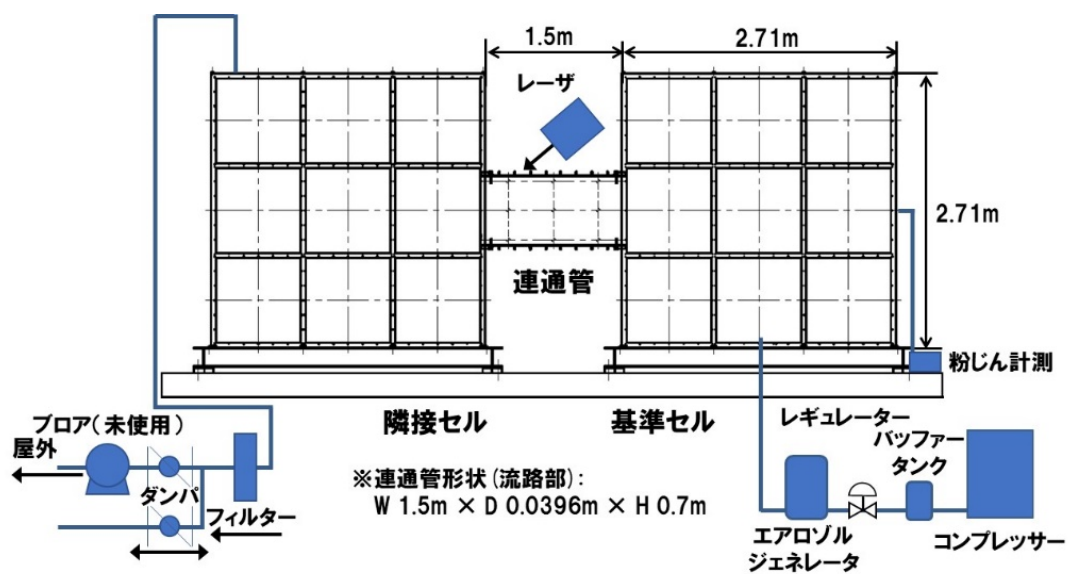
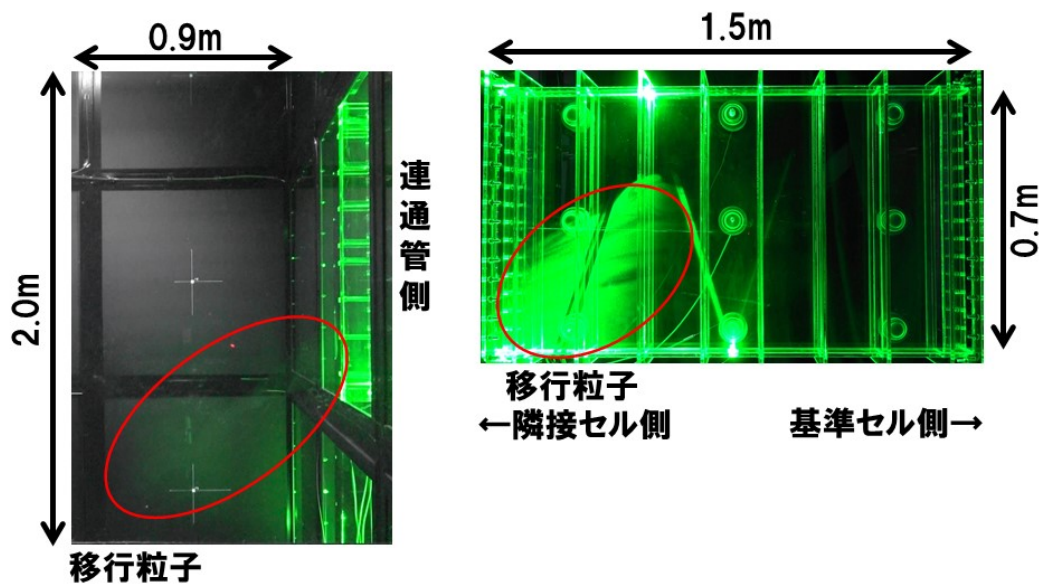


図 3.3.1-12 多セル区画実験装置の全体系統（水平配置）



(噴出直後)

図 3. 3. 1-13 水平配置における実験での基準セル模擬粒子噴出状況



(a) 隣接セル

(b) 連通管

(噴出開始から 90 秒後)

図 3. 3. 1-14 水平配置における実験での移行粒子状況

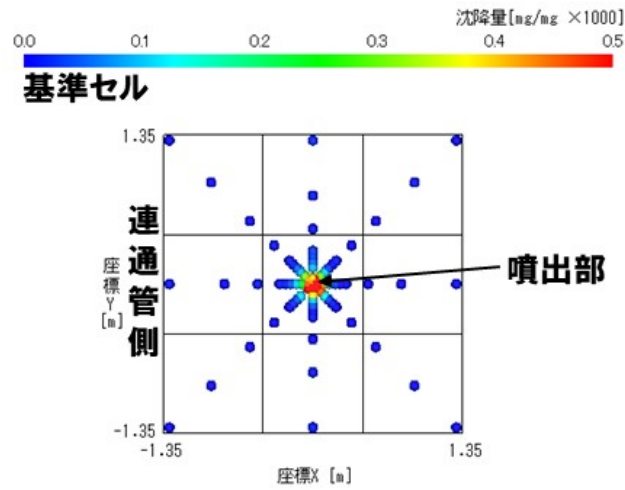


図 3.3.1-15 水平配置における実験の基準セル底面の模擬粒子沈降分布

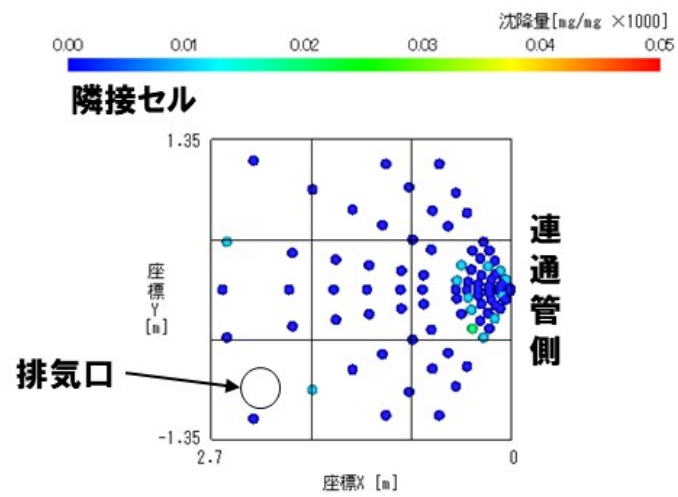


図 3.3.1-16 水平配置における実験の隣接セル底面の模擬粒子沈降分布

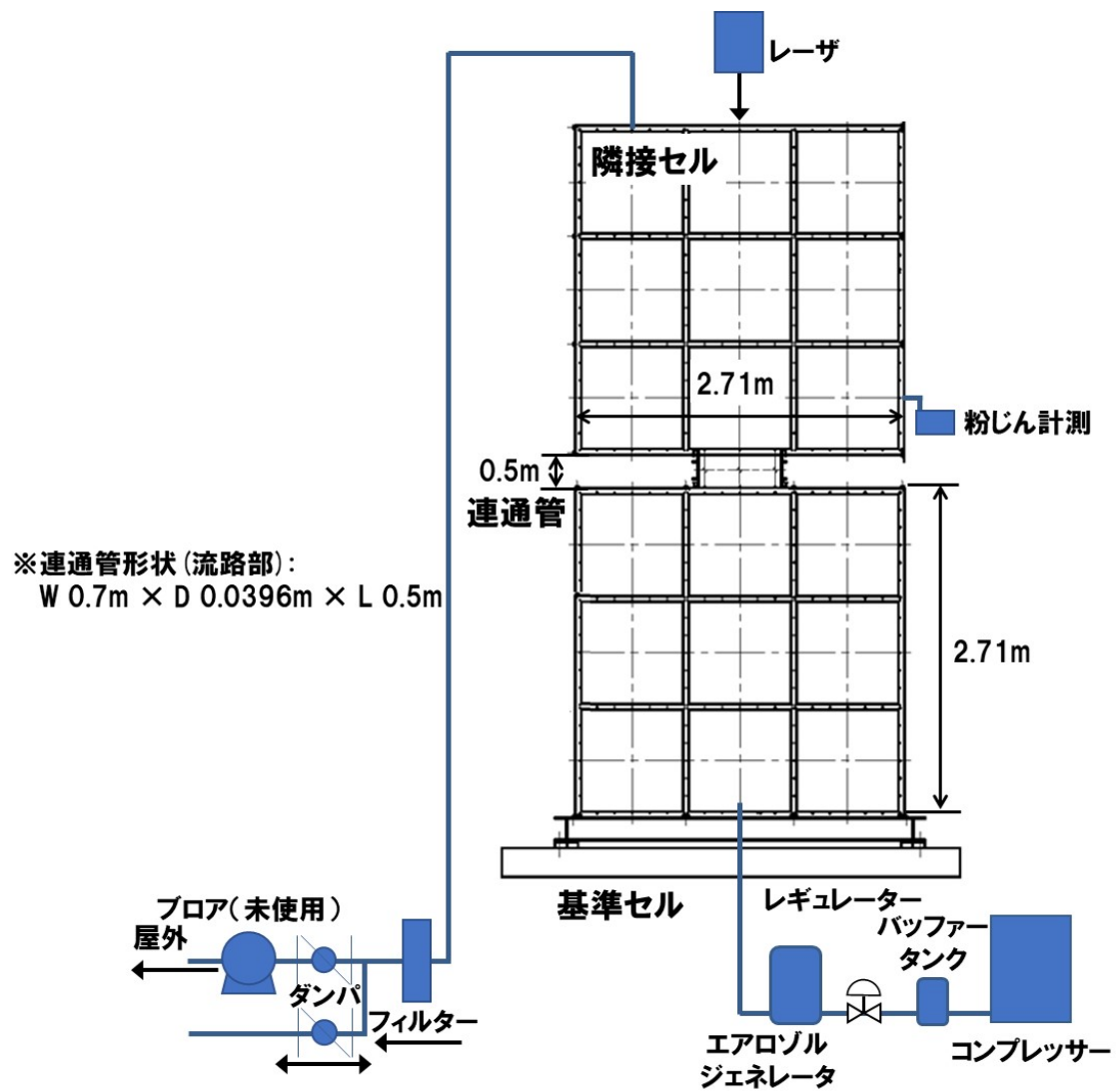
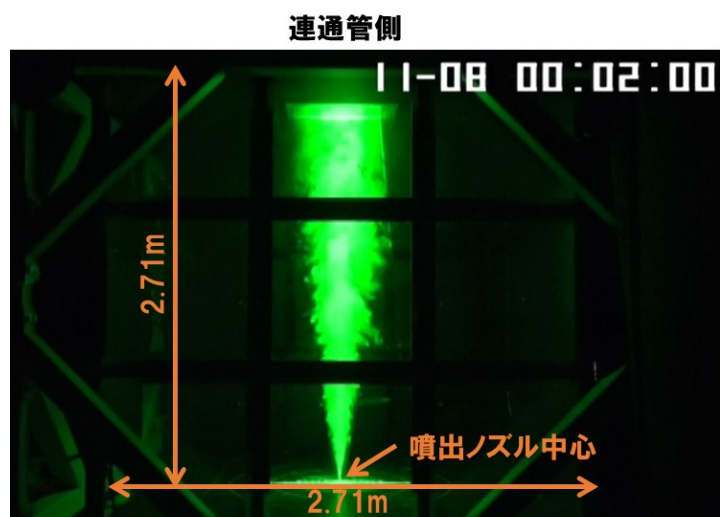
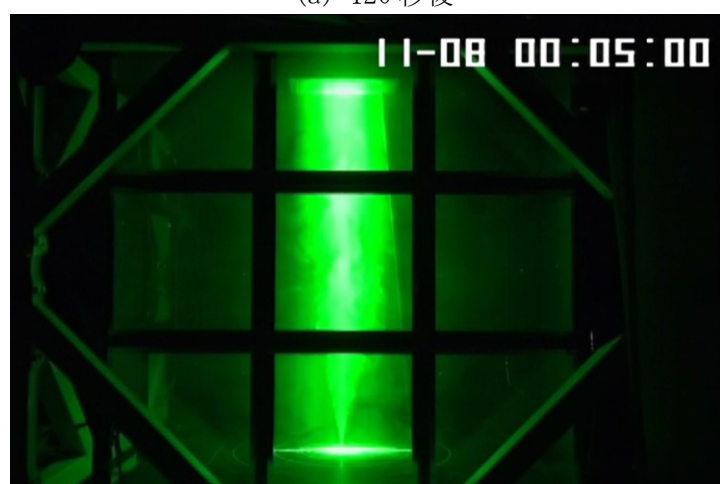


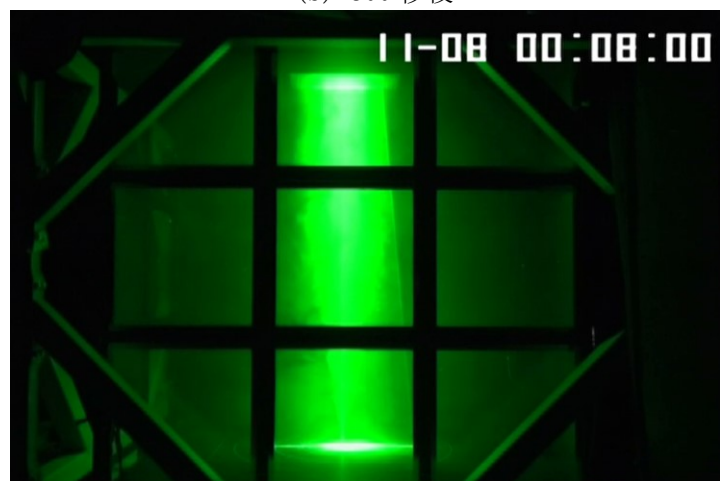
図 3.3.1-17 多セル区画実験装置の全体系統（垂直配置）



(a) 120 秒後

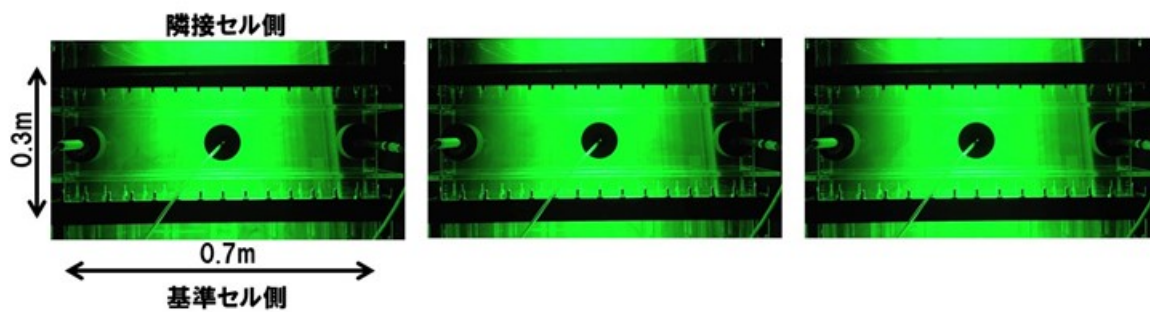


(b) 300 秒後



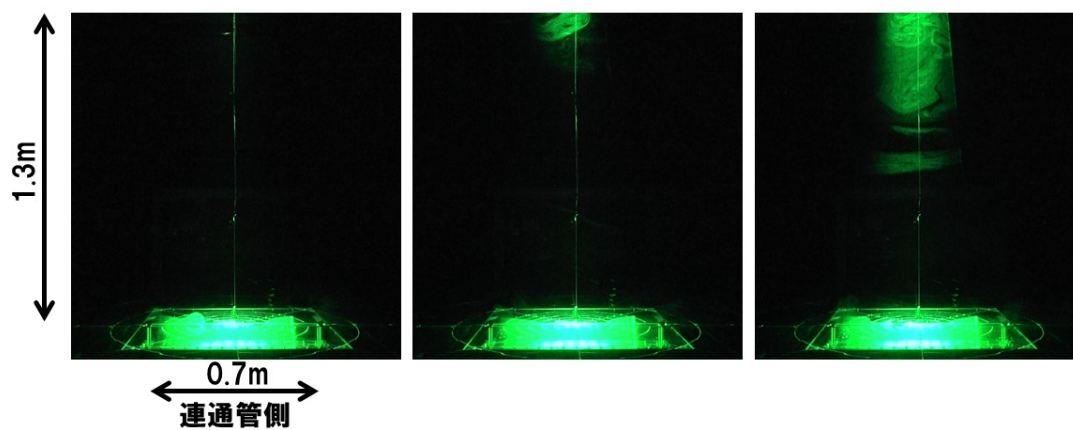
(c) 480 秒後

図 3. 3. 1-18 垂直配置における実験での基準セル内模擬粒子噴出状況



(a) 120 秒後 (b) 300 秒後 (c) 480 秒後

図 3.3.1-19 垂直配置における実験での移行状況（連通管）



(a) 120 秒後 (b) 300 秒後 (c) 480 秒後

図 3.3.1-20 垂直配置における実験での移行状況（隣接セル下部）

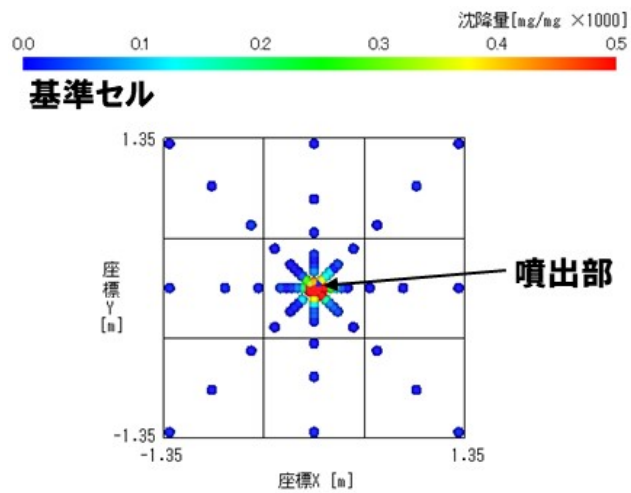


図 3.3.1-21 垂直配置における実験の基準セル底面の模擬粒子沈降分布

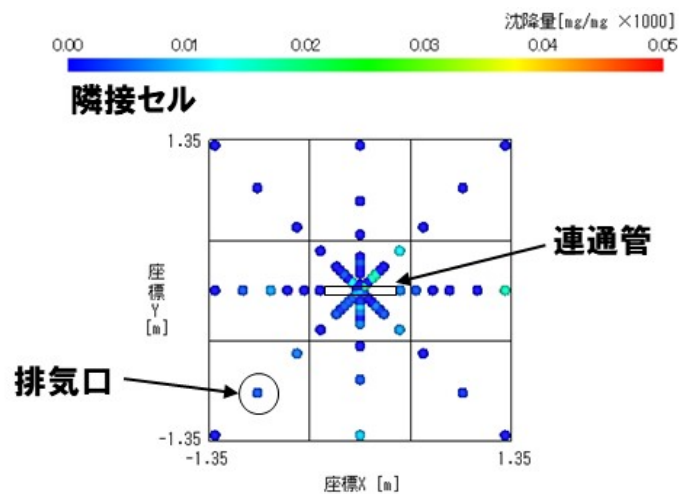


図 3.3.1-22 垂直配置における実験の隣接セル底面の模擬粒子沈降分布

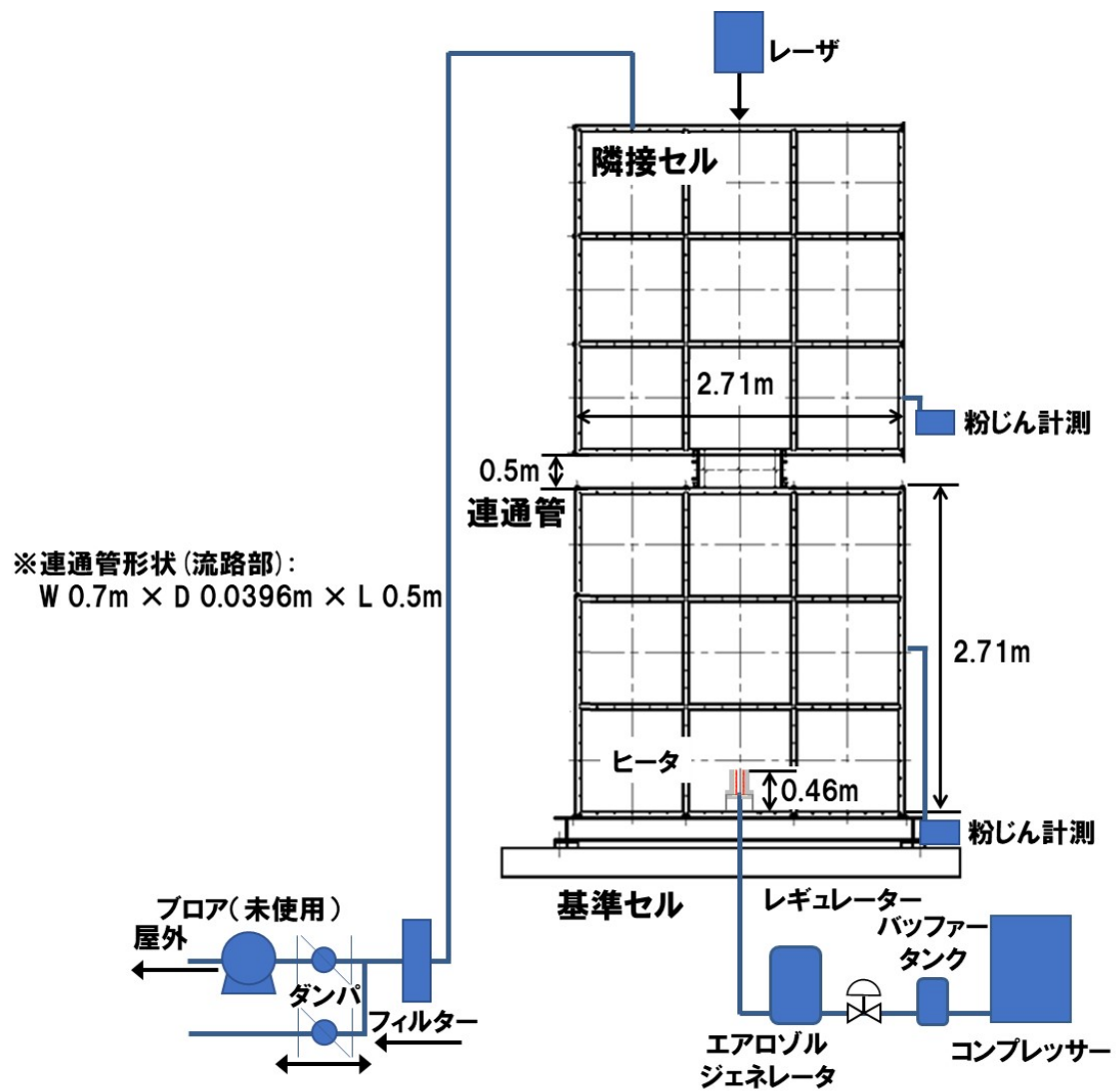
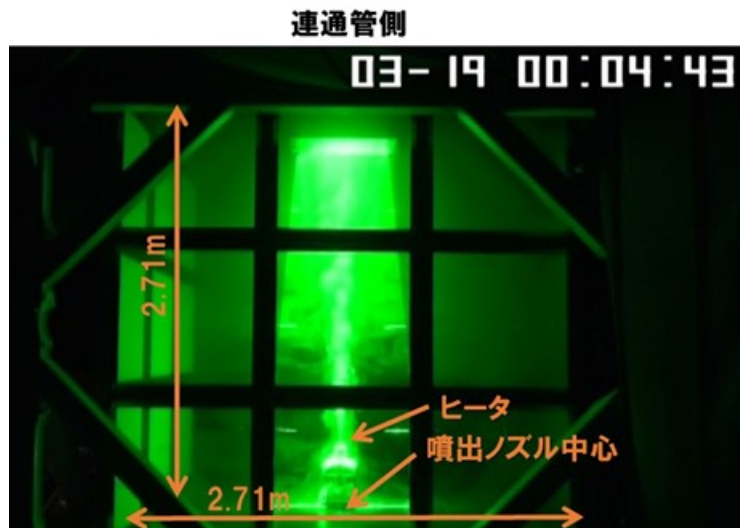
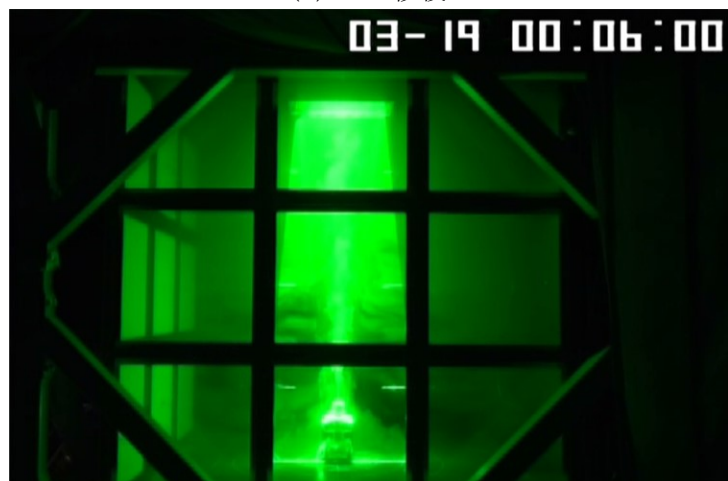


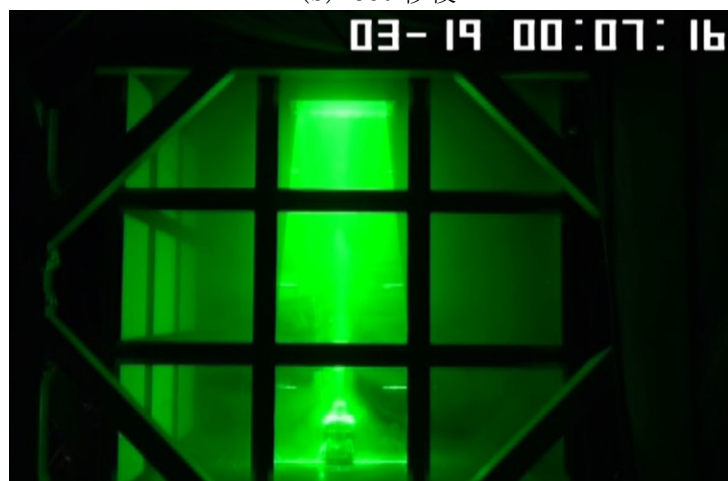
図 3. 3. 1-23 多セル区画実験装置の全体系統（垂直配置・熱印加）



(a) 283 秒後

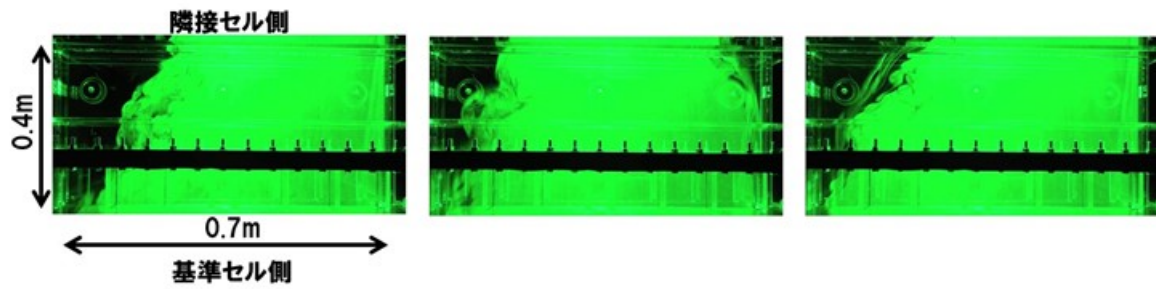


(b) 360 秒後



(c) 436 秒後

図 3. 3. 1-24 垂直配置における熱印加実験での基準セル内模擬粒子噴出状況

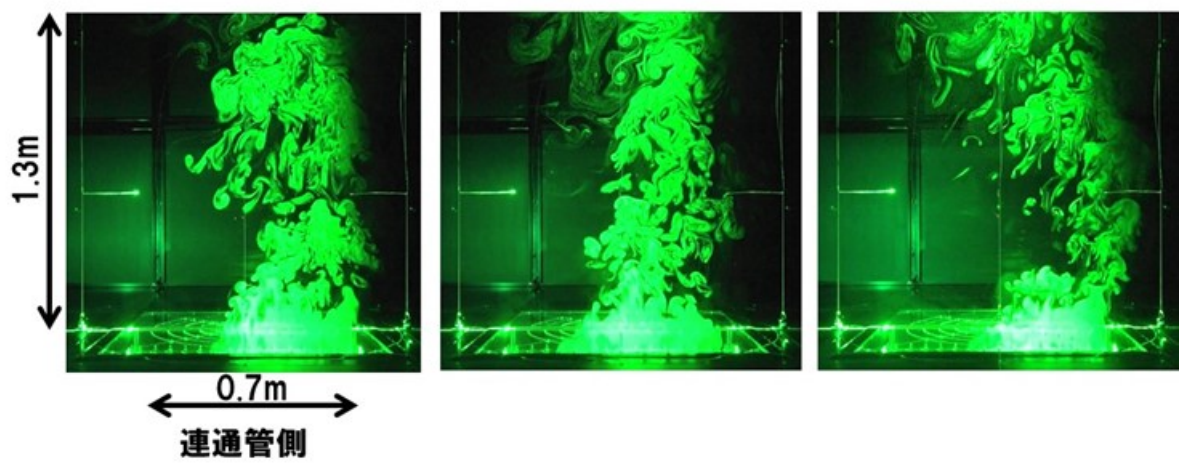


(a) 283 秒後

(b) 360 秒後

(c) 436 秒後

図 3.3.1-25 垂直配置における熱印加実験での移行粒子状況（連通管）



(a) 283 秒後

(b) 360 秒後

(c) 436 秒後

図 3.3.1-26 垂直配置における熱印加実験での移行粒子状況（隣接セル下部）

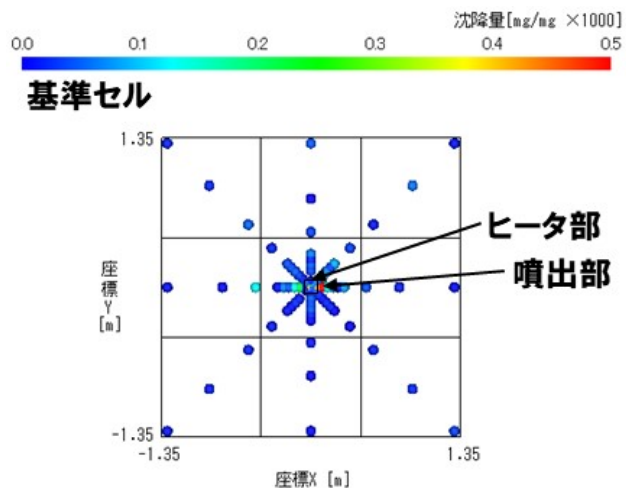


図 3.3.1-27 垂直配置における熱印加実験の基準セル底面の模擬粒子沈降分布

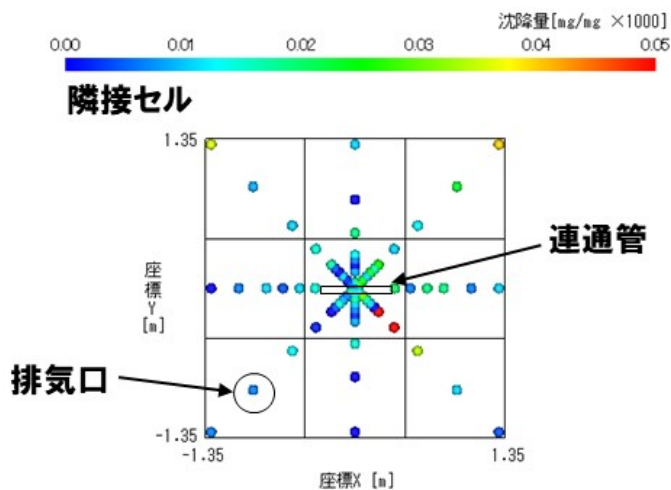


図 3.3.1-28 垂直配置における熱印加実験の隣接セル底面の模擬粒子沈降分布

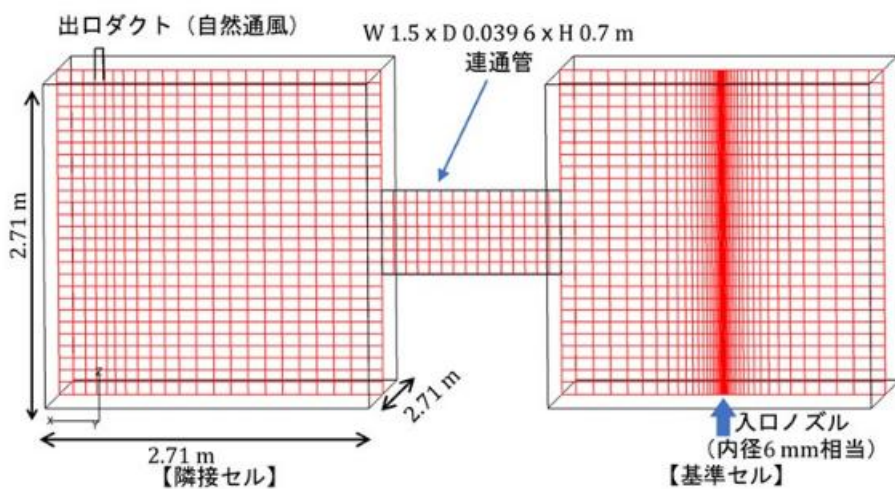
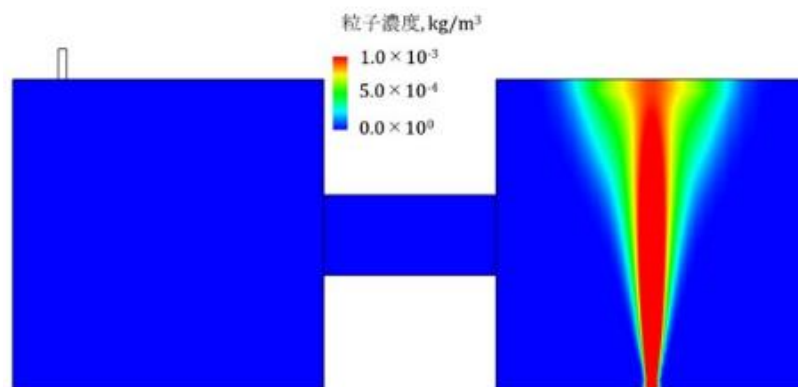
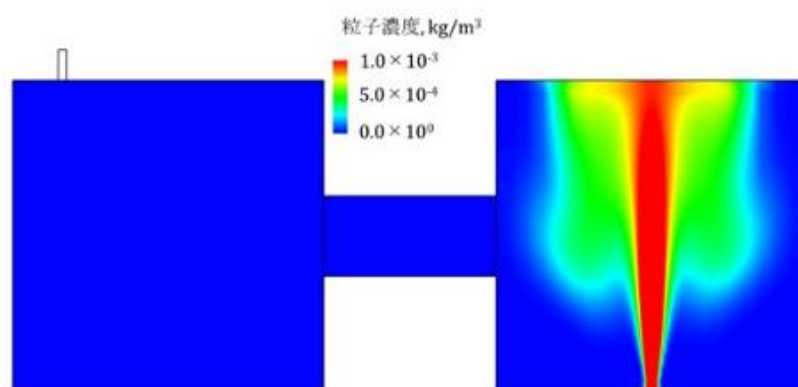


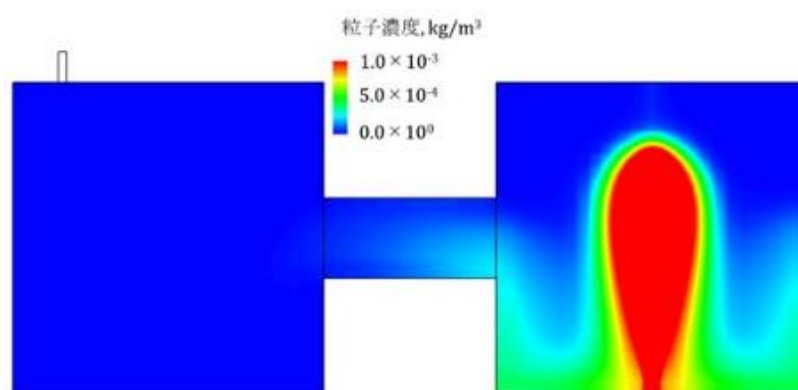
図 3.3.1-29 水平配置における実験の解析モデル



(a) 30s

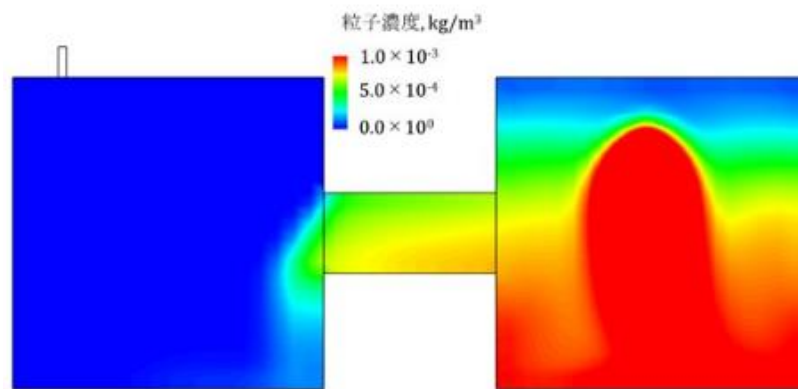


(b) 100s

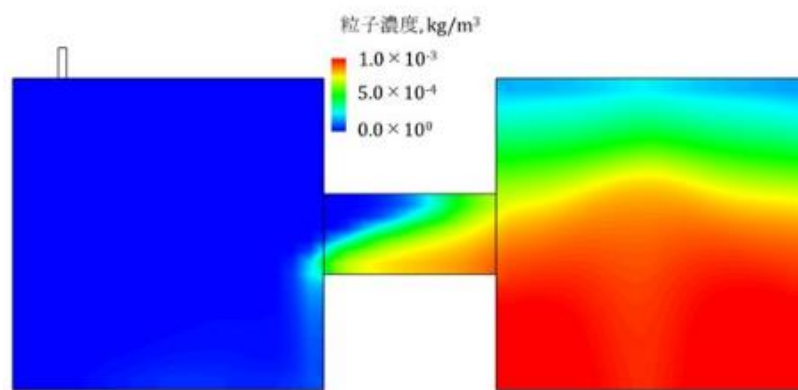


(c) 200s

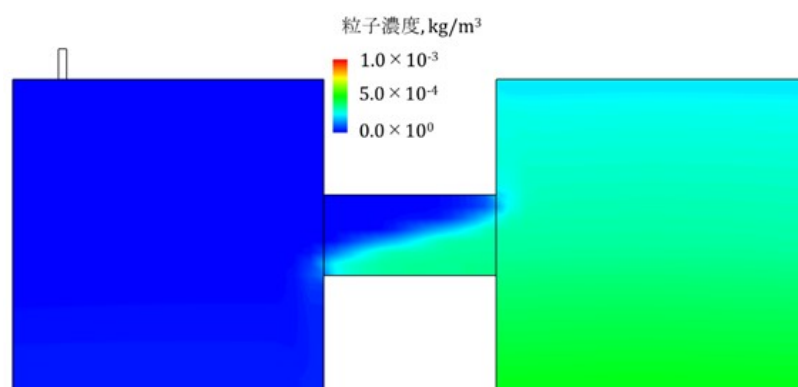
図 3.3.1-30(1/2) 水平配置における実験の解析結果（濃度コンター）



(d) 650s

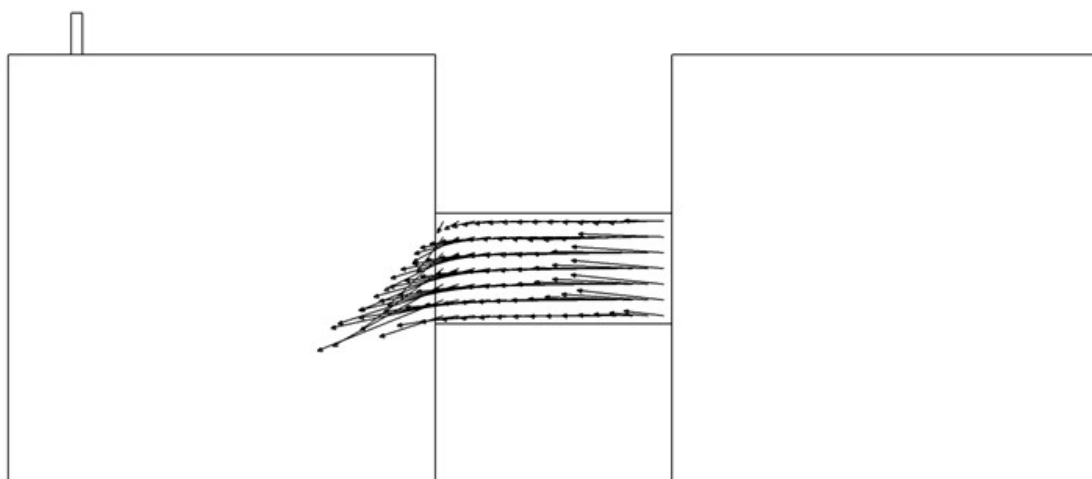


(e) 800s

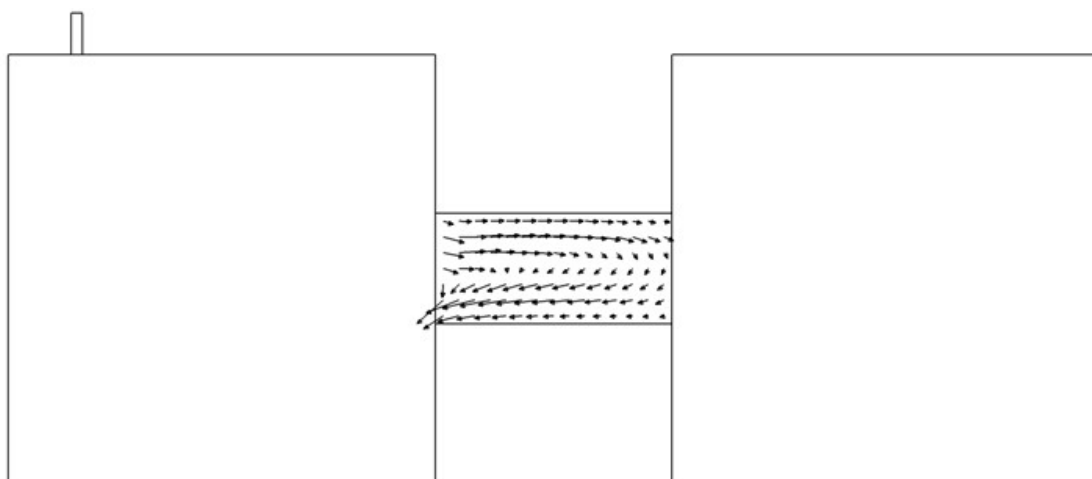


(f) 21,600s

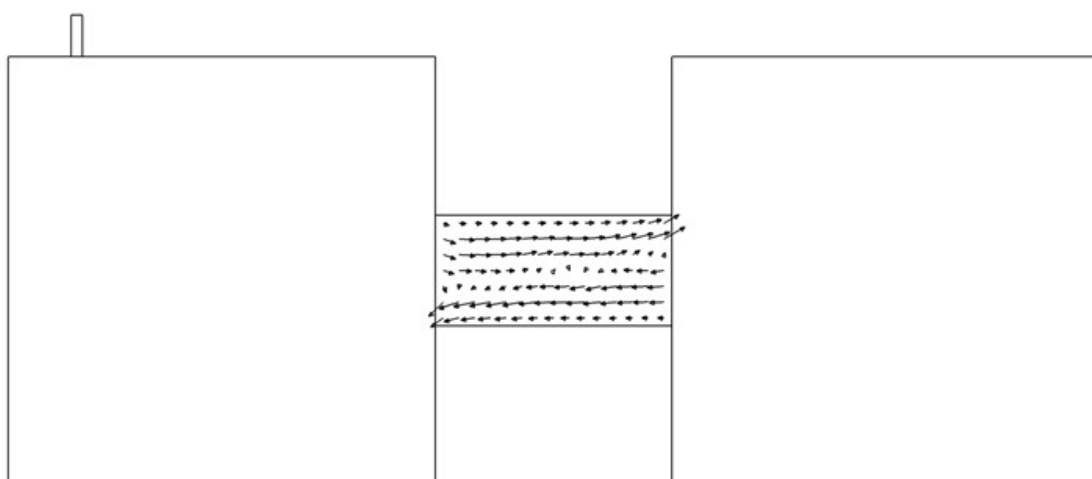
図 3.3.1-30(2/2) 水平配置における実験の解析結果（濃度コンター）



(a) 650s



(b) 800s



(c) 2,000s

図 3. 3. 1-31 水平配置における実験の解析結果（連通管における空気の速度ベクトル）

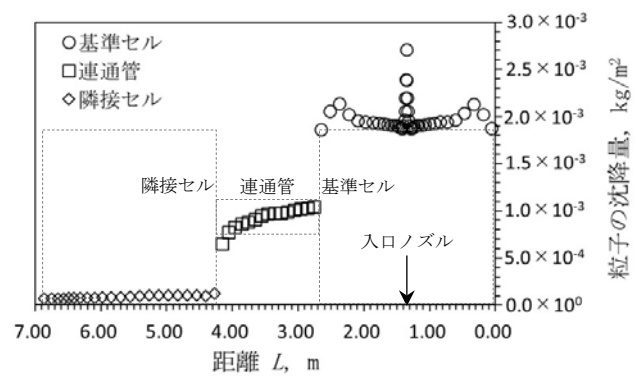


図 3.3.1-32 水平配置における実験の解析結果 (24 時間後の沈降分布)

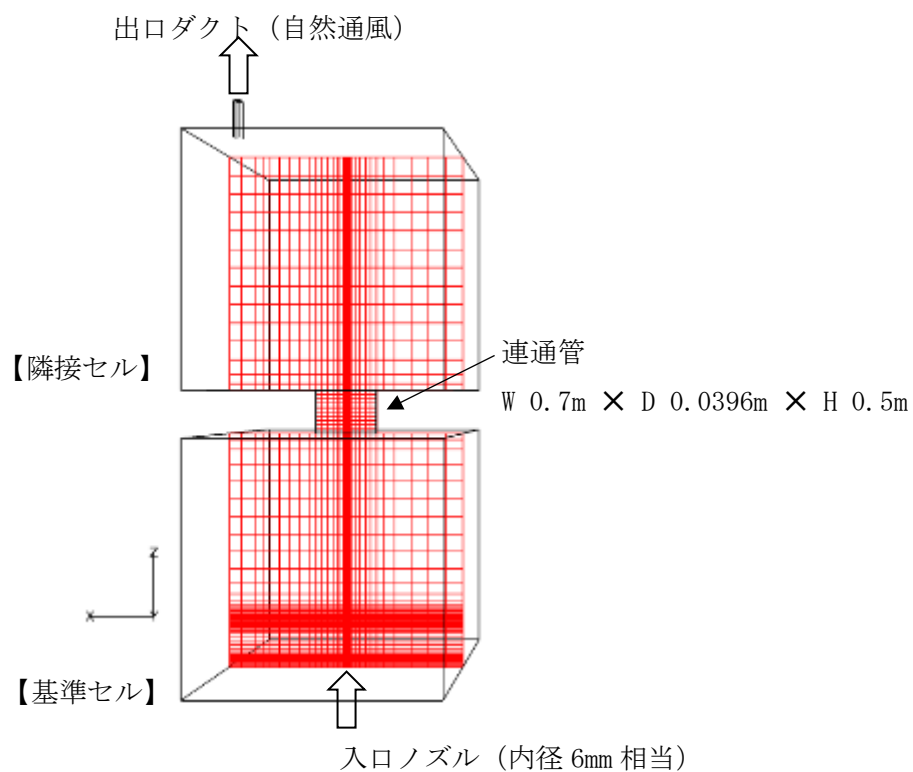


図 3.3.1-33 垂直配置における実験の解析モデル

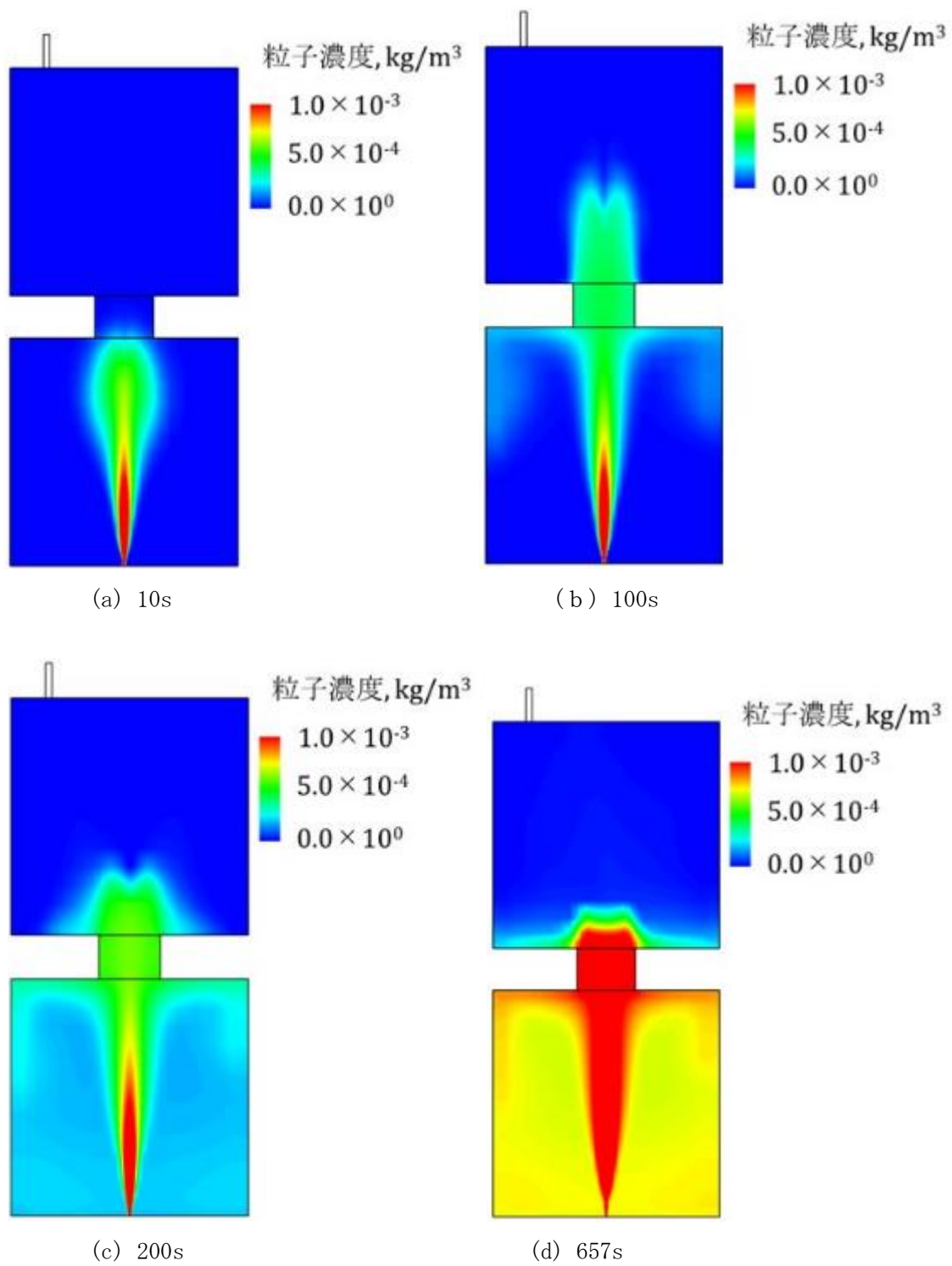
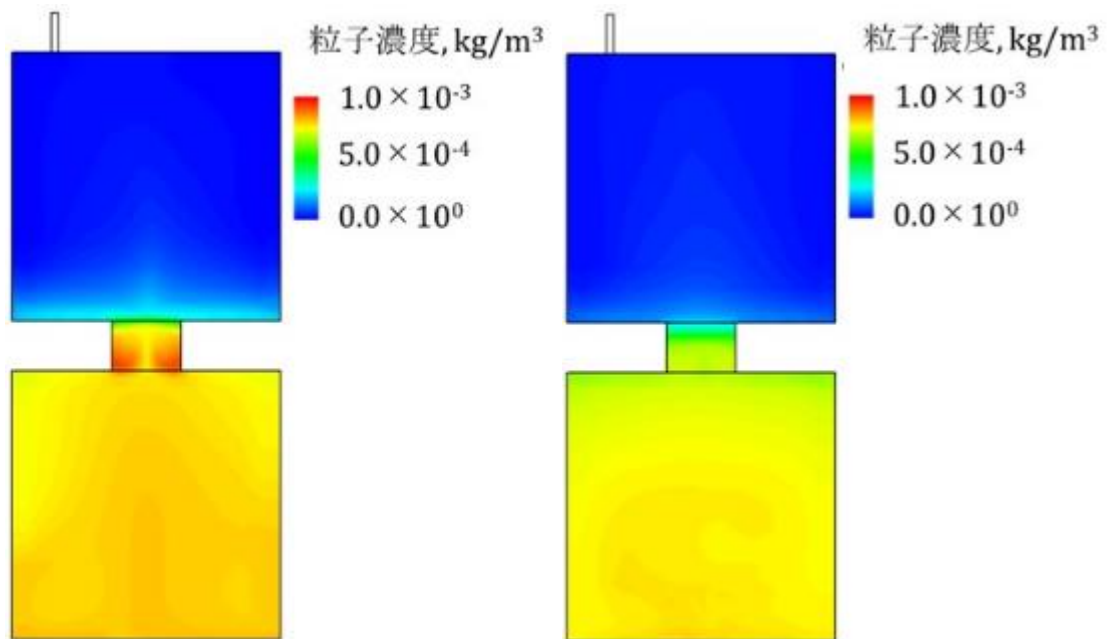
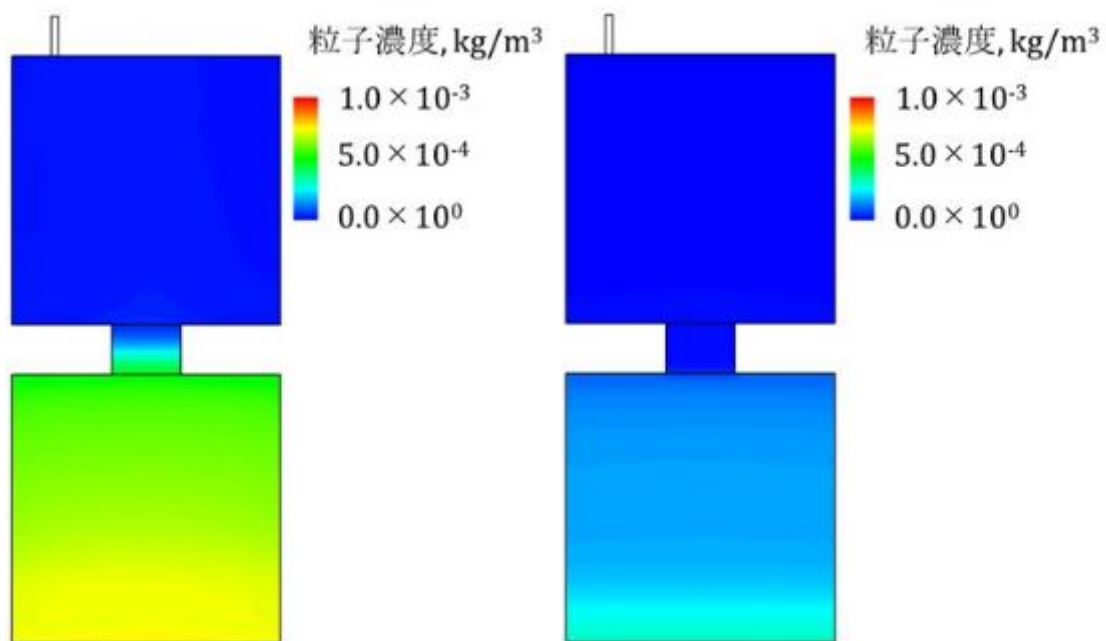


図 3.3.1-34(1/2) 垂直配置における実験の解析結果（濃度コンター）



(e) 800s

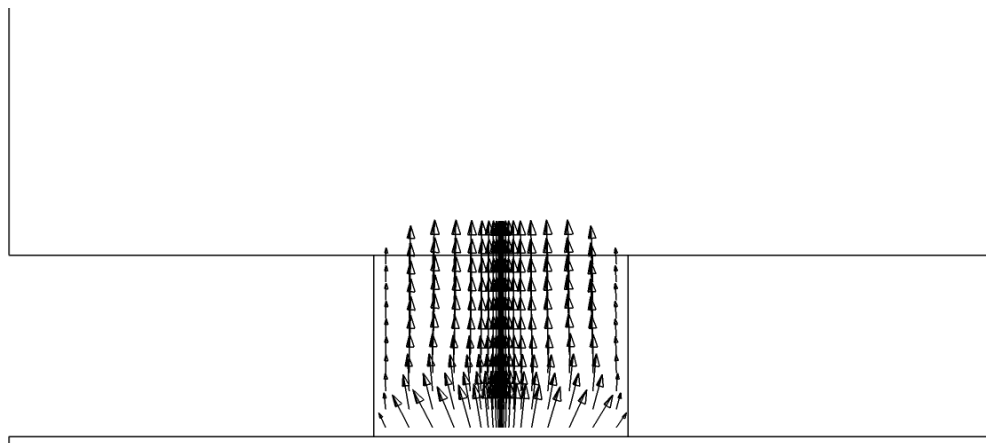
(f) 2,000s



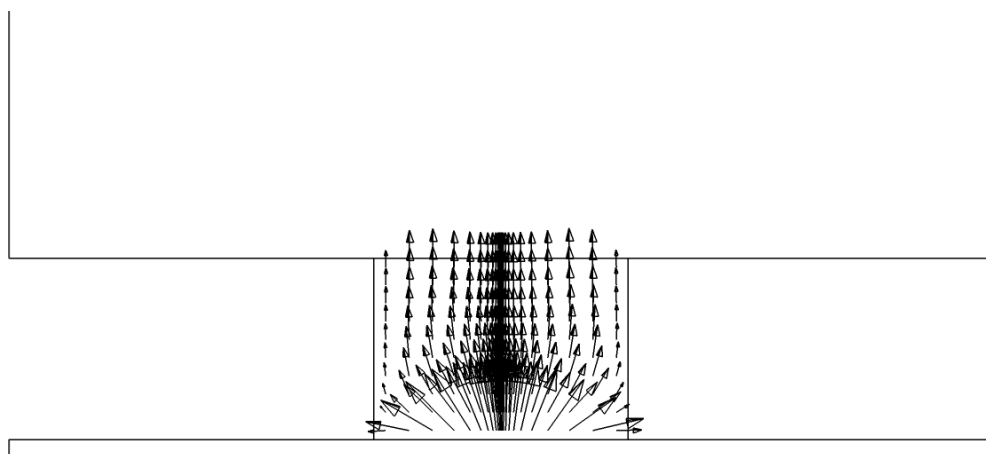
(g) 6,250s

(h) 43,200s

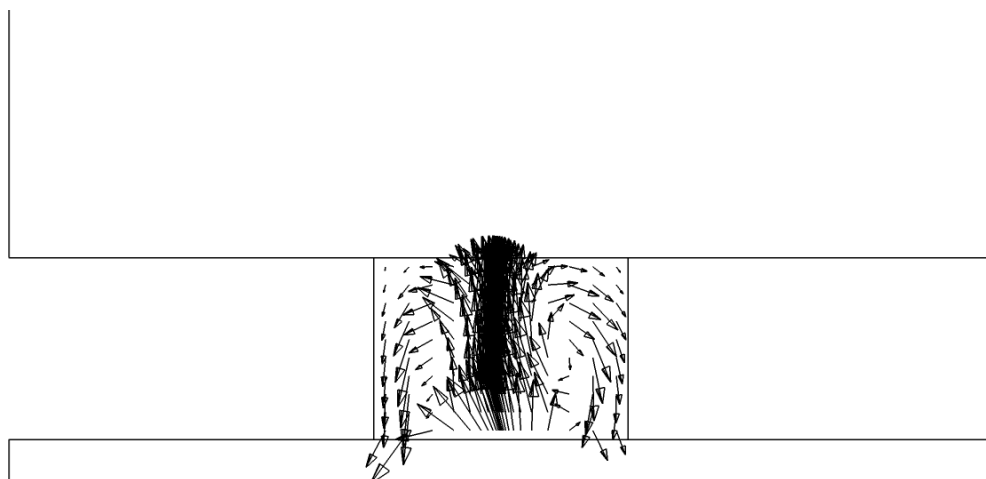
図 3.3.1-34(2/2) 垂直配置における実験の解析結果 (濃度コンター)



(a) 10s (1 倍)

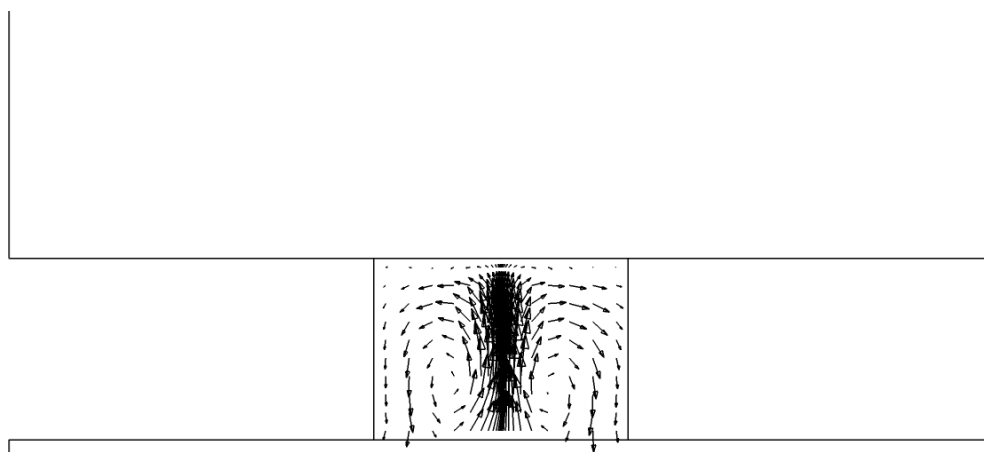


(b) 650s (1 倍)

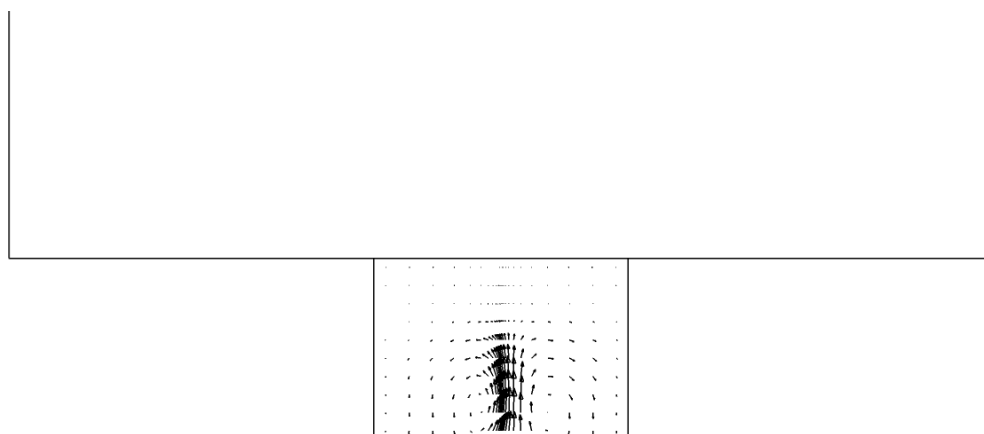


(c) 700s (16 倍)

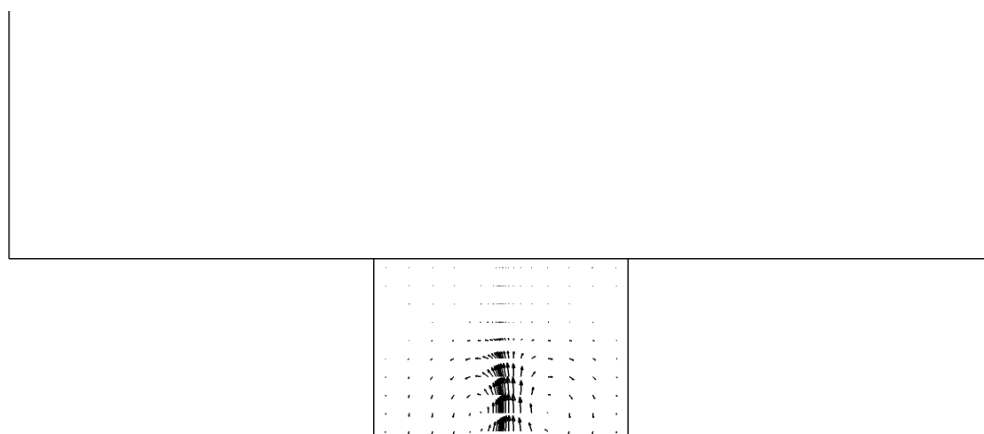
図 3. 3. 1-35(1/2) 垂直配置における実験の解析結果 (連通管における空気の流れの速度ベクトル)



(d) 800s (16 倍)

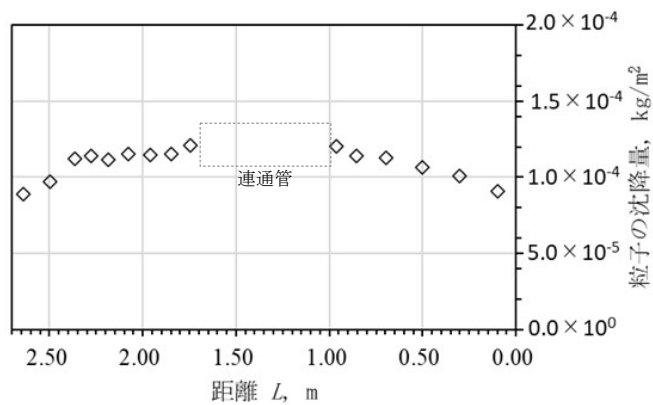


(e) 1,500s (16 倍)

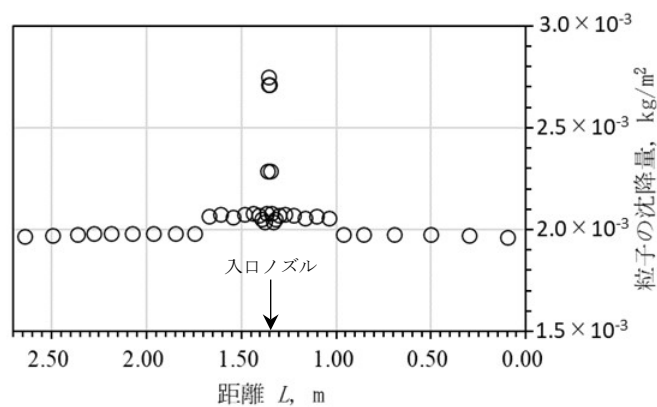


(f) 2,000s (16 倍)

図 3.3.1-35(2/2) 垂直配置における実験の解析結果（連通管における空気の流れベクトル）



(a) 隣接セル



(b) 基準セル

図 3. 3. 1-36 垂直配置における実験の解析結果（24 時間後の沈降分布）

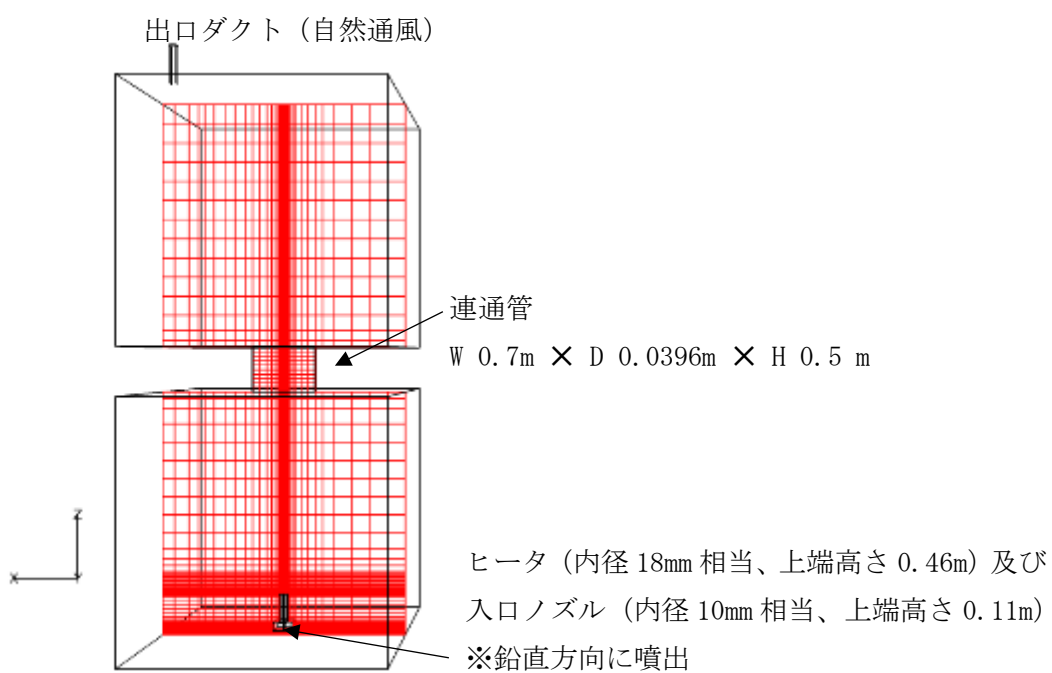
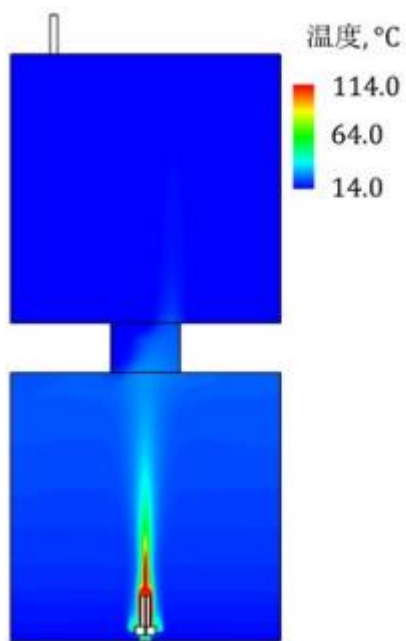
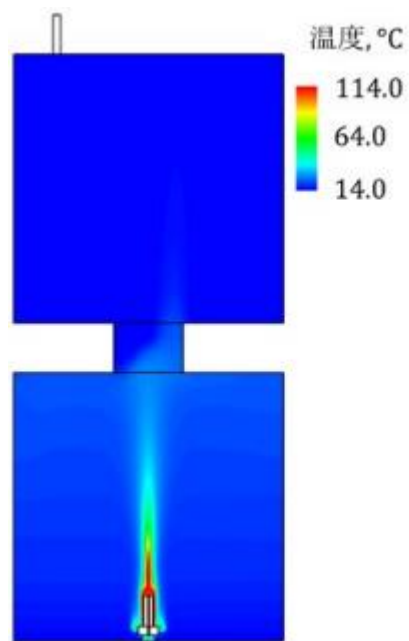


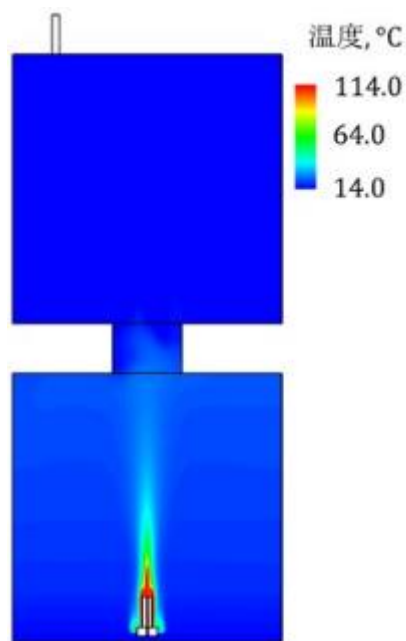
図 3. 3. 1-37 熱印加時の垂直配置における実験の解析モデル



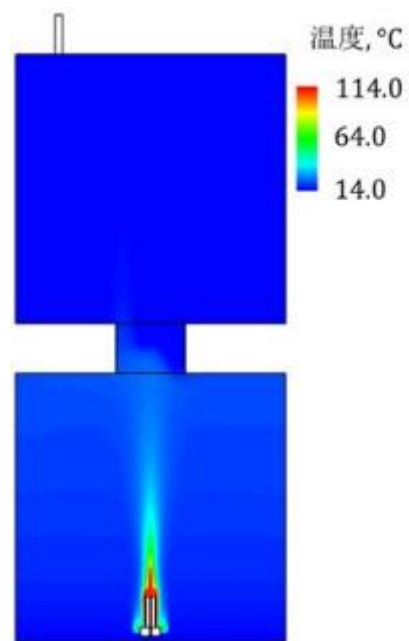
(a) 50s



(b) 650s



(c) 800s



(d) 2,000s

図 3.3.1-38 熱印加時の垂直配置における実験の解析結果（空気の温度コンター）

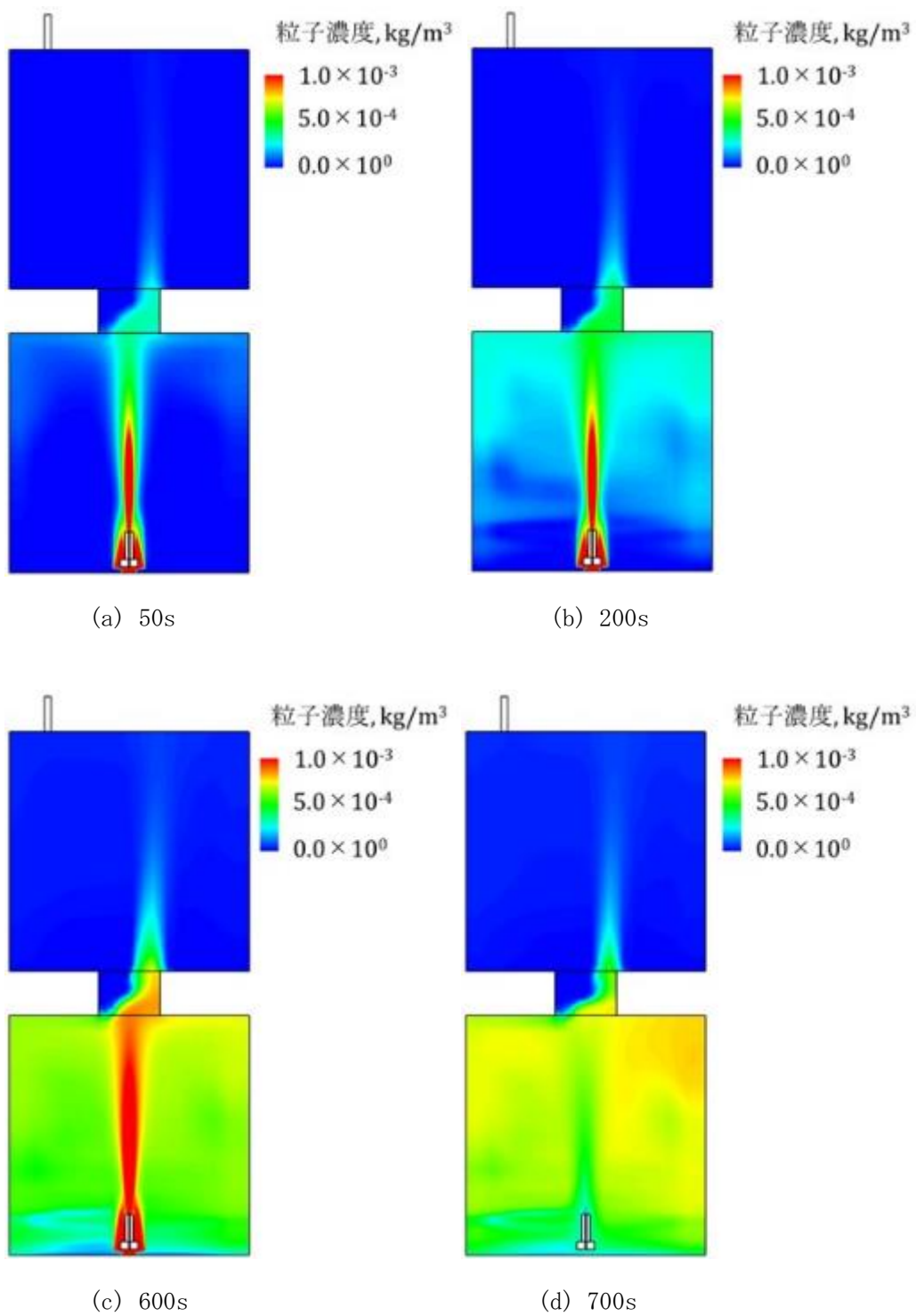
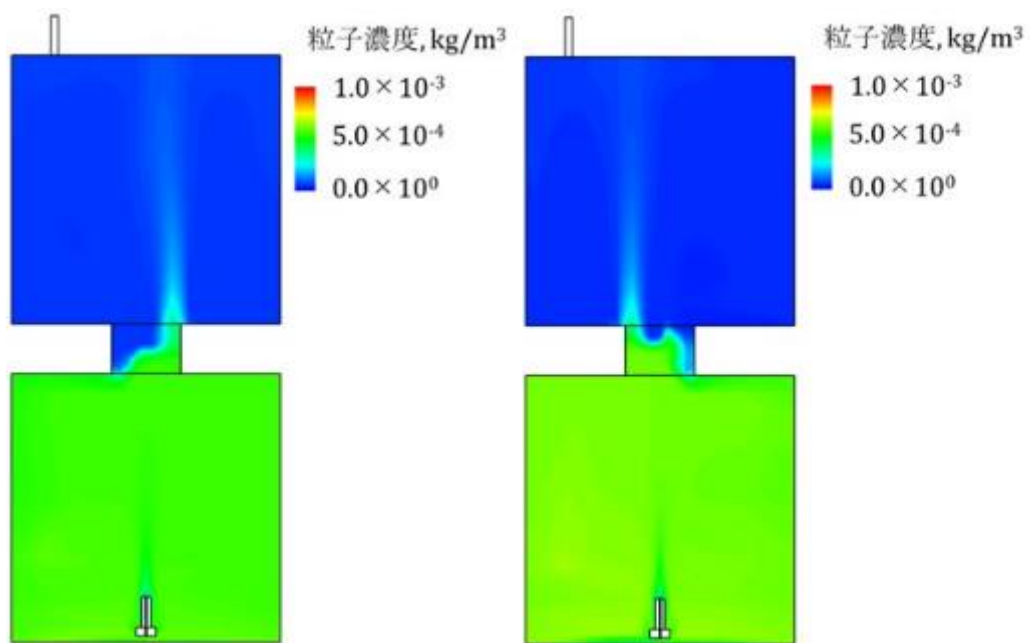


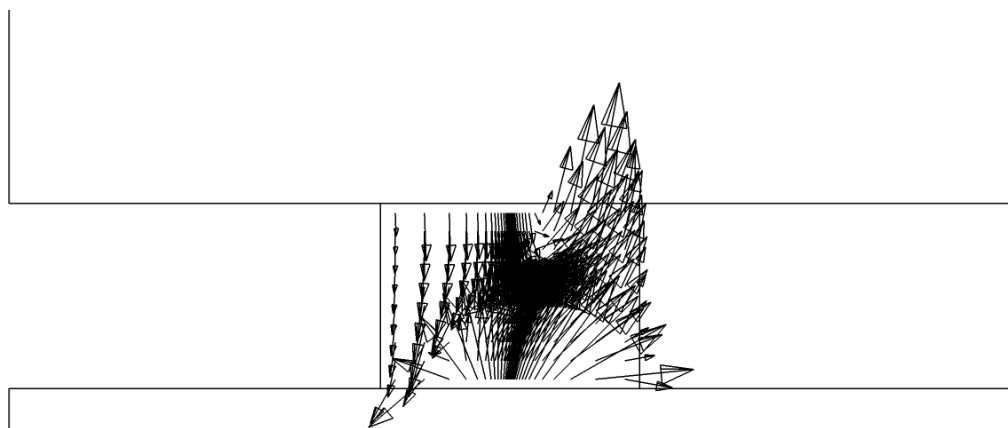
図 3.3.1-39(1/2) 熱印加時の垂直配置における実験の解析結果（濃度コンター）



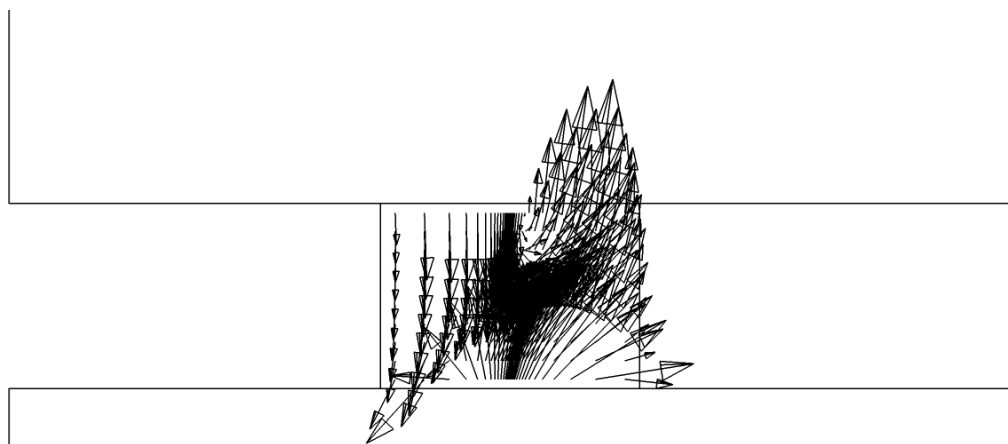
(e) 1400s

(f) 1900s

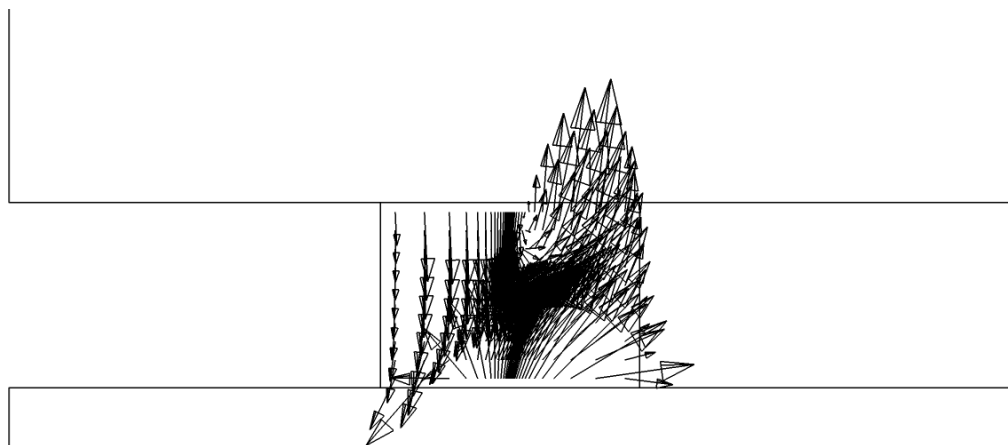
図 3. 3. 1-39 (2/2) 熱印加時の垂直配置における実験の解析結果（濃度コンター）



(a) 50s

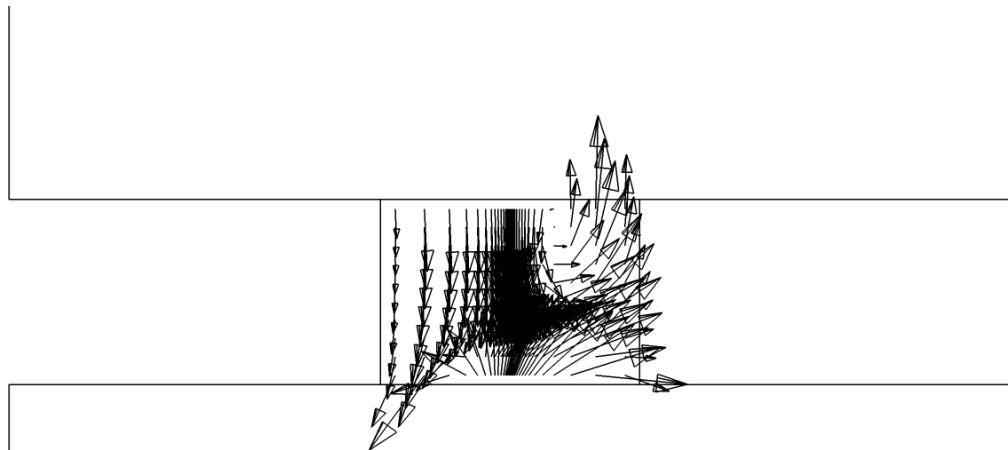


(b) 200s

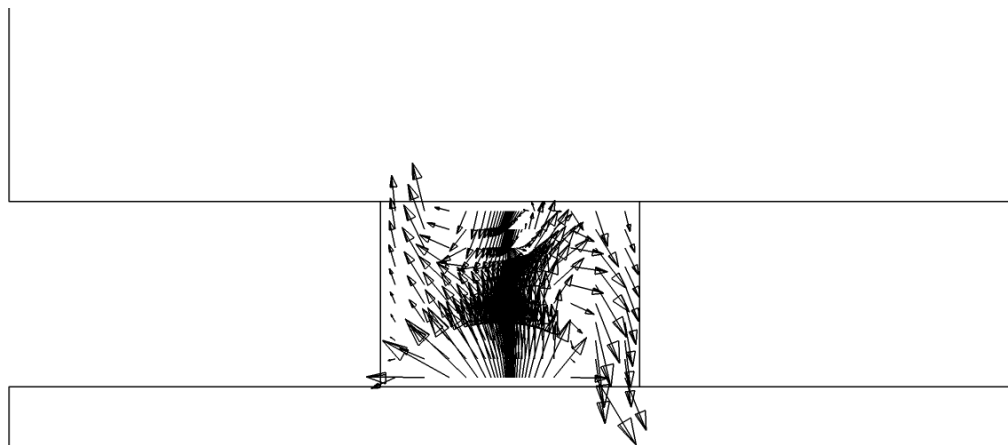


(c) 600s

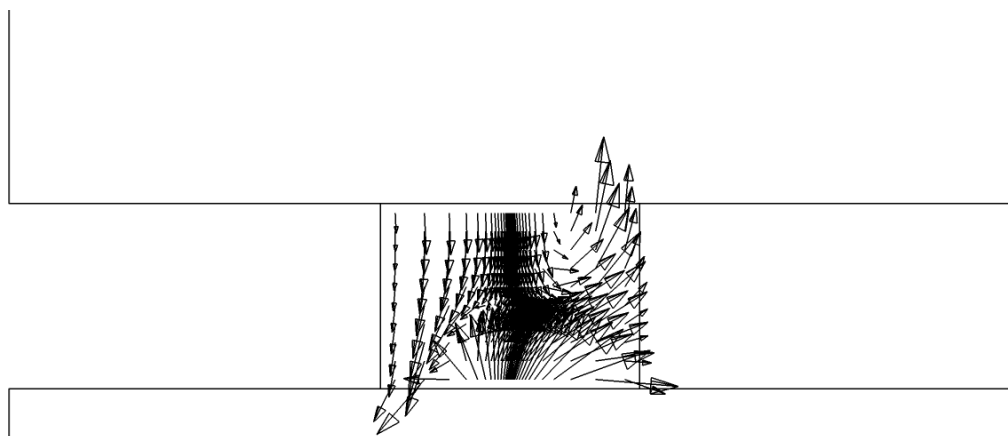
図 3. 3. 1-40 (1/2) 熱印加時の垂直配置における実験の解析結果
(連通管における空気の流れの速度ベクトル)



(d) 700s

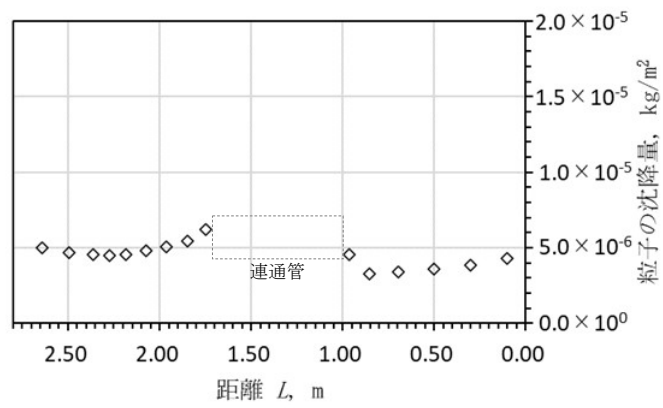


(e) 1,400s

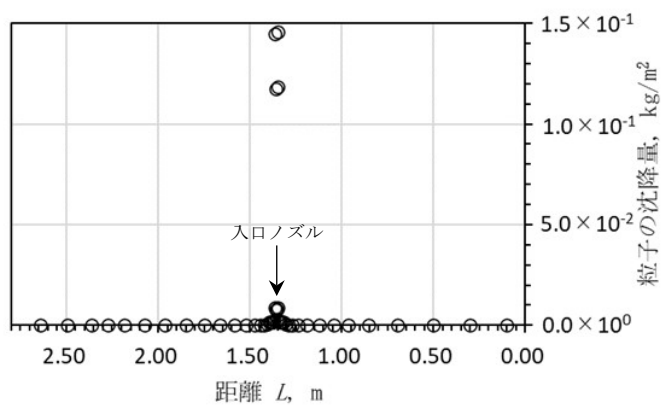


(f) 1,900s

図 3.3.1-40(2/2) 熱印加時の垂直配置における実験の解析結果
(連通管における空気の流れベクトル)



(a) 隣接セル



(b) 基準セル

図 3. 3. 1-41 熱印加時の垂直配置における実験の解析結果 (2, 000 秒後の沈降分布)

3.3.2 燃焼生成エアロゾル性状計測（再委託先：徳島大学）【H28-R1】

本研究では、ナトリウム燃焼における反応条件を変更し、各条件での反応状態を可視化計測すると共に、その反応安定性、反応形態などを明確化し、ナトリウム燃焼状態や生成するエアロゾルを評価できる燃焼条件の最適化を行った。また、酸化剤（酸素、水蒸気）の違いによる燃焼形態変化を観察した。上記で設定した反応条件において、生成エアロゾルの組成計測、エアロゾルの光学物性値測定方法の適用性評価をした。

生成エアロゾルの組成計測では、ラマン散乱法を用いた生成エアロゾルの組成同定を行った。また、エアロゾルの光学物性の計測精度向上を目的として、波長の異なるミー散乱光計測とレーザ誘起灼熱法（LII：Laser Induced Incandescence）を用いたエアロゾルの粒径の比較、ミー散乱光計測を用いた複素屈折率の計測を行った。ミー散乱計測では、精度向上のため 500nm 近傍のダイオードレーザを追加して計測を実施した。上記試験において使用した対向型ナトリウム反応装置、レーザ計測装置配置、レーザ計測光学系、試験条件を各々図 3.3.2-1、図 3.3.2-2、図 3.3.2-3、表 3.3.2-1 に示す。

(1) 反応条件の最適化【H28-H29】

ナトリウム-酸素燃焼における反応条件を変更し、各条件での反応状態を可視化計測すると共に、その反応安定性、反応形態などを明確化し、ナトリウム燃焼状態や生成するエアロゾルを評価できる燃焼条件の最適化を行った。可視化計測では、ミー散乱法を使用した。図 3.3.2-3(a)の装置を用い、生成するエアロゾルによるミー散乱光を用いて、反応面を評価した。試験条件では、表 3.3.2-1 の条件 1 を用いた。燃焼持続時間を考慮し、酸素濃度を 2%及び 4%に設定した。また、本試験では、酸素のみを導入し、水蒸気濃度は 0%とした。

ナトリウム-酸素燃焼時のナトリウム温度の影響を図 3.3.2-4 に、酸素濃度の影響を図 3.3.2-5 に示す。ナトリウム温度は、ナトリウム皿から供給されるナトリウム濃度に影響し、ナトリウム温度が上昇すると、ナトリウム濃度が上昇し、ナトリウム-酸素燃焼の反応面がナトリウム皿の上方に移行する。ナトリウム燃焼状態や生成するエアロゾルを評価する上で、反応面がナトリウム皿の上方に位置し、ナトリウム液面との距離が大きいことが望ましい。図 3.3.2-4 における可視化計測結果より、ナトリウム温度が上昇するに従い、反応面がナトリウム皿の上方に移行することが確認できた。また、酸素濃度の影響では、図 3.3.2-5 における可視化計測より、酸素濃度の上昇に伴い、反応面がナトリウム液面に近付くことが確認された。また、酸素濃度 4%では、酸素濃度 2%に比べ、ナトリウムの消費率が大きくなることが明らかとなった。圧力は、反応安定性を考慮して設定し、表 3.3.2-1 の条件 1 の設定範囲内で、反応状態の顕著な変化が見られないことを確認した。上記計測結果を考慮し、各計測に必要な時間として、10 分以上の反応安定性を確保できる条件として、表 3.3.2-1 の条件 2 を決定した。

(2) 酸化剤の違いによる燃焼形態の変化【H28-H29】

酸化剤（酸素、水蒸気）の違いによる燃焼形態を観察した。可視化計測では、ミー散乱法を使用した。図 3.3.2-3(a) の装置を用い、生成するエアロゾルによるミー散乱光と燃焼場からの発光を用いて、燃焼形態を評価した。試験条件では、表 3.3.2-1 の条件 1 を用いた。燃焼酸化剤の違いによる燃焼形態を図 3.3.2-6 に示す。ナトリウム-酸素反応では、燃焼場からの発光は観察されず、生成するエアロゾルからのミー散乱光のみが観察される。一方、ナトリウム-水蒸気反応では、反応面から強い発光が観察され、その発光波長 (589nm、黄色) から、発光がナトリウム D 線であることが確認された。ナトリウム-酸素反応とナトリウム-水蒸気反応では、反応時に生成される化学種が異なり、ナトリウム-水蒸気反応では、水素に関連する水酸基 (OH ラジカル) などが生成される。このような燃焼形態の差異により、ナトリウム-水蒸気反応では、ナトリウムが励起状態に遷移し、ナトリウム D 線が観察された。

(3) 生成エアロゾルの組成【H30】

生成エアロゾルの組成計測では、ラマン散乱法を用いた生成エアロゾルの組成同定を行った。図 3.3.2-3(b) の装置を用い、生成するエアロゾルからのラマン散乱光を用いて、エアロゾル組成を評価した。ラマン散乱法では、散乱光強度の向上を図るため、波長 532nm の高出力 (11W) レーザからのレーザ光をチャンバーに入射できるように光学系を設置した。照射側光路には、532nm のみを通過するフィルタを設置した。受光側にはデータ取得を行う分光器、ICCD カメラに接続したファイバーを配置し、ファイバーの手前にはラマン散乱光を取得するために 532nm 以外の波長の光を通過するノッチフィルタを設置した。また、光軸を確認するために 450nm レーザを配置した。また、光学部品などからのレーザ光の散乱光を低減するため、遮光版で光学系の全体の周りを覆い、ノイズの混入を防いだ。図 3.3.2-7 に光学系写真、表 3.3.2-2 にラマン散乱法で用いたレーザ装置一覧を示す。

ナトリウム燃焼から生成されるエアロゾルとして、酸化ナトリウム (Na_2O)、過酸化ナトリウム (Na_2O_2) 等が想定される。ナトリウム-酸素燃焼では、酸化ナトリウム、過酸化ナトリウムの生成が考えられ、生成エアロゾルの組成を評価するため、酸化ナトリウム、過酸化ナトリウムに加え、前述のナトリウム-水蒸気反応の評価に資するため、水酸化ナトリウム (NaOH) のラマン散乱光の基準スペクトルを計測した。酸化ナトリウム、過酸化ナトリウム、水酸化ナトリウムのラマン散乱光計測結果を図 3.3.2-8、図 3.3.2-9、図 3.3.2-10 に示す。ラマン散乱スペクトルは各分子に特徴的な形状を有し、計測されるスペクトルから反応生成物の同定が可能となる。

ラマン散乱法を用いたナトリウム-酸素反応における生成エアロゾルの同定を行った。試験条件では、表 3.3.2-1 の条件 2 を用いて燃焼場を形成した。対向型ナトリウム反応装置に付属したチャンバー上昇機構を用いて、ナトリウム液面から高さ 4.0mm から 0.5mm 間隔で上昇させて 9.5mm までの各位置におけるラマン散乱光を取得した。ナトリウム-酸素場におけるラマン散乱光計測結果 ($r=0\text{mm}$) を図 3.3.2-11 に示す。589nm 近傍において特徴的なピークが確認された。これはナトリウム特有のナトリウム D 線である。また、540nm

近傍に複数のピークが計測され、本ピークはナトリウムダイマ (Na_2) に起因する蛍光であることが確認された。また、ナトリウム-酸素燃焼では生成されない水酸化ナトリウムのラマン散乱光は、検知されないことが確認された。

酸化ナトリウム、過酸化ナトリウムのラマン散乱光は、540-553nm に位置し、ナトリウムダイマに起因する蛍光と重なりが生じた。ナトリウムダイマに起因する蛍光強度の低減のため、試料皿の外周部分 ($r=15\text{mm}$) におけるナトリウム液面に近傍のラマン散乱の取得を試みた。本計測条件 (条件 3) を表 3.3.2-3 に示す。ナトリウム温度の低減、流速の増加により、反応面を液面近傍に移動した。条件 3 におけるナトリウム計測結果を図 3.3.2-12 に示す。555nm、570nm、616nm 近傍において、条件 2 では確認できなかった信号が確認された。555nm 近傍の信号に関し、バックグラウンドを除去した結果を図 3.3.2-12 (d) の赤線にて示す。ラマン散乱光の基準スペクトルより、555nm の信号は酸化ナトリウムまたは過酸化ナトリウムに起因するものと考えられ、スペクトル形状とスペクトル波長から、過酸化ナトリウムからのラマン散乱光である可能性が高いことが確認された。

(4) 光学物性値測定方法の適用性評価【H30-R1】

エアロゾルの光学物性の計測精度向上を目的として、波長の異なるミー散乱光計測と LII 計測を用いたエアロゾルの粒径の比較、ミー散乱光計測を用いた複素屈折率の計測を行った。

LII 計測には、図 3.3.2-3 (a) の装置を用いた。LII では、信号強度の時間的低下を計測することにより、粒形の評価が可能となるが、LII 信号の低下では、レーザで加熱された粒子の絶対温度もパラメータとなる。昨年度までにレーザー計測試験で得られた LII 信号における波長依存性を整理・分析し、粒子径の絶対値を評価した。具体的には、415nm 及び 653nm の LII 信号を取得し、粒子温度から粒径を求めた。415nm における発光強度比の 2 次元画像を図 3.3.2-13 に示す。時間経過に従いナトリウム皿近傍の LII 強度が増加しており、粒径が大きくなっていることを示している。条件 1 及び 2 における LII を用いた粒径分布計測結果 (各 3 回) を図 3.3.2-14～図 3.3.2-19 に示す。各条件において、ナトリウム皿からの距離 Z における粒度分布、粒子が存在している Z 方向領域 ($r: \pm 5\text{mm}$) のナトリウム皿側 (BOTTOM)、ガス導入側 (TOP)、その中央部 (MIDDLE) の粒径度数分布を求めた。粒径分布として、0.2-1.3 μm が計測されており、酸素濃度 4% では、酸素濃度 2% に比べ、ナトリウム皿近傍にて粒形が大きくなっていることが確認できる。また、ナトリウム液面方向に対し、粒径が大きくなる傾向が観察されている。また、3 回の繰り返し測定結果から、各々の位置における粒径分布について、再現性があることが分かる。

ミー散乱計測では、精度向上のため 500nm 近傍のダイオードレーザを増強して計測を実施した。計測で使用したダイオードレーザ一覧を表 3.3.2-4 に示す。ミー散乱計測では、ミー散乱光強度が、散乱角、粒径、波長、複素屈折率に依存することを利用して、粒径と複素屈折率を算出する。図 3.3.2-20 に散乱角 90° における粒径、複素屈折率とミー散乱光強度の関係 (1.5-0.4i) を示す。粒径の変化に伴い、ミー散乱光強度が顕著な波長依存性を示すことが分かる。計測には、図 3.3.2-3 (c) 及び (d) の装置を用い、生成するエア

ロゾルからのミー散乱光を用いて、エアロゾルの粒径、複素屈折率を評価した。計測したミー散乱光計測画像を図 3.3.2-21 に示す。405nm の散乱光を基準とし、ミー散乱光強度比 $(I/I_{405nm})_{EX}$ とミー散乱理論にて算出した散乱光強度比 $(I/I_{405nm})_{TH}$ との誤差 $\Sigma [(I/I_{405nm})_{EX} - (I/I_{405nm})_{TH}]^2$ を最小とする粒径、複素屈折率を求めた。条件 1 及び 2 におけるミー散乱光強度比とミー散乱理論との比較結果を図 3.3.2-22 に示す。評価対象範囲としては、 $r=10\mu\text{m}$ 、 $Z=2\sim 4\text{mm}$ の領域におけるミー散乱光強度を用いた。また、条件 1 及び 2 において求められた粒径、複素屈折率を表 3.3.2-5 に示す。図 3.3.2-23 は粒径、複素屈折率における誤差分布であり、各計測において、誤差を最小とする粒径、複素屈折率は一意に定まることが確認できる。酸素濃度 2% において、粒径： $1.02\mu\text{m}$ 、複素屈折率： $1.37\sim 0.61i$ 、酸素濃度 4% にて、粒径： $1.02\mu\text{m}$ 、複素屈折率 $1.41\sim 0.57i$ 、で誤差が最小となることが確認できた。同位置における LII 計測値は、酸素濃度 2% において $0.63\mu\text{m}$ 、酸素濃度 4% において $0.82\mu\text{m}$ であり、両計測結果はオーダーとして良い一致を示している。

同領域において、粒径を LII 計測値に固定し、複素屈折率を求めた結果を図 3.3.2-24、図 3.3.2-25 及び表 3.3.2-6 に示す。粒径を固定した場合には、誤差は 10 倍程度となる。酸素濃度 2% において、誤差が最小となる複素屈折率は表 3.3.2-5 と同程度の値を示す。一方、酸素濃度 4% の場合には、異なる複素屈折率にて誤差最小を示すことが確認された。これは、この粒径領域において、450-550nm の波長域で散乱光のピークを有するが、粒径、複素屈折率の組み合わせにて、この領域に散乱ピークを有するケースが生じるためである。精度を向上させるためには、450-550nm の計測点を増やすことが望ましい。

ナトリウム酸素燃焼場におけるミー散乱光計測データの精度確認のため、ラテックス粒子計測を行った。計測には、図 3.3.2-3 (c) 及び (d) の装置を用い、粒径が均一なラテックス粒子を使用して基準となるミー散乱光データを取得した。ラテックス粒子は Magsphere Inc. 製ポリスチレンラテックス標準粒子、粒径 $1\mu\text{m}$ のものを使用した。溶媒に試験用純水を利用してラテックス粒子が 0.001% の溶液を作成した。表 3.3.2-7 にラテックス粒子の仕様を示す。ラテックス粒子溶液を入れた石英セルを対向型ナトリウム反応装置のチャンバー下部から内部に挿入、レーザ光がラテックス粒子の溶液を通過する高さで固定し、レーザ光を入射させてミー散乱光を取得した。実験時には、対向型ナトリウム反応装置のレーザ側及び ICCD カメラ側の 2 ヶ所の窓を付け、ナトリウム酸素燃焼場の計測時と同じ光学系配置とした。ラテックス粒子計測において、入射したレーザに対して直角のミー散乱光の計測を行った。また、試験用純水のみでの計測を行い、溶媒として使用した水からの散乱光強度を差し引いた。

ラテックス粒子計測画像を図 3.3.2-26 に示す。散乱光は、石英セルからほぼ均一に発生しており、ラテックス粒子によるレーザ光の減衰などは生じていないことを確認した。各計測波長におけるラテックス粒子の散乱光強度波長依存性を図 3.3.2-27(a) に、同条件において計算したラテックス粒子からのミー散乱光強度との比較を図 3.3.2-27(b) に示す。実験値とミー散乱理論値は良い一致を示すことが確認できた。本結果では、450nm-500nm、600nm に存在する散乱光のピークが捉えられていない。本散乱光スペクトル形状を確認するため、入射光としてキセノンランプからの連続光を使用し、ラテックス粒子からの散乱

スペクトルを計測した。散乱光の強度を確保するため、散乱角 90° に対して、視野角 10° にて計測を行った（散乱角 $80^\circ \sim 100^\circ$ の散乱光を計測）。計測結果並びにミー散乱理論にて算出した散乱光強度を図 3.3.2-28 に示す。ラテックス粒子には、粒径に $0.044 \mu\text{m}$ の標準偏差を有しており、これらの散乱角、粒径における散乱光を計測している。計測結果では、410-420nm、450-550nm、550-600nm に散乱光のピークが確認できる。散乱角が 90° では、450-500nm、550nm-600nm にピークを有し、散乱角が 90° よりずれると（散乱角 80° 及び 100° 方向）、410-420nm、500-550nm に散乱光のピークを有するようになる。計測結果における 410-420nm、450-550nm、550-600nm に散乱光は、これらの散乱光ピークの重なりとして計測されており、ミー散乱理論に基づく散乱光ピークが確認できている。

以上のように散乱光強度に対する誤差要因として角度依存性を評価した。

(5) 実験と素反応解析との比較【R1】

前述の実験で取得したナトリウム燃焼計測結果との比較検討を行うことを目的にナトリウムと酸素、水蒸気との素反応解析を実施した。反応を伴う 2 次元反応場では、以下の式が成り立つ。

$$\frac{D(\rho Y_k)}{Dt} = \text{div}(\rho D_k \text{grad} Y_k) + S_k \quad (3.3.2-1)$$

$$\frac{D(\rho C_p \bar{T})}{Dt} = \text{div}(\lambda \text{grad} \bar{T}) + F + Q_R \quad (3.3.2-2)$$

ここで、 ρ は密度、 Y_k は化学種 k のモル質量密度、 D_k は化学種 k の拡散係数、 S_k は化学種 k の生成項、 C_p は比熱、 T は温度、 λ は熱伝導率、 F は化学反応に伴う反応熱、 Q_R は輻射熱である。

対向型ナトリウム反応場では、半径方向に流速が存在するため、2 次元反応解析を行う必要がある。本研究では、総括反応を用いた 2 次元解析結果における流速データを活用し、1 次元モデルにて素反応解析を行った。表 3.3.2-8 及び表 3.3.2-9 に用いた素反応モデルを示す。素反応モデルは、「NIST Chemical Kinetics Database on the Web」に掲載されている素反応式他を抽出して使用した[3.3.2-1]。素反応解析における化学種 i の反応生成率 R_i は以下の式で表わされる。

$$R_i = \sum_j (\nu_{ij}'' - \nu_{ij}') r_j \quad (3.3.2-3)$$

ここで、 ν_{ij}' は反応物の化学量論係数、 ν_{ij}'' は生成物の化学量論係数、 r_j は反応 j の反応率である。また、 r_j は以下の式で求められる。

$$r_j = k_j \left[\prod_i (C_i)^{\nu_{ij}'} - K_j^{-1} \prod_i (C_i)^{\nu_{ij}''} \right] \left[C_M \sum_i f_{ij} X_i \right]^{\nu_{Mj}} \quad (3.3.2-4)$$

ここで、 k_j は反応速度定数、 C_i は種のモル濃度、 K_j は平衡定数、 C_M は第三体のモル濃度、 f_{ij} は第三体係数、 ν_{Mj} は 1 か 0 で、第三体反応が生じる場合には 1、第三体反応が生じない場合には 0 となる。

エアロゾルの生成モデルとしては、すす生成モデルが広く研究されている。すす生成モデルでは、芳香族系炭化水素の生成から C_2H_2 との脱水素反応により、多環化してすすへと成長するモデルが提案されている[3.3.2-2]。ナトリウム燃焼によるエアロゾル生成では、このような環状分子の生成は生じないと考えられ、すす生成モデルの応用は難しい。一方、Si の酸化による粒子生成モデルも提案されており、このモデルでは、 SiO_2 のクラスター化により粒子が成長するモデルを採用している[3.3.2-3]。本モデルは、ナトリウム燃焼に伴う酸化ナトリウムの生成、エアロゾルへの成長過程により適合すると考えられ、 NaO_2 のクラスター化により、粒子が成長するモデルを採用した。表 3.3.2-10 に粒子生成反応モデルを示す。また、ナトリウム蒸気圧と温度の関係を図 3.3.2-29 に示す。本試験では、ナトリウム温度を 820K に設定しており、圧力 0.05MPa では Na 濃度は 2.6% となる。条件 1 (酸素濃度 2%) 及び条件 2 (酸素濃度 4%) におけるナトリウム-酸素反応解析結果を図 3.3.2-30 に示す。本解析では、粒子生成反応モデルは組み込んでいない。また、本モデルでは、反応生成物として NaO_2 が生成される機構となる。酸素の増加により、反応域がナトリウムプールに近付くことが確認でき、本結果は実験結果と一致する。また、水蒸気濃度 2% (他の条件は条件 1) におけるナトリウム-水蒸気反応解析結果を図 3.3.2-31 に示す。ナトリウム-水蒸気反応では、酸素反応と比較して反応速度が遅く、反応面がナトリウム液面上方に形成されることが確認でき、本結果は実験結果と一致する[3.3.2-4]。また、ナトリウム-水蒸気反応では、主な生成反応物が $NaOH$ であり、反応場の温度域において粒子生成は生じない。

本反応機構に NaO_2 のクラスター化モデルを組み込み、解析を行った結果を図 3.3.2-32 に示す。計算条件は、条件 2 (酸素濃度 4%) とした。ナトリウム-酸素反応により生成される NaO_2 により、 $(NaO_2)_2$ 、 $(NaO_2)_3$ が生成され、大きな分子が Na プール側に生成されることが確認できる。本結果は、径が大きい粒子が Na プール側に存在する結果と定性的に一致した。

以上から、ナトリウム燃焼の主要な反応経路について、極めて反応速度が速く、Na 酸化物が生成する酸化反応が支配的であることが考えられる。

【参考文献】

- [3.3.2-1] NIST Chemical Kinetics Database <https://kinetics.nist.gov>.
- [3.3.2-2] M. Frenklach, Reaction mechanism of soot formation in flames, Phys. Chem. Chem. Phys., 4, pp.2028-2037 (2002).
- [3.3.2-3] S.-M. Suh, M. R. Zachariah and S. L. Girshick, Modeling particle formation during low-pressure silane oxidation: Detailed chemical kinetics and aerosol dynamics, J. Vac. Sci. Technol. A, Vol. 19, No. 3, pp.940-951 (2001).
- [3.3.2-4] Y. Deguchi, R. Muranaka, T. Kamimoto, T. Takagi, S. Kikuchi, A. Kurihara, Reaction path and product analysis of sodium-water chemical reactions using laser diagnostics, Applied Thermal Engineering, Volume 114, 5 pp.1319-1324 (2017).

表 3.3.2-1 試験条件

番号	対象（測定場所）	条件 1	条件 2
1	ナトリウム試料重量(g)	1.7	←
2	液体ナトリウム温度(K) [T1]	820-690	820
3	ガス加熱ユニット(K) [T7]	使用せず	←
4	アルゴン+水蒸気加熱ヒータ設定温度(K) [T2]	使用せず	←
5	アルゴンガードフロー設定温度(K) [T3]	873	←
6	ナトリウム皿周囲のアルゴン流量 (l/min) [L1、T6]	1.3	←
7	アルゴン+酸素流量(l/min) [L2、L3、T4、T7]	0.26	←
8	アルゴンガードフロー流量(l/min) [L4、L5]	8.0	←
9	酸素濃度 (vol%) (酸素導入時は水蒸気濃度 0 vol%) [H1]	0、2、4	2、4
10	水蒸気濃度 (vol%) (水蒸気導入時は酸素濃度 0 vol%) [H1]	0、2	0
11	圧力(MPa)	0.05- 0.042	0.05

表 3.3.2-2 ラマン散乱法で用いたレーザ装置

	波長	色	最大出力
1	450nm	青紫	(光軸確認用)
1	450nm	緑	11W

表 3.3.2-3 r=15mm のラマン散乱光計測試験条件

番号	対象（測定場所）	条件 2	条件 3
-	レーザ強度(W)	1	2
2	液体ナトリウム温度(K) [T1]	820	710
4	アルゴン+酸素（水蒸気）加熱ヒータ設定温度(K) [T2]	873	578
5	アルゴンガードフロー設定温度(K) [T3]	873	578
7	アルゴン+酸素流量(l/min) [L2、L3、T4、T7]	0.26	0.5
12	圧力(MPa)	0.05	0.009

表 3.3.2-4 ミー散乱計測で使用したダイオードレーザー一覧

	波長	色	最大出力
1	405nm	青紫	250mW
2	450nm	青紫	500mW
3	520nm	緑	700mW
4	532nm	緑	150mW
5	650nm	赤	250mW
4	638nm	赤	250mW
5	785nm	赤	5W

表 3.3.2-5 計測値と理論値との誤差を最小とする粒径、複素屈折率

項目	試験	粒径 (μm)	複素屈折率
条件 1、酸素濃度 2%	No. 1	1.01	1.37-0.6i
	No. 2	1.04	1.31-0.55i
	No. 3	0.99	1.42-0.7i
	平均	1.02	1.37-0.61i
条件 2、酸素濃度 4%	No. 1	1.01	1.52-0.64i
	No. 2	1.03	1.41-0.49i
	No. 3	1.03	1.31-0.58i
	平均	1.02	1.41-0.57i

表 3.3.2-6 粒径として LII 計測値を使用した場合の複素屈折率

項目	試験	粒径 (μm)	複素屈折率
条件 1、酸素濃度 2%	No. 1	0.63	1.28-0.69i
	No. 2	0.63	1.29-0.69i
	No. 3	0.63	1.28-0.70i
	平均	0.63	1.28-0.69i
条件 2、酸素濃度 4%	No. 1	0.82	1.53-0.17i
	No. 2	0.82	1.52-0.17i
	No. 3	0.82	1.52-0.17i
	平均	0.82	1.52-0.17i

表 3. 3. 2-7 ラテックス粒子の仕様

項目	仕様
粒径 (μm)	1. 0
標準偏差 (μm)	0. 044
屈折率	1. 5905
ポリマー密度 (g/ml)	1. 05
固形分 (%)	10
試験溶液濃度 (%)	0. 001

表 3. 3. 2-8 ナトリウム-水反応モデル

H₂-O₂系：既存データベースを活用

1)	H+O ₂	→	O+OH
2)	H ₂ +O	→	H+OH
3)	H ₂ O+O	→	OH +OH
4)	H ₂ O+H	→	H ₂ +OH
5)	H ₂ O ₂ +OH	→	H ₂ O+HO ₂
6)	H ₂ O+M	→	H+OH
7)	H +O ₂ +M	→	HO ₂
8)	HO ₂ +O	→	OH+O ₂
9)	HO ₂ +H	→	OH+OH
10)	HO ₂ +H	→	H ₂ +O ₂
11)	HO ₂ +OH	→	H ₂ O+O ₂
12)	H ₂ O ₂ +O ₂	→	HO ₂ +HO ₂
13)	H ₂ O ₂ +M	→	OH+OH
14)	H ₂ O ₂ +H	→	HO ₂ +H ₂
15)	O+H+M	→	OH
16)	O ₂ +M	→	O+O
17)	H ₂ +M	→	H+H
18)	H ₂ O ₂ +O	→	OH+HO ₂

Na-H₂O：文献ベースの反応系を統合

18)	NaO+O	→	Na+O ₂
19)	NaH+H	→	H ₂ + Na
20)	Na+O ₂	→	NaO ₂
21)	Na+H ₂ O	→	NaOH+H
22)	OH+Na	→	NaOH
23)	H ₂ O+NaO	→	NaOH+OH
24)	NaOH+H	→	H ₂ +NaO
25)	NaO ₂ +O	→	O ₂ +NaO

表 3. 3. 2-9 ナトリウム-酸素反応モデル

1)	$O_2 + M$	$\rightarrow$	$O + O$
2)	$NaO + O$	$\rightarrow$	$Na + O_2$
3)	$Na + O_2$	$\rightarrow$	NaO_2
4)	$NaO_2 + O$	$\rightarrow$	$O_2 + NaO$

表 3. 3. 2-10 粒子生成反応モデル

1)	$NaO_2 + NaO_2$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_2$
2)	$NaO_2 + (NaO_2)_2$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_3$
3)	$NaO_2 + (NaO_2)_3$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_4$
4)	$NaO_2 + (NaO_2)_4$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_5$
5)	$NaO_2 + (NaO_2)_5$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_6$
6)	$NaO_2 + (NaO_2)_6$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_7$
7)	$NaO_2 + (NaO_2)_7$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_8$
8)	$NaO_2 + (NaO_2)_8$	$\rightarrow$	$(NaO_2)_9$
9)	$NaO_2 + (NaO_2)_9$	$\rightarrow$	Particle

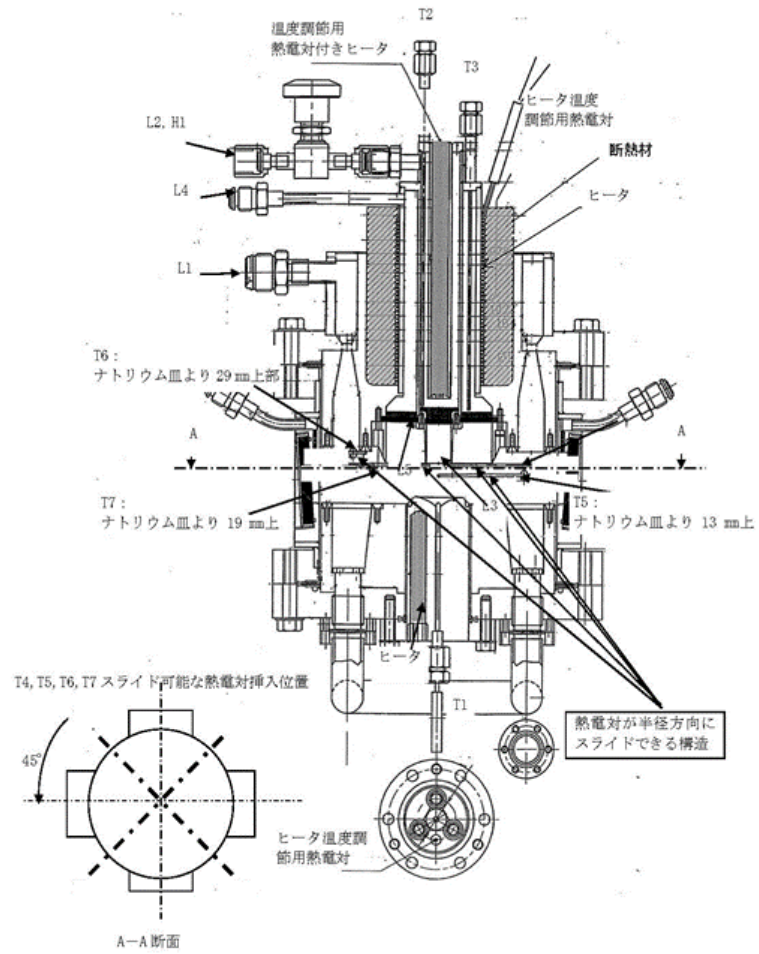


図3.3.2-1 対向型ナトリウム反応装置

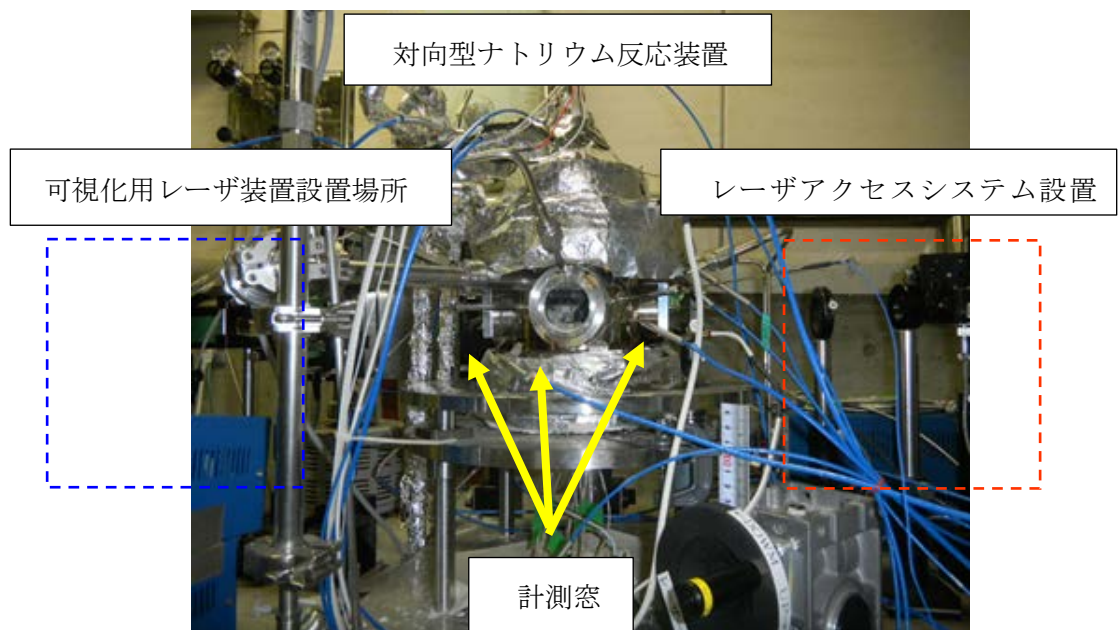
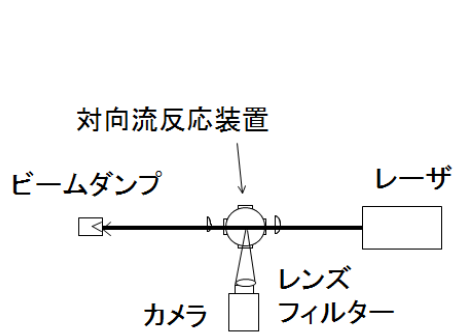
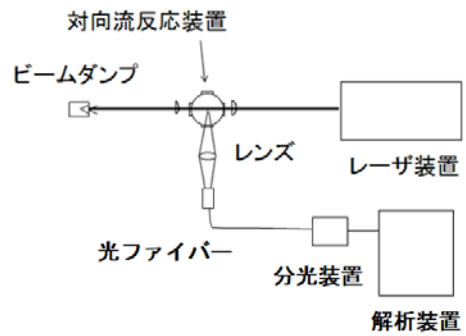


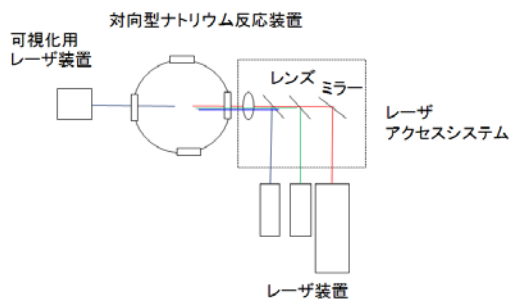
図 3.3.2-2 レーザ計測装置配置



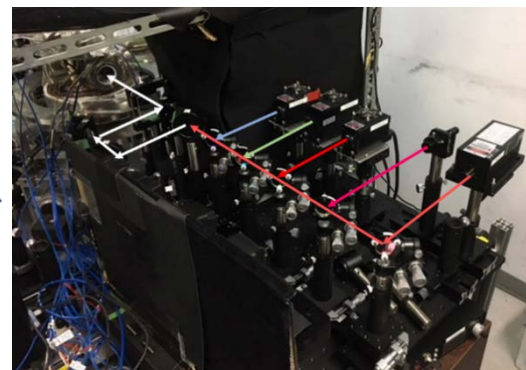
(a) 可視化、ミー散乱法、LII



(b) ラマン散乱法

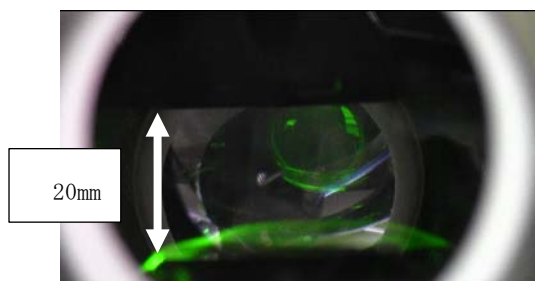


(c) 多波長ミー散乱法

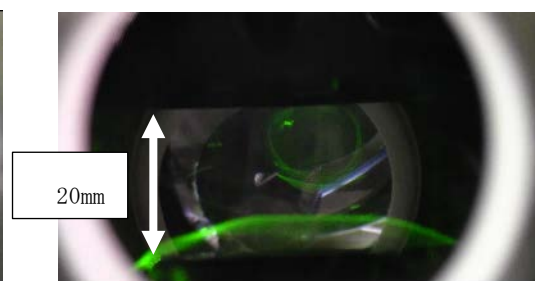


(d) 多波長ミー散乱法用レーザ及び合波ユニット

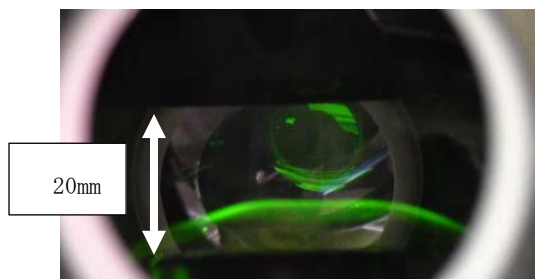
図 3. 3. 2-3 レーザ計測光学系



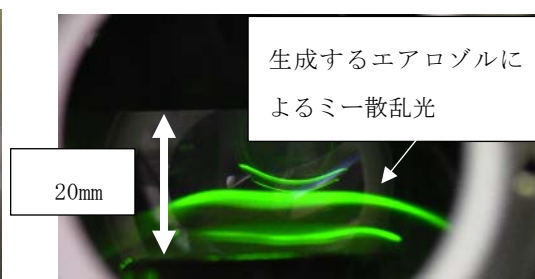
(a) 690K



(b) 720K



(c) 770K



(d) 820K

図 3. 3. 2-4 可視化計測結果（ナトリウム温度の影響、酸素濃度：2%）

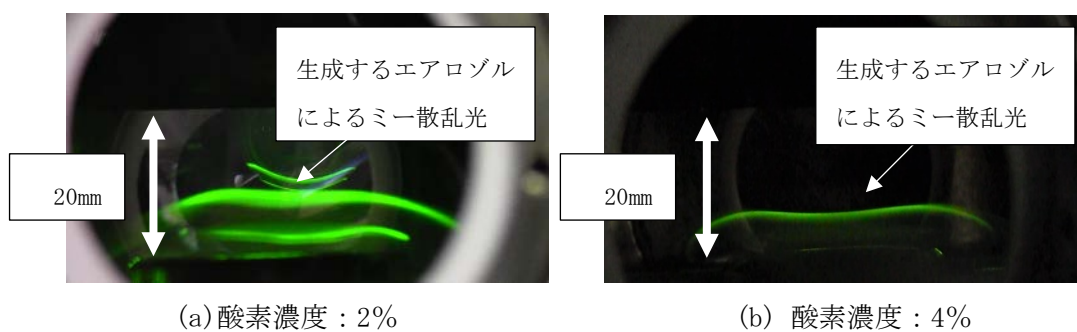


図 3.3.2-5 可視化計測結果（酸素濃度の影響、ナトリウム温度：820K）

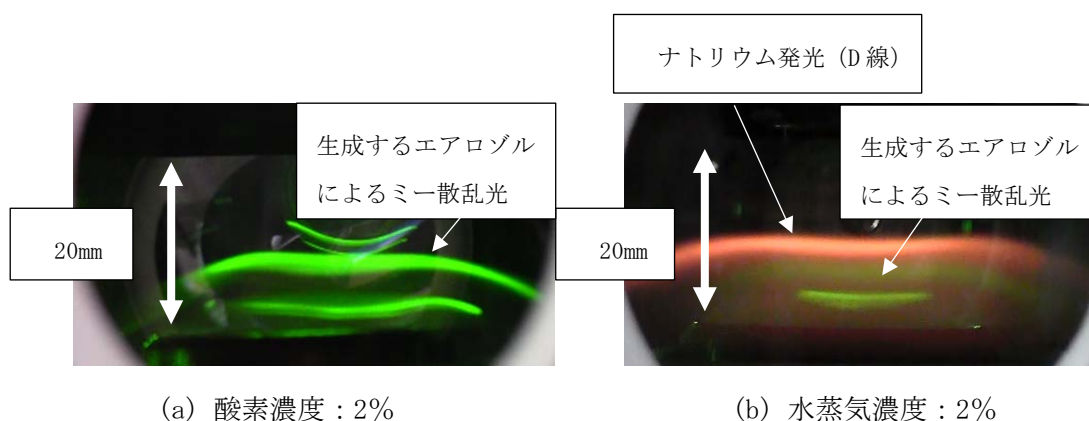


図 3.3.2-6 酸化剤の違いによる燃焼形態変化（ナトリウム温度：820K）

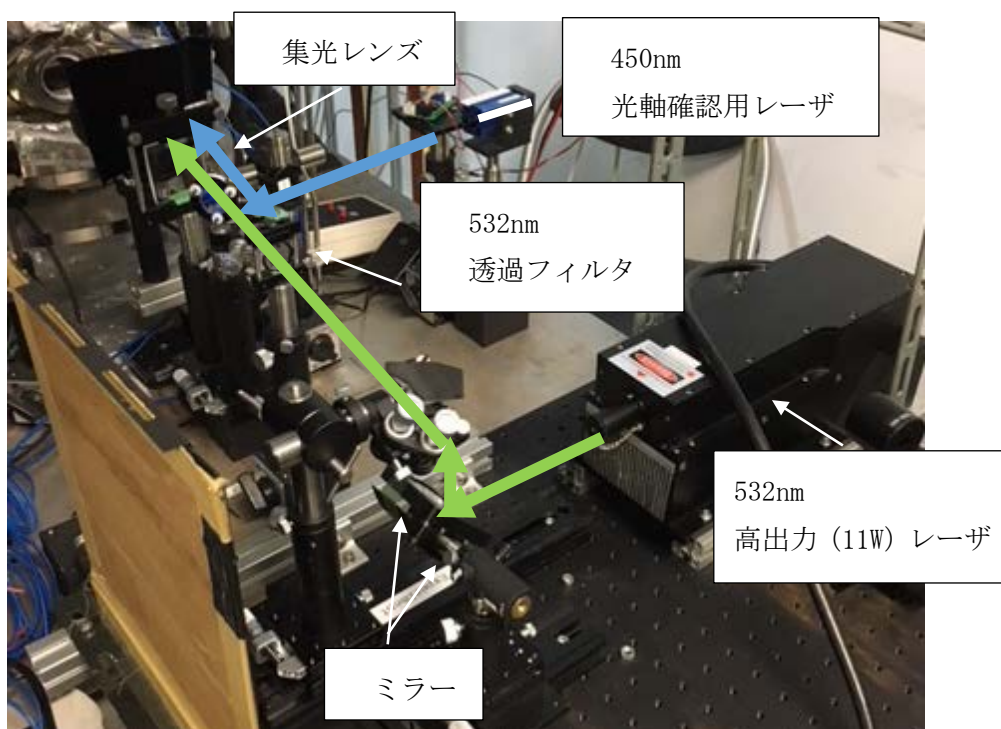
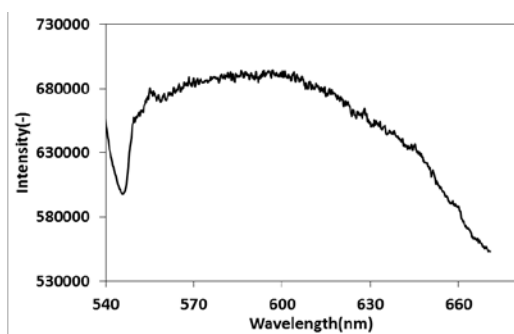
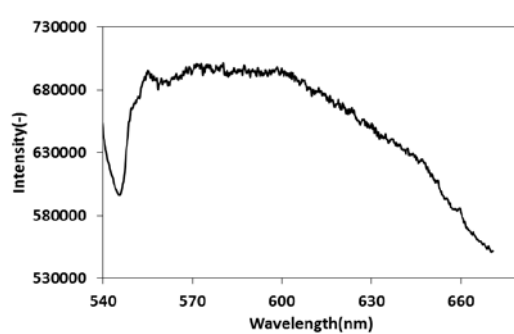


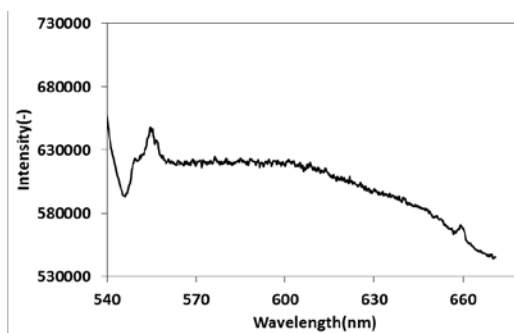
図 3.3.2-7 ラマン散乱法で用いた光学系写真



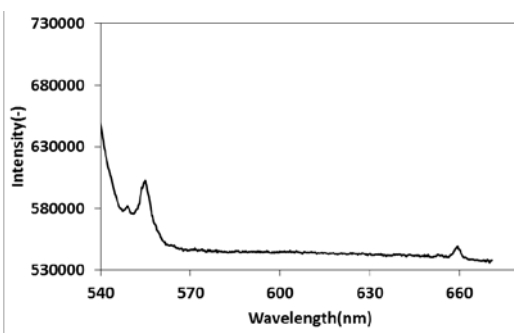
(a) 298K



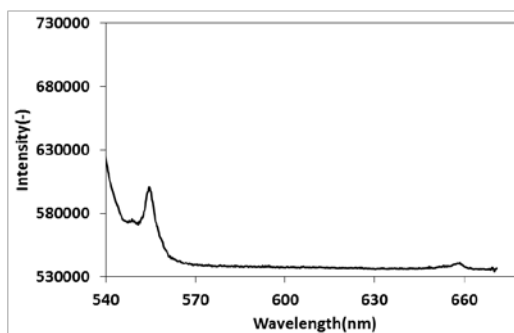
(b) 386K



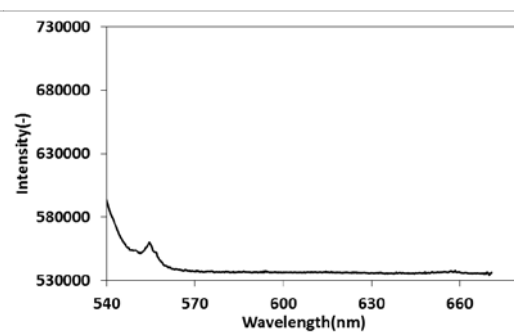
(c) 481K



(d) 580K

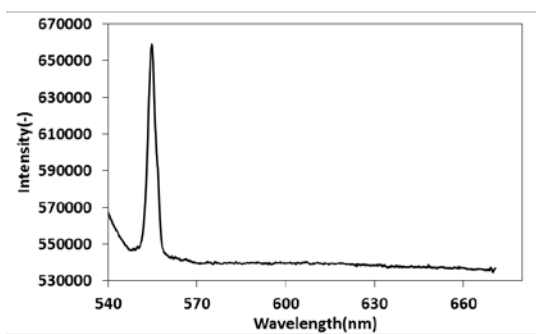


(e) 677K

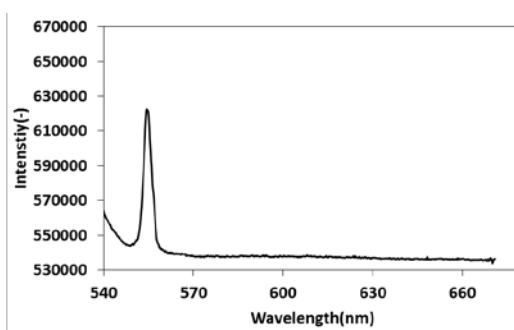


(f) 777K

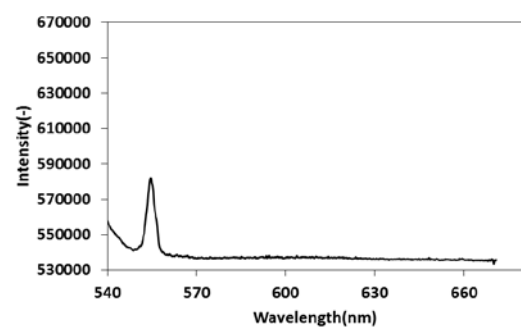
図 3.3.2-8 酸化ナトリウムのラマンスペクトル



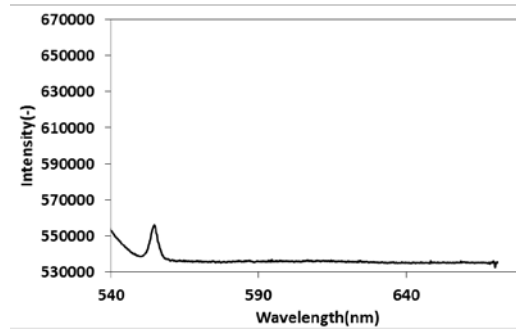
(a) 298K



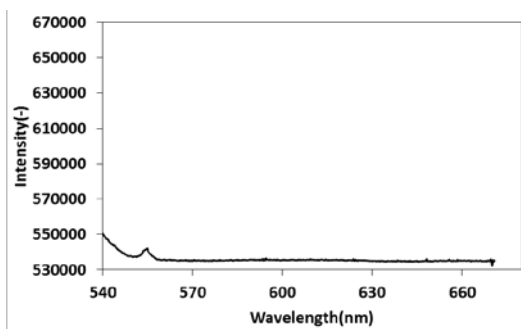
(b) 384K



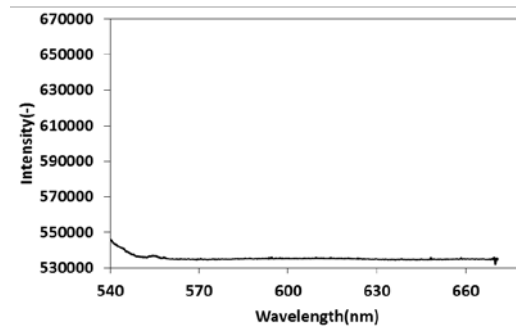
(c) 482K



(d) 582K

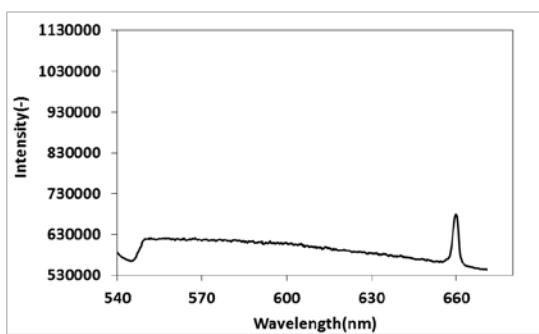


(e) 677K

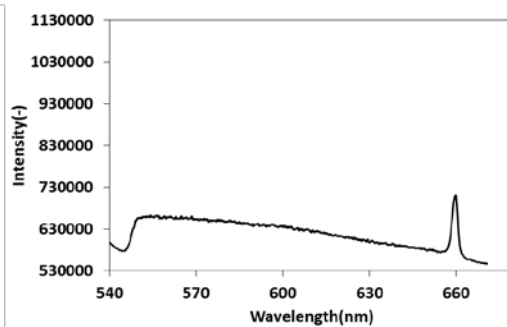


(f) 772K

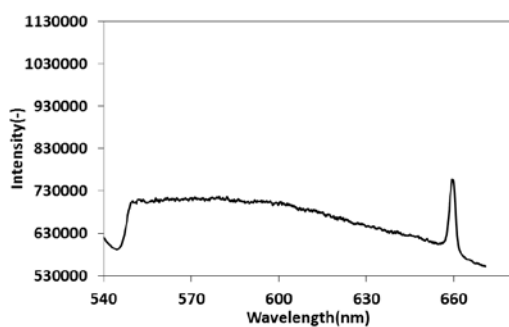
図 3.3.2-9 過酸化ナトリウムのラマンスペクトル



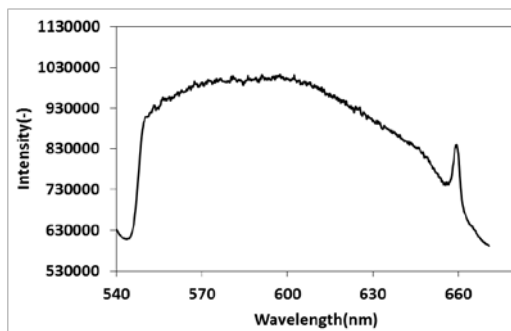
(a) 298K



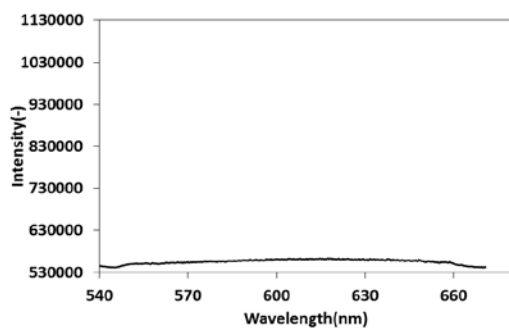
(b) 383 K



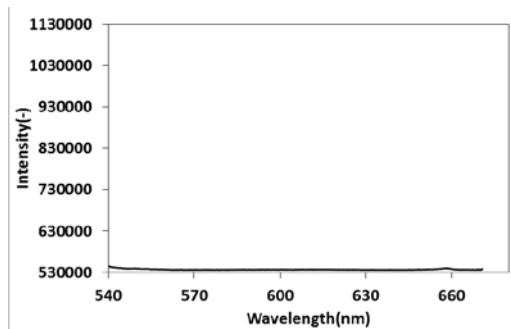
(c) 480K



(d) 583K



(e) 676K



(f) 779K

図 3. 3. 2-10 水酸化ナトリウムのラマンスペクトル

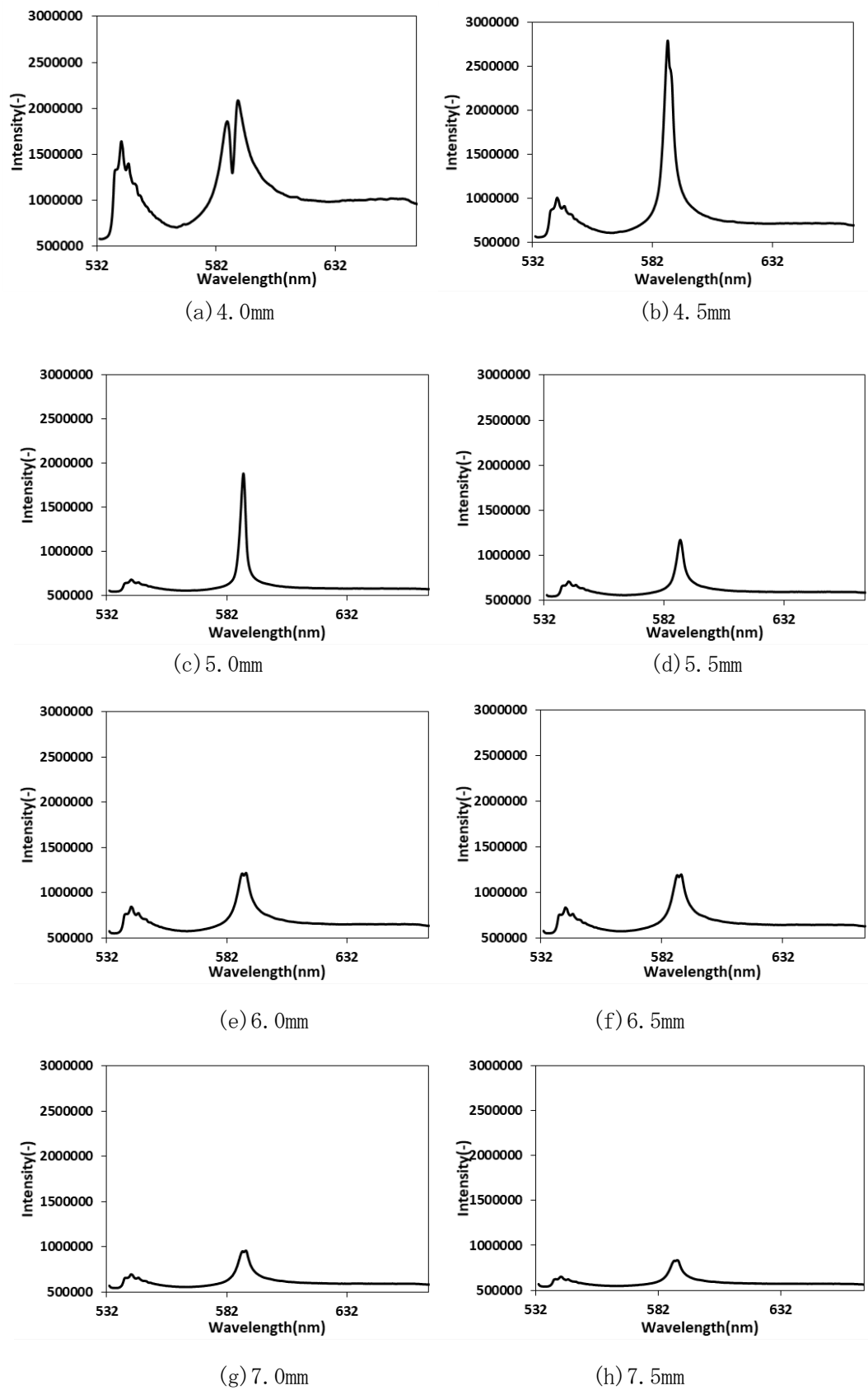
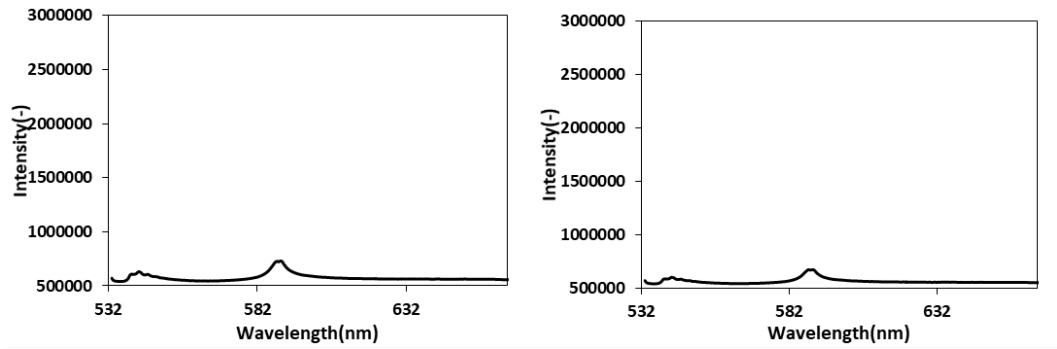
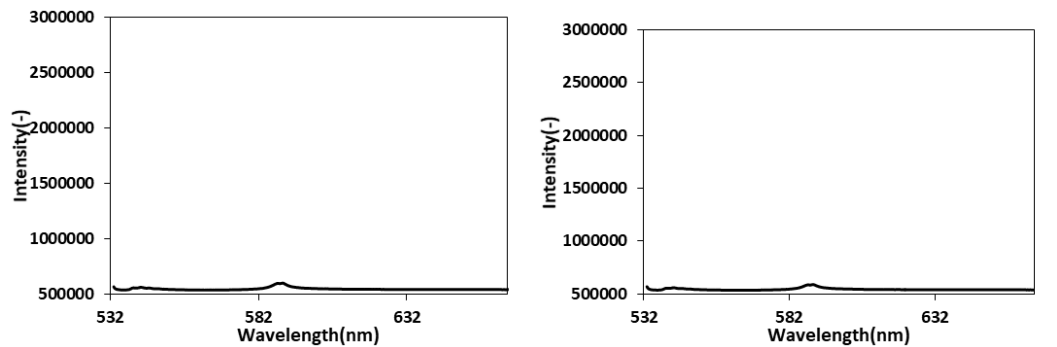


図 3. 3. 2-11(1/2) ナトリウム-酸素燃焼におけるラマン散乱光 (r=0mm)



(i) 8.0mm

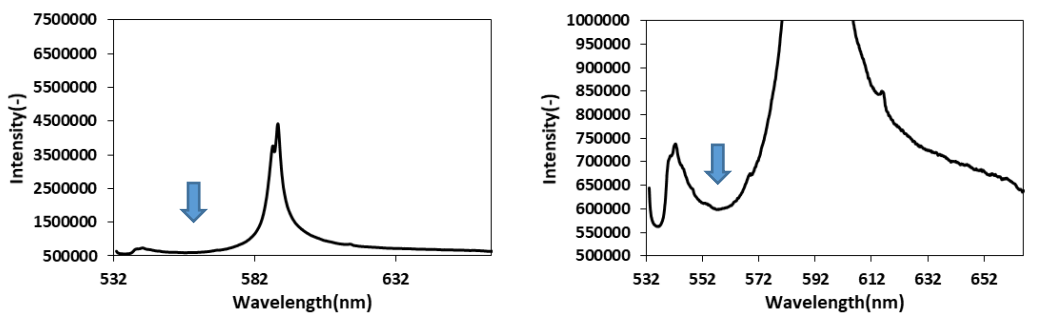
(j) 8.5mm



(k) 9.0mm

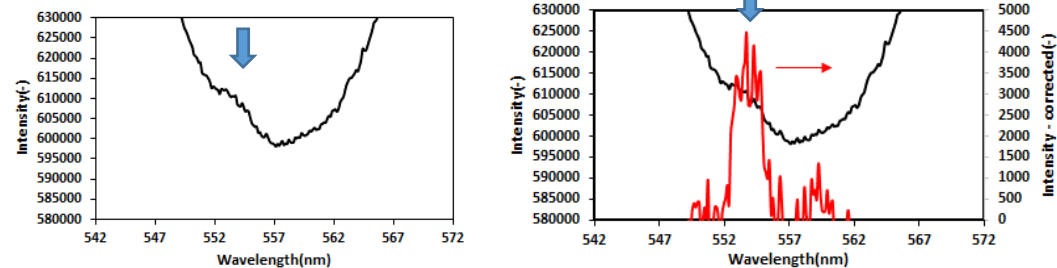
(l) 9.5mm

図 3.3.2-11 (2/2) ナトリウム-酸素燃焼におけるラマン散乱光 ($r=0\text{mm}$)



(a) 532-660nm

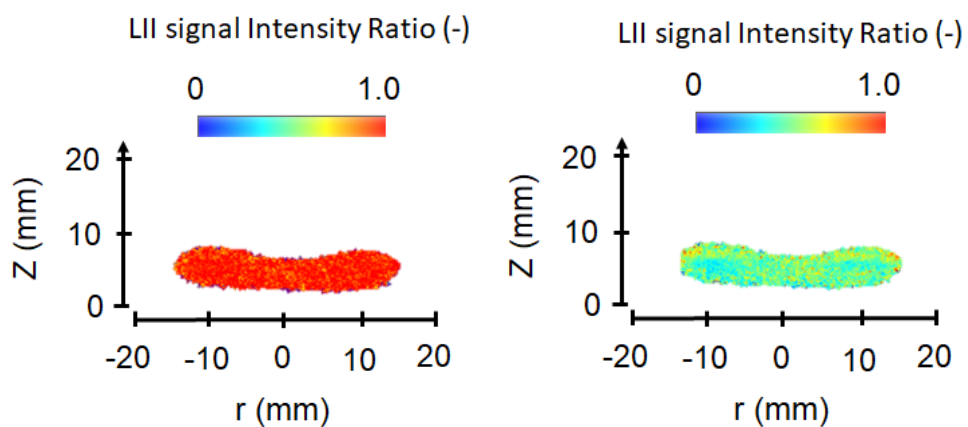
(b) 532-660nm (拡大)



(c) 542-572nm

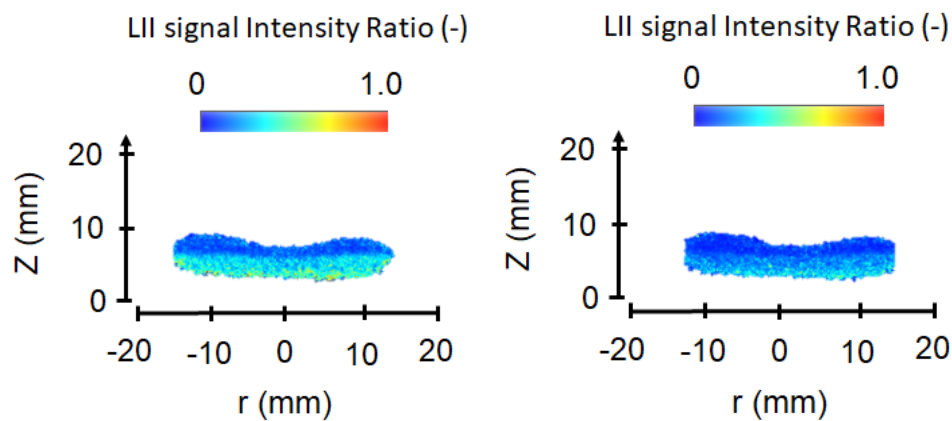
(d) 542-572nm (バックグラウンド除去)

図 3.3.2-12 条件 3 におけるラマン散乱光計測結果



(a) LII 光強度分布 (delay: $2 \mu s$)

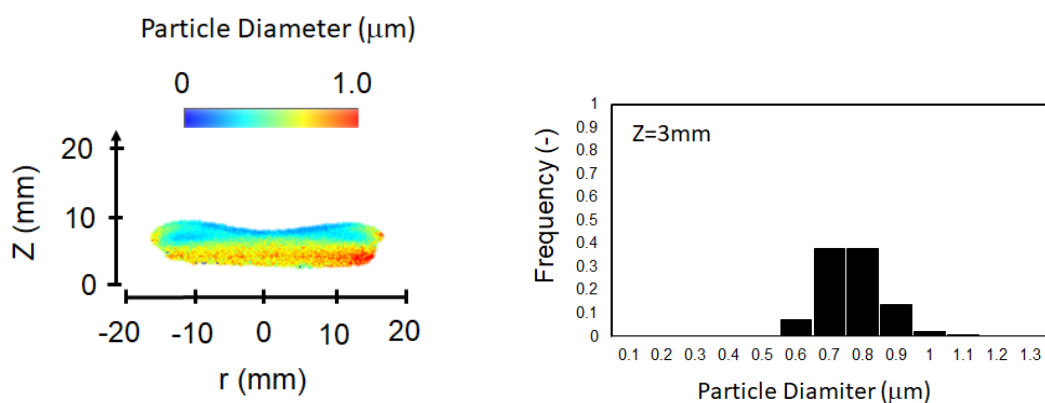
(b) LII 光強度分布 (delay: $4 \mu s$)



(c) LII 光強度分布 (delay: $8 \mu s$)

(d) LII 光強度分布 (delay: $10 \mu s$)

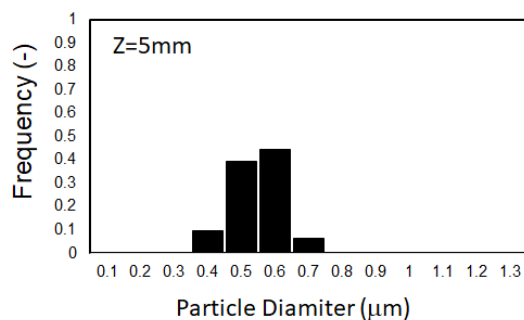
図 3.3.2-13 415nm における発光強度比の 2 次元画像 (条件 1)



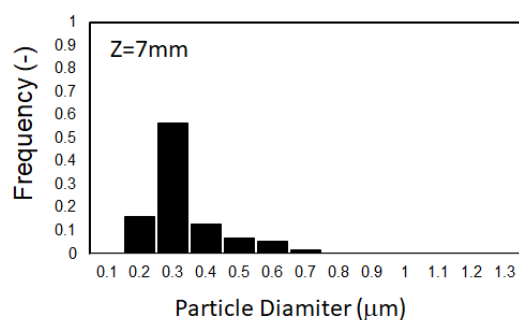
(a) 粒径分布

(b) Z=3mm 粒径度数分布 (r: 全域)

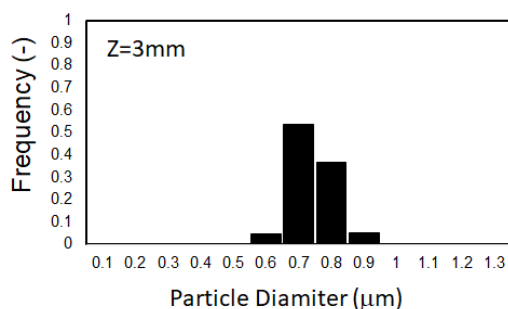
図 3.3.2-14(1/2) LII 計測結果 (条件 1、酸素濃度 2%-No. 1)



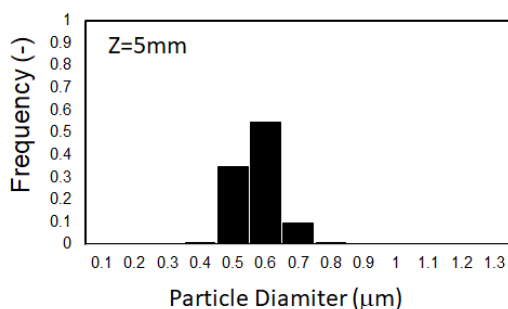
(c) Z=5mm 粒径度数分布 (r : 全域)



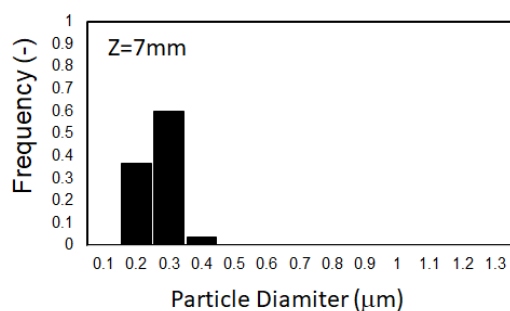
(d) Z=7mm 粒径度数分布 (r : 全域)



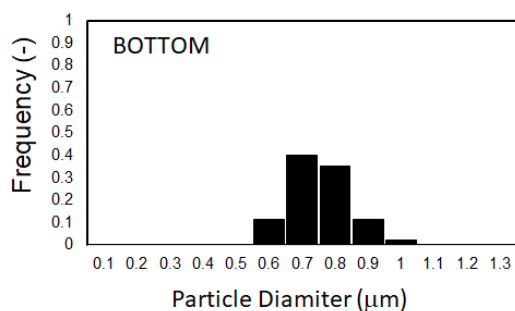
(e) Z=3mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



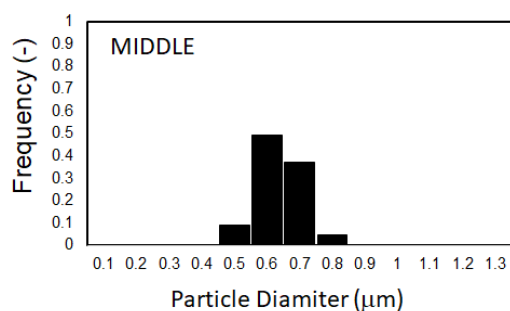
(f) Z=5mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



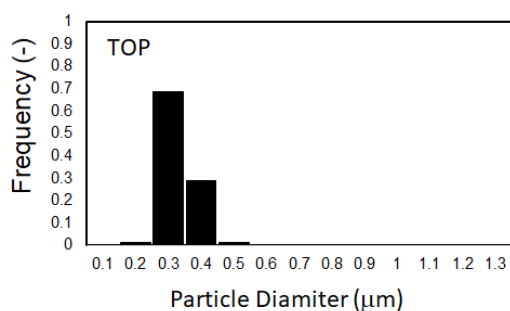
(g) Z=7mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



(j) BOTTOM 粒径度数分布 (r : ±5mm)

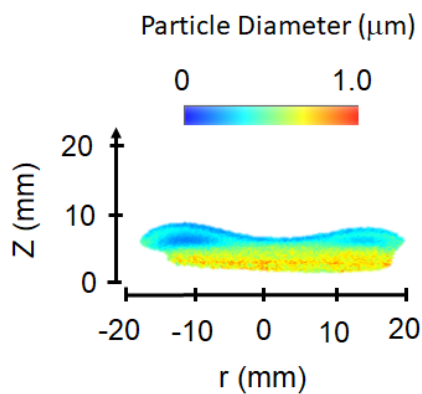


(i) MIDDLE 粒径度数分布 (r : ±5mm)

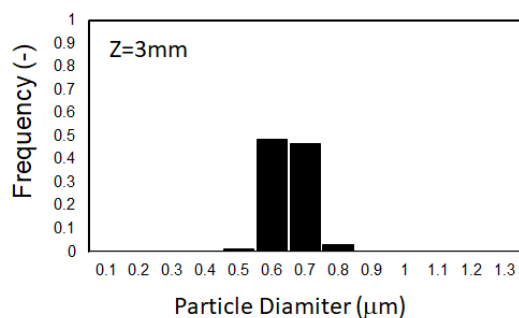


(k) TOP 粒径度数分布 (r : ±5mm)

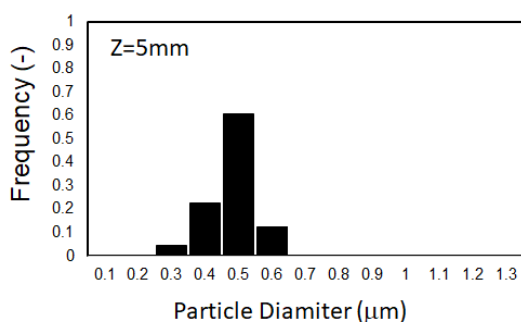
図 3.3.2-14(2/2) LII 計測結果 (条件 1、酸素濃度 2%-No. 1)



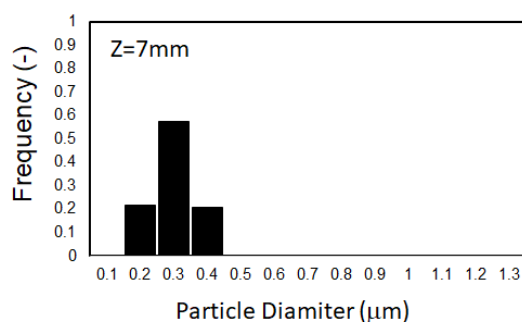
(a) 粒径分布



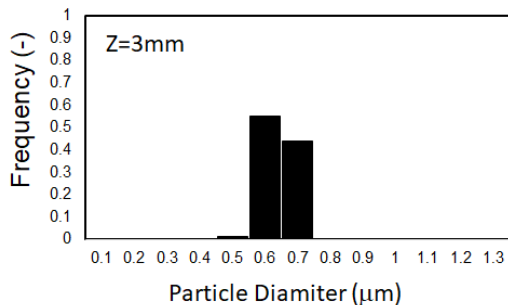
(b) Z=3mm 粒径度数分布 (r: 全域)



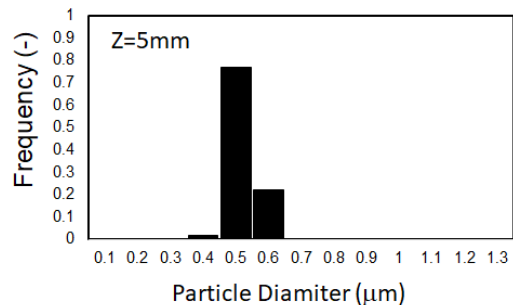
(c) Z=5mm 粒径度数分布 (r: 全域)



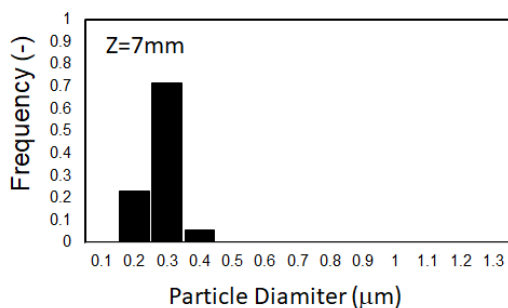
(d) Z=7mm 粒径度数分布 (r: 全域)



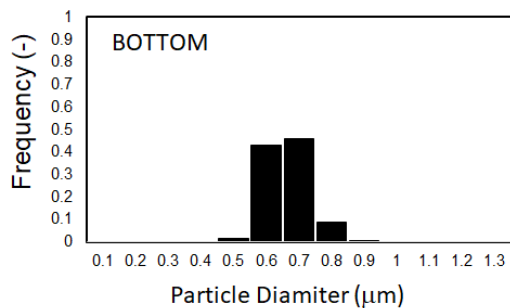
(e) Z=3mm 粒径度数分布 (r: ±5mm)



(f) Z=5mm 粒径度数分布 (r: ±5mm)

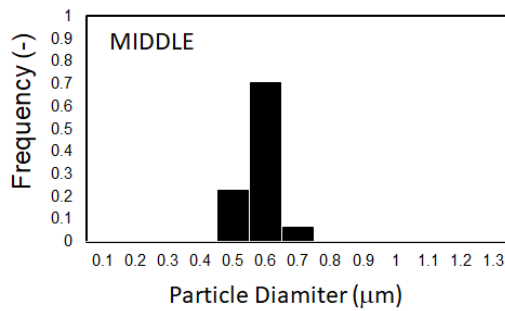


(g) Z=7mm 粒径度数分布 (r: ±5mm)

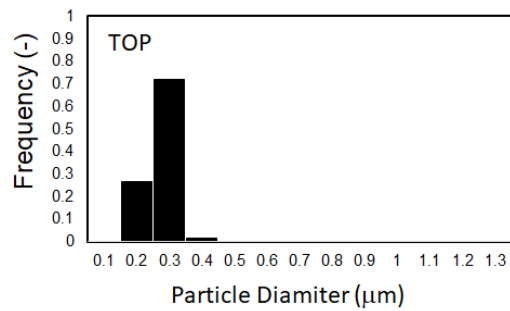


(j) BOTTOM 粒径度数分布 (r: ±5mm)

図 3. 3. 2-15(1/2) LII 計測結果 (条件 1、酸素濃度 2%-No. 2)

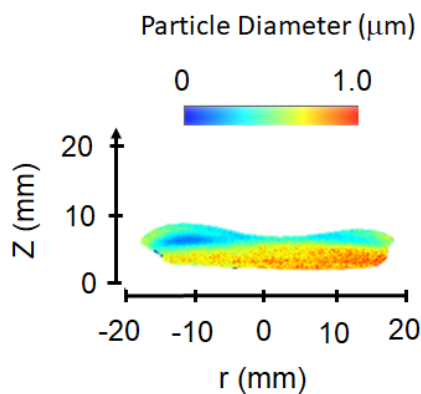


(i) MIDDLE 粒径度数分布 (r : ±5mm)

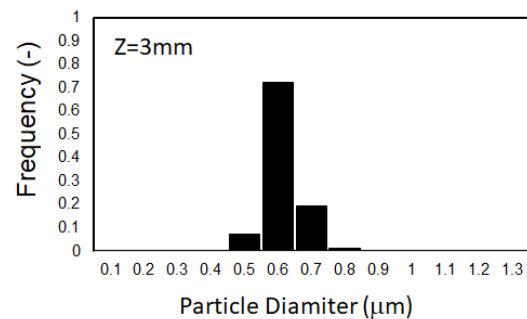


(k) TOP 粒径度数分布 (r : ±5mm)

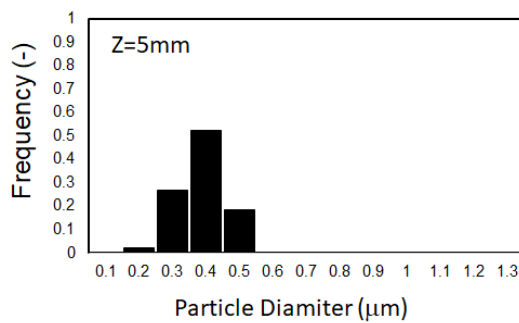
図 3. 3. 2-15 (2/2) LII 計測結果 (条件 1、酸素濃度 2%-No. 2)



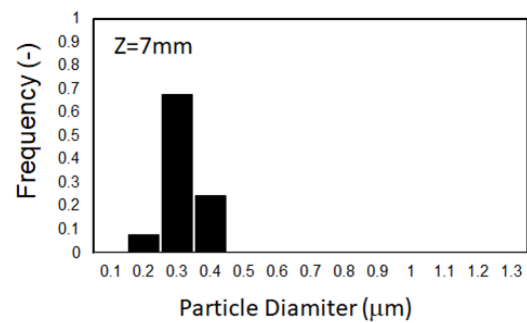
(a) 粒径分布



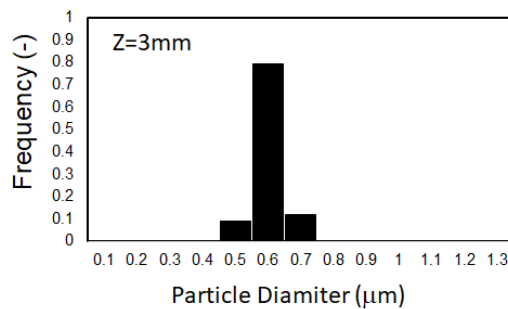
(b) Z=3mm 粒径度数分布 (r : 全域)



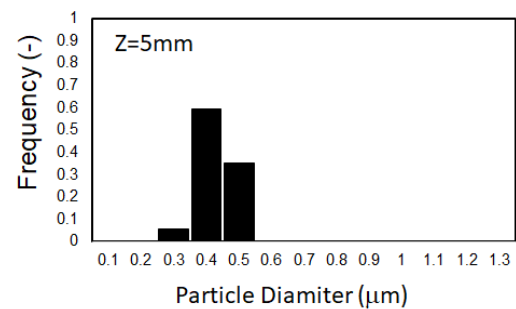
(c) Z=5mm 粒径度数分布 (r : 全域)



(d) Z=7mm 粒径度数分布 (r : 全域)

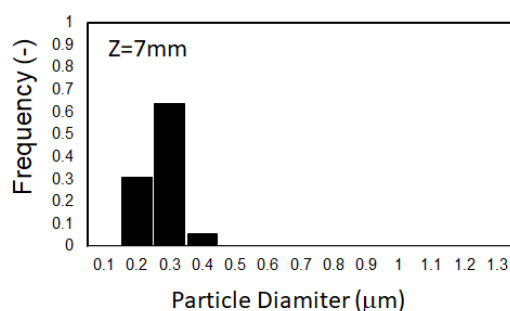


(e) Z=3mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)

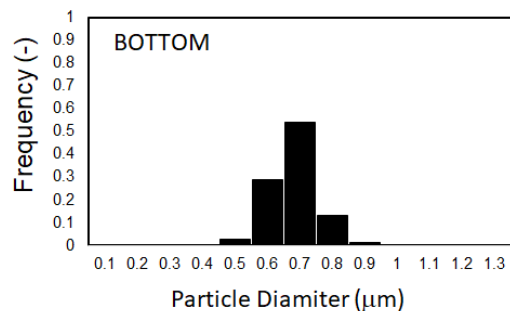


(f) Z=5mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)

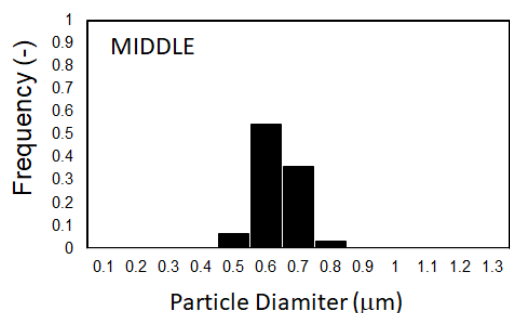
図 3. 3. 2-16 (1/2) LII 計測結果 (条件 1、酸素濃度 2%-No. 3)



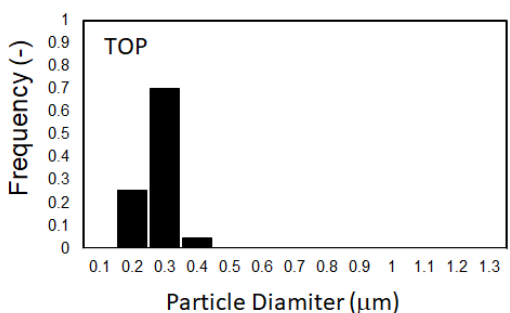
(g) Z=7mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



(j) BOTTOM 粒径度数分布 (r : ±5mm)

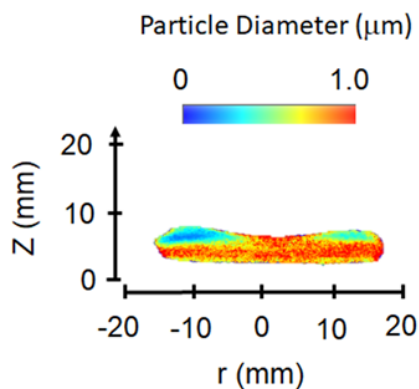


(i) MIDDLE 粒径度数分布 (r : ±5mm)

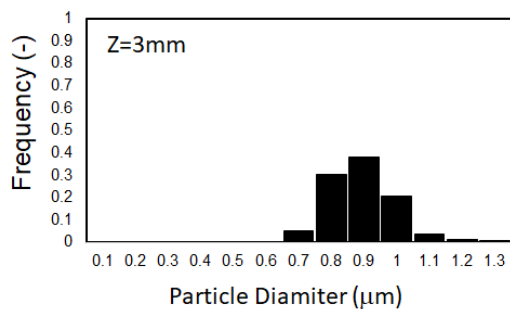


(k) TOP 粒径度数分布 (r : ±5mm)

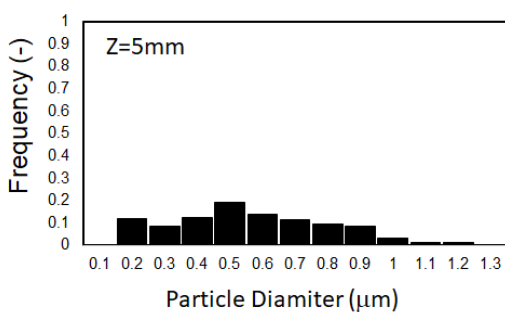
図 3. 3. 2-16 (2/2) LII 計測結果 (条件 1、酸素濃度 2%-No. 3)



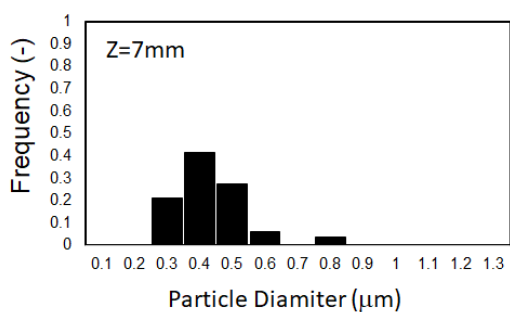
(a) 粒径分布



(b) Z=3mm 粒径度数分布 (r : 全域)

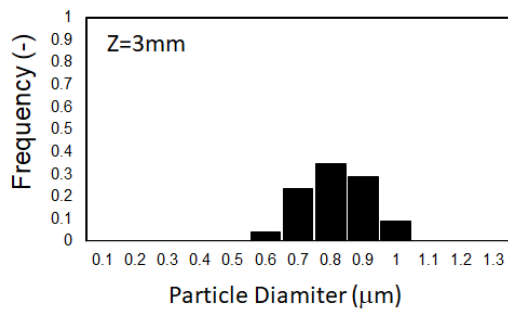


(c) Z=5mm 粒径度数分布 (r : 全域)

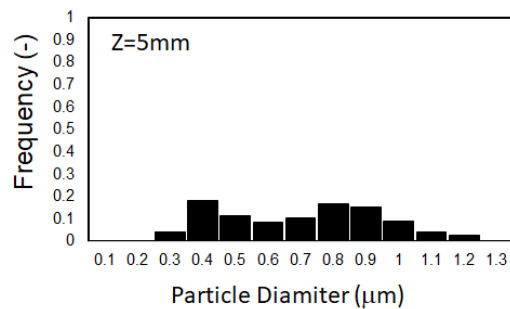


(d) Z=7mm 粒径度数分布 (r : 全域)

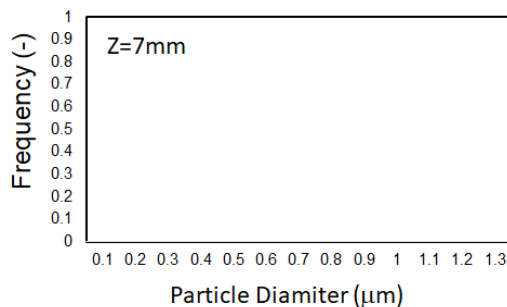
図 3. 3. 2-17 (1/2) LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No. 1)



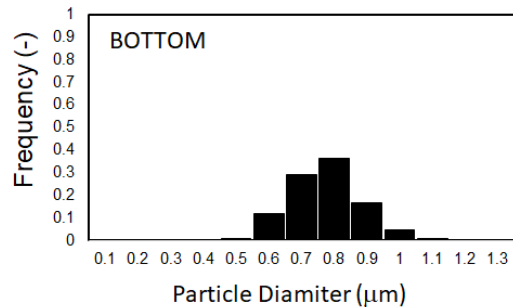
(e) Z=3mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



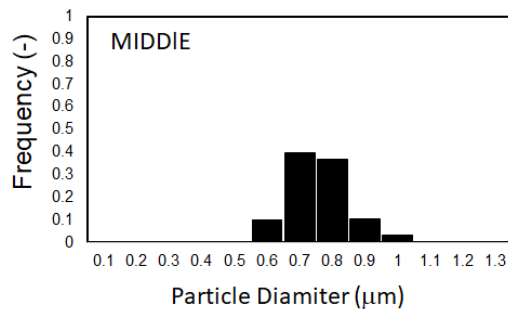
(f) Z=5mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



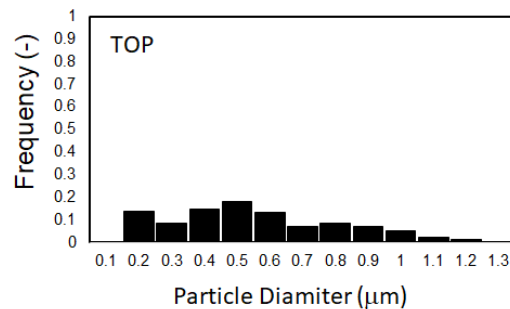
(g) Z=7mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



(j) BOTTOM 粒径度数分布 (r : ±5mm)

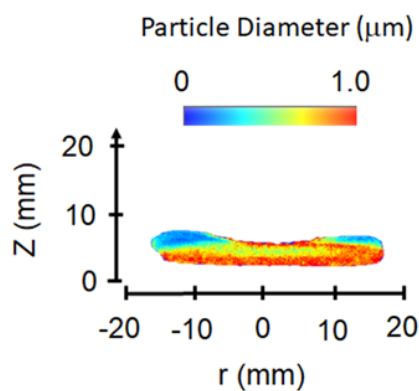


(i) MIDDLE 粒径度数分布 (r : ±5mm)

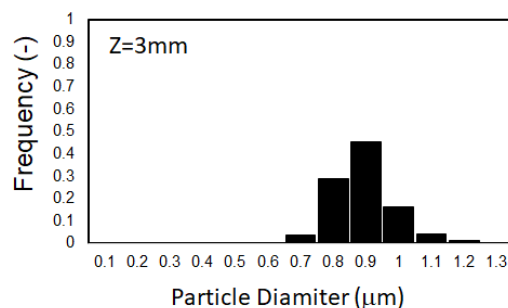


(k) TOP 粒径度数分布 (r : ±5mm)

図 3. 3. 2-17 (2/2) LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No. 1)

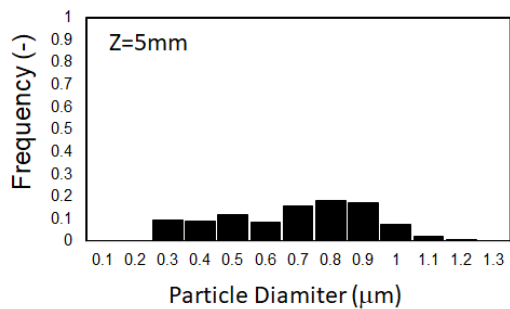


(a) 粒径分布

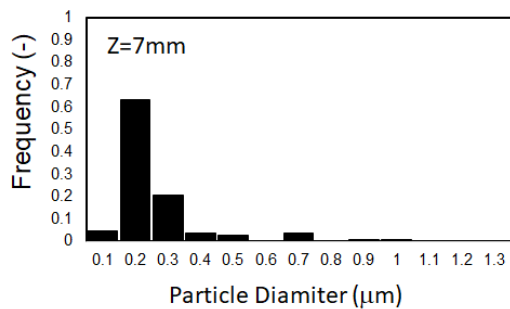


(b) Z=3mm 粒径度数分布 (r : 全域)

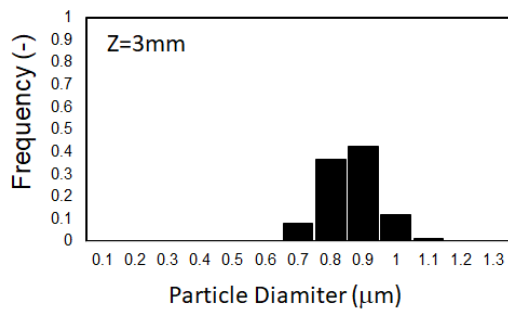
図 3. 3. 2-18 (1/2) LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No. 2)



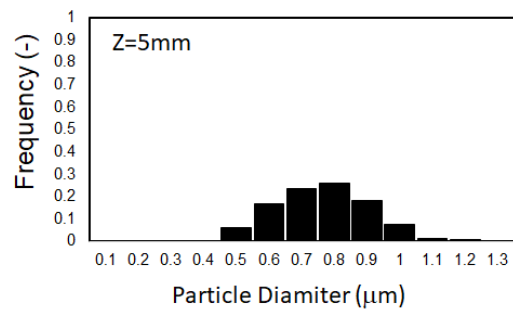
(c) Z=5mm 粒径度数分布 (r : 全域)



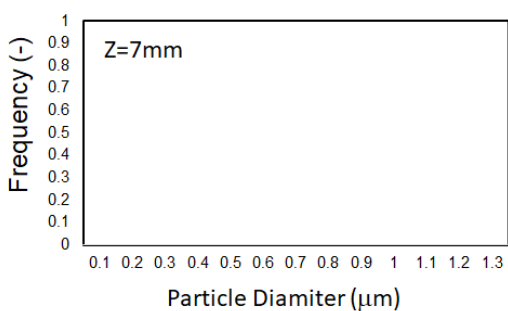
(d) Z=7mm 粒径度数分布 (r : 全域)



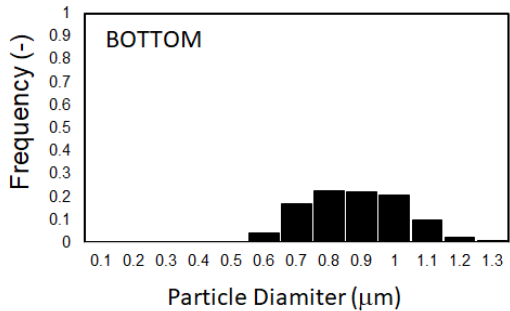
(e) Z=3mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



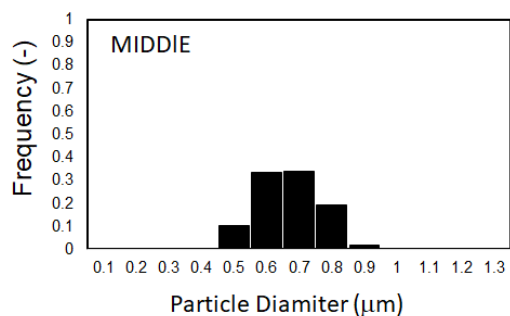
(f) Z=5mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



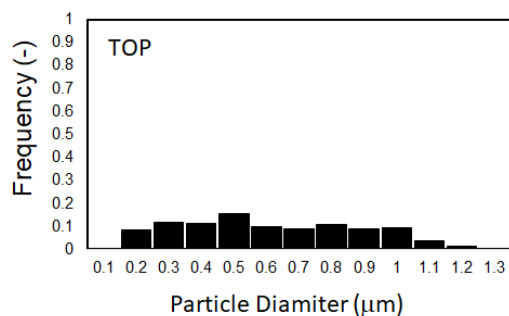
(g) Z=7mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



(j) BOTTOM 粒径度数分布 (r : ±5mm)

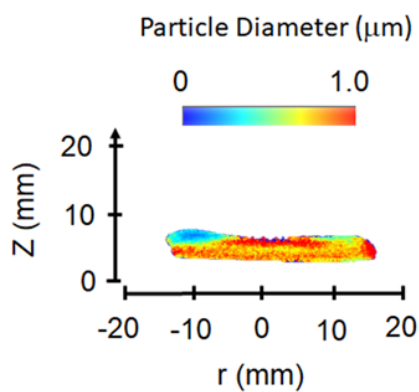


(i) MIDDLE 粒径度数分布 (r : ±5mm)

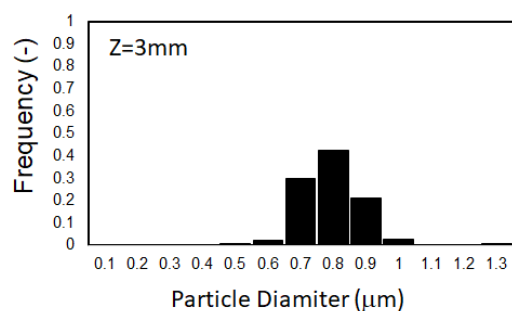


(k) TOP 粒径度数分布 (r : ±5mm)

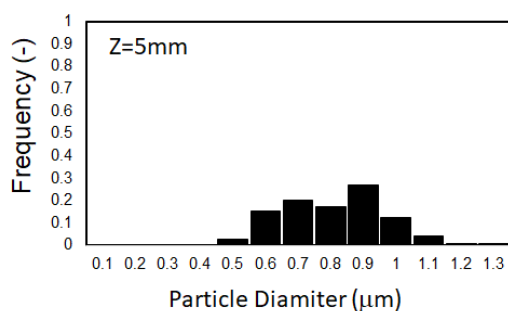
図 3.3.2-18(2/2) LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No. 2)



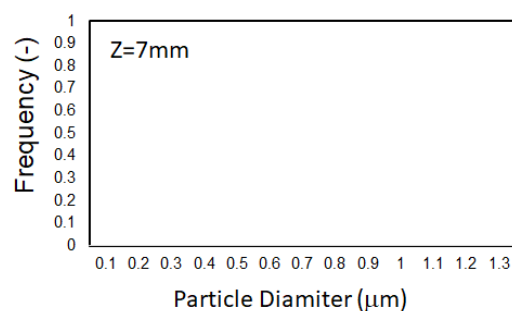
(a) 粒径分布



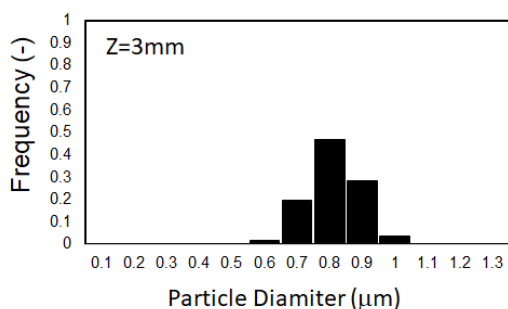
(b) Z=3mm 粒径度数分布 (r : 全域)



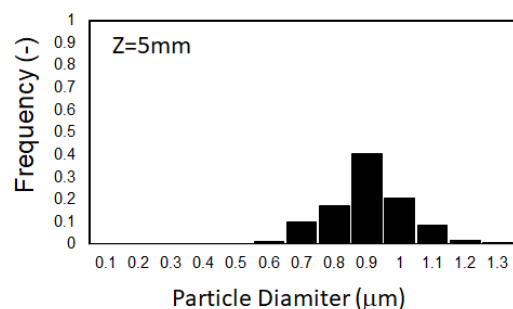
(c) Z=5mm 粒径度数分布 (r : 全域)



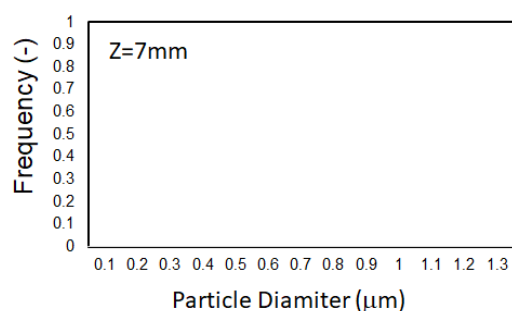
(d) Z=7mm 粒径度数分布 (r : 全域)



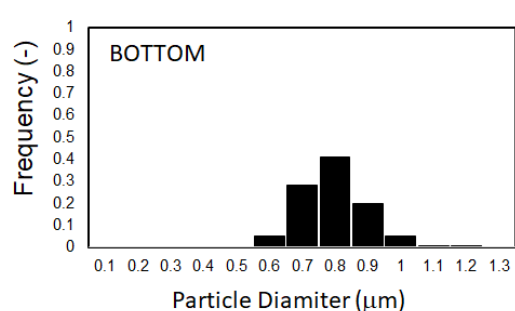
(e) Z=3mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



(f) Z=5mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)

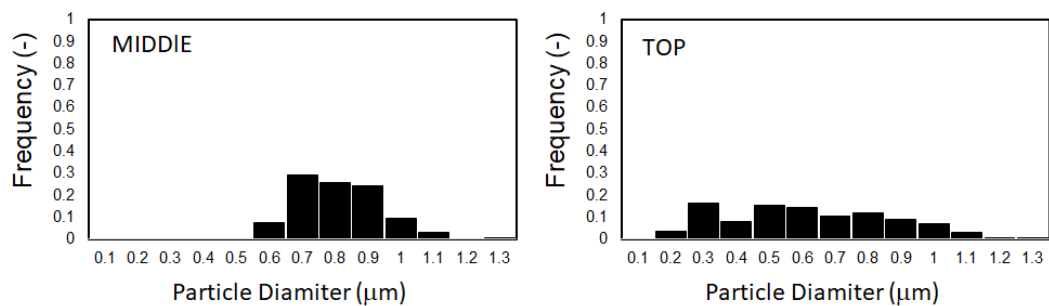


(g) Z=7mm 粒径度数分布 (r : ±5mm)



(j) BOTTOM 粒径度数分布 (r : ±5mm)

図 3. 3. 2-19(1/2) LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No. 3)



(i) MIDDLE 粒径度数分布 ($r: \pm 5\text{mm}$) (k) TOP 粒径度数分布 ($r: \pm 5\text{mm}$)

図 3. 3. 2-19 (2/2) LII 計測結果 (条件 2、酸素濃度 4%-No. 3)

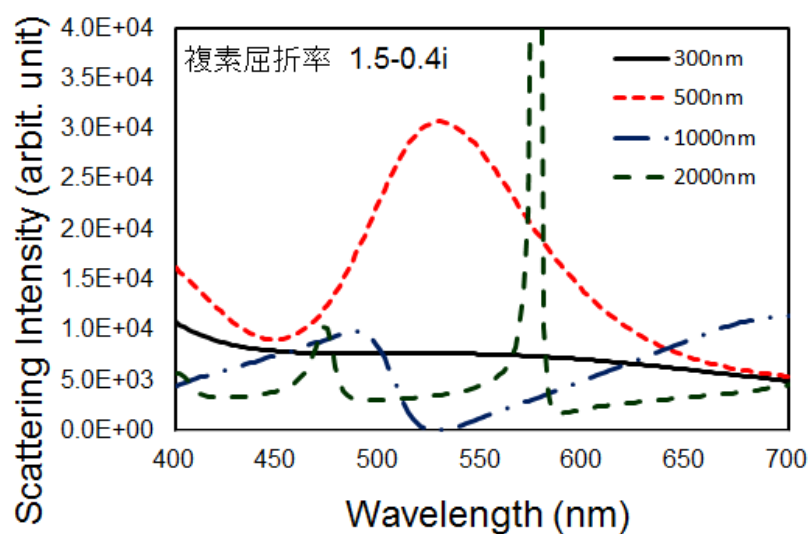
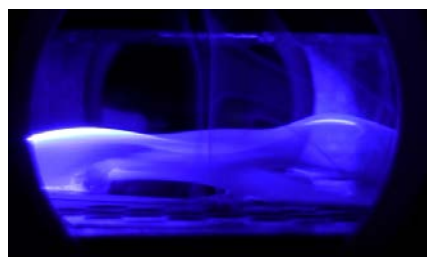


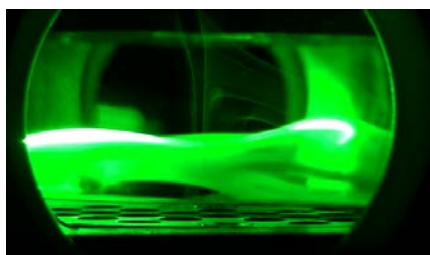
図 3. 3. 2-20 粒径、複素屈折率とミー散乱光強度の関係 (1.5-0.4i)



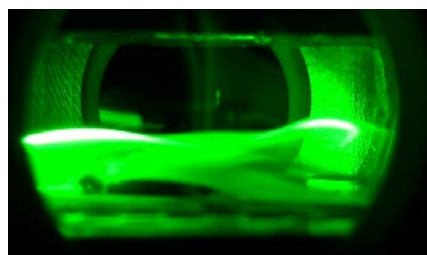
(a) 405nm ダイオードレーザ



(b) 450nm ダイオードレーザ (1/5 倍)

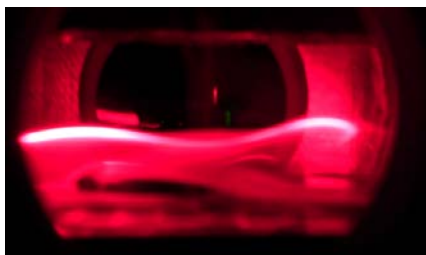


(c) 520nm ダイオードレーザ



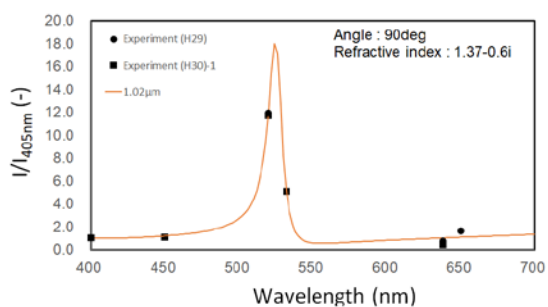
(d) 532nm ダイオードレーザ

図 3. 3. 2-21 (1/2) ミー散乱光計測画像 (条件 1、酸素濃度 : 2%)

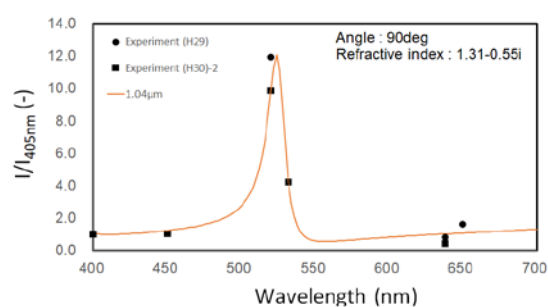


(e) 638nm ダイオードレーザ

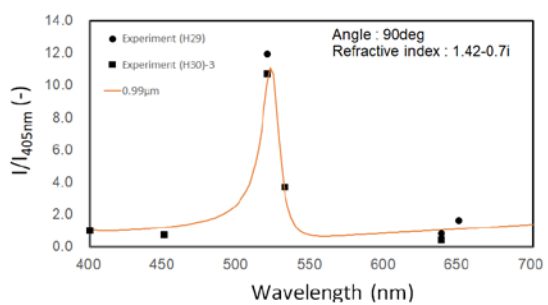
図 3.3.2-21 (2/2) ミー散乱光計測画像 (条件 1、酸素濃度 : 2%)



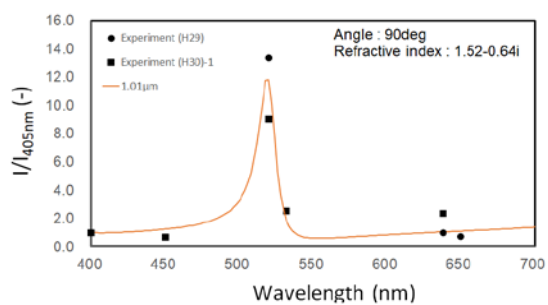
(a) 条件 1、酸素濃度 2% (No. 1)



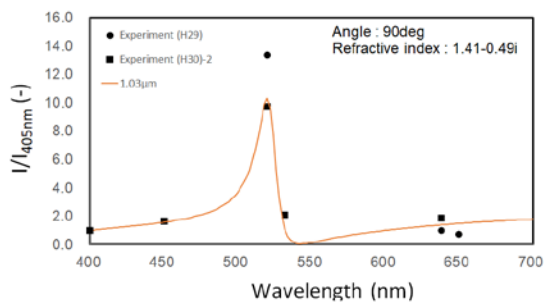
(b) 条件 1、酸素濃度 2% (No. 2)



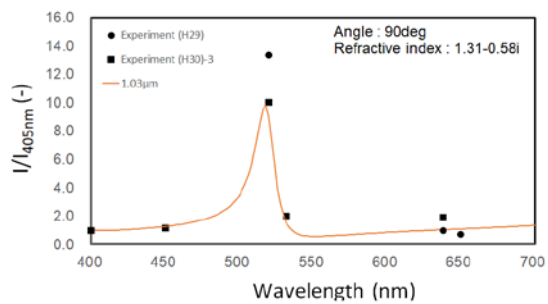
(c) 条件 1、酸素濃度 2% (No. 3)



(d) 条件 2、酸素濃度 4% (No. 1)

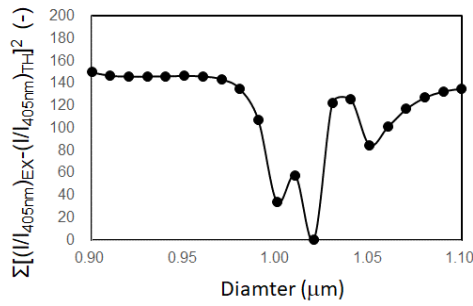


(e) 条件 2、酸素濃度 4% (No. 2)

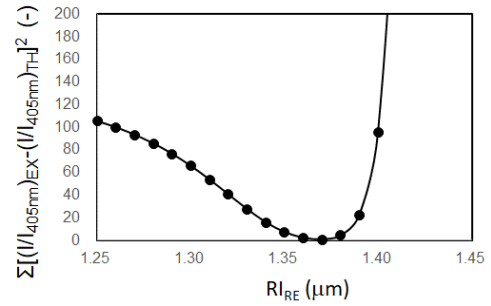


(f) 条件 2、酸素濃度 4% (No. 3)

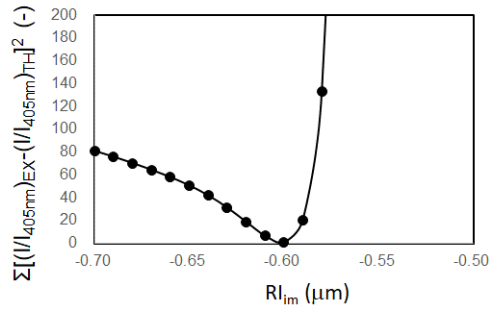
図 3.3.2-22 実験結果とミー散乱理論との比較



(a) 直径

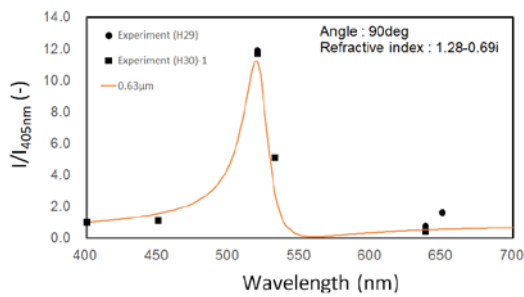


(b) 複素屈折率実数部

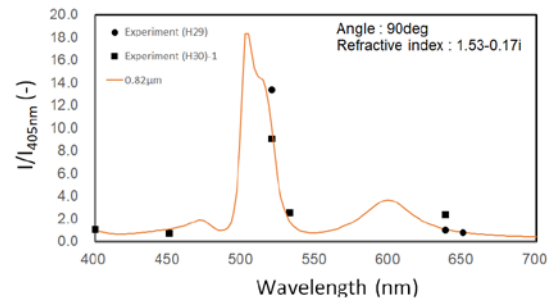


(c) 複素屈折率虚数部

図 3.3.2-23 直径、複素屈折率における誤差分布（誤差最小値：0.76）

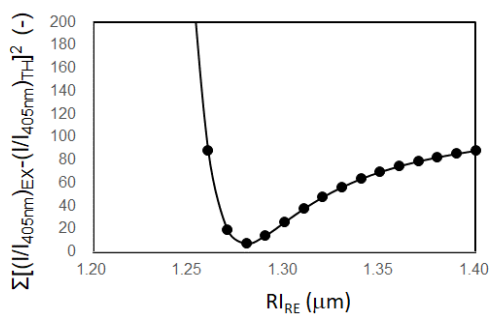


(a) 条件 1、酸素濃度 2% (No. 1)

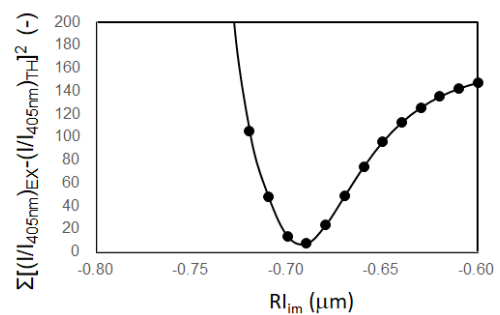


(b) 条件 2、酸素濃度 4% (No. 1)

図 3.3.2-24 実験結果とミー散乱理論との比較（粒径として LII 計測値を使用）



(a) 複素屈折率実数部



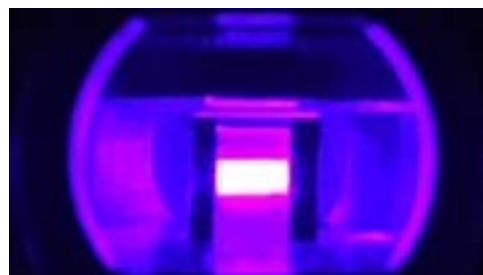
(b) 複素屈折率虚数部

図 3.3.2-25 複素屈折率における誤差分布

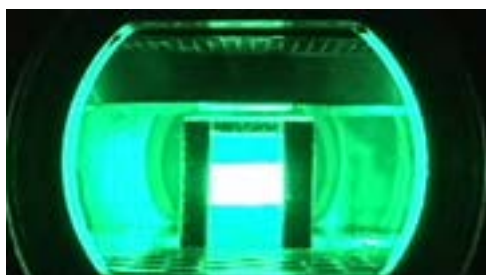
（粒径として LII 計測値を使用、最小値：7.36）



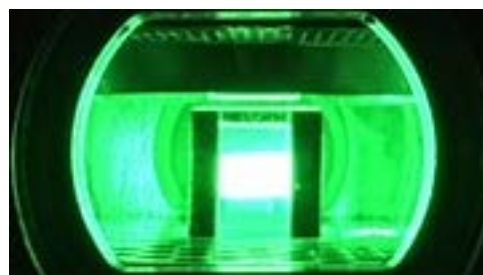
(a) 405nm ダイオードレーザー



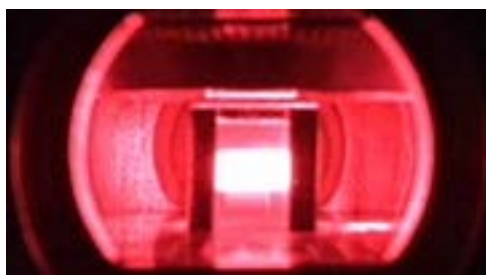
(b) 450nm ダイオードレーザー



(c) 520nm ダイオードレーザー

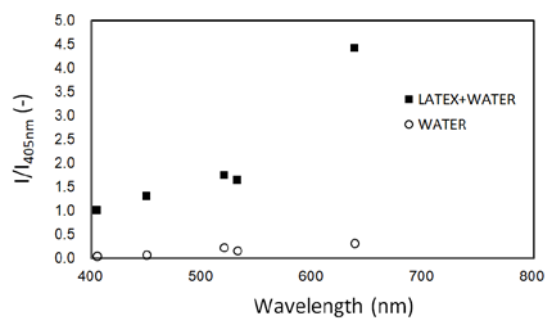


(d) 532nm ダイオードレーザー

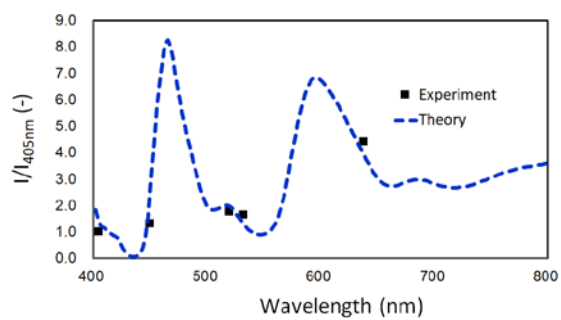


(e) 638nm ダイオードレーザー

図 3. 3. 2-26 ラテックス粒子のミー散乱光計測画像

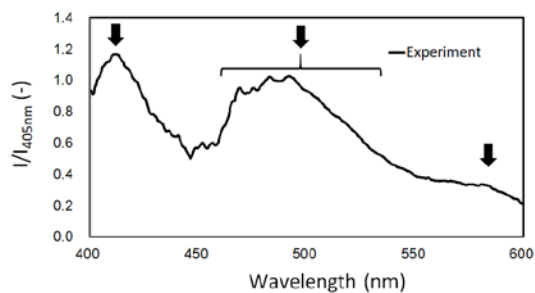


(a) 散乱光強度波長依存性

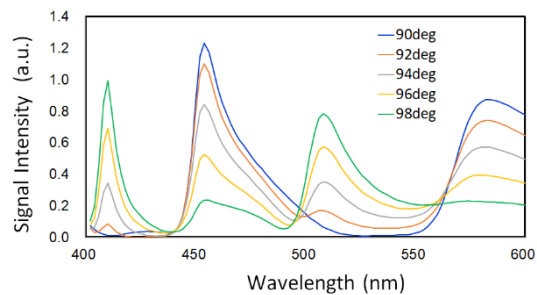


(b) 散乱光強度波長依存性

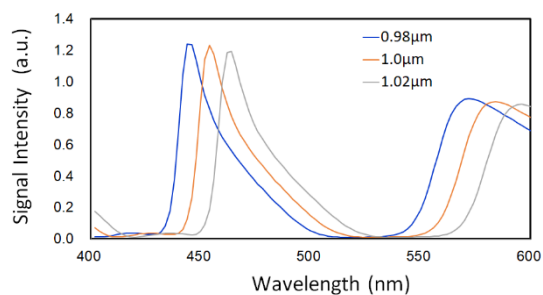
図 3. 3. 2-27 ラテックス粒子のミー散乱光強度波長依存性（レーザー光使用）



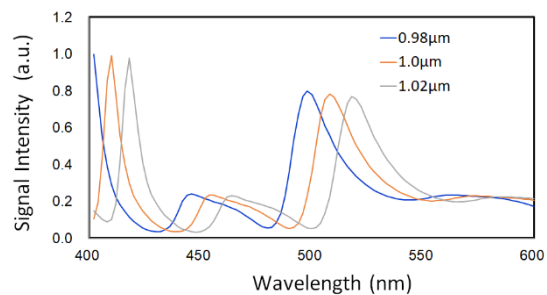
(a) ラテックス粒子からの散乱光スペクトル



(b) 散乱光スペクトル強度の角度依存性
(粒径: $1\ \mu\text{m}$)



(a) 散乱光スペクトル強度の粒径依存性
(散乱角度: 90°)



(b) 散乱光強度波長依存性
(散乱角度: 98°)

図 3.3.2-28 ラテックス粒子のミー散乱光強度波長依存性 (ランプ光使用)

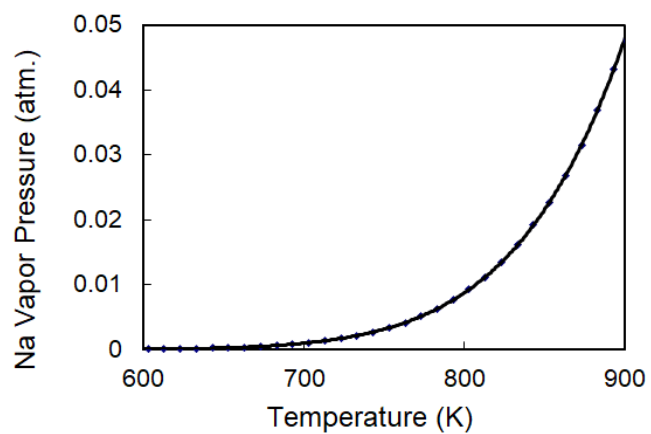
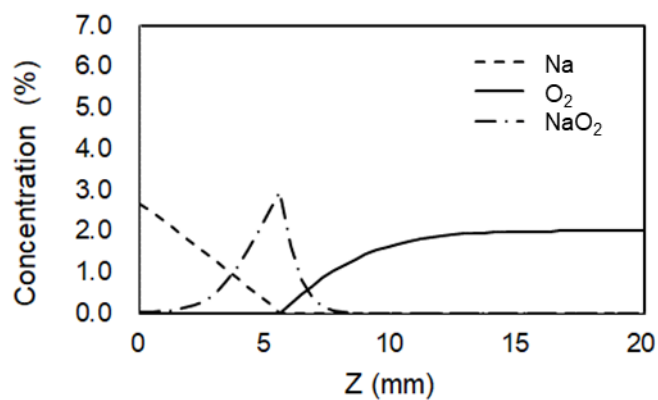
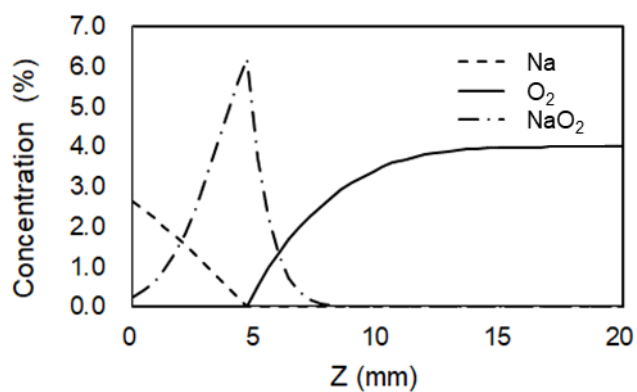


図 3.3.2-29 ナトリウムの蒸気圧と温度の関係



(a) 条件 1、酸素濃度 2%



(b) 条件 2、酸素濃度 4%

図 3.3.2-30 ナトリウム-酸素反応解析結果（粒子生成反応モデルなし）

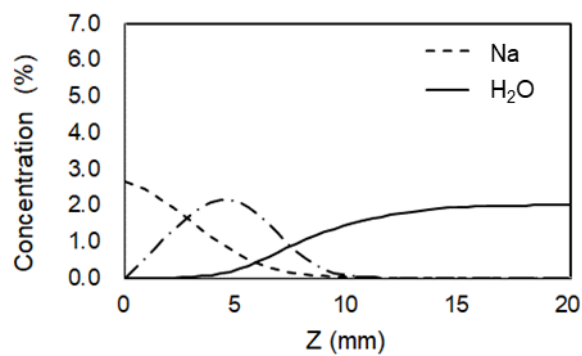
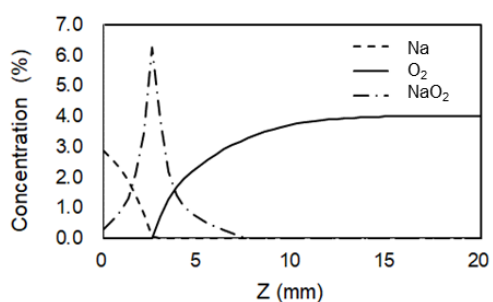
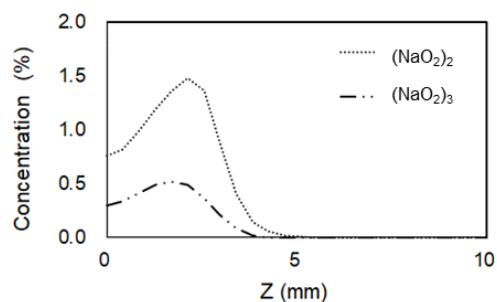


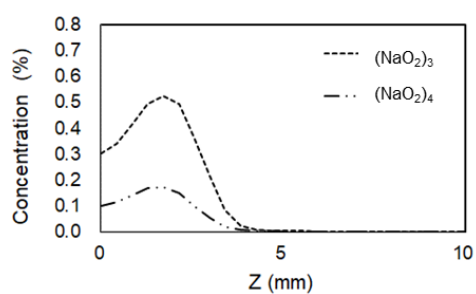
図 3.3.2-31 ナトリウム-水蒸気反応解析結果（水蒸気濃度 2%）



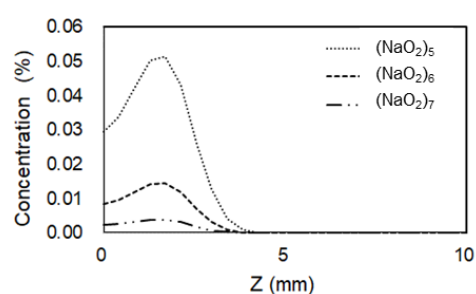
(a) Na、O₂、NaO₂ 分布



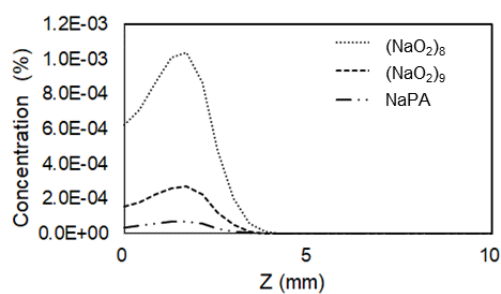
(b) (NaO₂)₂、(NaO₂)₃ 分布



(c) (NaO₂)₃、(NaO₂)₄ 分布



(d) (NaO₂)₅、(NaO₂)₆、(NaO₂)₇ 分布



(e) (NaO₂)₈、(NaO₂)₉ 分布

図 3.3.2-32 粒子生成反応モデルを付加したナトリウム-酸素反応解析結果
（条件 2、酸素濃度 4%）

3.3.3 ナトリウムとコンクリートとの反応性に係る熱分析実験【H28～H29】

(1) 試験設備の整備【H28】

H28 年度は、高速炉構造コンクリートにおいて断熱耐火材に使用される、パーライトコンクリートの主要成分であるカルシウム化合物とナトリウムもしくはナトリウムーコンクリート反応により副次的に生成する、ナトリウム化合物との反応性を把握するため、JAEA で所有する既存試験設備を利用し、専用ステンレス容器の製作並びにグローブボックスの再生を行い、熱分析試験に係る各試験装置の整備を実施した。

図 3.3.3-1 に試験装置の概要を示す。熱分析装置は、SETARAM/リガク社製の示差走査熱量測定装置 (DSC: Differential Scanning Calorimetry) DSC-111 を使用し、試験中の試料表面の反応状況を把握できるように Olympus 製のビデオスコープ IPLEX LX を試料容器の上端部に設置している。試料容器はナトリウムとの反応性を考慮して、SUS304L 製で内径 5mm、深さ 76mm のものを用いた。基準物質(reference)は融点の高いアルミナ(Al_2O_3)を試料(sample)側にはアルゴン (Ar) 雰囲気グローブボックス内で調整したナトリウム (Na) もしくはナトリウム化合物とパーライトコンクリートの主成分であるカルシウム化合物を供した。

なお、水や酸素との反応性のあるナトリウムやナトリウム化合物等を取り扱うことから、試験は、全てグローブボックス内で実施できるように環境を整備した。図 3.3.3-2 にグローブボックスに設置された試験装置の様子を示す。具体的には、湿分や酸素の影響を可能な限り排除するために、混合ガス (アルゴン 95%・水素 5%混合) を使用して、湿分と酸素を低減するための再生運転を反応試験前に十分実施し、グローブボックスの雰囲気は湿分や酸素濃度を 0.1ppm 未満に維持した。

(2) 試薬を用いた熱分析と評価【H28～H29】

高速炉構造コンクリートにおいて断熱耐火材に使用される、パーライトコンクリートの主要成分であるカルシウム化合物として、炭酸カルシウム (CaCO_3) 及び水酸化カルシウム ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) の試薬とナトリウム (Na) の反応性に加え、初期段階でコンクリート中の水と反応して生成することが想定される水酸化ナトリウム (NaOH) の反応についても熱分析を実施した。

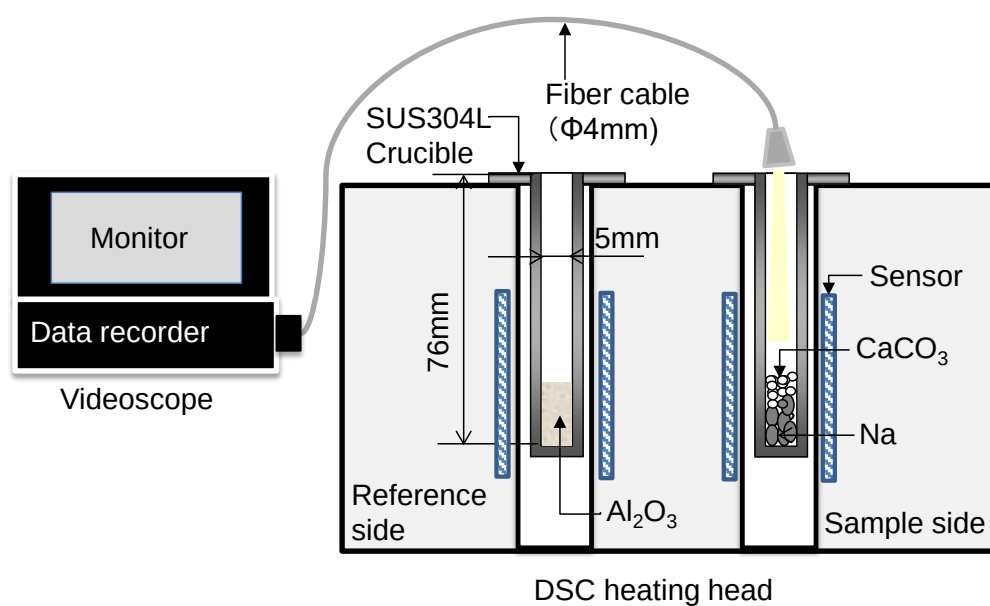
H28 年度は、前述の整備した試験装置を用いて、炭酸カルシウム (CaCO_3) とナトリウムの反応性に加え、初期段階でコンクリート中の水と反応して生成することが想定される水酸化ナトリウム (NaOH) の反応について着目し、予備的な熱分析実験を実施し、反応開始点温度の同定及び反応性を評価した。また、試験で得られたデータを基に簡易的な速度論的評価を実施し、既往知見との比較検討を実施すると共に、反応過程を推定するために反応後残渣物の XRD 測定と熱力学計算ソフト FactSage[3.3.3-1]による平衡状態図による評価を実施した。以上の詳細は、H28 年度成果報告書に記載済みである[3.3.3-2]。

H29 年度は、前年度に引き続き、構造物コンクリートの主要成分の 1 つであるカルシウム化合物として、 CaCO_3 及び $\text{Ca}(\text{OH})_2$ の試薬と Na を用いた熱分析実験を実施した。特に

CaCO₃とナトリウムとの反応においては、前年度予備的に実施した粉末形状の知見を踏まえて、ペレット形状の試料調整を実施する等の試験体系を改善し、試験後の分析や反応メカニズムの評価を向上させた。また、熱分析実験で得られたデータを基に簡易的な速度論的評価を実施し、既往知見との比較検討を実施した。なお、このうち、Na-CaCO₃反応とNa-Ca(OH)₂反応に関する熱分析データは、後述する広島大学で実施した、詳細な速度論解析や各種分析に供した。以上の詳細は、H29 年度成果報告書にて報告済みである [3.3.3-3]

【参考文献】

- [3.3.3-1] Bale, C. W.; Bélisle, E.; Chartrand, P.; Decterov, S. A.; Eriksson, G.; Hack, K.; Jung, I. H.; Kang, Y. B.; Melançon, J.; Pelton, A. D.; Robelin, C.; Petersen, S., FactSage thermochemical software and databases – recent developments. Calphad 2009, 33, 295-311.
- [3.3.3-2] 平成 28 年度 革新的ナトリウム冷却高速炉におけるマルチレベル・マルチシナリオプラントシミュレーションシステム技術の研究開発 成果報告書
- [3.3.3-3] 平成 29 年度 革新的ナトリウム冷却高速炉におけるマルチレベル・マルチシナリオプラントシミュレーションシステム技術の研究開発 成果報告書



- ・装置名称 : SETARAM カルベ式示差走査熱量計
- ・型 式 : DSC111
- ・本体外形寸法 : 幅 550mm, 奥行き 660mm, 高さ 550mm, 重量 35kg
- ・測定温度範囲 : 室温～約 800℃
- ・昇温速度 : 0.01～30℃/min
- ・熱量測定方式 : カルベ式
- ・熱量検出器 : サラウンド式熱電対
- ・熱量検出分解能 : 0.4 μW
- ・熱量検出限界 : 等温測定時 ; 5 μW , 昇温測定時 ; 15 μW
- ・測定容器材質 : SUS304L (内径 5mm、深さ 76mm)
- ・測定容器容量 : 250mm³
- ・装置コントロール及びデータ解析ソフト : SETSOFT 2000

図 3.3.3-1 試験装置概要



図 3. 3. 3-2 グローブボックス内に設置された試験装置

3.3.4 ナトリウム - コンクリート反応の熱的挙動解析（再委託先：広島大学）【H28～R1】

(1) パーライトコンクリートの熱分解反応【H28, R1】

① 不活性気体中での熱分解挙動【H28】

ナトリウム-コンクリート反応は、その事象展開のシナリオに依存して、コンクリート自体に加えて、コンクリートの熱分解により生成する固体及び気体生成物とナトリウムの反応、更には、反応により生成したナトリウム化合物とコンクリート由来の化合物との反応を含む複雑な反応系である。このため、ナトリウム-コンクリート反応の総括的反応挙動を解析する上では、コンクリートの熱分解反応の反応経路とそれぞれの反応段階の速度論的挙動の詳細についての知見が必要となる。当該研究課題の初年度に当たる H28 年度は、パーライトコンクリートの熱分解反応について、パーライトコンクリートの性状と化学組成、熱分解反応の挙動、及び熱分解反応における多段階反応の速度論的特徴を明らかにし、ナトリウム-コンクリート反応の包括的理解のための基礎的情報を得た[3.3.4-1]。以下に具体的な内容を示す。

走査型電子顕微鏡 (SEM; JSM-6510, JEOL) を用いた形態観察と SEM に装着したエネルギー分散型 X 線分析 (EDX; INCA x-act, Oxford) による元素組成の簡易定量により、パーライトコンクリートの性状的特徴と化学組成についての知見を得た。また、粉末 X 線回折測定 (XRD; RINT 2200V, Rigaku) により、コンクリートに含まれる結晶性化合物を検索した。この結果、パーライトコンクリートは、一般に用いられるポルトランドセメントと同様に、酸化カルシウム-酸化ケイ素系の水和化合物、水酸化カルシウム、炭酸カルシウムなどの複合組成を持つことを明らかにした。

パーライトコンクリートの熱分解反応挙動を、熱重量測定 (TG)、示差熱分析 (DTA)、及び発生ガスの質量分析 (MS) により追跡した (TG/DTA-MS, Thermomass, Rigaku)。また、プログラムした温度変化の下でのその場測定により種々の温度における試料の XRD パターン (高温 XRD, RINT 2200V+PTC 20A, Rigaku) を測定し、熱分解反応に伴う結晶相の変化を追跡した。更に、任意の温度まで加熱し、部分的に熱分解させた試料を室温まで冷却し、SEM 観察を行った。この結果、パーライトコンクリートの熱分解反応は、試料温度の上昇に伴い、多段階の水和水の脱水反応、水酸化カルシウムの熱分解反応、及び炭酸カルシウムの熱分解反応の順に多段階の反応として進行することを明らかにした。これにより、種々の温度においてナトリウム-コンクリート反応に関与するコンクリート由来の気体及び固体成分を同定した。

多段階の熱分解反応のそれぞれの反応段階の反応温度範囲と速度論的挙動を明らかにするために、TG 測定 (TG-8121, Thermoplus Evo2, Rigaku) により得た速度論的曲線を速度論的分離解析[3.3.4-2]の手法を用いて解析した。これにより、各反応段階の寄与率と速度論的パラメータを算出し、パーライトコンクリートの熱分解反応挙動をシミュレーションするための数値データを得た。以上の詳細は、H28 年度成果報告書にて報告済みである[3.3.3-2]。

② 二酸化炭素雰囲気による熱分解挙動の変化【R1】

上述したように、当該研究課題の初年度である H28 年度において、不活性雰囲気中でのパーライトコンクリートの熱分解挙動について詳細を明らかにし、その後、ナトリウムコンクリート反応の総括的反応挙動を検討する上での基礎的情報として用いてきた。以下の研究項目で述べる通り、種々の温度でのナトリウムコンクリート反応の物理幾何学的な挙動を明らかにし、その総括的反応挙動のシミュレーションのための骨格を議論することができた。その上で、更に総括的反応挙動の詳細を検討するためには、雰囲気に依存したパーライトコンクリートの熱分解挙動の変化についての補遺的知見を得ることが必要であると考えられた。最終年度に当たる R1 年度において、反応雰囲気中の二酸化炭素及び、後述する③の水蒸気がパーライトコンクリートの熱分解反応に及ぼす影響について追加実験を行い、それぞれの影響を明らかにすると共に、ナトリウムコンクリート反応の総括的反応挙動への影響を議論した。

反応雰囲気中の二酸化炭素分圧は、コンクリートの熱分解が熱源から近接したコンクリート表面から逐次内部に進行することを考えると、バルクでのコンクリートの熱分解においては前段の事象として進行したコンクリートの熱分解により生成する自生の二酸化炭素により上昇することが想定される。TG/DTG-DTA 測定(TG-8121, Thermoplus Evo2, Rigaku)において、反応雰囲気を種々の二酸化炭素分圧に制御して、パーライトコンクリートの熱分解反応に及ぼす影響を精査した。二酸化炭素分圧は、窒素-二酸化炭素の混合比率により設定し、二酸化炭素濃度計(RI-557, RIKEN KEIKI)を用いて調整した。

図 3.3.4-1 に、種々の二酸化炭素分圧の条件での TG/DTG-DTA 曲線を比較する。いずれの二酸化炭素分圧の条件においても、水酸化カルシウムの熱分解に相当する 750K に到達した直後に質量増加を示し、不活性気体雰囲気と異なる挙動を示した。また、炭酸カルシウムの熱分解による減量過程も 1000K 以上で観測され、不活性気体雰囲気の場合と比較して高温側にシフトし、減量値も増加した。更に二酸化炭素分圧の上昇に伴い、減量温度の高温側へのシフトと減量値の増加が観測された。図 3.3.4-2 に、二酸化炭素分圧を 20kPa に調整した条件下で、加熱に伴うパーライトコンクリートの結晶相の変化を高温 XRD により追跡した結果を示す。パーライトコンクリート中には、水酸化カルシウム(portlandite)と炭酸カルシウム(calcite)の結晶相が存在するが、773~873K の温度範囲において、portlandite 相に対する回折ピークが消失し、calcite 相に対応する回折ピークが成長する。また、1000K 以上での calcite の熱分解に伴い、ケイ酸二カルシウム(larnite)の結晶成長が観測される。二酸化炭素雰囲気中での portlandite の熱分解においては、生成した炭酸カルシウムの炭酸化反応が逐次的に進行することが報告されている[3.3.4-3]。試薬ベースの試験では、炭酸化による増量過程は二酸化炭素分圧の影響を受けないことが報告されているが、パーライトコンクリート中の portlandite の熱分解-炭酸化反応では、二酸化炭素分圧の上昇に伴い、高温側にシフトする現象が観測される。これは、セメント構造中において portlandite の分解による水蒸気の放出と炭酸化のための二酸化炭素の拡散過程が、純粋な水酸化カルシウムの場合と異なることを示唆している。また、雰囲気二酸化炭素と portlandite 以外のカルシウム化合物との反応により calcite が生成し、気体の

拡散過程の障壁となる可能性もある。二酸化炭素分圧の上昇に伴う炭酸カルシウムの分解反応の高温側へのシフトは、反応の平衡論的な関係から妥当である。

図 3.3.4-3 に、二酸化炭素分圧を 15kPa に制御した条件において、種々の昇温速度で測定したパーライトコンクリートの熱分解反応に対する TG/DTG-DTG 曲線を示す。Portlandite の熱分解に続く炭酸化反応の増量現象を含め、全ての反応段階が昇温速度の上昇に伴う高温側へシフトし、速度論的過程の特徴を示す。熱分解の各反応段階の間に速度論的相互関係がないと仮定すると、酸化カルシウムの炭酸化過程を含めた多段階過程を積算型の速度式で表すことができる[3.3.4-4]。

$$\frac{d\alpha}{dt} = \sum_{i=1}^N c_i A_i \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT}\right) f_i(\alpha_i)$$

$$\text{with} \quad \sum_{i=1}^N c_i = 1 \quad \text{and} \quad \sum_{i=1}^N c_i \alpha_i = \alpha \quad (3.3.4-1)$$

ここで、 α 、 c 、 A 、及び E_a は、それぞれの反応段階の反応率、寄与率、Arrhenius の前指数因子、及び見かけの活性化エネルギーを、添え字 i は反応段階を示す。 R 及び t は、それぞれ気体定数及び時間である。また、 $f(\alpha)$ は、固相反応の物理幾何学的特徴を反映する動力学的モデル関数である。これまでに、不活性気体中でのパーライトコンクリートの熱分解反応に対しては、7 段階の反応段階を仮定した速度論的解析が妥当であることを明らかにしている[3.3.4-1]。二酸化炭素雰囲気中での熱分解反応に対しては、不活性気体中での反応段階に加えて酸化カルシウムの炭酸化過程が出現することと、不活性気体中では 2 段階の反応として観測されたより高温での減量過程が 3 段階に分かれて観測されるために、全体として 9 段階の反応としての速度論解析が妥当であると考えられた。図 3.3.4-4 に、二酸化炭素雰囲気中でのパーライトコンクリートの熱分解反応を、式(3.3.4-1)に基づき非線形最小二乗法によりフィティングした結果を示す(速度論的分離解析)。Portlandite の熱分解と生成した酸化カルシウムの炭酸化過程は、それぞれ同一の温度範囲で減量に対して正及び負の寄与を示して進行し、これらの反応が逐次的な 2 つの反応界面の進行によるものであることを示唆している。速度論的分離解析を通じて最適化した、各反応段階の速度論的パラメータを表 3.3.4-1 に示す。Portlandite の分解反応(第 5 段階)と生成した酸化カルシウムの炭酸化反応(第 6 段階)の速度論的パラメータは、ほぼ等しい値を示す。二酸化炭素雰囲気中で純粋な酸化カルシウムを加熱した場合、炭酸化反応は定量的には進行しないことから、Portlandite の熱分解反応により生成する水蒸気が、酸化カルシウムの炭酸化を促進することが考えられる。図 3.3.4-5 に、表 2.2.4-1 に示した動力学モデル関数 $f_i(\alpha_i)$ を用いて描いた各段階の反応の進行に伴う速度変化挙動を表す実験母曲線を示す。脱水反応に対応する第 1～第 4 段階の反応は拡散律速的の反応挙動を示す。水酸化カルシウムの熱分解(第 5 段階)及び酸化カルシウムの炭酸化反応(第 6 段階)の反応も減速過程であるが、第 5 段階の反応は界面律速型の変化挙動を示すのに対して、第 6 段階の反応は擬 1 次反応的の挙動により減速する。同様の擬 1 次反応的の挙動は、炭酸塩の分解過程に対応すると思われる第 7 及び第 8 段階の反応においても観測される。炭酸カルシウムの分解過程に対応する第 9 段階

の反応では、他の反応段階と異なり反応途中で極大を示す挙動が観測される。

上述の結果から明らかなように、二酸化炭素雰囲気中でのパーライトコンクリートの熱分解反応には、portlandite の熱分解に伴う酸化カルシウムの炭酸化過程が関与することになるが、portlandite の熱分解反応の温度域に変化はなく、ナトリウムコンクリート反応の総括的挙動への影響は小さいと考えられる。また、二酸化炭素雰囲気中では calcite の熱分解反応が 1000K 以上の高温にシフトするが、以下の項で述べるように calcite とナトリウムの反応は 700K 付近での事象と考えられるため、ナトリウム炭酸カルシウムの反応挙動への影響は小さいと考えられる。

③ 水蒸気雰囲気による熱分解挙動の変化【R1】

パーライトコンクリートの熱分解反応において、水蒸気の発生は室温から 800K 付近まで続き、発生する水蒸気の質量分率は、発生気体全体の 90%以上を占める。熱分解により生成する水蒸気とナトリウムの反応は劇的に進行するが、ナトリウムと接触しない状況下では発生した水蒸気による反応雰囲気中の水蒸気分圧の上昇が、パーライトコンクリートの熱分解挙動に影響を及ぼすものと思われる。そこで、図 3.3.4-6 に示すように、TG-DTG 測定において、調湿器 (Me-40DP-2PLW-FH-EC, Micro-Equipment Co.) を用いて任意の水蒸気分圧に調湿した湿潤窒素を反応雰囲気に設定し、雰囲気水蒸気分圧の熱分解反応への影響を調査した。

雰囲気水蒸気圧を制御した条件での TG-DTG 測定においては、水蒸気の凝縮を避けるため誘導管と TG 装置の電気炉部分を制御する水蒸気分圧による一定温度に加温した上で、水蒸気を導入し 30 分間測定系を安定させた。その後、試料を一定の昇温速度で加熱し、TG-DTG 曲線を得た (図 3.3.4-7)。図 3.3.4-8 に、種々の水蒸気分圧条件下で測定したパーライトコンクリートの熱分解反応に対する TG-DTG 曲線を比較する。分解生成物として水蒸気を発生する反応段階は、一様に水蒸気分圧の上昇と共に高温側にシフトするが、700~800K 付近の水酸化カルシウム (portlandite) の分解過程においてその影響が特に顕著に表れる。一方で、炭酸塩の分解過程に対しては、雰囲気水蒸気の影響は確認できない。

図 3.3.4-9 に、雰囲気水蒸気分圧を 4.2kPa に制御した条件で、種々の昇温速度で測定したパーライトコンクリートの熱分解に対する TG-DTG 曲線を比較する。反応雰囲気に水蒸気が存在する条件下では、分解生成物として水蒸気を生成する全ての反応段階において、昇温速度に依存した反応温度の高温へのシフト幅が不活性気体中での反応に比べて小さくなる傾向が見られた。この傾向は、雰囲気水蒸気分圧が大きい条件でより顕著に見られる。不活性気体中でのパーライトコンクリートの熱分解反応の各段階に対して見積もった速度論的パラメータを初期値として、式 (3.3.4-1) を仮定して速度論的分離解析を行うと、図 3.3.4-10 に例として示すような良好なフィッティングが得られる。水蒸気を生成する反応過程に対しては、不活性気体中での反応に比べて大きい見かけの Arrhenius パラメータが得られ、その値は水蒸気分圧と共に大きくなる。これらの値は、それぞれの反応段階の速度論的挙動を水蒸気分圧の影響を無視して評価した見かけの値であり、求められる Arrhenius パラメータに反応速度の温度依存性を評価するパラメータとしての本来の物理化学的な意義を問う

ことはできない。

一方で、速度論的分離解析をツールとして用いることにより、特定の反応段階の速度論的曲線を多段階反応の総括的データから抽出することが可能である。雰囲気水蒸気の影響を顕著に受ける反応段階については、抽出した速度論的曲線を用いて、水蒸気分圧の影響を考慮した単一過程の速度論的解析を行い、時間、温度、及び水蒸気分圧をパラメータとして各反応段階の速度論的挙動を包括的に説明できる可能性がある。特に、ナトリウム-コンクリート反応に係る主要な温度領域において急激な水蒸気の発生を伴い進行する portlandite の熱分解過程(700～800K)については、そのような包括的な速度論的挙動の解析を通じて、雰囲気水蒸気圧の状況に応じて反応進展の温度と速度をシミュレーションするための速度論的パラメータを取得しておくことが望まれる。雰囲気水蒸気分圧を考慮した速度論的解析のためには、基本的な速度式に水蒸気分圧 $p(\text{H}_2\text{O})$ と平衡水蒸気圧 $P_{\text{eq}}(T)$ からなる収容関数 $a(p(\text{H}_2\text{O}), P_{\text{eq}}(T))$ を導入した速度式を用いることが考えられる[3.3.4-5]。

$$\frac{d\alpha}{dt} = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) f(\alpha) a(p(\text{H}_2\text{O}), P_{\text{eq}}(T)) \quad (3.3.4-2)$$

収容関数については、最近、次式の分析式が提案され、水酸化カルシウムをはじめとした金属水酸化物の熱分解反応や無機水和物の加熱脱水過程について水蒸気分圧を考慮した包括的な速度論解析の試みがなされている[3.3.4-5, 3.3.4-6]。

$$a(p(\text{H}_2\text{O}), P_{\text{eq}}(T)) = \left(\frac{P^\circ}{p(\text{H}_2\text{O})}\right)^a \left[1 - \left(\frac{p(\text{H}_2\text{O})}{P_{\text{eq}}(T)}\right)^b\right] \quad (3.3.4-3)$$

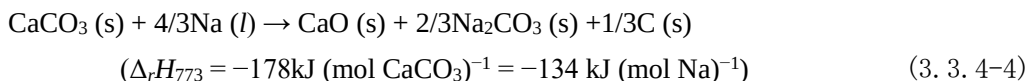
コンクリート中の portlandite の熱分解過程についても、種々の温度及び水蒸気分圧条件下でのコンクリートの熱分解反応の総括的挙動を測定した上で、速度論的分離解析により portlandite の熱分解反応段階の速度論的データを抽出し、式(3.3.4-2)及び(3.3.4-3)を用いて解析することにより、水蒸気分圧を考慮した速度論的挙動を定式化することができる可能性がある。

(2) ナトリウム-炭酸カルシウム反応【H29～H30】

ナトリウムと炭酸カルシウムの反応は、石灰岩質コンクリートにおいてはナトリウム-コンクリート反応の主要な反応であり、その反応の熱力学と速度論的挙動の解明が必要である。また、炭酸カルシウムは、その他のコンクリートにおいてもセメント部の結晶成分の1つである。本研究項目では、ナトリウム融液と試薬の炭酸カルシウムの反応をモデル反応とし、その熱的及び速度論的特徴を明らかにした。

熱力学データベース (FactSage[3.3.4-7]) を用いた状態図のシミュレーションと反応生成物の XRD 測定により、主要となる反応の量的関係と熱力学的パラメータを推定した。反応の熱的及び速度論的特徴に関するデータとしては、JAEA で実施した、アルゴン雰囲気中での示差走査熱量測定 (DSC) の結果を用いた。DSC ピーク面積から反応エンタルピーを算出すると共に、DSC 曲線を速度論的データとして用い、多段階からなる反応の詳細な速度論解析を行った。更に、反応中の試料を回収し、SEM 観察により反応幾何学に関する情報を得た。これらを基にして、ナトリウム-炭酸カルシウム反応の反応温度域を特定し、その反応進展

モデルとして表した。ナトリウム－炭酸カルシウム反応においては、式(3.3.4-4)の固－液反応が主要な反応と考えられる。



炭酸カルシウムとして粉末試料及びペレット成形試料を用いた場合のいずれにおいても、ナトリウム－炭酸カルシウム反応は、700K 付近で開始する。炭酸カルシウム粉末試料及びペレットを用いた反応に対して実験的に得られた $\Delta_r H$ の平均値は、それぞれ $-92.5 \pm 22.4\text{kJ}(\text{mol Na})^{-1}$ 及び $-89.9 \pm 16.3\text{kJ}(\text{mol Na})^{-1}$ であり実質的に等しい値であったが、測定ごとに大きなばらつきが観測された。計算値よりも小さいエンタルピー変化が観測される原因の1つとしては、反応界面で生成する $\text{CaO}(\text{s})$ 、 $\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{s})$ 、及び $\text{C}(\text{s})$ からなる固体生成物層により、反応の進行と共に $\text{CaCO}_3(\text{s})$ と $\text{Na}(\text{l})$ の接触が困難となり、未反応の反応物が残存する状態で反応が終結していることが考えられる。

炭酸カルシウム粉末試料及びペレットを用いたナトリウム－炭酸カルシウム反応に対する DSC 曲線は、いずれの場合も多段階の反応挙動を示す。炭酸カルシウム粉末試料を用いた場合、4 段階の反応として形式的に解釈できる。この多段階挙動は、反応の進展に伴う炭酸カルシウム粉末とナトリウム融液の接触状況の変化及び反応により生成する固体生成物 ($\text{CaO}(\text{s})$ 、 $\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{s})$ 、及び $\text{C}(\text{s})$) 層による反応の阻害により生じる物理幾何学的な反応挙動として理解される。このうち、第1段階の反応は、炭酸カルシウム粉末表面とナトリウム融液の初期接触領域における反応として特定することができる。一方で、炭酸カルシウムペレットを用いた反応では、2 段階の反応挙動が観測される。SEM による反応界面の進行形態の観察から、第1段階の反応は、炭酸カルシウムペレット表面とナトリウム融液の反応であると考えられた。第2段階は固体生成物層を介してナトリウム融液がペレット内部に浸入し、反応界面においてペレット内部の炭酸カルシウムと反応する過程であることが分かった。いずれの炭酸カルシウム試料を用いた反応についても、多段階の反応挙動を速度論的分離解析法により解析し、各反応段階の寄与率と速度論的パラメータを算出した。また、本研究で得た情報を基にして、ナトリウム－炭酸カルシウム反応の物理幾何学的反応モデルを提案した。以上の詳細は、H29 年度及び H30 年度成果報告書にて報告済みである[3.3.3-3, 3.3.4-7]。

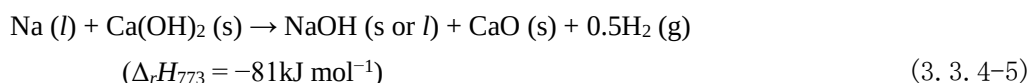
(3) ナトリウム－水酸化カルシウム反応【H29～H30】

水酸化カルシウムは、パーライトコンクリートの熱分解反応の研究項目で述べた通り、セメント部の主要な結晶相である。また、その分解反応は、ナトリウム－コンクリート反応の主要な温度領域で急激な水蒸気の発生を伴うことから、ナトリウム－水酸化カルシウム反応を含めた水酸化カルシウムの反応は、コンクリートの強度劣化やその後の反応の展開に係る重要な反応であると考えられる。本研究項目では、ナトリウム融液と試薬の水酸化カルシウムの反応をモデル反応とし、その熱的及び速度論的特徴を明らかにした。

研究手法としては、上述したナトリウム－炭酸カルシウム反応の場合と同様に、熱力学データベースを用いた状態図のシミュレーション、XRD による固体生成物相の同定、DSC に

よる反応過程の追跡、及び反応試料の SEM 観察を主な手法として用いた。

ナトリウム-水酸化反応においては、式(3.3.4-5)の固-液反応が主要な反応と考えられる。



DSC 測定の結果から、この反応は 550～700K の温度範囲で進行することが分かった。また、実験的に得られた $\Delta_r H$ は $-81.9 \pm 4.5 \text{ kJ mol}^{-1}$ であり、熱力学データベースを用いた計算値と一致する。このことは、式(3.3.4-5)の反応の定量的進行を示唆するものである。ここで、生成物の 1 つである NaOH の融点は 591K であり、反応初期では固体の NaOH が生成し、生成した NaOH が固体生成物層中で反応中に融解すると共に、591K 以上の温度での反応では、反応界面において NaOH 融液が生成する。

ナトリウム-水酸化カルシウム反応に対する DSC 曲線は、2 段階の反応挙動を示す。この多段階反応挙動は、591K 付近での反応挙動の変化により特徴付けられることから、NaOH の状態変化が反応の速度論挙動に影響を及ぼすことによると考えられる。反応中に回収した試料の SEM 観察においても未反応の水酸化カルシウム層の上部に融液の痕跡を示す生成物層が観察され、第 2 段階の反応においては、固液混合層として流動性のある生成物層を介して反応が進行すると考えられる。2 段階の反応挙動を速度論的分離解析法により解析し、各反応段階の寄与率と速度論的パラメータを決定すると共に、ナトリウム-水酸化カルシウム反応の物理幾何学的反応モデルを提案した。以上の詳細は、H29 年度及び H30 年度成果報告書にて報告済みである[3.3.3-3, 3.3.4-7]。

(4) ナトリウム-コンクリート反応の反応挙動評価システムの検討【R1】

① ナトリウム-コンクリート反応の反応展開モデル

ナトリウム-コンクリート反応は、複数の物理・化学変化が複雑に関連しながら進行する複雑系の反応であると共に、固体の関与する反応に特徴的な物理幾何学的要因が反応の速度論的挙動に大きな影響を及ぼす。また、反応系への熱源からのエネルギー供給と反応物であるナトリウム融液の供給の順序や供給のタイミングにより異なる反応条件が生成し、その後の事象展開も異なることになる。図 3.3.4-11 に、コンクリートへの熱源からのエネルギー供給と反応物であるナトリウム融液の供給の順序の違いを考慮した場合の反応事象の展開をモデル的に表す。図 3.3.4-11(a)に示したように、コンクリートへの熱源からのエネルギー供給が先行した場合、コンクリート自体の熱分解反応や熱分解により生成した固体生成物の融解が反応事象として起こる。この状態で、ナトリウム融液が供給されると、熱分解の固体生成物やその融液とナトリウム融液の反応となる。図 3.3.4-11(b)に示すように熱源からのエネルギー供給と系外からのナトリウム融液の供給が同時に起こる場合、ナトリウムとコンクリートの直接的な反応とコンクリート自体の熱的变化に加えて、コンクリートの熱分解により生成する固体生成物とナトリウムの反応及び気体生成物とナトリウムの反応が同時に進行するような図式が考えられる。

熱源からのエネルギー供給や系外からのナトリウム融液の供給の偶発性を考慮すると、

温度軸上で種々の反応事象の順序性と関係性を整理したモデルが最も多様な拡張性を備えたモデルとして考えられる。このようなモデル構築のためには、ナトリウム-コンクリート反応に係る多くの物理的及び化学的変化の量論的、熱的、及び速度論的情報が必要となる。上述したパーライトコンクリートの熱分解、ナトリウム-炭酸カルシウム反応、及びナトリウム-水酸化カルシウム反応についての情報に加えて、当該研究グループによりこれまでに蓄積してきたシリカ系コンクリートの熱分解及びシリカ-ナトリウム化合物反応についての情報を用いることにより、温度軸上での必要最小限の反応事象の関連を検討することができる。表 3. 3. 4-2 に、温度軸上で整理した反応進展モデル構築のために用いた文献情報を示す。

② 温度軸上での反応展開モデル

図 3. 3. 4-12 に、温度軸上で整理した反応進展モデルの概略図を示す。ナトリウム-コンクリート反応の主要な反応事象として、500K 以下のナトリウム融液と水蒸気の反応、600K 付近でのナトリウム-水酸化カルシウム反応を発端とする反応展開、及び 700K 付近でのナトリウム-炭酸カルシウム反応とナトリウム-シリカ反応の同時進行を抽出することができる。500K 以下では、コンクリートの熱分解により生成した水蒸気が豊富に存在し、この水蒸気とナトリウム融液の反応により、水酸化ナトリウム更には酸化ナトリウムの生成が想定される。

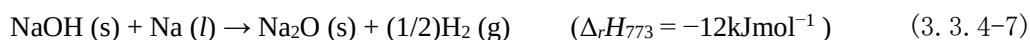
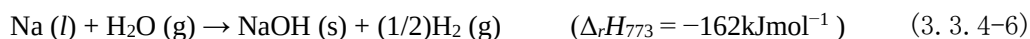
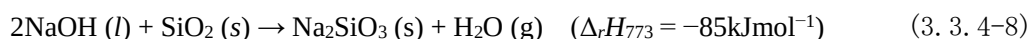


図 3. 3. 4-13 に、この温度領域で想定される反応進展を模式的に示す。コンクリートと接触したナトリウム融液は、コンクリートの熱分解の熱源としても作用する。この熱源からのエネルギー供給により、セメント部の吸着水及び $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ ゲル(C-S-H ゲル)のゲル水の脱水が起こる。生成した水蒸気はコンクリートとナトリウム融液の接触面でナトリウム融液と式(3. 3. 4-6)の反応に関与する。式(3. 3. 4-6)の反応は発熱的であり、更にこの温度域での反応に対する熱源となる。生成した水酸化ナトリウム固体は、一部ナトリウム融液中に拡散すると共に、水酸化ナトリウム固体を含むナトリウム融液がコンクリート層に浸入する事象が考えられる。

図 3. 3. 4-14 に、600K 付近で想定される反応進展を模式的に示す。この温度領域では、式(3. 3. 4-5)に示したナトリウム-水酸化カルシウム反応により支配されるものと思われ、セメント部に点在する水酸化カルシウムと物理的に接触したナトリウム融液との反応が起こる。水酸化ナトリウム-シリカ反応においては、591K での水酸化ナトリウムの直後、式(3. 3. 4-8)により劇的に反応が進行することが報告されている[3. 3. 4-11]。



このため、式(3. 3. 4-5)のナトリウム-水酸化カルシウム反応の生成物である水酸化ナトリウムが 591K 以上の温度で融液となり、骨材あるいはセメント部のシリカと接触すると式(3. 3. 4-8)の反応が進行する。この反応により生成する水蒸気は、反応界面においてナトリウム融液と反応し、水酸化ナトリウム融液を生成するため、シリカとの反応が継続するもの

と思われる。水酸化ナトリウム－シリカ反応に対する DSC 曲線においても、水酸化ナトリウムの融解直後の劇的な発熱現象の後、広い温度範囲で緩やかな発熱現象が継続することが報告されている。一連の反応より僅かに高い温度で、水酸化カルシウムの熱分解が起こる。水酸化カルシウムの熱分解による水蒸気の発生は、コンクリートの熱分解による水蒸気の発生挙動のうち最も急激な反応である。水酸化カルシウムにより生成する水蒸気とナトリウム融液の反応とそれにより生成する水酸化ナトリウム融液により、水酸化ナトリウム－シリカ反応が更に進行するものと思われる。このような、反応進展により、ナトリウム及び水酸化ナトリウムの混合液となった液相の反応物は、更にコンクリート層に浸入する。

図 3.3.4-15 に、700K 付近で想定される反応展開の模式図を示す。この温度領域では、式 (3.3.4-4) のナトリウム－炭酸カルシウム反応とナトリウム－シリカ反応 [3.3.4-9] が同時進行する。どちらの反応が優先的であるかは、炭酸カルシウムとシリカの存在比率とそれぞれのナトリウム融液との接触状況に依存するものと思われる。この反応段階では、ナトリウム融液のコンクリートへの浸入が更に進展し、上述した 700K 以下の温度での反応と 700K 付近での反応が同時進行するような状況も推測される。

(5) 反応挙動評価法の実用性と意義【R1】

温度軸上で整理した反応進展モデルと各反応の挙動についての実験室レベルでの速度論的解析の結果を統合することにより、各温度域におけるそれぞれの反応の挙動をシミュレーションすることが本研究成果の実用的な展開の 1 つとして考えられる。600K 付近及び 700K 付近でのナトリウム－コンクリート反応を例として、反応挙動シミュレーションの方法について模索し、その実用的意義と課題について検討した。

図 3.3.4-16 に、600K 付近で想定される反応展開の速度論的シミュレーションを模式的に示す。この温度域で支配的となる式 (3.3.4-5) のナトリウム－水酸化カルシウム反応では、水酸化ナトリウムの融点である 591K を境界として、反応の速度挙動が変化する。これに起因すると考えられる 2 段階の反応のそれぞれについては、速度論的分離解析により速度論的パラメータを求めており、Arrhenius の速度式を仮定した簡便な速度論的シミュレーションが可能である。591K 以下の温度では、ナトリウム融液と水酸化カルシウムの接触面で反応が開始し、生成する固体生成物層を介してナトリウム融液の水酸化カルシウム方向への拡散することにより反応界面が進行していく反応と考えられる。シミュレーションした速度挙動は、反応率 α として一般化されたデータとなる。第 1 段階の反応過程については、水酸化カルシウムの融解までに進行する反応界面の移動距離と速度論データとして用いた DSC 測定のスAMPLING における水酸化カルシウム層上面の面積 (試料セル内部の底面積) が、反応率 α を特徴付けるパラメータとなる。591K 以上の温度では、固体生成物層中で水酸化ナトリウムが融解すると共に反応界面で生成する水酸化ナトリウムも液体となる。このような状況におけるナトリウム－水酸化カルシウム反応の速度挙動は、第 2 段階の反応に対する速度論的パラメータを用いてシミュレーションすることができる。このシミュレーションにおいても、反応率 α は反応界面の進行距離と試料セルの底面積と関連付けられる。591K の前後でシミュレーションした速度挙動を比較すると水酸化ナトリウムの融解

によりナトリウム－水酸化カルシウム反応が大きく加速される状況が読み取れる。同時に、水酸化ナトリウム融液とシリカの接触面では劇的な反応が予測されるため、水酸化ナトリウムの融点は、ナトリウム－コンクリート反応の挙動を予測する上で重要な温度となるものと思われる。

図 3.3.4-17 に、700K 付近で想定される反応展開の速度論的シミュレーションを模式的に示す。この温度域では、ナトリウム－炭酸カルシウム反応とナトリウム－シリカ反応がほぼ同じ温度で開始する。いずれの場合も反応の進行は複雑な多段階反応として進行するが、初期の反応挙動はナトリウム融液との初期接触面での反応によると解釈すると、DSC 曲線から速度論分離解析により求めた速度論的パラメータを用いて初期反応の速度挙動をシミュレーションすることができる。図には、初期反応の主要部としてナトリウム－炭酸カルシウム反応に対して第 1 段階の反応を、ナトリウム－シリカ反応に対して第 2 段階の反応をシミュレーションした結果を示す。この場合の反応率 α は、初期接触面積に依存した値と解釈できる。反応はほぼ同じ温度で開始するが、速度挙動のシミュレーションの結果からは、ナトリウム－シリカ反応の速度が遅い状況が読み取れる。これらの反応は、セメント部においては、セメントの構成成分である calcite 及びシリカの存在比率と分布状況に依存した反応挙動を示すものと思われる。一方、骨材として石灰岩あるいはシリカ系鉱物を用いた構造コンクリートのナトリウム耐性を比較する場合、熱的安定性の観点からはほぼ同等の耐性を示すが、反応性の観点からはシリカ系コンクリートで幾分か高い安定性が期待される。

本研究で試行した実験室スケールでのナトリウム－コンクリート反応に関与する反応の熱的及び速度論的挙動についての解析結果は、ナトリウム－コンクリート反応の総括反応事象を温度軸上で整理し、また、ナトリウム－コンクリート反応の特異な温度域を抽出する上で有用であった。更に、抽出した温度域における各反応の物理幾何学的反応モデルを議論し、速度挙動を簡易な速度論的シミュレーションにより比較するために用いることができた。一方で、実験室における試薬ベースの反応挙動の検討結果を用いた反応進展モデルと、実事象としてのナトリウム－コンクリート反応との整合性を担保するためには、反応物の量や幾何学的分布、熱源からのエネルギー供給と反応系外からの反応物供給の条件などを細かく考慮した複雑なモデリングが必要となることは言うまでもない。本研究の成果は、そのような高度なモデリングのための基礎的情報として位置付けられるものである。

【参考文献】

- [3.3.4-1] Koga, N.; Kikuchi, S., Thermal behavior of perlite concrete used in a sodium-cooled fast reactor Multistep reaction kinetics and melting for safety assessment. J Therm Anal Calorim 2019, 138, 983-996.
- [3.3.4-2] Koga, N.; Goshi, Y.; Yamada, S.; Pérez-Maqueda, L. A., Kinetic approach to partially overlapped thermal decomposition processes. J. Therm. Anal. Calorim. 2013, 111, 1463-1474.
- [3.3.4-3] Koga, N.; Kodani, S., Thermally induced carbonation of $\text{Ca}(\text{OH})_2$ in a CO_2

- atmosphere: kinetic simulation of overlapping mass-loss and mass-gain processes in a solid-gas system. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2018, 20, 26173–26189.
- [3.3.4-4] Koga, N., Physico-geometric approach to the kinetics of overlapping solid-state reactions. In *Handbook of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2nd ed.; Vyazovkin, S.; Koga, N.; Schick, C., Eds. Elsevier: Amsterdam, 2018; Vol. 6, pp 213–251.
- [3.3.4-5] Koga, N.; Favergeon, L.; Kodani, S., Impact of atmospheric water vapor on the thermal decomposition of calcium hydroxide: a universal kinetic approach to a physico-geometrical consecutive reaction in solid-gas systems under different partial pressures of product gas. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 21, 11615–11632.
- [3.3.4-6] Fukuda, M.; Favergeon, L.; Koga, N., universal kinetic description for thermal decomposition of copper(II) hydroxide over different water vapor pressures. *J. Phys. Chem. C* 2019, 123, 20903–20915.
- [3.3.4-7] 平成 30 年度 革新的ナトリウム冷却高速炉におけるマルチレベル・マルチシナリオプラントシミュレーションシステム技術の研究開発 成果報告書
- [3.3.4-8] Kikuchi, S.; Koga, N.; Yamazaki, A., Comparative study on the thermal behavior of structural concretes of sodium-cooled fast reactor: Siliceous concretes. 2019, 137, 1211–1224.
- [3.3.4-9] Kikuchi, S.; Koga, N.; Seino, H.; Ohno, S., Kinetic study on liquid sodium-silica reaction for safety assessment of sodium-cooled fast reactor. *J. Therm. Anal. Calorim.* 2015, 121, 45–55.
- [3.3.4-10] Kikuchi, S.; Koga, N.; Seino, H.; Ohno, S., Experimental study and kinetic analysis on sodium oxide-silica reaction. *J. Nucl. Sci. Technol.* 2016, 53, 682–691.
- [3.3.4-11] Kikuchi, S.; Koga, N., Thermal behavior of sodium hydroxide-structural concrete composition of sodium-cooled fast reactor. *J. Therm. Anal. Calorim.* 2018, 131, 301–308.

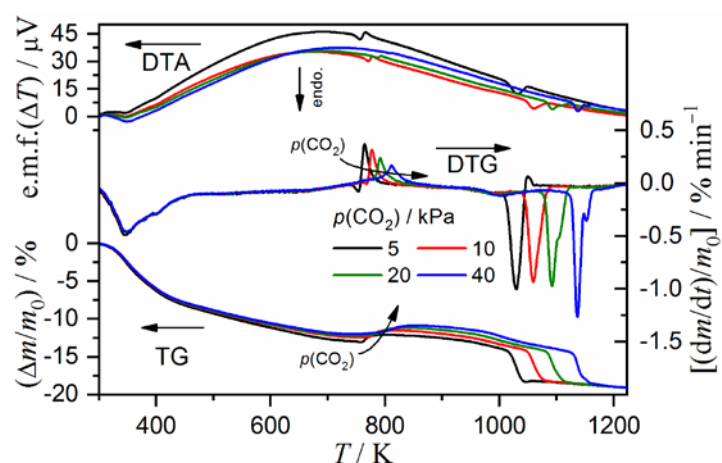


図 3.3.4-1 種々の二酸化炭素分圧(全圧: 101.3kPa)の窒素-二酸化炭素混合気流(流速: $300\text{cm}^3\text{min}^{-1}$)中で測定したパーライトコンクリート(試料量: 10.0mg)のTG/DTG-DTA 曲線(昇温速度: 5Kmin^{-1})

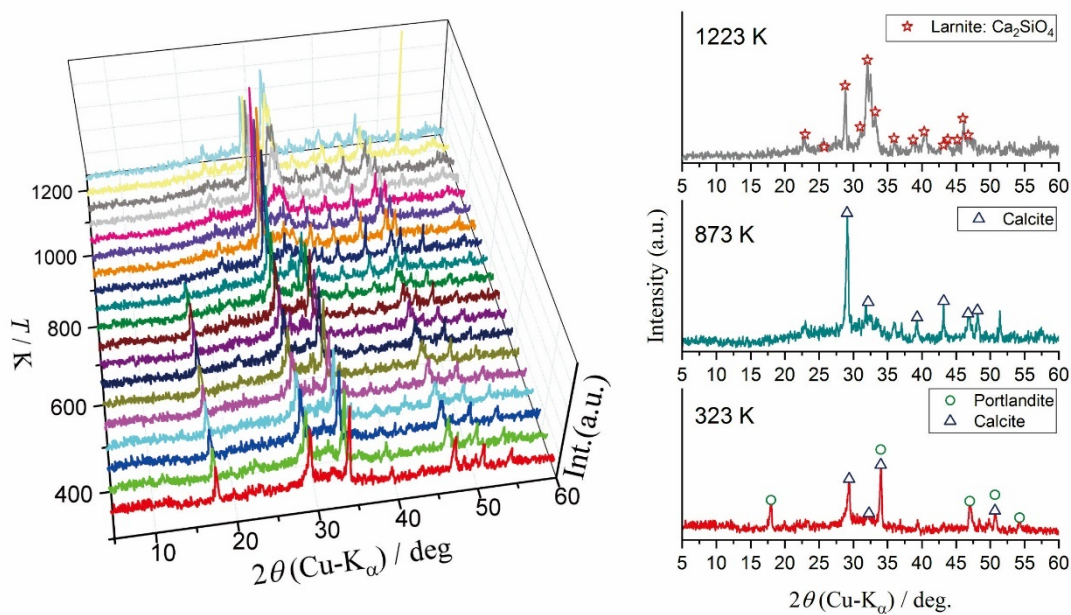


図 3.3.4-2 二酸化炭素分圧 20kPa の窒素-二酸化炭素混合気流(流速: $100\text{cm}^3\text{min}^{-1}$)中でパーライトコンクリートを段階的に加熱した際の XRD パターンの変化

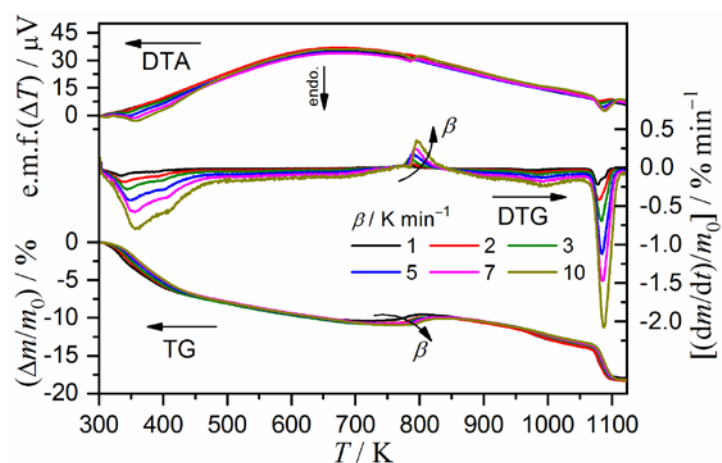


図 3.3.4-3 二酸化炭素分圧 15kPa の窒素-二酸化炭素気流(流速: $300\text{cm}^3\text{min}^{-1}$)中、種々の昇温速度で測定したパーライトコンクリート(試料量: 10.0mg)の TG/DTG-DTA 曲線

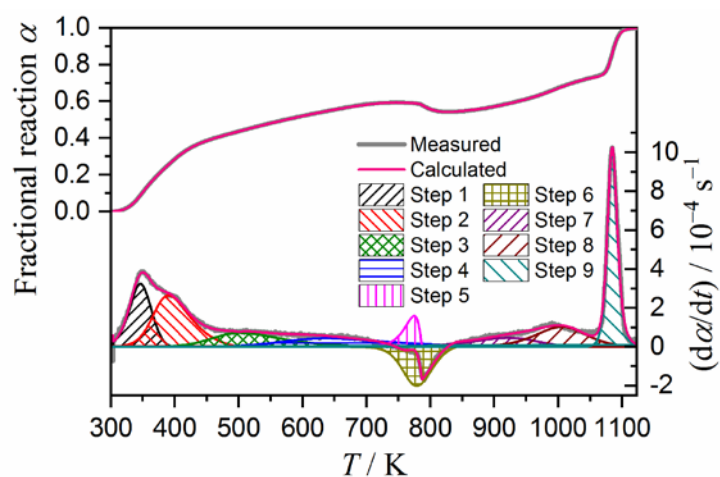


図 3.3.4-4 二酸化炭素分圧 15kPa の窒素-二酸化炭素気流(流速: $300\text{cm}^3\text{min}^{-1}$)中でパーライトコンクリートを加熱した際の多段階反応に対する速度論的分離解析の例 (昇温速度: 5Kmin^{-1})

表 3.3.4-1 二酸化炭素雰囲気中でのパーライトコンクリートの加熱した際の多段階反応の各反応段階の速度論的パラメータ

i	c_i	$E_{a,i} / \text{kJmol}^{-1}$	A_i / s^{-1}
1	0.17 ± 0.01	84.0 ± 0.5	$(3.01 \pm 0.18) \times 10^{10}$
2	0.22 ± 0.01	95.9 ± 0.3	$(3.17 \pm 0.04) \times 10^{10}$
3	0.12 ± 0.01	145.0 ± 3.0	$(1.67 \pm 0.01) \times 10^{12}$
4	0.10 ± 0.02	129.0 ± 1.7	$(4.21 \pm 0.06) \times 10^7$
5	0.06 ± 0.01	292.8 ± 2.6	$(2.63 \pm 0.08) \times 10^{17}$
6	-0.13 ± 0.01	284.5 ± 2.2	$(6.27 \pm 0.01) \times 10^{16}$
7	0.07 ± 0.01	158.3 ± 4.2	$(2.15 \pm 0.03) \times 10^6$
8	0.15 ± 0.03	207.7 ± 4.2	$(1.52 \pm 0.02) \times 10^8$
9	0.25 ± 0.02	303.1 ± 4.1	$(5.12 \pm 1.09) \times 10^{12}$

i	$f_i(\alpha_i)=\alpha_i^{m_i}(1-\alpha_i)^{n_i}[-\ln(1-\alpha_i)]^{p_i}$			R^2
	m_i	n_i	p_i	
1	2.56 ± 0.35	0.59 ± 0.01	-2.63 ± 0.27	0.993 ± 0.008
2	7.53 ± 0.45	-0.43 ± 0.01	-7.72 ± 0.44	
3	9.84 ± 0.26	-0.80 ± 0.03	-10.87 ± 0.11	
4	8.41 ± 0.38	-0.71 ± 0.03	-9.07 ± 0.52	
5	0.03 ± 0.01	0.60 ± 0.05	0.07 ± 0.01	
6	3.52 ± 0.33	0.16 ± 0.01	-3.36 ± 0.32	
7	-0.70 ± 0.39	1.65 ± 0.16	0.78 ± 0.27	
8	0.43 ± 0.09	1.59 ± 0.28	-0.19 ± 0.12	
9	0.28 ± 0.03	1.54 ± 0.08	0.59 ± 0.02	

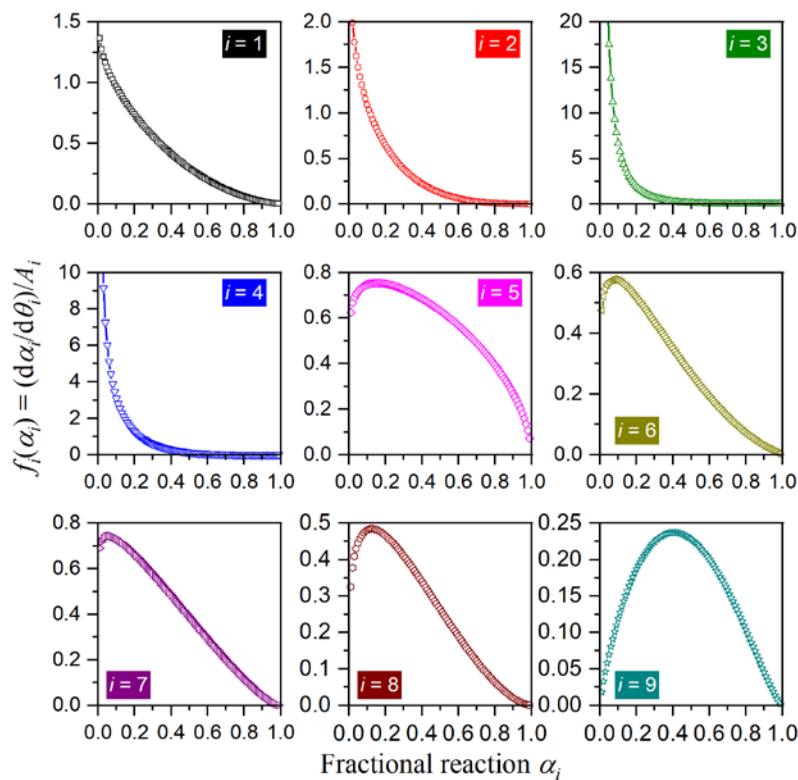


図 3.3.4-5 二酸化炭素分圧 15kPa の窒素－二酸化炭素気流(流速: $300\text{cm}^3\text{min}^{-1}$)中でパーライトコンクリートを加熱した際の各反応段階の実験母曲線

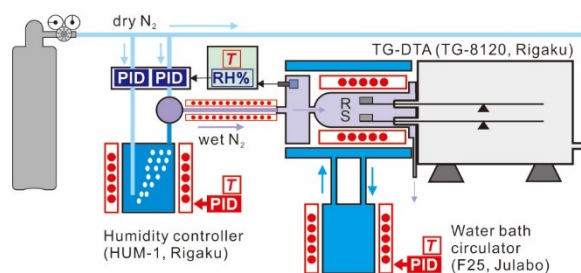


図 3. 3. 4-6 雰囲気水蒸気圧を制御した条件での TG-DTG 測定のための装置構成の概略

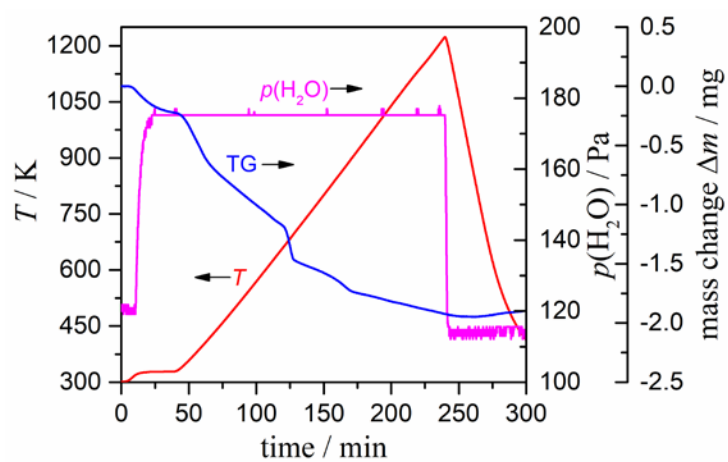


図 3. 3. 4-7 雰囲気水蒸気圧を制御した条件でのパーライトコンクリートの熱分解反応に対する TG-DTG 測定例

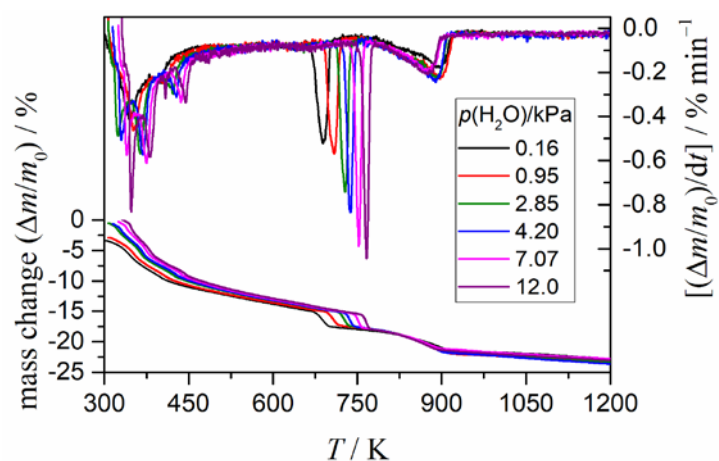


図 3.3.4-8 種々の水蒸気分圧(全圧: 101.3kPa)の窒素-水蒸気混合気流(流速: $300\text{cm}^3\text{min}^{-1}$)中で測定したパーライトコンクリート(試料量: 10.0mg)のTG-DTG 曲線(昇温速度: 5Kmin^{-1})

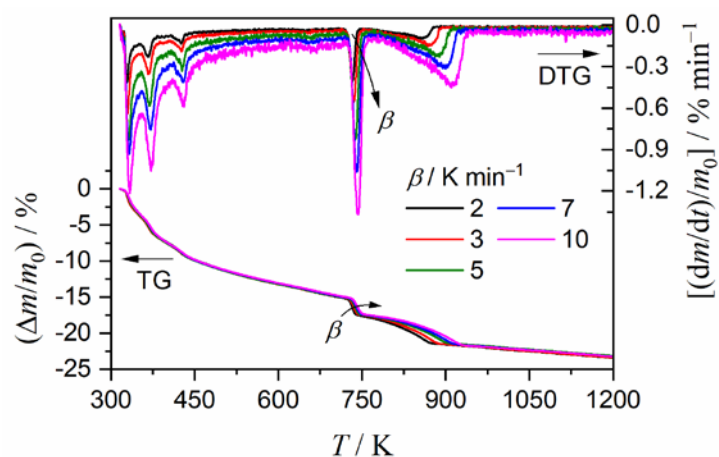


図 3.3.4-9 水蒸気分圧 4.2kPa(全圧: 101.3kPa)の窒素-水蒸気混合気流(流速: $300\text{cm}^3\text{min}^{-1}$)中、種々の昇温速度で測定したパーライトコンクリート(試料量: 10.0mg)のTG-DTG 曲線

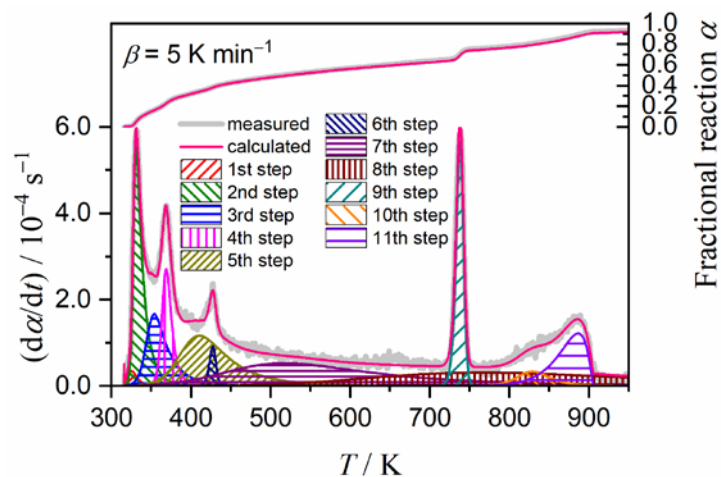


図 3.3.4-10 種々の水蒸気分圧(全圧: 101.3kPa)の窒素－水蒸気混合気流(流速: 300cm³min⁻¹)中で測定したパーライトコンクリート(試料量: 10.0mg)のTG-DTG 曲線(昇温速度: 5Kmin⁻¹)

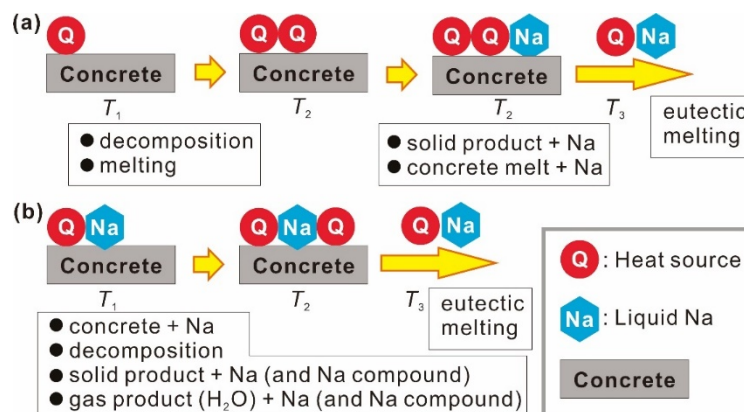


図 3.3.4-11 ナトリウム－コンクリート反応に係る事象の進展モデル

表 3. 3. 4-2 ナトリウム-コンクリート反応に係る化学変化及び物理変化についての基礎的情報

Reactant	Reactions	Techniques	Information	Reference
■ Thermal Decompositions of Cements				
Perlite concrete	■ Multistep thermal decomposition and subsequent melting • Dehydration: (absorbed, zeolite, and crystallization waters) • Decomposition: $(\text{Ca}(\text{OH})_2 \text{ and } \text{CaCO}_3)$ • Carbonation: $(\text{CaO} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CaCO}_3)$ • Crystallization: $(\text{Ca}_2\text{SiO}_4)$ • Melting: (Mixture of decomposition products)	● TG-DTA ● TG/DTA-MS ● HTXRD ● SEM ● SEM-EDX ● Thermodynamic simulation	■ Multistep thermal decomposition • Overall behavior • Each reaction steps (reactions, evolved gas, crystalline phase, contributions, reaction temperature range, morphological change, and kinetic parameters) ■ Melting (melting temperature range, morphological change, and crystalline phase of quenched melt)	This work
Cement portion of siliceous concrete	■ Multistep thermal decomposition and subsequent melting • Dehydration: (absorbed, zeolite, and crystallization waters) • Decomposition: $(\text{Ca}(\text{OH})_2 \text{ and } \text{CaCO}_3)$ • Carbonation: $(\text{CaO} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CaCO}_3)$ • Crystallization: $(\text{Ca}_2\text{SiO}_4)$ • Melting: (Mixture of decomposition products)	● TG-DTA ● TG/DTA-MS ● HTXRD ● SEM ● SEM-EDX ● Thermodynamic simulation	■ Multistep thermal decomposition • Overall behavior • Each reaction steps (reactions, evolved gas, crystalline phase, contributions, reaction temperature range, morphological change, and kinetic parameters) ■ Melting (melting temperature range, morphological change, and crystalline phase of quenched melt)	[3.3.4-8]
■ Reactions of Na and Calcium Compounds				
● Na ● CaCO_3 (powder and pellet)	$\text{CaCO}_3(\text{s}) + (4/3)\text{Na}(\text{l}) \rightarrow \text{CaO}(\text{s}) + (2/3)\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{s}) + (1/3)\text{C}(\text{s})$	● DSC ● DSC-Microscope ● XRD ● SEM ● EPMA ● Thermodynamic simulation	• Reaction temperature range • Reaction geometry • Thermodynamic parameters • Multistep kinetic features • Kinetic parameters	This study
● Na ● $\text{Ca}(\text{OH})_2$ (lightly pressed powder)	$\text{Na}(\text{l}) + \text{Ca}(\text{OH})_2(\text{s}) \rightarrow \text{NaOH}(\text{l}) + \text{CaO}(\text{s}) + (1/2)\text{H}_2(\text{g})$	● DSC ● DSC-Microscope ● XRD ● SEM ● EPMA ● Thermodynamic simulation	• Reaction temperature range • Reaction geometry • Thermodynamic parameters • Multistep kinetic features • Kinetic parameters	This study
■ Reactions of SiO_2 and Sodium Compounds				
● Na ● SiO_2 (powder)	$\text{SiO}_2(\text{s}) + (4/3)\text{Na}(\text{l}) \rightarrow (2/3)\text{Na}_2\text{SiO}_3(\text{s}) + (1/3)\text{Si}(\text{s})$	● DSC ● DSC-microscope ● XRD ● Thermodynamic simulation	• Reaction stoichiometry • Reaction temperature range • Thermodynamic parameters • Multistep kinetic features • Kinetic parameters	[3.3.4-9]
● Na_2O ● SiO_2 (powder)	$\text{SiO}_2(\text{s}) + 2\text{Na}_2\text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{Na}_4\text{SiO}_4(\text{s})$	● DSC ● DSC-microscope ● XRD ● Thermodynamic simulation	• Reaction stoichiometry • Reaction temperature range • Thermodynamic parameters • Multistep kinetic features • Kinetic parameters	[3.3.4-10]
● NaOH ● SiO_2 (powder)	$\text{SiO}_2(\text{s}) + 2\text{NaOH}(\text{l}) \rightarrow \text{Na}_2\text{SiO}_3(\text{s}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$	● DSC ● DSC-microscope ● XRD ● Thermodynamic simulation	• Reaction stoichiometry • Reaction temperature range • Thermodynamic parameters • Multistep kinetic features • Kinetic parameters	[3.3.4-11]

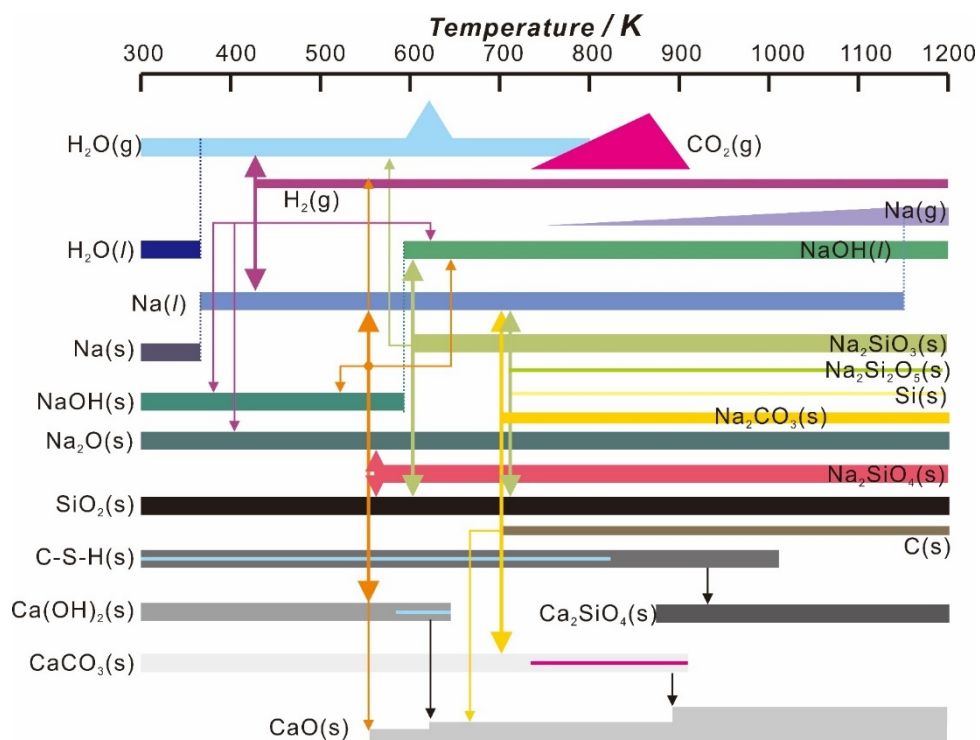


図 3.3.4-12 温度軸上で整理した反応進展モデルの概略

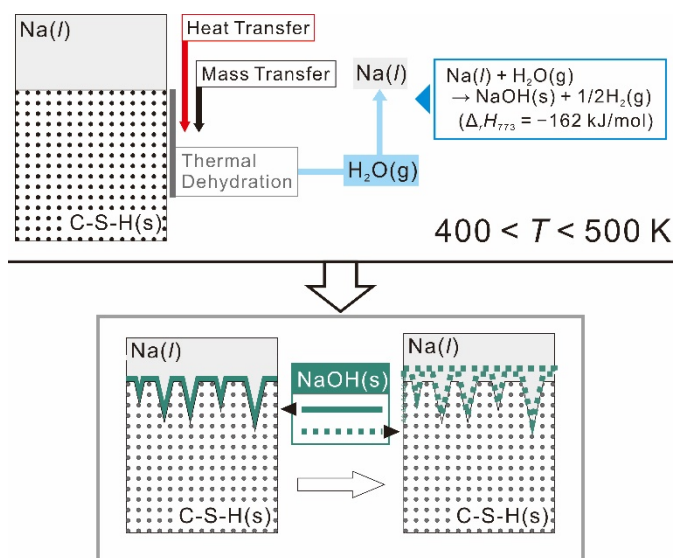


図 3.3.4-13 400～500K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート反応の反応進展の概略

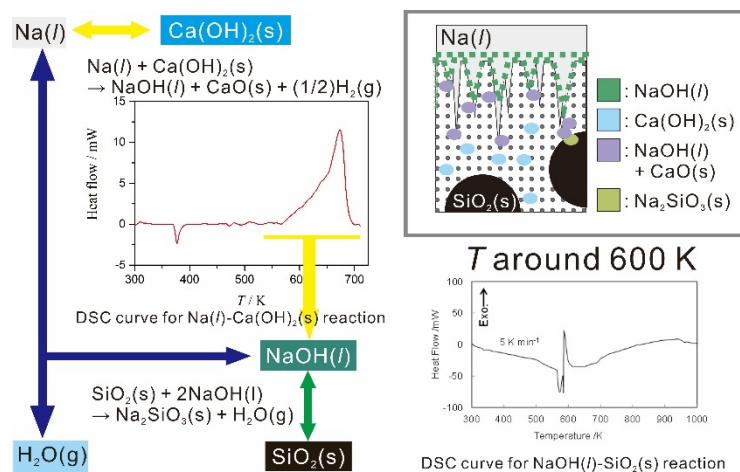


図 3.3.4-14 600K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート反応の反応進展の概略

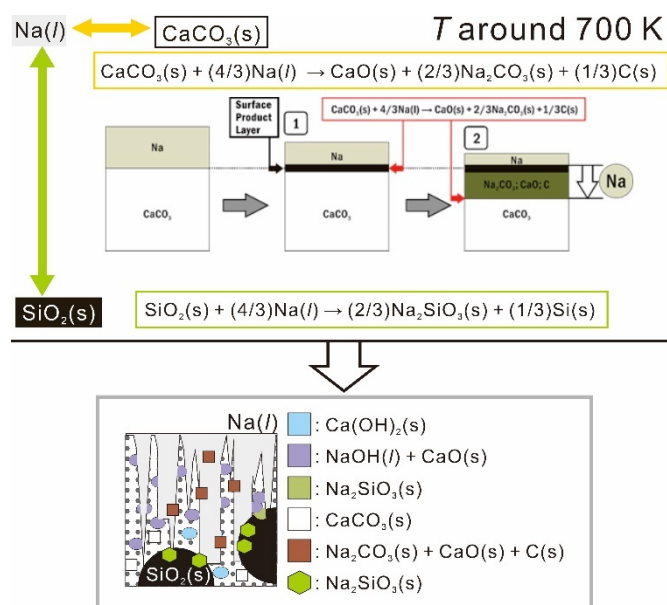


図 3.3.4-15 700K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート反応の反応進展の概略

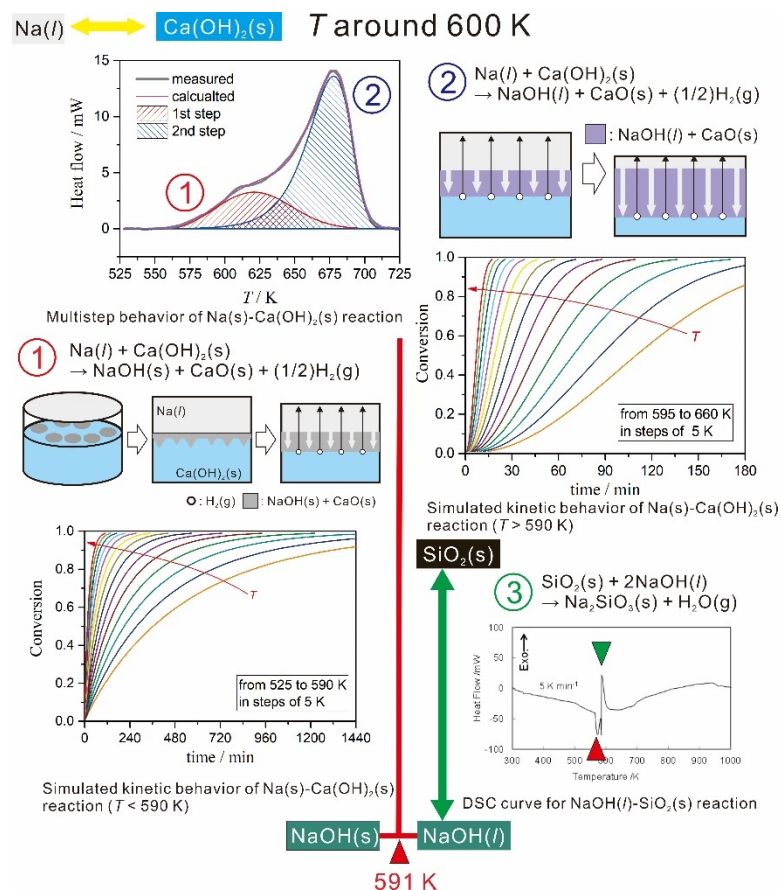


図 3.3.4-16 600K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート反応の速度論的シミュレーションの例

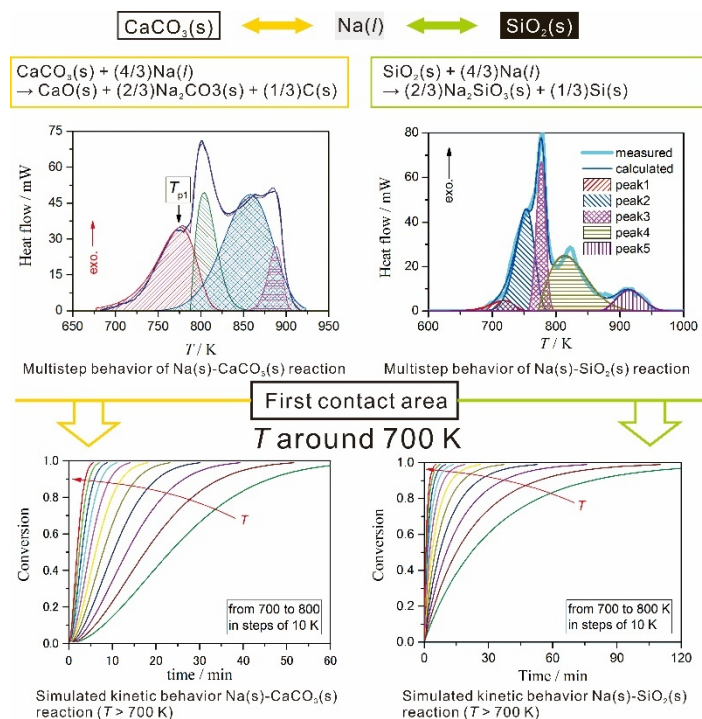


図 3.3.4-17 700K 付近で想定されるナトリウム-コンクリート反応の速度論的シミュレーションの例

3.4 研究推進【H28-R1】

(1) はじめに

本業務における研究推進を効率的に行うために、再委託先を含めた全体会議を4ヵ年の業務期間中11回実施した。また、外部有識者を含めた4名の委員によるアドバイザー委員会を設置し、業務期間中6回実施し、研究成果のレビュー、今後の研究開発に反映し得る貴重な意見を得た。令和元年度では、全体会議を3回(2019.6.7、2019.10.11及び2020.1.23)、アドバイザー委員会を1回(2019.7.5)開催した。

(2) アドバイザリ委員会での主な意見

- ・本業務の背景、全体像を説明して欲しい。
- ・高速炉での深層防護の事象レベルと本業務でのターゲットを明確にして欲しい。
- ・「もんじゅ」での知見も有効活用して欲しい。
- ・既存技術、知見を有効活用すること。
- ・基礎的な実験と実際の現象との相違には注意を払うこと。
- ・公募終了段階では大枠が完成することになるが、公募期間後の研究計画も説明して欲しい。
- ・マルチレベルにおいてはワンスルーカップリングの適用範囲をしっかりと見極めること。
- ・マルチシナリオにおける組み込み物理モデルの選定の優先度について重要度ランク表(PIRT: Phenomena Identification and Ranking Table)等を用いた論理的考察があれば良い。
- ・1D-3Dカップリングにおける入口速度分布の与え方(3D側)の想定を明確にすること。
- ・マルチレベルの連成解析において、各解析コードの時間ステップサイズと同期タイミングの最適化について検討した方が良い。
- ・核熱カップリングについては、制御棒周りの出力分布変化等の多次元効果について検討をするべきである。
- ・多セル区画における模擬エアロゾル計測では、解析コードの妥当性を確認する上で、セル内での空間的な濃度分布を測定する方が良い。
- ・ナトリウム-コンクリート反応については、反応進展については、化学反応に加え、熱的影響によるコンクリートの形状変化やクラックによる影響にも注意する必要がある。
- ・最終年度として、妥当性評価の具体的なイメージを明確にすること。
- ・公募終了以降の開発目標とそのための実施事項や課題について整理すること。特に本公募でどこまで実施、適応し、何が制限条件、課題となるかが重要。

(3) まとめ

研究推進として、4ヵ年の業務期間中、定期的に全体会議並びにアドバイザー委員会を開催し、効率的に業務を推進すると共に、今後の研究開発方針や具体的な開発対象の反映

を行うことができた。

4. 結言

4.1 マルチレベルシミュレーションシステム開発

原子炉システムの安全性の観点から炉心部に着目し、炉心熱流動及び炉物理に関連する既存解析コードを整理すると共に、解析コード間のカップリング方法及び効率的なデータ転送方法を検討し、本システムの基本フレームとなる統合プラットフォームと CFD コード、サブチャンネル解析手法並びに核特性解析手法をカップリングさせた、マルチレベルシミュレーション手法を構築し、個別（「1D-CFD 連成解析手法」、「1D-サブチャンネル連成解析手法」、「核-熱連成解析手法」）の妥当性確認を行った。

開発したマルチレベルシミュレーションの総合的な妥当性評価として、「EBR-II」の SHRT-45R 試験を対象とした解析を実施し、統合プラットフォームと多次元熱流動並びに核特性との連成解析により、炉心部周辺での着目する物理現象に対してモデルの詳細度レベルを変えた評価ができることを確認した。

4.2 シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションシステム開発

類似解析コードの比較、並びに、リスク評価に対する包絡性の検討を実施し、本業務で開発するシミュレーションシステムに必要となる物理モデル（機能）を抽出すると共にシステム概念の構築（炉内側は CFD、炉外側は質点系動特性解析）を行うと共に、シビアアクシデントマルチシナリオシミュレーションとしての基本システムを構築した。また構築したシステムに、重要度の高い物理モデルとして炉内側は溶融燃料挙動モデル、炉外側はナトリウム-コンクリート反応モデル、デブリー-コンクリート反応モデル、ナトリウム燃焼モデルの組み込みを行った。既存コードによる解析結果や理論解との比較からモデルの妥当性を個別に確認した。

開発したシミュレーションシステムの総合的な検証として、原子炉容器液位確保機能喪失事象を対象とした解析を実施し、炉内側での冷却材沸騰、溶融燃料の落下、炉外側での冷却材や燃料の落下に伴うナトリウム燃焼、コンクリート及びデブリーとの反応について一貫して評価できることを確認した。

4.3 コード V&V のための実験データベース構築

4.3.1 ナトリウム燃焼に係る基礎実験

ナトリウム燃焼時の多区画（多セル）への熱移行、燃焼生成エアロゾル物質移行を模擬した実験装置（多セル区画実験装置）の設計するため、実験装置の計測項目の検討として、ナトリウム漏えい事象における重要度ランク評価、コード V&V の観点での既存実験の整理（評価マトリクスの作成）を実施すると共に、実験装置のスケールリングに対する検討を行った。また、ナトリウム漏えい時のコンクリート区画内での伝熱流動や物質移行挙動を明らかにするため、取り扱いに優しい非ナトリウム系の模擬エアロゾル（模擬粒子）を用いて、複数の貫通部で連結された多区画部内での温度や粒子移行挙動等を計測可能な多セル区画実験装置を設計・製作した。

実験計画の策定、必要計測機器の準備をした上で、多セル間の熱・物質移行試験及びデー

タの分析を実施すると共に、3次元CFD解析を援用して模擬粒子が移行する現象理解を深めた。また、得られた実験データを整理し、コードV&Vに資するデータベースを構築した。

4.3.2 燃焼生成エアロゾル性状計測

既存装置の改良を行うと共に、レーザアクセスシステムの追設、ナトリウム燃焼過程と生成するエアロゾルの光学計測系の構築を行い、試験装置を改良した。改良した試験装置における実験基本パラメータ（基本条件）を決定し、ナトリウム燃焼形態及びエアロゾルの生成状況を把握した。またこれまでに実施したレーザ計測試験の結果を整理・分析すると共に特徴的な条件を選定し、その再現性を確認するため、同条件下で3回以上の試験を行い、試験値のばらつきを確認した。更に、計測値の精度を評価するために必要な基礎データを取得し、試験に対する誤差要因を評価した。

また、ナトリウムと酸素、水蒸気との素反応解析を行い、上記で整理したナトリウム燃焼計測結果との比較・検討を行った。これにより、ナトリウム燃焼における主反応経路の同定を行った。

4.3.3 ナトリウムとコンクリートとの反応性に係る熱分析実験

高速炉構造コンクリートにおいて断熱耐火材に使用される、パーライトコンクリートの主要成分であるカルシウム化合物とナトリウムもしくはナトリウム-コンクリート反応により副次的に生成する、ナトリウム化合物との反応性を把握するため、JAEAで所有する既存試験設備を整備し、グローブボックス内の環境で熱分析実験を可能とする試験体系を確立した。整備された環境の下、パーライトコンクリートの主要成分であるカルシウム化合物として、炭酸カルシウム及び水酸化カルシウムの試薬とナトリウムを用いた熱分析実験を実施した。熱分析実験で得られたデータを基に簡易的な速度論的評価を実施し、既往知見との比較検討をすると共に、広島大学と共同で想定シナリオや反応モデルの検討を実施し、反応挙動評価法の構築に資する知見及び見通しを得た。

4.3.4 ナトリウム - コンクリート反応の熱的挙動解析

4.3.3で実施した熱分析実験の研究成果を基にして、ナトリウムもしくはナトリウム化合物-構造コンクリート反応の反応性と反応挙動を評価するための実験的手法と実験項目の精査と選定を行った。この過程で、反応雰囲気依存した構造コンクリートの反応挙動の変化についての情報を追加実験により得た。また、一連の実験結果を解析する手法の定式化を図り、シビアアクシデントの想定シナリオに沿ってナトリウムもしくはナトリウム化合物-構造コンクリート反応の反応挙動を評価するシステムの骨格構造を提案した。更に、ナトリウムもしくはナトリウム化合物-炭酸カルシウム等の反応をモデル反応として、反応挙動評価法の実用性と得られる結果の意義について分析評価した。

研究期間全体を通じて、ナトリウム冷却高速炉の構造コンクリートの主要な構成成分とナトリウムもしくはナトリウム化合物との反応性と反応挙動について実験の分析を行い、モデル反応の実験解析を通じて明らかにし、安全性評価のための基礎的データを得た。

4.4 研究推進

本業務全般について、研究の方向性や進捗状況を確認するため、再委託先を含めた全体会議を適宜開催し、また、外部有識者によるアドバイザリ委員会を設置し、成果レビュー及び今後の展開について討議した。全体会議を 11 回実施し、効率的な研究実施をマネジメントした。また外部有識者によるアドバイザリ委員会を 6 回実施し、研究成果のレビュー、今後の研究開発に反映し得る貴重な意見を得た。

以上、4 ヶ年の研究期間全体を通じての所期の目標を達成した。