

過酷事故時の原子炉格納容器・原子炉建屋内の水素分布解析

大西 史倫* 浜野 明千宏** 高橋 淳郎* 三橋 利玄*

Three-Dimensional Analysis of Hydrogen Distribution in the Containment Vessel and Reactor Building during a Severe Accident

Fumitomo Onishi*, Achihiro Hamano**, Atsuo Takahashi* and Toshiharu Mitsuhashi*

過酷事故時における原子炉格納容器および原子炉建屋内の水素や水蒸気分布、水蒸気凝縮、セシウム挙動などの物理現象を詳細に解析することは安全性解析において重要である。そこで、これら物理現象を同時に解析できる 3 次元圧縮性流体解析手法に基づく BAROC コードを開発し、解析コードの有効性を確認するために苛酷事故時における原子炉建屋内の水素濃度分布を解析した。解析対象は福島第一原子力発電所 1 号機原子炉建屋相当とし、得られた解析結果は建屋内の 5 階に放出された水素が 4 階との開口部を通過して 4 階およびその下階にも流れ込む挙動を示した。さらに水蒸気および凝縮を考慮した解析を行い、水蒸気凝縮の効果もあり最終的に得られた濃度分布が可燃領域にあることを示した。

Keywords: BAROC、3 次元圧縮性流体解析、過酷事故、水素分布、多成分ガス、水蒸気凝縮、原子炉格納容器、原子炉建屋

1. はじめに

福島第一原子力発電所の事故では複数号機で水素爆発が発生しており、原子炉建屋内の水素分布解析[1]が重要である。水素分布の解析のためには、原子力発電所のシビアアクシデント解析コードが必要であるが、シビアアクシデント解析コードの多くは外国製の商用コード[2][3][4]であるため、容易にコードの変更や追加が困難である。また、これらコードのほとんどが詳細な 3 次元流体解析が行えないため、得られる水素分布は簡易的なものにならざるを得ない。

そこで、これら問題に対処するために原子炉格納容器および原子炉建屋内の 3 次元圧縮性流体解析コード BAROC を開発した。これにより詳細な 3 次元流体解析を行うことや過酷事故解析に必要

な機器や現象の解析機能の追加が容易となる。さらには、さまざまなシビアアクシデント解析コードとの結合も容易である。

本稿では、BAROC コードの機能概要およびコードの有効性確認のために実施した過酷事故時における原子炉建屋内水素分布解析および原子炉建屋内の水蒸気および凝縮を考慮した水素濃度分布解析について報告する。

2. BAROC コードの機能概要

本章では過酷事故時における原子炉格納容器および原子炉建屋内の 3 次元圧縮性流体解析コード BAROC (**B**est estimate **A**nalysis code for thermal-hydraulic phenomena with **R**eactor **O**perations in **C**ontainments and reactor buildings) の概要を説明する。

BAROC コードは、陰解法による 3 次元圧縮性流体解析機能の他、実在流体の状態方程式、水素、水蒸気を含む多成分ガス挙動解析機能、バルクおよび壁面での水蒸気凝縮解析機能、セシウム挙動解析機能、壁温度評価および壁熱伝達モデルなどを有している。

*アドバンスソフト株式会社 熱流動エンジニアリングセンター

Thermal Hydraulics Engineering Center, AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 第 4 事業部

4th Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

BAROC コードの開発にあたって、多成分ガスに対する3次元圧縮性流体解析をSIMPLE法系列の解法[5][6]より効率良く計算できるように、新たな陰解法として圧力 Poisson 方程式をエネルギー保存式に基づいて組み立て圧力、流速、エネルギーが強く結びついた解法[7] (ECBA 法と呼ぶ) を独自に開発した。

さらには、原子炉格納容器や原子炉建屋に対する計算モデルの構築を容易にするために、STL ファイルからモデル形状を読み込む機能を持たせるようにした。

以下では、主要な解析機能である3次元圧縮性流体解析機能、実在流体の状態方程式、多成分ガス挙動解析機能などを説明する。

2.1.3 次元圧縮性流体解析の基礎方程式

本節では、デカルト座標系と円筒座標系に対する基礎方程式を示す。なお、以下の基礎方程式において、 $\alpha = 1$ のとき、円筒座標系の (r, θ, z) に対応し、 $\alpha = 0$ のときデカルト座標系の (x, y, z) に対応する。また、基礎式に対して体積多孔率 γ_v 、面積透過率 $\gamma_r, \gamma_\theta, \gamma_z$ 、抵抗 R_r, R_θ, R_z についても考慮した。粘性係数については、乱流粘性係数を流体の粘性係数との和で表わした実効粘性係数 $\mu_e (= \mu + \mu_t)$ とし、熱伝導度については乱流熱伝導度と熱伝導度の和で表わした実効熱伝導度 $\lambda_e (= \lambda + \lambda_t)$ とした。

(1) 質量保存式

$$\gamma_v \frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \gamma_r \rho u) + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial \gamma_\theta \rho v}{\partial \theta} + \frac{\partial \gamma_z \rho w}{\partial z} = \Gamma \quad (1)$$

ここで、 t は時間、 ρ は流体密度、 u, v, w は3方向の流速、 Γ は質量の生成消滅を表す。

(2) 運動量保存式

① x 方向運動量保存式

$$\gamma_v \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial r^\alpha \gamma_r u \rho u}{\partial r} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial \gamma_\theta v \rho u}{\partial \theta} - \frac{\alpha \gamma_v \rho v^2}{r} + \frac{\partial \gamma_z w \rho u}{\partial z} = -\gamma_v \left(\frac{\partial p}{\partial r}\right) - R_r - \gamma_v \rho g_r \quad (2)$$

$$+ \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left[r^\alpha \gamma_r \mu_e 2 \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\gamma_\theta \mu_e \left\{ \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial r} - \alpha \frac{v}{r} \right\} \right] - \alpha \frac{2 \gamma_v \mu_e}{r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{u}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\gamma_z \mu_e \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \right]$$

ここで、 p は圧力、 μ は粘性係数、 R は重力や流体抵抗損失などの外力および凝縮などによる生成消滅項を示す。いずれも各方向で共通である。

② y 方向運動量保存式

$$\gamma_v \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial r^\alpha \gamma_r u \rho v}{\partial r} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial \gamma_\theta v \rho v}{\partial \theta} + \frac{\alpha \gamma_v \rho u v}{r} + \frac{\partial \gamma_z w \rho v}{\partial z} = -\gamma_v \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \left(\frac{\partial p}{\partial \theta}\right) - R_\theta - \gamma_v \rho g_\theta + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left[r^\alpha \gamma_r \mu_e \left\{ \frac{\partial v}{\partial r} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial u}{\partial \theta} - \alpha \frac{v}{r} \right\} \right] + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\gamma_\theta \mu_e 2 \left\{ \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial v}{\partial \theta} + \alpha \frac{u}{r} \right\} \right] + \alpha \frac{1}{r} \gamma_v \mu_e \left(\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} - \frac{v}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\gamma_z \mu_e \left\{ \frac{\partial v}{\partial z} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial w}{\partial \theta} \right\} \right] \quad (3)$$

③ z 方向運動量保存式

$$\gamma_v \frac{\partial \rho w}{\partial t} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial r^\alpha \gamma_r u \rho w}{\partial r} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial \gamma_\theta v \rho w}{\partial \theta} + \frac{\partial \gamma_z w \rho w}{\partial z} = -\gamma_v \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right) - R_z - \gamma_v \rho g_z \quad (4)$$

$$+ \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left[r^\alpha \gamma_r \mu_e \left\{ \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right\} \right] + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\gamma_\theta \mu_e \left\{ \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial z} \right\} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\gamma_z \mu_e 2 \frac{\partial w}{\partial z} \right]$$

(3) エネルギー保存式

$$\begin{aligned}
& \gamma_v \frac{\partial E}{\partial t} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial r^\alpha \gamma_r (E+p)u}{\partial r} \\
& \quad + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial \gamma_\theta (E+p)v}{\partial \theta} \\
& \quad + \frac{\partial \gamma_z (E+p)w}{\partial z} \\
& = \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \gamma_r \lambda_e \frac{\partial T}{\partial r} \right) \\
& \quad + \left(\frac{1}{r^2}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\gamma_\theta \lambda_e \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) \\
& \quad + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_z \lambda_e \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (5) \\
& + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \gamma_r \sum h_p (\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right. \\
& \quad \left. - \frac{\lambda_e}{C_p}) \frac{\partial Y_p}{\partial r} \right) \\
& + \left(\frac{1}{r^2}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\gamma_\theta \sum h_p (\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right. \\
& \quad \left. - \frac{\lambda_e}{C_p}) \frac{\partial Y_p}{\partial \theta} \right) \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_z \sum h_p (\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} - \frac{\lambda_e}{C_p}) \frac{\partial Y_p}{\partial z} \right)
\end{aligned}$$

ここで、 E は全エネルギー、 T は流体温度(以下、単に温度)、 Y_p は p 成分の質量分率、 D_{pq} は成分 p と q の相互拡散係数を示す。また、 λ_e は実効熱伝導度で分子熱伝導度 λ と乱流熱伝導度 λ_t の和で表され、乱流熱伝導度は、定圧比熱、乱流粘性係数および乱流プラントル数を用いて表わされる。

2.2. 多成分ガス挙動解析モデル

本式は p 成分の質量分率 Y_p に関する質量保存式として表される。拡散項では、分子拡散と乱流拡散を考慮する。 σ_c は乱流 Schmidt 数であり、通常 1.0 である。

$$\begin{aligned}
& \gamma_v \frac{\partial \rho Y_p}{\partial t} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial r^\alpha \gamma_r \rho u Y_p}{\partial r} \\
& \quad + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial \gamma_\theta \rho v Y_p}{\partial \theta} \\
& \quad + \frac{\partial \gamma_z \rho w Y_p}{\partial z} \\
& = \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \gamma_r (\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c}) \frac{\partial Y_p}{\partial r} \right) \\
& \quad + \left(\frac{1}{r^2}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\gamma_\theta (\rho D_{pq} \right. \\
& \quad \left. + \frac{\mu_t}{\sigma_c}) \frac{\partial Y_p}{\partial \theta} \right) \\
& \quad + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_z (\rho D_{pq} \right. \\
& \quad \left. + \frac{\mu_t}{\sigma_c}) \frac{\partial Y_p}{\partial z} \right) + \gamma_v \rho Y_{p,\text{src}} \quad (6)
\end{aligned}$$

2.3. 状態方程式およびガス物性関数

多成分ガスで構成される流体に対する状態方程式は次に示す完全理想気体式と実在物性に対応した SRK(Soave-Redlich-Kwong)式[8]、Peng-Robinson 式[9]の3つの式が選択可能である。これら状態方程式をもとに、圧力 p 、温度 T 、流体密度 ρ の関係が得られる。

(1) 完全理想気体式

$$p = \rho RT \quad (7)$$

(2) SRK(Soave-Redlich-Kwong)式

$$p = \frac{\rho T}{1 - b\rho} R - \frac{a\rho^2}{1 + b\rho} \quad (8)$$

(3) Peng-Robinson 式

$$p = \frac{\rho T}{1 - b\rho} R - \frac{a\rho^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2} \quad (9)$$

ここで、 R は一般気体定数を分子量で割ったものである。

単成分ガスのパラメータ(a , b)は次のように表される。

$$a = a_c D(T)$$

$$a_c = \frac{f_a}{P_c} \left(\frac{R}{M} T_c \right)^2 = \text{const.}$$

$$D^{0.5} = 1 + m \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{0.5} \right] = [D(T)]^{0.5} + \frac{b_1}{T}$$

$$\begin{aligned} m &= 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \\ &= m(\omega) \\ &= \text{const. (Peng} \\ &\quad \text{– Robinson)} \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} m &= 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 = m(\omega) \\ &= \text{const. (SRK)} \end{aligned}$$

$$b = f_b \frac{R T_c}{M P_c} = \text{const.}$$

$$f_a = \begin{cases} 0.45723553 & \text{(Peng – Robinson)} \\ 0.42748 & \text{(SRK)} \end{cases}$$

$$f_b = \begin{cases} 0.077796074 & \text{(Peng – Robinson)} \\ 0.08664 & \text{(SRK)} \end{cases}$$

ここで、 ω は偏心因子と呼ばれる。 T_c は臨界温度、 P_c は臨界圧力を表す。

多成分系の場合、 (a, b) は混合則に基づいた以下の式で表される。なお、各成分のパラメータ (a, b) は(10)式を用いて得られる。 X はモル分率を表している。

$$\begin{aligned} a &= \sum_i \sum_j X_i X_j (a_i a_j)^{0.5} \\ b &= \sum_i X_i b_i \end{aligned} \quad (11)$$

ガスを想定した状態方程式を使用する場合、定圧比熱 C_p 、比エンタルピー h 、粘性係数 μ 、熱伝導度 κ は圧力に依存せず、温度のみの関数とし、実測に基づいた温度の多項式で表すこととする。多項式中の係数は物質ごとに NASA より提供されているデータベース[10]を基に設定する。なお、BAROC で用意している物質は次のとおりである。

アルゴン、メタン、一酸化炭素、二酸化炭素、エタン、エタノール、プロパン、イソブタン、ブタン、水素、水、硫化水素、ヘリウム、アンモニア、一酸化窒素、窒素、亜酸化窒素、酸素、二酸化硫黄、硫黄、エチレン、クリプトン、キセノン、ヨウ素

(1) 定圧比熱

$$\frac{C_p}{R} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4 \quad (12)$$

(2) 比エンタルピー

$$\frac{h}{RT} = a_0 + a_1 \frac{T}{2} + a_2 \frac{T^2}{3} + a_3 \frac{T^3}{4} + a_4 \frac{T^4}{5} \quad (13)$$

(3) 粘性係数

$$\ln \mu = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \quad (14)$$

(4) 熱伝導度

$$\ln \kappa = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \quad (15)$$

定圧比熱 C_p と定積比熱 C_v の関係は状態方程式ごとに異なり、次のように表される。

(1) 完全理想気体式

$$C_p = C_v + \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)^2}{\rho^2 \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)} = C_v + R \quad (16)$$

(2) SRK(Soave-Redlich-Kwong)式

$$\begin{aligned} C_p &= C_v + \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)^2}{\rho^2 \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)} = C_v + \frac{R}{AB^{-2}} \\ A &= 1 - \frac{a\rho(1-b\rho)^2(2+b\rho)}{RT(1+b\rho)} \\ B &= 1 + \frac{a\rho(1-b\rho)(D(T)T_c)^{-0.5}}{T(1+b\rho)} \end{aligned} \quad (17)$$

(3) Peng-Robinson 式

$$\begin{aligned} C_p &= C_v + \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)^2}{\rho^2 \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)} = C_v + \frac{R}{AB^{-2}} \\ A &= 1 - \frac{2a\rho(1-b\rho)^2(1+b\rho)}{RT(1+2b\rho-b^2\rho^2)} \\ B &= 1 + \frac{a\rho(1-b\rho)(D(T)T_c)^{-0.5}}{T(1+2b\rho-b^2\rho^2)} \end{aligned} \quad (18)$$

なお、多成分系では式(11)に示したように温度に対する複雑な式として a が表されるため、式(17)

と式(18)の A 、 B ともさらに複雑な式となる。

多成分系の平均の定圧比熱、比エンタルピー、粘性係数、熱伝導度は単成分の物性を以下の式 [12]で平均化して用いる。

(1)平均定圧比熱

単成分の定圧比熱と質量分率を用いて平均化する。

$$\bar{c}_p = \sum_i c_{p_i} Y_i \quad (19)$$

(2)平均比エンタルピー

単成分の比エンタルピーと質量分率を用いて平均化する。

$$\bar{h} = \sum_i h_i Y_i \quad (20)$$

(3)平均粘性係数

平均粘性係数は、次の Sutherland-Wassiljewa の式を用いて求める。

$$\bar{\mu} = \sum_i \mu_i \left[\frac{1}{X_i} \sum_j X_j \Phi_{ij} \right]^{-1} \quad (21)$$

$$= \sum_i \mu_i \left[\frac{1}{Y_i} \sum_j \left(\frac{M_i}{M_j} \right) Y_j \Phi_{ij} \right]^{-1}$$

ここで、 Φ_{ij} は次の Wilke の式を用いて求める。

$$\Phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \left(\frac{M_i}{M_j} \right) \right) \right]^{1/2}} \quad (22)$$

(4)平均熱伝導度

平均熱伝導度は、次の Wassiljewa の式を用いて求める。

$$\bar{\kappa} = \sum_i \kappa_i \left[\frac{1}{X_i} \sum_j X_j A_{ij} \right]^{-1} \quad (23)$$

$$= \sum_i \kappa_i \left[\frac{1}{Y_i} \sum_j \left(\frac{M_i}{M_j} \right) Y_j A_{ij} \right]^{-1}$$

ここで、 A_{ij} は次の Mason-Saxena の式を用いて

求める。

$$A_{ij} = 1.065 \Phi_{ij} \quad (24)$$

2.4. 数値計算法

本節では BAROC コードの圧縮性流体解析の数値計算法として新たに開発した ECBA 法^[7]を説明する。BAROC コードには、ECBA 法その他、SIMPLEC 法ベースの圧縮性流体解析の数値解法である MCBA 法や非圧縮性流体解析の数値解法である SIMPLE 法、SIMPLER 法、SIMPLEC 法などを有している。

また、行列ソルバーとして自社保有の BiCGStab 法[11]ソルバーの他、反復解法ライブラリ Lis[14]も組み込まれており利用することができる。

図 1 に示した ECBA 法による数値計算法の流れを以下に述べる。

- ① 運動量保存式の圧力項を陽的に扱った連立方程式に対して BiCGStab 法[11]等の行列ソルバーを用いて解き、流速の予測値を求める。
- ② 流速の予測値、新しい時刻の流速、圧力修正量の関係式（流速と圧力の関係式）、および圧力修正量に対する流速修正のため係数を求める。
- ③ エネルギー保存式に流速の予測値、流速修正係数などを代入して圧力修正量を変数とするエネルギー保存式ベースの圧力 Poisson 方程式の係数行列と荷重ベクトルを作成する。
- ④ 圧力 Poisson 方程式に対して BiCGStab 法等の行列ソルバーを用いて解き、圧力修正量を求める。
- ⑤ 圧力修正量を用いて、新しい時刻の圧力、流速、全エネルギーを更新する。
- ⑥ 質量保存式に新しい時刻の流速を代入しても流体密度に対する連立方程式を組み立て、BiCGStab 法等の行列ソルバーを用いて解いて、新しい時刻の流体密度を求める。
- ⑦ 全エネルギーを基に圧力、流体密度、流速を用いて、エンタルピーおよび内部エネルギーを求める。

- ⑧ 新しい時刻の流速、流体密度を、多成分系ガス濃度の質量保存式に代入して、ガス濃度の質量分率に対する連立方程式を組み立て、BiCGStab 法等の行列ソルバーを用いて解いて、新しい時刻のガス濃度の質量分率を求める。
- ⑨ 状態方程式に圧力、内部エネルギーまたはエンタルピーを代入して、温度およびその他物性を求める。

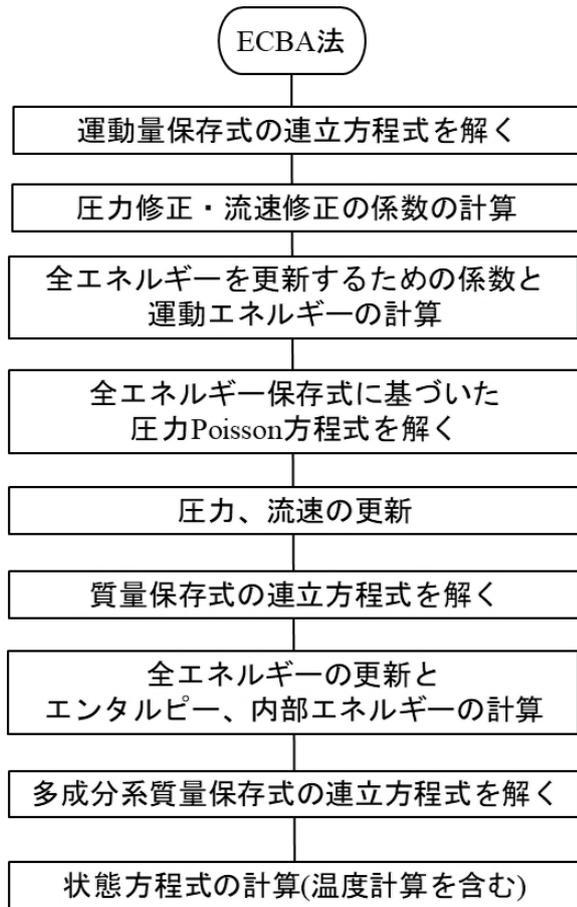


図 1 ECBA 法による数値解法の流れ

ECBA 法では、多成分ガスを考慮したエネルギー保存式を基に圧力 Poisson 方程式を組み上げるため、次のようにエネルギー保存式の左辺に第 5 項から第 7 項を、右辺に第 4 項から第 6 項を加えて変形する。運動量保存式の基本変数は流速 (u, v, w) ではなく運動量束 ($\rho u, \rho v, \rho w$) のため、対流項は運動量束を基に書き換えている。

$$\begin{aligned}
 & \gamma_v \frac{\partial E}{\partial t} + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial r^\alpha \gamma_r \left[\frac{E+p}{\rho}\right] \rho u}{\partial r} \\
 & + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial \gamma_\theta \left[\frac{E+p}{\rho}\right] \rho v}{\partial \theta} + \frac{\partial \gamma_z \left[\frac{E+p}{\rho}\right] \rho w}{\partial z} \\
 & - \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \gamma_r \lambda_e \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{E}{\rho C_v} \right] \right) \\
 & - \left(\frac{1}{r^2}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\gamma_\theta \lambda_e \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{E}{\rho C_v} \right] \right) \\
 & - \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_z \lambda_e \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{E}{\rho C_v} \right] \right) \\
 & = \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \gamma_r \lambda_e \frac{\partial T}{\partial r} \right) \\
 & + \left(\frac{1}{r^2}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\gamma_\theta \lambda_e \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_z \lambda_e \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\
 & - \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \gamma_r \lambda_e \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{E}{\rho C_v} \right] \right) \tag{25} \\
 & - \left(\frac{1}{r^2}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\gamma_\theta \lambda_e \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{E}{\rho C_v} \right] \right) \\
 & - \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_z \lambda_e \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{E}{\rho C_v} \right] \right) \\
 & + \left(\frac{1}{r}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \gamma_r \sum h_p (\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right. \\
 & \left. - \frac{\lambda_e}{C_p}) \frac{\partial Y_p}{\partial r} \right) \\
 & + \left(\frac{1}{r^2}\right)^\alpha \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\gamma_\theta \sum h_p (\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right. \\
 & \left. - \frac{\lambda_e}{C_p}) \frac{\partial Y_p}{\partial \theta} \right) \\
 & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_z \sum h_p (\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} - \frac{\lambda_e}{C_p}) \frac{\partial Y_p}{\partial z} \right)
 \end{aligned}$$

エネルギー保存式の基本変数である全エネルギー E を次のように書き換え、式(25)の左辺の E に代入して離散化する。

$$\begin{aligned}
 E &= \rho h - p + \frac{1}{2} \rho u^2 \\
 &\cong \left[\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)} - 1 \right] (p^{n+1(l)} \\
 &\quad + \delta p^{n+1(l+1)}) \\
 &\quad + \left(\frac{1}{2} \rho u^2\right)^{n+1(l)}
 \end{aligned} \tag{26}$$

また、式(25)の左辺の第 2 項から第 4 項の運動

量束に次式を代入して、圧力修正量に置き換える。

$$\begin{aligned}\rho u^{n+1}_{i+1/2} &= \rho u^l_{i+1/2} + \delta\rho u_{i+1/2} \\ \rho v^{n+1}_{j+1/2} &= \rho v^l_{j+1/2} + \delta\rho v_{j+1/2} \\ \rho w^{n+1}_{k+1/2} &= \rho w^l_{k+1/2} + \delta\rho w_{k+1/2} \\ \rho u_{i+1/2} &= -\frac{1}{(a^u_p + \sum a^u_{nb})_i} \frac{\delta p_{i+1} - \delta p_i}{\Delta l_i} \\ \delta\rho v_{j+1/2} &= -\frac{1}{(a^v_p + \sum a^v_{nb})_j} \frac{\delta p_{j+1} - \delta p_j}{\Delta m_j} \\ \delta\rho w_{k+1/2} &= -\frac{1}{(a^w_p + \sum a^w_{nb})_k} \frac{\delta p_{k+1} - \delta p_k}{\Delta n_k}\end{aligned}\quad (27)$$

このようにすることで、圧力修正量 $\delta p^{n+1(l+1)}$ に関する圧力 Poisson 方程式の連立方程式が得られる。なお、式(25)の左辺の対流項の離散化式には、式(26)と式(27)をかけることによって $\delta p^{n+1(l+1)}$ に関する二乗の項が現れるが、他より小さいものとして省略する。また、対流項において式(26)の $\delta p^{n+1(l+1)}$ と式(27)の $\delta p^{n+1(l+1)}$ の一方または両方を考慮するかは、収束性と計算安定性から判断して選択するようにしているが、検討の結果、式(27)の $\delta p^{n+1(l+1)}$ のみを考慮することを基本としている[7]。

また、式(25)の右辺の離散化式は行列計算の荷重項として代数的に計算する。

3. 原子炉建屋内水素分布解析

BAROC コードの有効性を確認するために苛酷事故時における原子炉建屋内の水素濃度分布を解析した。解析対象は福島第一原子力発電所1号機原子炉建屋相当とした。なお、水素最大濃度を先行研究の結果[1]と比較することを念頭に置いたため、本解析では水蒸気を考慮しなかった。

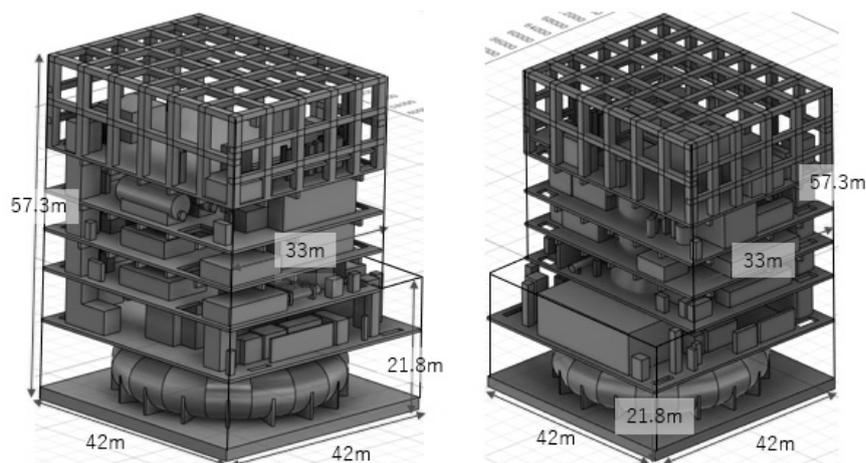
3.1. 想定シナリオと計算条件

想定したシナリオは全交流電源喪失(SBO)後、炉心溶融に伴い原子力格納容器トップフランジからシールドプラグを経由して原子炉建屋内5階オペレーションフロアに水素が漏洩する状況とした。水素はシールドプラグ1か所からオペレー

ションフロアに流入するものとし、水素の流入量と流入時間はMAAPによる解析結果[13]を参考とし、3ケースの流入量134kg、210kg、400kgと流入時間4.4時間とした。解析では一定の流入速度(kg/s)として与え、また、水素の流入温度は1,000Kとした。状態方程式には実在流体用のSRK式を用いた。本解析の主要な計算条件を表1に示す。

表1 原子炉建屋内水素分布解析の計算条件

No.	項目	内容
1	計算体系	X=42.0m(格子分割数:84) Y=42.0m(格子分割数:84) Z=57.3m(格子分割数:121)
2	全格子数	790,272
3	有効格子数	479,512
4	数値計算法	ECBA 法
5	状態方程式	SRK 式
6	乱流モデル	k-ε モデル
7	考慮するガス成分	N ₂ 、O ₂ 、H ₂
8	対流項の差分スキーム	一次精度風上差分法
9	時間刻み幅制御	Courant 数の最大値による自動制御
10	Courant 数の最大値	1,000
11	行列計算法	ILU(2)-BiCGStab(l)法 (Lis[14]を利用)
12	解析対象時間	流入開始から6時間
13	原子炉建屋内初期条件	圧力 : 101,325Pa 温度 : 298.15K 気体成分 : N ₂ 79% O ₂ 21% 流速 : ゼロ
14	水素流入箇所	5階シールドプラグ
15	水素流入量	134kg、210kg、400kg の3ケース
16	水素流入温度	1,000K
17	水素流入条件	計算開始から4.4時間まで一定量で流入
18	流速境界条件	スリップ
19	温度境界条件	外壁 : 298.15K 内部構造物 : 断熱



(1)機器ハッチから見た図

(2)(1)とは逆方向から見た図

図 2 原子炉建屋内水素分布解析の計算モデル

3.2. 計算モデル

公開情報から 1F1 の各階平面図を入手した。5 階平面図からは 4 階へ下りる階段が 2 か所設置されており、また、機器ハッチも 2 階から 5 階迄設置されていることを確認した。ただし、事故当時 1F1 5 階の機器ハッチは閉じていたため、2 階から 4 階までの機器ハッチは開いている状態とした。これら情報に基づき、3D CAD を活用し、3 次元の原子炉建屋モデルを作成した。内部の構造物の高さ情報が不明なため、設置する構造物はフロア高さの半分と仮定して設定した。作成した原子炉建屋モデルを図 2 に示す。作成したモデル形状を STL ファイルに変換して利用し、STL ファイルのモデル形状から直交格子での分割を行い、さらに形状模擬精度を上げるためにポアラス設定を行い計算に使用した。

3.3. 計算結果

水素流入量 134kg、210kg、400kg の 3 ケースに対して計算を行った。図 3 に水素流入量 210kg ケースの水素流入開始から 5 秒、25 秒、45 秒後の 5 階の水素濃度分布について示す。この結果より、原子炉建屋 5 階の梁や柱等の構造物を避けながら水素が上方に挙動しているのが分かる。

図 4 から図 6 に水素流入量 210kg ケースの水素流入開始から 1 時間、3 時間、5 時間後の流速ベクトル分布、水素濃度分布、温度分布を示す。

流速ベクトル分布より 5 階へ流入した水素は、階段を通過して 4 階に流入していることが明らかになった。また、4 階に流入した水素は機器ハッチを通過して 3 階、2 階へ流入していることが示された。計算開始から 4.4 時間までは 5 階シールドプラグから水素の流入があるため、下階へ水素が流入する現象が示されているが、水素流入停止後の計算開始から 5 時間の状態は 2 階から 3 階にかけて水素を多く含む流体が上昇している現象が示されている。

図 5 の水素濃度分布よりシールドプラグより漏洩した水素は約 1 時間で 5 階オペレーションフロアに充満し、その時の最大水素濃度は 4% 程度である。その後時間経過とともに 5 階の最大水素濃度は向上するも、水素流入が停止する 4.4 時間をピークに低下する。水素流入停止 1.6 時間後(実現象 6 時間後)の 5 階の最大水素濃度は 12% 程度であるが、流動変動と水素の拡散現象により最大水素濃度は低下途中であり、定常状態に到達するまでは多くの時間を要す結果となっている。

また、図 6 の温度分布も水素濃度分布と同様に 5 階オペレーションフロアの温度が最も高く、下階は温度が低い分布が計算結果より得られた。

図 7 と図 8 に水素流入量 134kg、210kg、400kg の 3 ケースの原子炉建屋内の平均圧力変化と平均温度変化を示す。水素流入量が多くなるに従って原子炉建屋内平均圧力および温度が高く推移す

る結果が得られた。

図 9 に水素流入開始から 5.5 時間から 6.0 時間の各階最大水素濃度の時間平均を示す。水素流入量 134kgs と 210kg ケースの 4 階と 5 階の最大水素濃度は先行研究の結果[1]と概ね一致していることを確かめた。

本計算は表 2 に示した計算サーバーを用いて実行した。3 ケースの計算に要した CPU 実行時間を表 3 に示す。有効格子数約 48 万格子の原子炉建屋内の 3 次元熱流動解析の計算が 11~16 時間程度の CPU 実行時間で計算結果が得られ、実用的な計算ができていているといえる。

表 2 使用した計算サーバーのスペック

No.	項目	詳細
1	OS	CentOS release 7.6.1810
2	CPU	Intel Gold 5218 2.30GHz
3	Memory	96GB

表 3 3 ケースの計算に要した CPU 実行時間

ケース	水素流入量	CPU 実行時間
1	134kg	14 hr 5 min
2	210kg	11 hr 55 min
3	400kg	16 hr 33 min

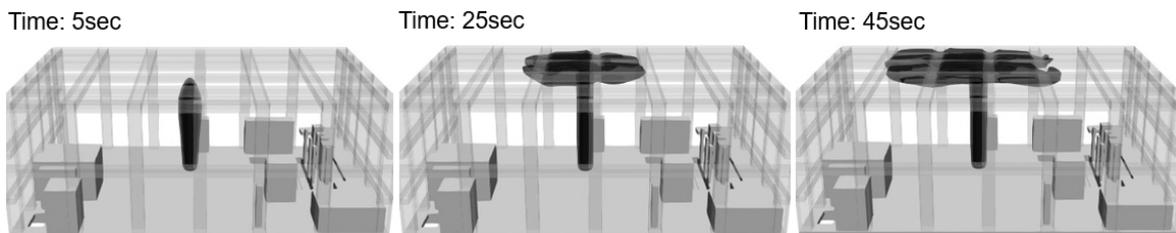


図 3 水素流入開始から 5 秒、25 秒、45 秒後の 5 階水素濃度分布 (水素流入量 210kg ケース)

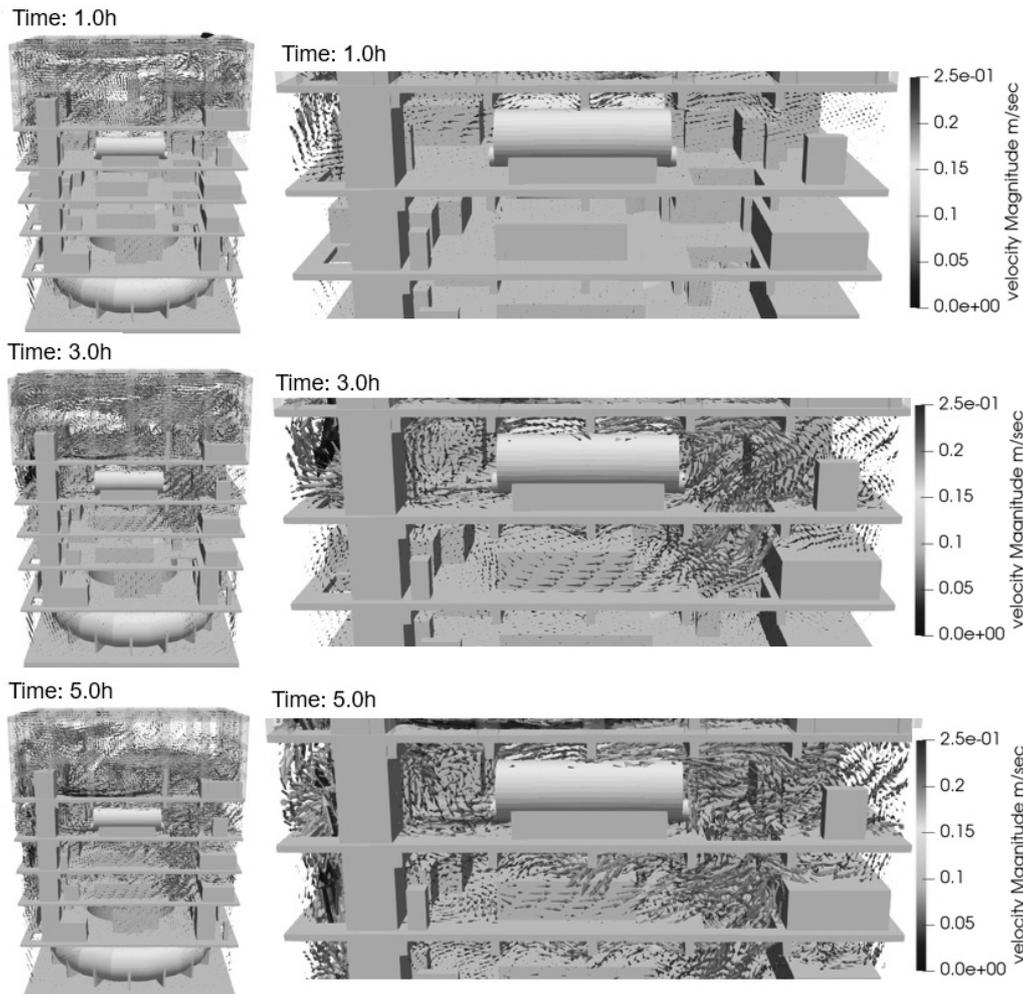


図 4 水素流入開始から 1 時間、3 時間、5 時間後の流速ベクトル分布 (水素流入量 210kg ケース)

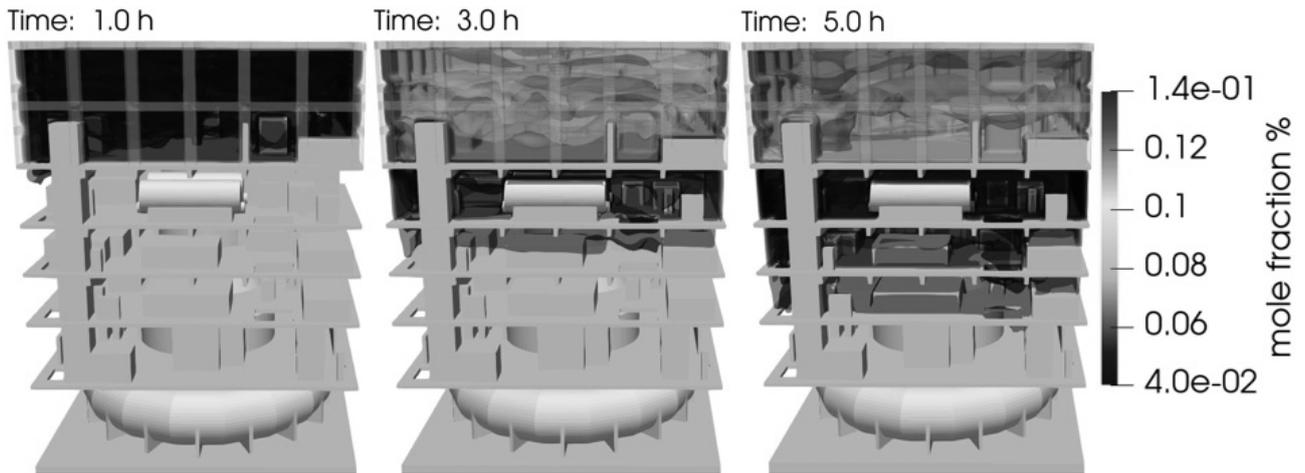


図 5 水素流入開始から 1 時間、3 時間、5 時間後の水素濃度分布（水素流入量 210kg ケース）

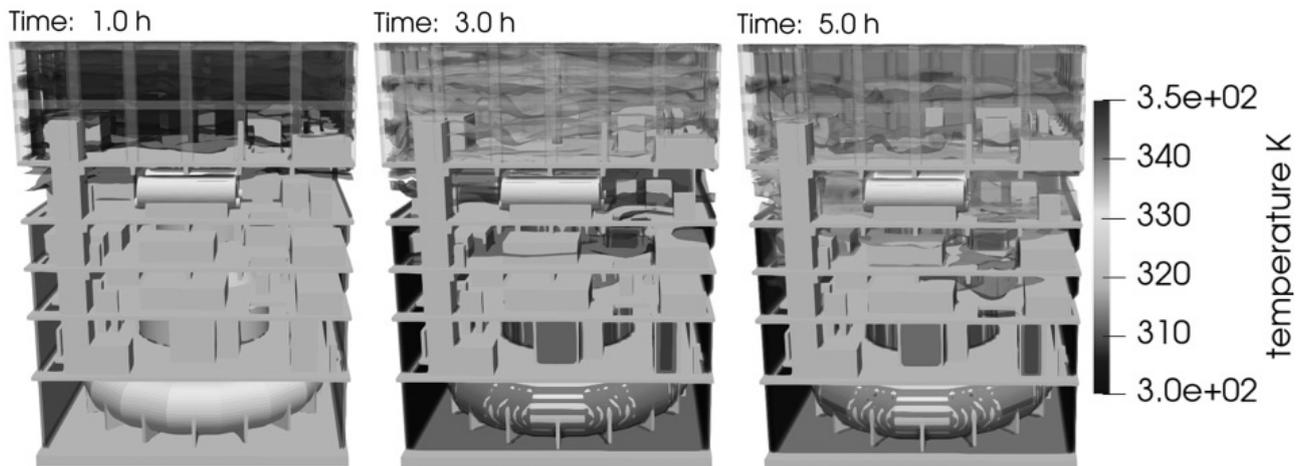


図 6 水素流入開始から 1 時間、3 時間、5 時間後の温度分布（水素流入量 210kg ケース）

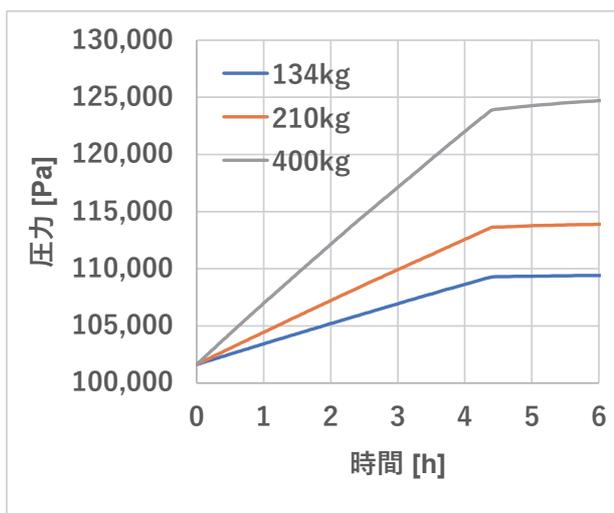


図 7 原子炉建屋内平均圧力変化

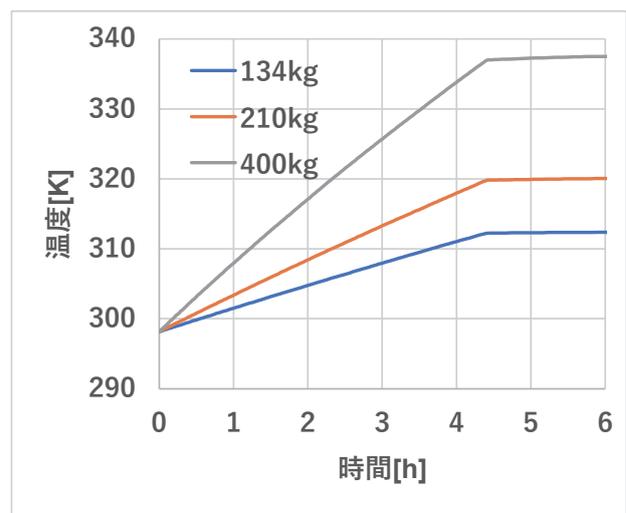


図 8 原子炉建屋内平均温度変化

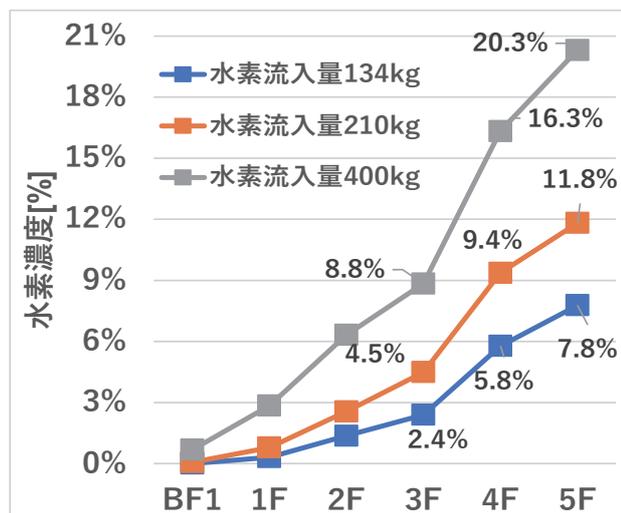


図 9 5.5 時間から 6 時間の各階最大水素濃度の時間平均

4. 水蒸気凝縮を考慮した原子炉建屋内水素・水蒸気分布解析

BAROC コードの有効性を確認するために苛酷事故時における原子炉建屋内の水素濃度と水蒸気濃度の分布を解析した。解析対象は福島第一原子力発電所 1 号機原子炉建屋相当とした。

なお、本解析ではバルクおよび壁面での水蒸気凝縮解析機能および壁温度評価および壁熱伝達モデルを用いている。

4.1. 想定シナリオと計算条件

想定したシナリオは全交流電源喪失(SBO)後、炉心溶融に伴い原子力格納容器トップフランジからシールドプラグを経由して原子炉建屋内 5 階オペレーションフロアに水素と水蒸気が漏洩する状況とした。水素と水蒸気はシールドプラグ 1 か所からオペレーションフロアに流入するものとし、水素と水蒸気の流入量と流入時間は MAAP による解析結果[13]を参考とし、水素と水蒸気の流入量はモル比 1 : 2.78 に相当する 210kg と 5,250kg とし、流入時間は 4.4 時間とした。解析では流入開始から 4.4 時間まで一定の流入速度(kg/s)として与え、また、水素の流入温度は 1,000K とした。状態方程式には実在流体用の SRK 式を用いた。

初期の水蒸気濃度は相対湿度 60%相当としてモル分率を算出し与えた。

外壁と内壁の温度は壁温度評価モデルを用いて計算し、外気の温度は 298.15K で固定した。壁の厚みは床面 1m、その他 5 面の外壁は 0.3m とし、材質をコンクリートとして熱容量と熱伝導度を与えた。外気側の熱伝達係数は入力で与え、内壁の熱伝達係数は BAROC コード内臓の相関式を用いて求めた。

水蒸気凝縮ではバルク凝縮と壁面凝縮を考慮した。

計算は水素・水蒸気流入開始から 24 時間まで行った。本解析の主要な計算条件を表 4 に示す。

表 4 水蒸気凝縮を考慮した原子炉建屋内水素分布解析の計算条件

No.	項目	内容
1	計算体系	X=38.0 m (格子分割数:76) Y=38.0 m (格子分割数:76) Z=54.3 m (格子分割数:92)
2	全格子数	531,392
3	有効格子数	336,217
4	数値計算法	ECBA 法
5	状態方程式	SRK 式
6	乱流モデル	k-ε モデル
7	考慮するガス成分	N ₂ 、O ₂ 、H ₂ 、H ₂ O
8	対流項の差分スキーム	一次精度風上差分法
9	時間刻み幅制御	Courant 数の最大値による自動制御
10	Courant 数の最大値	1,000
11	行列計算法	ILU(2)-BiCGStab(l)法 (Lis[14]を利用)
12	解析対象時間	流入開始から 24 時間
13	原子炉建屋内初期条件	圧力 : 101,325Pa 温度 : 298.15K 気体成分 : N ₂ 77.5%、O ₂ 20.6%、H ₂ O 1.9% 流速 : ゼロ
14	水素流入箇所	5 階シールドプラグ
15	水素流入量	210kg
16	水蒸気流入量	5,250kg
17	水素・水蒸気流入温度	1,000K

18	水素・水蒸気 流入条件	計算開始から 4.4 時間まで一定量で流入
19	流速境界条件	スリップ
20	温度境界条件	外壁：外気 298.15K で固定、壁温度評価モデルを使用 内部構造物：断熱
21	水蒸気凝縮	バルク凝縮と壁面凝縮

4.2. 計算モデル

3.2 節と同様に公開情報より原子炉建屋モデルの寸法を採取し、これら情報に基づき、3DCAD を活用し、3 次元の原子炉建屋モデルを作成した。作成した原子炉建屋モデル図 10 に示す。原子炉建屋モデル形状の入力データモデル形状から直交格子での分割を行い、さらに形状模擬精度を上げるためにポーラス設定を行い計算に使用した。当モデルは 3.2 節の計算モデルと異なり、2 階から 5 階迄の機器ハッチは開状態とした。

4.3. 計算結果

水素流入量 210kg、水蒸気流入量 5,250kg として流入開始から 4.4 時間、流入停止後 19.6 時間として全体で 24 時間の計算を行った。水素・水蒸気流入開始から 2 時間、4 時間、6 時間後の流速ベクトル分布、水素濃度分布、水蒸気濃度分布、温度分布を図 11 から図 14 に示す。

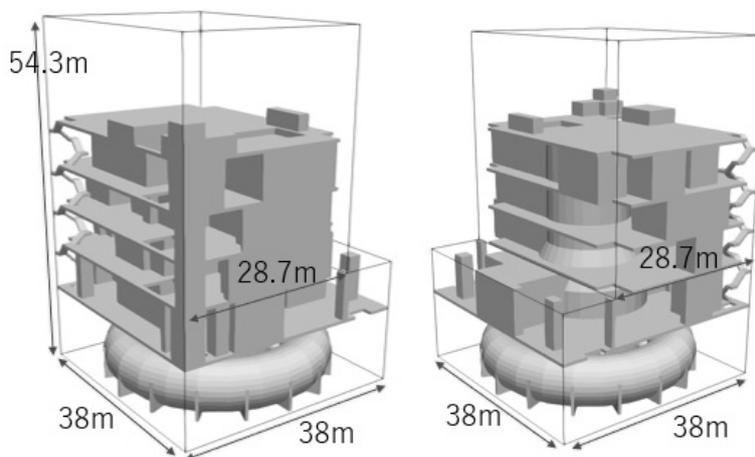
図 15 と図 16 に地下から 5 階の各階の最大水素濃度変化と最高温度変化を示す。また、図 17 と

図 18 に原子炉建屋内の平均圧力変化と平均温度変化を示す。

図 11 の流速ベクトル分布より 5 階へ流入した水素は、流入開始から 4.4 時間まで 5 階フロアに水素・水蒸気の流入があるため、5 階フロアの機器ハッチから 4 階、3 階に水素・水蒸気が流入する現象が示されている。流入開始から 4.4 時間後以降は開口面積が大きい機器ハッチを通じて上の階に水素・水蒸気を含む流体が流入する現象が得られた。

図 12 の水素濃度分布よりシールドプラグから流入した水素は流入開始から 2 時間で 5 階オペレーションフロアに充満し、流入開始から 4 時間で水素濃度は 10% を越え、最大水素濃度は 20% 程度まで上昇し、階下の 4 階でも 10% を越えている(図 15)。その後、水素・水蒸気流入から 4.4 時間で流入が停止すると、最大水素濃度は急速に低下する。流入開始から 6 時間後(水素流入停止 1.6 時間後)の 5 階の最大水素濃度は 11% 程度まで低下する。

図 13 の水蒸気濃度分布も水素濃度分布と同様に、水蒸気が流入している期間は濃度が上昇し、流入開始から 4.4 時間後ピークに達する。5 階オペレーションフロアにおいて、最大で水蒸気濃度が 50% 近くまで達するが、平均としては水蒸気凝縮の効果により 10% 程度に収まっている。流入停止後、図 16 の最高温度変化や図 14 の 6 時間後の温度分布に見られるように、急速な温度低下に伴って水蒸気凝縮が促進されるため、最大でも水蒸気濃度は 5~6% 程度となる。



(1)機器ハッチから見た図

(2)(1)とは逆方向から見た図

図 10 水蒸気凝縮を考慮した原子炉建屋内水素分布解析の計算モデル

急速な温度低下による水蒸気凝縮の促進は、図 18 に示した原子炉建屋内の平均圧力変化にも影響がみられる。

図 19 に流入開始後 6 時間後と 24 時間後の地下から 5 階の各階の最大水素濃度を示す。流動変動や乱流拡散により 24 時間後の水素濃度分布はかなり緩やかなものとなっているが、5 階と 4 階では水素濃度は 10%程度に維持されている。

24 時間後では 4 階、5 階とも水素濃度 10%、水蒸気濃度 4%、空気濃度 86%となる結果が得られ、

いずれも文献[15]の Fig. 3 の水素-水蒸気-空気混合物の三元図の可燃領域に入っていることが示された。

以上により、原子炉建屋内の水蒸気凝縮を考慮した水素濃度分布の解析ができ、流入開始から 24 時間後の水素濃度、水蒸気濃度、空気濃度が可燃領域にあることが示された。

本解析 24 時間の計算にかかった CPU 実行時間は 17.7 時間と実時間より速く、実用的な計算ができていていることが分かる。

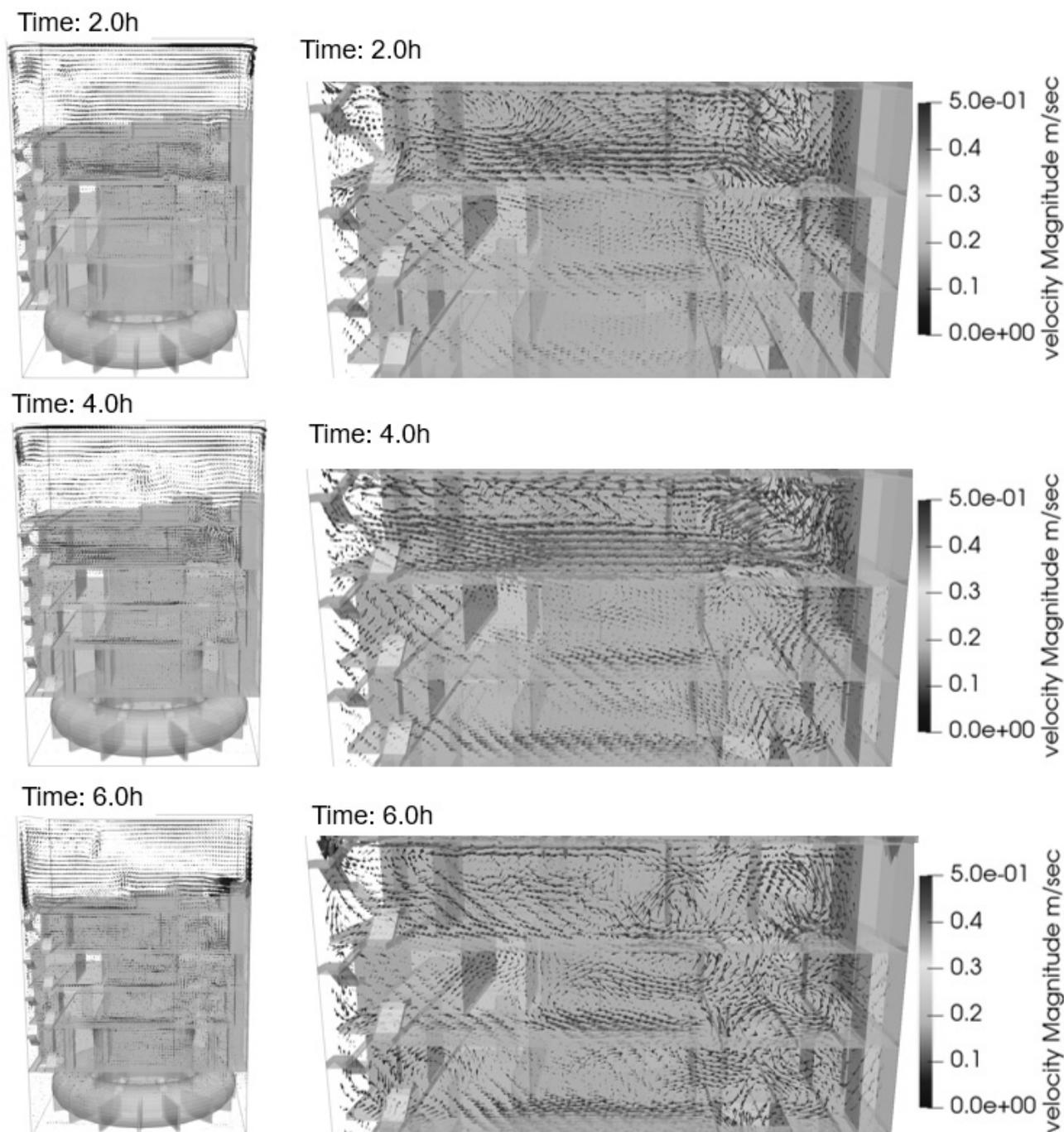


図 11 水素・水蒸気流入開始から 2 時間、4 時間、6 時間後の流速ベクトル分布

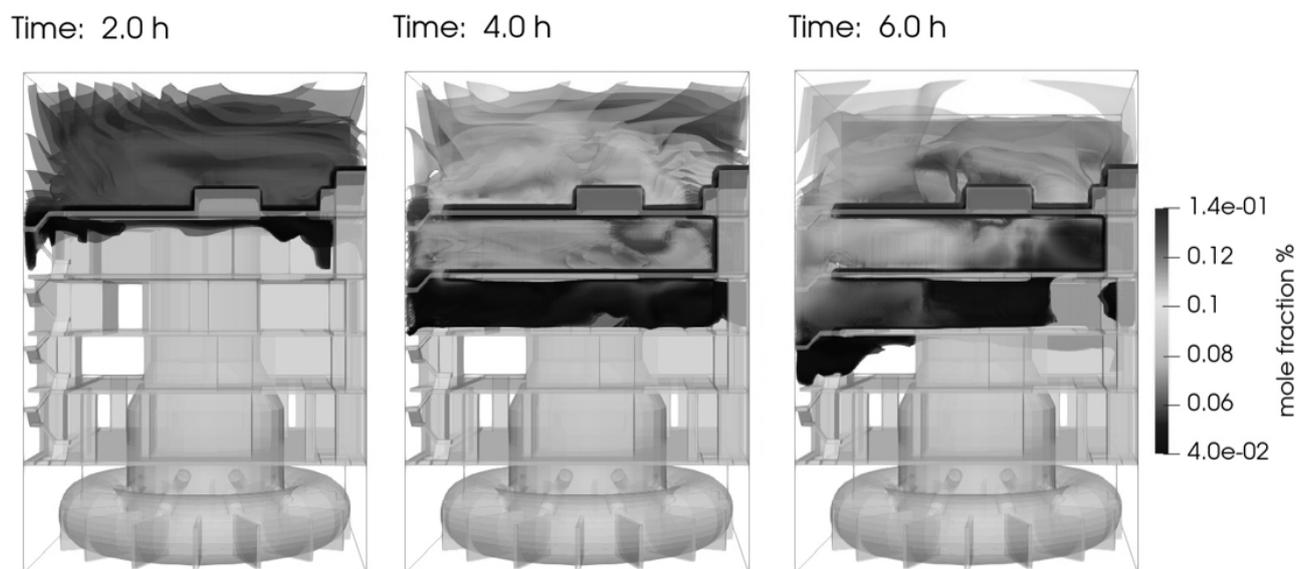


図 12 水素・水蒸気流入開始から 2 時間、4 時間、6 時間後の水素濃度分布

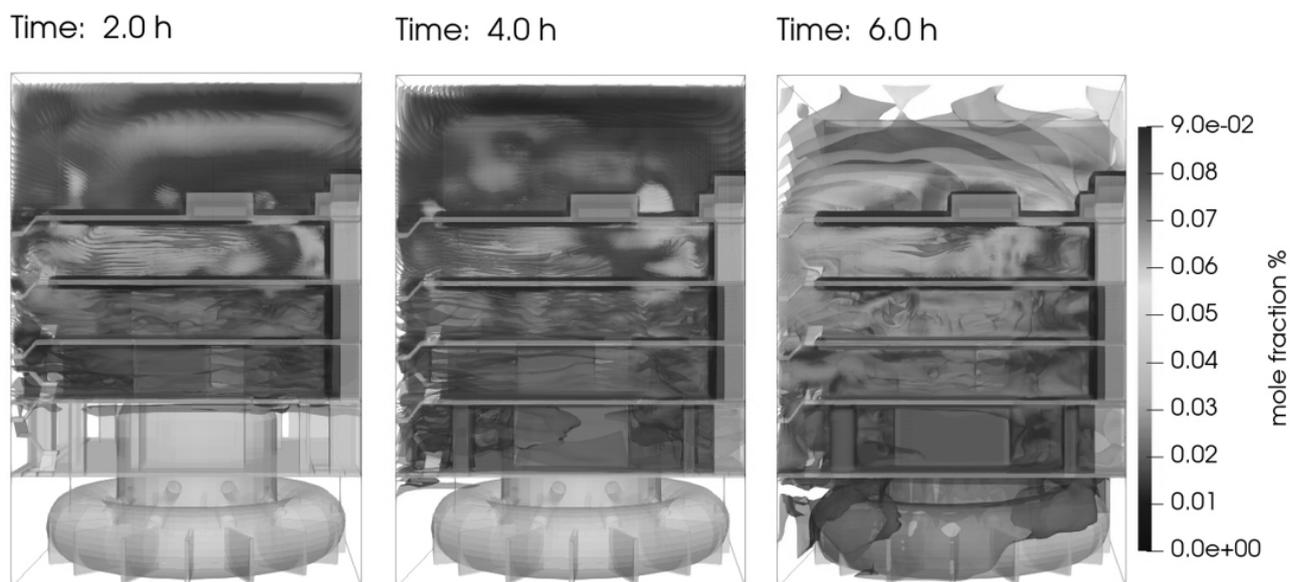


図 13 水素・水蒸気流入開始から 2 時間、4 時間、6 時間後の水蒸気濃度分布

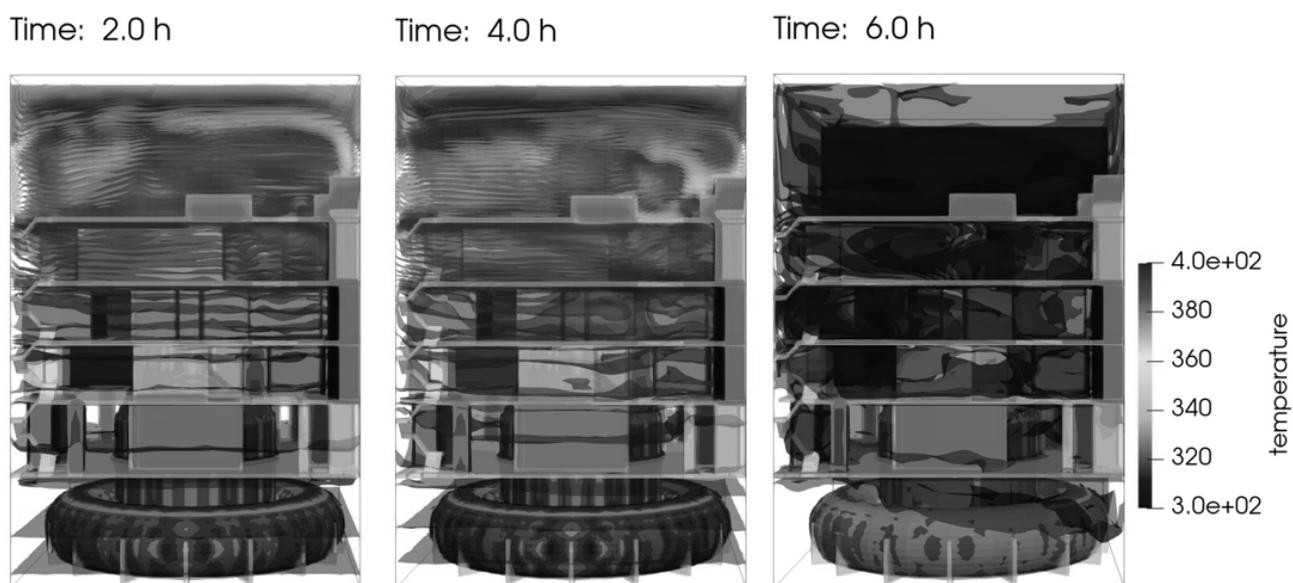


図 14 水素・水蒸気流入開始から 2 時間、4 時間、6 時間後の温度分布

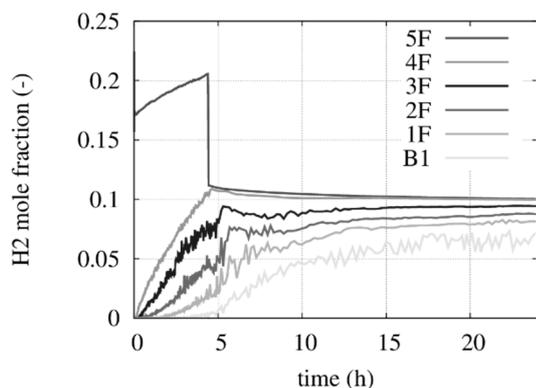


図 15 各階最大水素濃度変化

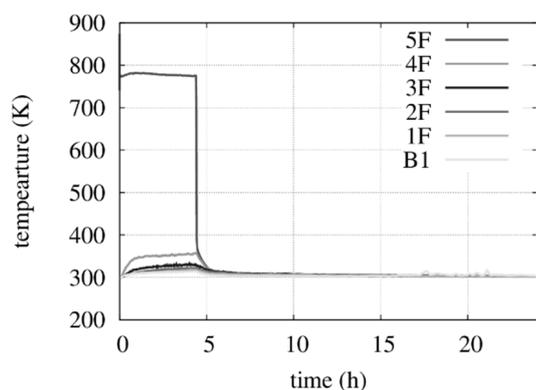


図 16 各階最高温度変化

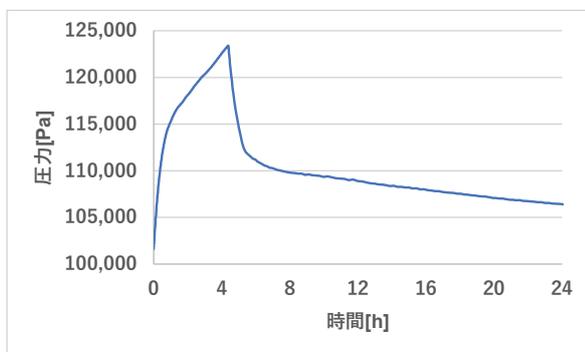


図 17 原子炉建屋内平均圧力変化

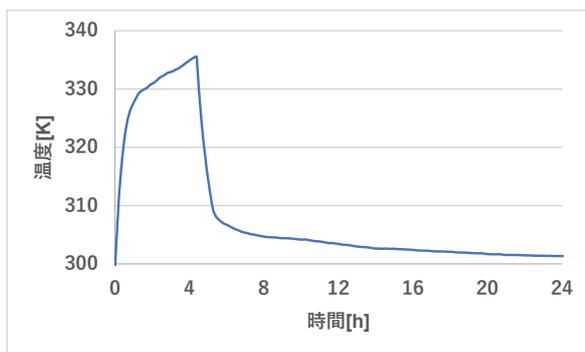


図 18 原子炉建屋内平均温度変化

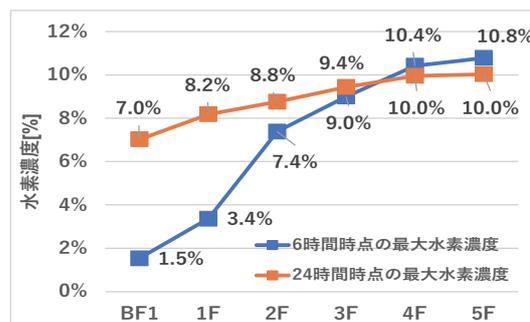


図 19 6 時間後と 24 時間後の各階最大水素濃度

5. まとめ

原子炉格納容器および原子炉建屋内の本格的な 3 次元流体解析コード BAROC を開発した。BAROC コードは、独自に開発した新しい陰解法による 3 次元圧縮性流体解析機能の他、実在流体の状態方程式、水素、水蒸気を含む多成分ガス挙動解析機能、バルクおよび壁面での水蒸気凝縮解析機能、セシウム挙動解析機能、壁温度評価および壁熱伝達モデルなど、原子炉格納容器および原子炉建屋内の 3 次元流体解析を実施する上で必要最低限の機能を有している。

本稿では、BAROC コードの機能概要を説明するとともに、解析コードの有効性を確認するために実施した福島第一原子力発電所 1 号機原子炉建屋相当の苛酷事故時における原子炉建屋内の水素濃度分布解析について報告した。得られた解析結果は建屋内の 5 階に放出された水素が 4 階との開口部を通して 4 階およびその下階にも流れ込む挙動を示すと同時に先行研究と同等の水素濃度が得られた。さらに原子炉建屋内の水蒸気および凝縮を考慮した水素濃度分布の解析を行い、流入開始から 24 時間後の水素濃度、水蒸気濃度、空気濃度が可燃領域にあることを示した。

今後は原子炉格納容器および原子炉建屋特有の機器や現象に対する解析モデルの組み込み、並列化による高速化、シビアアクシデント解析コードとの結合などを予定している。

参考文献

- [1] 福島第一原子力発電所事故発生後の詳細な進展メカニズムに関する未確認・未解明事

- 項の調査・検討結果「第5回進捗報告」について(添付資料 1-10).
- [2] Frank Rahn, "GOTHIC CONTAINMENT ANALYSIS PACKAGE TECHNICAL MANUAL Version 7.2b(QA)", NAI 8907-06 Rev 17 (March 2009).
- [3] Frank Rahn, "GOTHIC CONTAINMENT ANALYSIS PACKAGE USER MANUAL Version 7.2b(QA)", NAI 8907-02 Rev 18 (March 2009).
- [4] "MELCOR Computer Code Manuals Vol. 1: Primer and User's Guide Version 1.8.6", NUREG/CR-6119, Sandia National Laboratories (September 2005).
- [5] Patankar, S.V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere (1970).
- [6] Van Doormaal, J. P. and Raithby, G.D., "Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows", Numerical Heat Transfer. vol. 7, pp. 147-163, (1984).
- [7] 三橋, "陰解法による3次元圧縮性流体解析の新手法 - SIMPLE 法系列の限界を超えて", アドバンスシミュレーション vol.28 (2020).
- [8] Soave, G.; "Equilibrium constants from a modified Redkh-Kwong equation of state"; Chemical Engineering Science, 1972, Vol.27, p.1197-1203.
- [9] Peng, D. Y, and Robinson, D. B. ; "The characterization of the heptanes and heavier fractions for the GPA Peng-Robinson programs" Gas Processors Association, 1978.
- [10] Bonnie J. McBride, Sanford Gordon and Martin A. Reno, Coefficients for Calculating, Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species, NASA, Technical Memorandum 4513, 1993.
- [11] H. A. van der Vorst, "Bi-CGSTAB : a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems", SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing (1992). 13(2):631-644.
- [12] 富士総合研究所編「汎用流体解析システム」、丸善株式会社(1993年), p341 など.
- [13] 原子力規制委員会, 「1～3号機原子炉建屋における線源調査について ～汚染密度、核種スペクトル測定の実績～」, (2020.6.25) .
- [14] 反復解法ライブラリ Lis, <https://www.ssisc.org/lis/>
- [15] Z.M. Shapiro, T.R. Moffette, "HYDROGEN FLAMMABILITY DATA AND APPLICATION TO PWR LOSS-OF-COOLANT ACCIDENT", WAPD-SC-545, U.S. Atomic Energy Commission, Pittsburgh, PA (1957).
- ※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル(カラー版) がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)