# 過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コードAdvance/BAROCの計算安定性強化と質量保存性向上のための改良

三橋　利玄*　　高橋　淳郎**　　大西　史倫**　　浜野　明千宏**

# Enhancements for Improved Numerical Stability and Mass Conservation of Three-Dimensional Thermal-Hydraulic Analysis Software for Containment Vessel and Reactor Building during Severe Accidents, Advance/BAROC

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

一般に熱流動計算では大量の水蒸気凝縮が生じると計算不安定になることが多く、計算時の時間刻み幅が大きく制限される。Advance/BAROC ではこれを克服するために水蒸気の凝縮項の線形化を工夫し、質量保存式、エネルギー保存式、水蒸気成分の対流拡散方程式に適用した。さらに、質量保存性を高めるために、質量保存式に物質成分の拡散項の総和を加え、成分濃度の正規化を行わなくても良いように改良を加えた。これにより、原子炉建屋の 3 次元熱流動計算において 16 時間で 150 トンにも及ぶ大量の水蒸気が流入し、90%以上の水蒸気が凝縮しても、Courant 数が 15 万以上の時間刻み幅に相当する 1 時間としても安定に計算できることを確認し、さらには、酸素、窒素、水素などの質量が所定の質量と一致していることを確認した。

https://doi.org/10.69290/j.001183-vol32
Keywords: BAROC、3 次元圧縮性熱流体解析、過酷事故、水素濃度分布、多成分ガス、水蒸気凝縮、BWR、原子炉建屋、計算安定性の強化、質量保存性の向上

## 1. はじめに

福島第一原子力発電所の事故では複数の原子炉建屋で水素爆発が発生しており、改めて原子炉建屋内の水素濃度分布挙動解析[1]が重要視されている。詳細な水素濃度分布を求めるためには、原子炉建屋内の複雑な構造を模擬しつつ、計算格子を細かくしてモデル化し、様々な複雑な物理現象を考慮して多成分系の熱流動解析を行う必要がある。しかし、現在使用されているシビアアクシデントコード[2][3][4]では、原子炉建屋内の詳細な 3 次元熱流動解析が難しい状況である。

このため、過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC（以下、BAROC）[5]を開発し、これまでの報告[6][7]において原子炉建屋内の水素濃度分布挙動解析への適用性を示した。

しかしながら、原子炉建屋内に漏洩する水素量の増加に伴って水蒸気量も増加し、かつ、水蒸気凝縮量も大量になると、計算不安定になって計算できないこともあった。また、計算できたとしても密閉とした原子炉建屋内の窒素、酸素などの質量が初期値から大きくずれていく不具合がみられた。そこで、BAROC の数値計算法を見直し、水蒸気の凝縮項の線形化を工夫し、質量保存式、エネルギー保存式、水蒸気成分の対流拡散方程式に適用した。さらに、質量保存性を高めるために、質量保存式にガス成分濃度の拡散項の総和を加え、成分濃度の正規化を行わなくても計算できる改良を加えた。

*アドバンスソフト株式会社　技師長
Chief Engineer, AdvanceSoft Corporation
**アドバンスソフト株式会社　第 4 事業部
4st Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

本報告ではこれら改良の詳細と改良が適切に行われているか検討するために実施した福島第一原子力発電所 3 号機相当の原子炉建屋の水素濃度分布挙動解析について述べる。

## 2. BAROC の熱流動解析の数値計算法

BAROC では多成分ガスの 3 次元圧縮性流体の計算を従来 SIMPLEC 法系列の解法に比べて計算時間や計算安定性を改善させ、高速かつ効率良く計算できるように ECBA 法を独自開発した[8]。ECBA 法は圧力や温度の大きな変化に対応できるように圧力・流速・エネルギーが強く結びついた解法である。本章では BAROC の熱流動解析の数値計算法として基礎方程式と ECBA 法の数値計算法を説明する。

### 2.1. 熱流動解析の基礎方程式

BAROC の基礎方程式は多成分ガスの圧縮性流体解析の一般的な方法に基づいており、次のとおりである。

未知数が、圧力、全エネルギー、密度、流速、ガス成分の質量分率で、成分数を N とすれば、未知数は 4+N 個となる。基礎方程式が、質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式、状態方程式、ガス成分濃度の質量保存式の 4+N 本となり、未知数と同じ数の式で構成されている。

①質量保存式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho u = S_\rho \qquad (1)$$

②運動量保存式

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot \rho u u = -\nabla p - \nabla \cdot \tau - \nabla \cdot \tau_t - \rho g + S_{\rho u} \qquad (2)$$

③エネルギー保存式

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{E+p}{\rho}\right)\rho u = \nabla \cdot \left(\lambda + \frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla T + \sum \nabla \cdot h_p \left(\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c} - \frac{\lambda}{C_p}\right)\nabla Y_p + S_E \qquad (3)$$

上式右辺第 2 項は濃度拡散に伴うエネルギー変化項を表している。

④ガス成分濃度の質量保存式

$$\frac{\partial \rho Y_p}{\partial t} + \nabla \cdot \rho u Y_p = \nabla \cdot \left(\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c}\right)\nabla Y_p + S_p \qquad (4)$$

ここで、$E$は全エネルギー、$t$は時間、$\rho$は流体密度、$p$は流体圧力（以下、単に圧力）、$\tau$は剪断応力、 $\tau_t$は乱流運動量束、$C_p$は定圧比熱、$C_v$は定積比熱、$T$は流体温度（以下、単に温度）、$\mu_t$は乱流粘性係数、$Pr_t$は乱流 Prandtl 数、$\sigma_c$は乱流 Schmidt 数、$h_p$はガス成分のエンタルピーを示す。さらには、$Y_p$は p 成分の質量分率、$D_{pq}$は成分 p と q の相互拡散係数、$S_\rho$, $S_{\rho u}$, $S_E$, $S_p$は各保存式の生成消滅項を示す。

### 2.2. ECBA 法の数値計算法

数値計算法の根幹である圧力 Poisson 方程式を、これまでの SIMPLE 法系列の質量保存式ではなく、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として ECBA 法を独自に開発した。

圧力 Poisson 方程式を組み立てるために、エネルギー保存式を次のように変形する。これは熱伝導項の温度を全エネルギーに置き直して圧力と強く結びつけて陰的に扱うためであり、文字の色が異なっている次式の左辺第 3 項と右辺第 2 項が新たに追加した項を示している。

エネルギー保存式の未知数は全エネルギーE であり、温度で表される熱伝導項をそのままだと陰解法で扱えないため、$T \cong \frac{E}{\rho C_v}$で近似すると、$\nabla \cdot \left(\lambda + \frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla T \cong \nabla \cdot \left(\lambda + \frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla\left(\frac{E}{\rho C_v}\right)$となるので、

左辺に加えて行列に組み立てるようにしている。境界条件の扱いやすさなどから熱伝導項は敢えて残し、右辺にも赤字の項を加えて両辺をバランスするようにしている。

右辺は代数的に計算するので計算安定性のためには右辺が大きく変化しないようにする必要があるが、$\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla T\cong\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla\left(\frac{E}{\rho C_v}\right)$ であるため、熱伝導によって右辺が大きくならないようにする働きにもなっている。

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial E}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\frac{E+p}{\rho}\right)\rho u \\
&-\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla\left(\frac{E}{\rho C_v}\right) \\
&=\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla T \\
&\quad-\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla\left(\frac{E}{\rho C_v}\right) \\
&\quad+\nabla\cdot\sum h_p\left(\rho D_{pq}+\frac{\mu_t}{\sigma_c}-\frac{\lambda}{C_p}\right)\nabla Y_p+S_E
\end{aligned}
\tag{5}
$$

未知数である圧力修正量$\delta p$のみの方程式となるようにするために、式( 5 )に次の式( 6 )を代入すると、式( 7 )で表される圧力 Poisson 方程式が得られる。

$$
\begin{aligned}
&E=\rho h-p+\frac{1}{2}\rho u^2 \\
&\cong\left[\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}-1\right]\left(p^{n+1(l)}+\delta p^{n+1(l+1)}\right) \\
&\qquad+\left(\frac{1}{2}\rho u^2\right)^{n+1(l)} \\
&p^{n+1(l+1)}=p^{n+1(l)}+\delta p^{n+1(l+1)} \\
&\rho u^{n+1(l+1)}=\rho u^{n+1(l)}-\nabla\left[\frac{\delta p^{n+1(l+1)}}{a_d+\sum a_{LU}}\right]
\end{aligned}
\tag{6}
$$

ここで、式( 6 )の 3 番目の式は SIMPLEC 法に基づいた定式化である。なお、式( 6 )に含まれる変数は計算格子を構成する各セルで定義される。本来は添え字(i, j, k)があるべき変数であるが煩わしくなるため省略している。次の式( 7 )は対流項と熱伝導項に相当する項により最大 6 個の隣接格子と繋がっており、式( 7 )の左辺第 2, 3, 4 項は当該格子(i, j, k)の$\delta p^{n+1(l+1)}$と隣接格子(i±1, j±1, k±1)の$\delta p^{n+1(l+1)}$から表現されるが、添え字は同様に省略している。

$$
\begin{aligned}
&\left[\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}-1\right]\frac{\delta p^{n+1(l+1)}}{\Delta t} \\
&+\nabla\cdot\left[\frac{\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}\delta p^{n+1(l+1)}}{\rho^{n+1(l)}}\right]\rho u^{n+1(l)} \\
&-\nabla\cdot\left(\frac{E+p}{\rho}\right)^{n+1(l)}\nabla\left[\frac{\delta p^{n+1(l+1)}}{a_d+\sum a_{LU}}\right]-\nabla \\
&\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)^{n+1(l)}\nabla\left[\frac{\left\{\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}-1\right\}\delta p^{n+1(l+1)}}{\rho {C_v}^{n+1(l)}}\right] \\
&=\frac{E^n-\left[\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}-1\right]p^{n+1(l)}-\left(\frac{1}{2}\rho u^2\right)^{n+1(l)}}{\Delta t} \\
&-\nabla\cdot\left(\frac{E+p}{\rho}\right)^{n+1(l)}\rho u^{n+1(l)}+ \\
&\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla T^{n+1(l)}-\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla\left(\frac{E^{n+1(l)}}{\rho C_v}\right) \\
&+\nabla\cdot\sum h_p^{n+1(l)}\left(\rho D_{pq}+\frac{\mu_t}{\sigma_c}-\frac{\lambda}{C_p}\right)\nabla Y_p^{n+1(l)}+S_E
\end{aligned}
\tag{7}
$$

上記の式( 7 )は計算格子を構成するセルの数に対応する本数の方程式群となり、未知数である$\delta p^{n+1(l+1)}$もセルの数だけある。これら方程式群は連立方程式として、左辺には$\delta p^{n+1(l+1)}$に対する係数の行列が構築され、右辺には荷重ベクトルとしてまとめられる。なお、対流項の離散化を通して得られる$\left[\delta p^{n+1(l+1)}\right]^2$は小さいものとして省略している。

## 3. 改良前の計算方法と計算の現状

これまでの計算では、原子炉建屋内に大量の水蒸気量が漏洩すると、水蒸気凝縮量も大量になる。計算上、水蒸気濃度の質量保存式の生成消滅項が非常に大きくなって凝縮速度が負の方向に大きくなる。そのため、水蒸気濃度の急激な減少に伴って、密度、エネルギーが急速に低下し圧力も急減して計算不安定になって計算できないことがあった。また、密閉の原子炉建屋内の窒素、酸素などの質量は過渡計算中も一定のはずが、漏洩による水蒸気濃度の大幅な増加や水蒸気凝縮による水蒸気濃度の急減によって初期値から大きく

ずれることを招くことがある。

質量保存式の生成消滅項が負の方向に大きくなっても、比較的大きな時間スケールで安定的に計算が可能になるように水蒸気に対する式( 4 )の生成消滅項$S_p^{n+1}$を、文献[9]を参考に Taylor 展開を中心とした線形化を次のように行った。

$$S_p^{n+1} \Rightarrow$$
$$-\max\left[-\frac{\partial S_p^{n+1}}{\partial Y},\ -\frac{S_p^{n+1}}{Y^n},\ \frac{S_p^{n+1}}{(1-Y^n)}\right] Y^{n+1} + S_p^{n+1} + \tag{8}$$
$$\max\left[-\frac{\partial S_p^{n+1}}{\partial Y},\ -\frac{S_p^{n+1}}{Y^n},\ \frac{S_p^{n+1}}{(1-Y^n)}\right] Y^n$$

水蒸気濃度の質量保存式の離散化式において、( 8 )式の右辺第 1 項を質量保存式の左辺、第 2 項と第 3 項を右辺に配置すると次のようになる。なお、簡単なために 1 次元表示としている。次式左辺は連立方程式の行列、右辺は荷重ベクトルとして計算するようにした。なお、計算安定性から右辺第 3 項の$Y_{p,i}^n$は$Y_{p,i}^{n+1(l)}$に変更している。

$$\frac{(\rho Y_p)_i^{n+1}}{\Delta t}$$
$$+ \max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1}}{Y_{p,i}^n},\ \frac{S_{p,i}^{n+1}}{(1-Y_{p,i}^n)}\right] \frac{(\rho Y_p)_i^{n+1}}{\rho_i^{n+1(l)}}$$
$$+ \left[\nabla \cdot \rho Y_p u\right]_i^{n+1} - \left[\nabla \cdot \left(D_{pq} + \frac{\mu_t}{\rho \sigma_c}\right) \nabla \rho Y_p\right]_i^{n+1} \tag{9}$$
$$= \frac{(\rho Y_p)_i^n}{\Delta t}$$
$$+ S_{p,i}^{n+1} + \max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1}}{Y_{p,i}^n},\ \frac{S_{p,i}^{n+1}}{(1-Y_{p,i}^n)}\right] Y_{p,i}^{n+1(l)}$$

ガス成分濃度質量保存式を解いて、各成分の質量分率$Y_{p,i}^{n+1}$を求めるが、理論上ガス成分濃度の格子単位の総和$\sum Y_{p,i}^{n+1}$は 1.0 となるはずであるが、数値計算上、時間刻み幅や空間格子幅の大きさによる離散化誤差や収束状況などで必ずしも 1.0 とはならない。そのため、ガス成分濃度質量保存式の離散化式の計算の後、総和が 1.0 となるように得られた$Y_{p,i}^{n+1}$を$Y_{p,i}^{n+1} / \sum Y_{p,i}^{n+1}$ に置き換えてガス成分濃度とした。この操作を一般的には正規化と呼ばれているものである。

計算を継続的に安定に行うには正規化が必須であるが、質量保存性は正規化によって左右され、時間刻み幅や反復計算の収束パラメータを変えても改善されなかった。

## 4. 質量保存性と水蒸気凝縮項に対する改良後の計算方法と計算結果

### 4.1. 質量保存性に対する改良

ガス成分濃度の質量保存式( 4 )の右辺の濃度拡散項の総和は理論上ゼロとなるはずであるが、数値計算上ゼロとならないため、ガス成分濃度の質量保存式の総和と質量保存式( 1 )に乖離が生じる。そこで次のようにガス成分濃度の質量保存式の総和と質量保存式( 1 )が整合するように、質量保存式( 1 )の右辺に濃度拡散項の総和項を加えた。なお、時間刻み幅が大きくても計算できるように総和項の質量分率を$\frac{(\rho Y_p)_i^{n+1}}{\rho_i^{n+1(l)}}$と書き換え密度$(\rho)_i^{n+1}$を未知数とした連立方程式に組み入れるようにした。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho u = \sum \nabla \cdot \left(\rho D_{pq} + \frac{\mu_t}{\sigma_c}\right) \nabla Y_p + S_\rho \tag{10}$$

これによって、ガス成分濃度の正規化を行わなくても安定に計算できるようになり、水素、酸素、窒素などの質量は所定の量と一致するようになった。

ここまで改良した計算方法の妥当性を確認するために、福島第一原子力発電所第 3 号機(以下、1F3)の原子炉建屋の解析を行った。図 1 に 1F3 の原子炉建屋モデルを示す。原子炉建屋を計算格子総数 77 万で分割し、現象時間 18 時間において、シールドプラグからの流入する水素量と水蒸気量を変えた 3 次元圧縮性熱流動解析の計算を行った。なお、解析条件や水素量と水蒸気量は文献[7]を参考に設定し、外部に漏洩のない密閉とした。

表 1 に改良妥当性の確認のために実施した計算の結果のまとめを示した。

ケース 1 と 2 では、ガス成分濃度の正規化を行わないと計算終了時の酸素、窒素の質量は初期値からずれることがなく一致した。また、計算終了時の水素の質量は流入水素量の積分値と一致した。なお、ここでいう質量は各格子の各成分の質量$(\rho Y_p \Delta V)_i^{n+1}$を積算したものである。$\Delta V$は格子

体積を示している。このことから、質量保存性に対する改良の妥当性を確認した。

水素量が増えると水蒸気量が飛躍的に増え、凝縮量も飛躍的に増え計算しにくくなることが予想される。果せるかな、表 1 にあるように水素量が 1,300kg の計算ケース 3 の場合、ガス成分濃度の正規化なしとした場合では計算できず、ガス成分濃度の正規化ありとして計算できても計算終了時の原子炉建屋内の水素量は所定の半分以下になった。

これはここまでの計算方法にまだ問題が残っていることを示しているため、さらに線形化を含めた凝縮項の取り扱いを見直し新たな計算方法を構築した。

次節で新たな計算方法の詳細と妥当性を確認するために実施した計算結果を述べる。

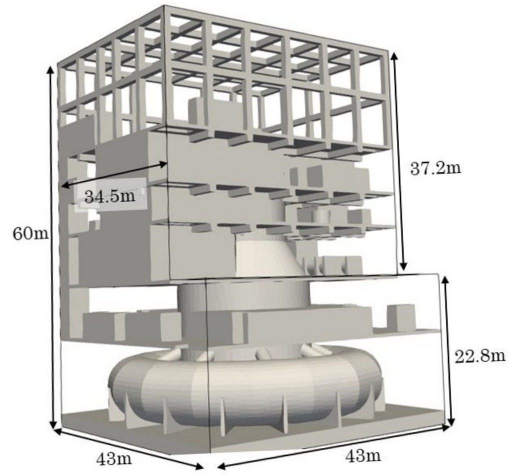



図 1　1F3 原子炉建屋モデル[7]

表 1　質量保存性に対する改良妥当性確認のために実施した計算結果のまとめ

| No. | 水素量[kg] | 水蒸気量[kg] | ガス成分濃度の正規化の有無 | 計算結果 |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 210 | 5,250 | あり | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量から数%ずれるものの結果は良好、最大 Courant 数 1,000 に相当する時間刻み幅で計算 |
| | | | なし | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量と一致し結果は良好、最大 Courant 数 1,000 に相当する時間刻み幅で計算 |
| 2 | 650 | 75,000 | あり | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量から数%から 10%近くずれるものの結果は良好、最大 Courant 数 2,500 に相当する時間刻み幅でも計算可能 |
| | | | なし | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量と一致し結果は良好であるが、時間刻み幅を小さくしないと計算できない |
| 3 | 1,300 | 150,000 | あり | 最大 Courant 数 500 に相当する時間刻み幅まで小さくし計算パラメータを見直してやっと計算できたが、計算終了時の水素が所定の半分以下 |
| | | | なし | 最大 Courant 数 10 まで時間刻み幅を小さくしても計算できない |

### 4.2. 水蒸気凝縮項の改良による計算安定化

表 1 に示したケース 2 と 3 でガス成分濃度の正規化なしとした場合、計算ができないか計算できても計算終了時の水素量が所定の半分以下委になった。そのため、様々な原因を探ったところ、ガス成分濃度の質量保存式の生成消滅項の線形化に対して密度の質量保存式において見落としがあり整合がとれていないことが原因であることが分かった。なお、文献[9]ではガス成分濃度の質量保存式の生成消滅項の線形化のみを行い、密度の質量保存式に対しては凝縮による生成消滅項を圧力で割って対角に加えて優対角化を図ることを行っているが、効果的とはいえない。

式( 10 )の密度の質量保存式を生成消滅項の線形化を考慮して次のように離散化する。こちらも簡単にために 1 次元で表示している。また、計算安定性から右辺第 3 項の$Y_{p,i}^{n}$は$Y_{p,i}^{n+1(l)}$に変更している。

$$
\begin{aligned}
&\frac{\rho_i^{n+1}}{\Delta t} \\
&+max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1(l)}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{Y_{p,i}^{n}},\ \frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{\left(1-Y_{p,i}^{n}\right)}\right]Y_{p,i}^{n+1(l)}\frac{\rho_i^{n+1}}{\rho_i^{n+1(l)}} \\
&+\nabla\cdot\rho_i^{n+1}u_i^{n+1(l)}-\sum\nabla\cdot\rho_i^{n+1}\left[\left(D_{pq}+\frac{\mu_t}{\rho\sigma_c}\right)\nabla Y_p\right]_i^{n+1(l)} \\
&=\frac{\rho_i^{n}}{\Delta t} \\
&+S_{p,i}^{n+1}+max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1}}{Y_{p,i}^{n}},\ \frac{S_{p,i}^{n+1}}{\left(1-Y_{p,i}^{n}\right)}\right]Y_{p,i}^{n+1(l)}
\end{aligned}
\tag{11}
$$

ここで、上式によって$\rho_i^{n+1}$を未知数とする連立方程式が構築される。連立方程式の左辺には$\rho_i^{n+1}$に対する係数を行列としてまとめられ、右辺には代数的に計算可能な荷重ベクトルとして集約される。

これによって、計算が困難であった表 1 のケース 2 と 3 においてガス成分濃度の正規化なしとした場合でも安定的に計算できるようになった。しかしながら、ガス成分濃度や全エネルギーの細かなところで矛盾しているところがみられため、密度の質量保存式と同様にエネルギー保存式の生成消滅項にも線形化を取り入れた。

式( 5 )のエネルギー保存式をガス成分濃度の質量保存式の生成消滅項の線形化と整合がとれるように次のように離散化した（簡単なために 1 次元で表示）。

$$
\begin{aligned}
&\frac{E_i^{n+1}}{\Delta t} \\
&+max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1(l)}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{Y_{p,i}^{n}},\ \frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{\left(1-Y_{p,i}^{n}\right)}\right]Y_{p,i}^{n+1(l)}\frac{E_i^{n+1}}{\rho_i^{n+1(l)}} \\
&+\nabla\cdot\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_i^{n+1(l)}\rho_i^{n+1}u_i^{n+1} \\
&=\frac{E_i^{n}}{\Delta t}+\left[\nabla\cdot\left(\lambda+\frac{\mu_t C_p}{Pr_t}\right)\nabla T\right]_i^{n+1(l)} \\
&+\left[\sum\nabla\cdot h_p\left(\rho D_{pq}+\frac{\mu_t}{\sigma_c}-\frac{\lambda}{C_p}\right)\nabla Y_p\right]_i^{n+1(l)}+S_{E,i}^{n+1} \\
&+max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1}}{Y_{p,i}^{n}},\ \frac{S_{p,i}^{n+1}}{\left(1-Y_{p,i}^{n}\right)}\right]Y_{p,i}^{n+1(l)}\frac{E_i^{n+1(l)}}{\rho_i^{n+1(l)}}
\end{aligned}
\tag{12}
$$

ここで、$n$+1($l$)の変数は新しい時間ステップの反復計算中の前反復の既知の値である。また、簡単なためにいくつかの項を省略している。

式( 12 )に式( 6 )を代入すると次のように未知数である$\delta p^{n+1(l+1)}$に対する連立方程式が構築できる。

$$
\begin{aligned}
&\left[\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}-1\right]\frac{\delta p^{n+1(l+1)}}{\Delta t}+\left[\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}-1\right]\frac{p^{n+1(l)}+\left(\frac{1}{2}\rho u^2\right)^{n+1(l)}}{\Delta t} \\
&+max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1(l)}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{Y_{p,i}^{n}},\ \frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{\left(1-Y_{p,i}^{n}\right)}\right]Y_{p,i}^{n+1(l)}\frac{\delta p^{n+1(l+1)}}{\rho_i^{n+1(l)}}\left[\left(\frac{\rho h}{p}\right)^{n+1(l)}\right. \\
&\left.-1\right]+max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1(l)}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{Y_{p,i}^{n}},\ \frac{S_{p,i}^{n+1(l)}}{\left(1-Y_{p,i}^{n}\right)}\right]Y_{p,i}^{n+1(l)}\frac{E_i^{n+1(l)}}{\rho_i^{n+1(l)}} \\
&=\frac{E_i^{n}}{\Delta t}+S_{E,i}^{n+1}+max\left[-\frac{\partial S_{p,i}^{n+1}}{\partial Y},\ -\frac{S_{p,i}^{n+1}}{Y_{p,i}^{n}},\ \frac{S_{p,i}^{n+1}}{\left(1-Y_{p,i}^{n}\right)}\right]Y_{p,i}^{n+1(l)}\frac{E_i^{n+1(l)}}{\rho_i^{n+1(l)}}
\end{aligned}
\tag{13}
$$

ここで、簡単なために式( 12 )の左辺第 3 項の対流項、右辺第 2 項の熱伝導項と第 3 項の拡散項を省略している。

ここで改良した計算方法の妥当性を確認するために、1F3 の原子炉建屋の解析を行った。計算格子や解析条件は前述と同様である。改良の妥当性を確認するために実施した計算結果のまとめを表 2 に示した。

水素量、水蒸気量が大幅に増えても結果は良好であり、改良の妥当性を確認できた。Nos.2&3 の

最大 Courant 数は、並列計算の 24 時間という制限内で計算が終わるように設定している。また、No.3 のガス成分濃度の正規化なしの場合では、最大 Courant 数 3,000 の他、5,000、10,000、20,000、160,000 (時間刻み幅 3,600 秒相当) としても安定に計算できることを確認した。

表 2　水蒸気凝縮項の改良による計算安定化に対する妥当性確認のために実施した計算結果のまとめ

| No. | 水素量[kg] | 水蒸気量[kg] | ガス成分濃度の正規化の有無 | 計算結果 |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 210 | 5,250 | あり | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量から数%ずれるものの結果は良好、最大 Courant 数 1,000 に相当する時間刻み幅で計算 |
| | | | なし | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量と一致し結果は良好、最大 Courant 数 1,000 に相当する時間刻み幅で計算 |
| 2 | 650 | 75,000 | あり | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量から数%近くずれるものの結果は良好、最大 Courant 数 2,500 に相当する時間刻み幅でも計算可能 |
| | | | なし | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量と一致し結果は良好、最大 Courant 数 2,500 に相当する時間刻み幅でも計算可能 |
| 3 | 1,300 | 150,000 | あり | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量から数%近くずれるものの結果は良好、最大 Courant 数 3,000 に相当する時間刻み幅でも計算可能 |
| | | | なし | 計算終了時の水素、酸素、窒素の質量は所定の量と一致し結果は良好、最大 Courant 数 3,000 に相当する時間刻み幅でも計算可能 |

### 4.3. 改良後の計算結果

#### 4.3.1. 質量保存性の確認

質量保存性の検討として行った表 2 のケース 2 とケース 3 の計算の結果として水素質量と酸素質量の変化を図 2 と図 3 に示す。これらの図では、ガス成分濃度の正規化ありの計算結果を"Normalize"、ガス成分濃度の正規化なしの計算結果を"not Normalize"、各格子のガス成分濃度の質量分率の総計が 0.8～1.2 の範囲に限って正規化を行わないとした計算結果を"not Normalize between 0.8 to 1.2"として示した。"not Normalize between 0.8 to 1.2"の計算結果では格子の質量分率の総計が 0.8 以下または 1.2 以上ではガス成分濃度の正規化を行っている。なお、いずれの計算でも質量保存式( 1 )の右辺に濃度拡散項の総和項を加えて計算している。

正規化なしとした場合の酸素の質量変化は流入量に寄らず、最後まで初期値と一致した結果となり、また、水素の質量変化は”Total of Inflow”で示した流入量の積算値と一致している。このことから質量保存式に濃度拡散項の総和項を加え、かつ、ガス成分濃度の正規化を行わないことが質量保存性に有効であることを示している。

正規化ありとした場合の酸素の質量変化は初

期値から 2～4%程度少なくなっている。また、水素の質量変化は流入量の積算値と 1～2%程度増えている。このことから、ガス成分濃度の正規化を行うと質量が保存されなくなることを示している。

各格子のガス成分濃度の質量分率の総計が 0.8～1.2 の範囲に限って正規化を行わないとした計算では、流入量の少ないケース 2 の場合、一貫してガス成分濃度の正規化なしの計算結果と同等の結果を得ているが、流入量の多いケース 3 では、酸素の質量変化はガス成分濃度の正規化なしの計算結果と比べてやや下回った結果となっている。これは、ガス成分濃度の質量分率の総計が 0.8～1.2 の範囲外の格子があることを示している。

図 4 にケース 3 の計算において、最大 Courant 数 160,000 とした場合の各成分の質量変化を数値として示した。窒素と酸素の質量は初期値と一致しており質量保存性を数値として確認できる。水素の最終的な質量は水素流入量の積算値と一致している。また、水蒸気の最終的な質量は水蒸気流入量の積算値から水蒸気凝縮量の総計と初期水蒸気質量を引いたものとほぼ一致しているが、凝縮項の線形化の影響でやや下回っている。

図 5 から図 7 にガス成分濃度の正規化なしのケース 2 と 3 の計算結果として地下から 5 階の各フロアの水素平均濃度、水蒸気平均濃度、最高温度の時間変化を示す。

高温の水素と水蒸気の流入に伴って、流入箇所がある 5 階から各成分の濃度も温度も上昇する。時間が経つと水蒸気の流入が継続されている一方で 5 階の水蒸気凝縮量が頭打ちになるため、水蒸気濃度が大幅に上昇して水素濃度は減少する。4 階から下では、5 階からの循環流によって各成分の濃度も温度も上昇するが、5 階に近い階ほど上昇率が大きい。このことから物理的に妥当な計算結果を得ていることが分かる。

以上から、通常の最大 Courant 数でも非現実的な最大 Courant 数を設定しても、質量保存式( 1 )の右辺に濃度拡散項の総和項を加え、かつ、ガス成分濃度の正規化を行わないことによって質量保存性が保たれることが確認できた。

### 4.3.2. 水蒸気凝縮時の計算安定性の確認

改良の妥当性を確認するために、最大 Courant 数を大きくしても安定に計算できるか検討した。検討には表 1 と表 2 に示したケース 3 のガス成分濃度の正規化なしの計算ケースを選んだ。この計算ケースは改良前では最大 Courant 数 10 に相当する時間刻み幅まで小さくしても大量の水蒸気凝縮によって計算が不安定になって破綻に追い込まれたものである。

検討には表 3 に示した 5 通りの Courant 数の計算を行った。表 3 には計算結果として得られた最大時間刻み幅も示している。ケース 3-1 の最大 Courant 数 3,000 は並列計算の 24 時間という制限内で計算が終わるように設定したものである。ケース 3-2 以降は最大 Courant 数をさらに大きくしている。

計算は並列数 14 の並列計算として行った。並列計算に用いた計算サーバーのスペックを表 4 に示す。

5 ケースの並列計算の CPU 実行時間を表 5 にまとめた。計算は最大 Courant 数を非現実なところまで大きくしても安定に計算できており、水蒸気凝縮項の線形化の改良の有効性が確認できる。また、CPU 実行時間は最大 Courant 数の比率に応じて減っていることが確認できる。

計算結果として、5 ケースの地下から 5 階の各フロアの水素平均濃度変化を比較したものを図 8 に示す。

いずれのケースの水素平均濃度は、第 4.3.1 項でも述べたように計算の後半で水蒸気濃度が大幅に上昇して水素濃度は減少する変化を示している。水素濃度の上昇傾向は似たようなものの、Courant 数が増えると数値拡散の増大や時間積分による誤差により水素濃度の均質化が促される傾向を示しており、最大 Courant 数を 160,000 とした場合はほぼ一緒の変化となっている。本ケースでは最大 Courant 数は 5,000 程度が限界とみられる。

以上から、水蒸気凝縮項の線形化を工夫しガス成分濃度の質量保存式の他、密度の質量保存式、エネルギー保存式に拡張した改良によって、最大

Courant 数を非現実的なところまで大きくしても安定に計算できることを確認した。

表 3　水蒸気凝縮時の計算安定性検討の 5 ケースの計算の最大 Courant 数と時間刻み幅

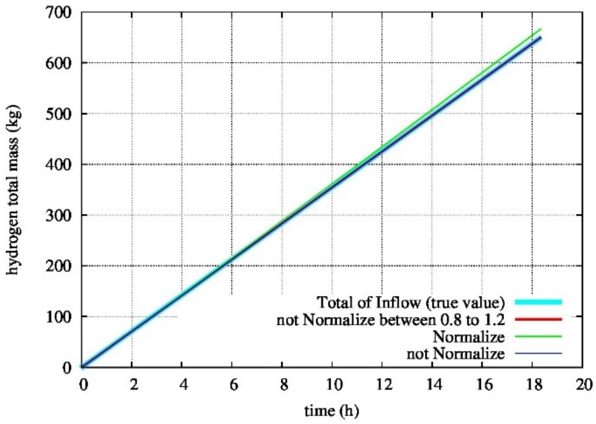
| ケース | 最大 Courant 数 | 最大時間刻み幅(s) |
|---|---|---|
| 3-1 | 3,000 | 55 |
| 3-2 | 5,000 | 90 |
| 3-3 | 10,000 | 194 |
| 3-4 | 20,000 | 422 |
| 3-5 | 160,000 | 3,600 |

表 4　使用した並列計算サーバーのスペック

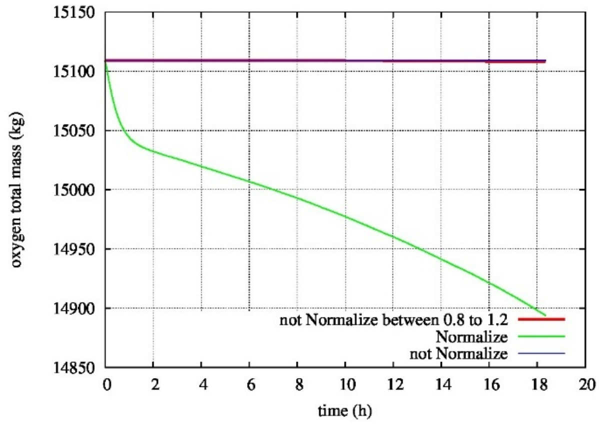
| No. | 項目 | 詳細 |
|---|---|---|
| 1 | OS | CentOS release 7.6.1810 |
| 2 | CPU | Intel Gold 5218 2.30GHzz |
| 3 | Memory | 96GB |

表 5　水蒸気凝縮時の計算安定性検討の 5 ケースの計算に要した CPU 実行時間(14 並列)

| ケース | 最大 Courant 数 | CPU 実行時間 |
|---|---|---|
| 3-1 | 3,000 | 19 hr 35 min 45 s |
| 3-2 | 5,000 | 10 hr 45 min　9 s |
| 3-3 | 10,000 | 5 hr 56 min 11 s |
| 3-4 | 20,000 | 4 hr　7 min 36 s |
| 3-5 | 160,000 | 42 min 7 s |

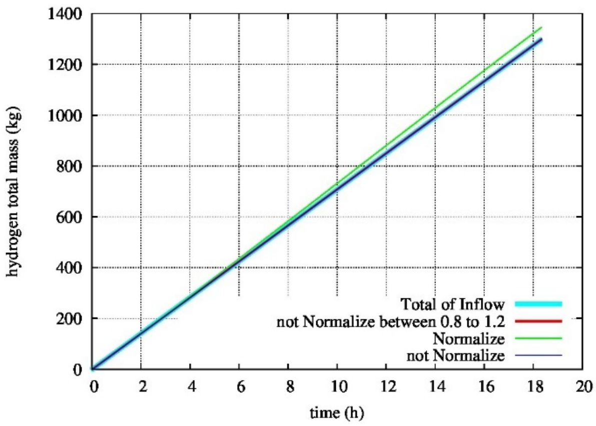



(a) 水素質量変化

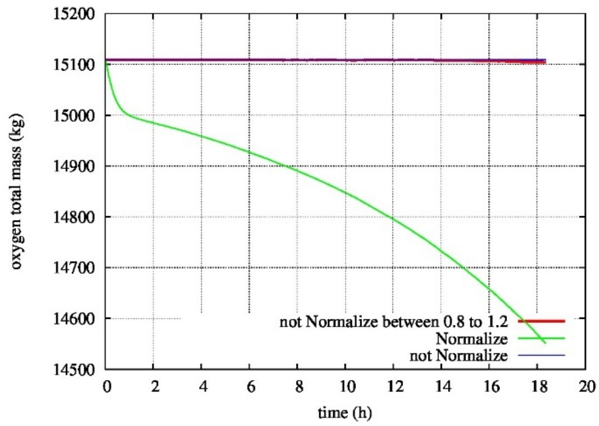



(b) 酸素質量変化

図 2　水素量 650kg・水蒸気量 75,000kg 流入時の質量変化(ケース 2)




(a) 水素質量変化

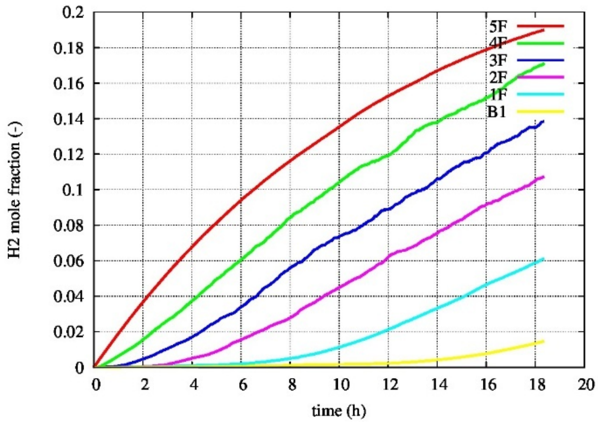



(b) 酸素質量変化

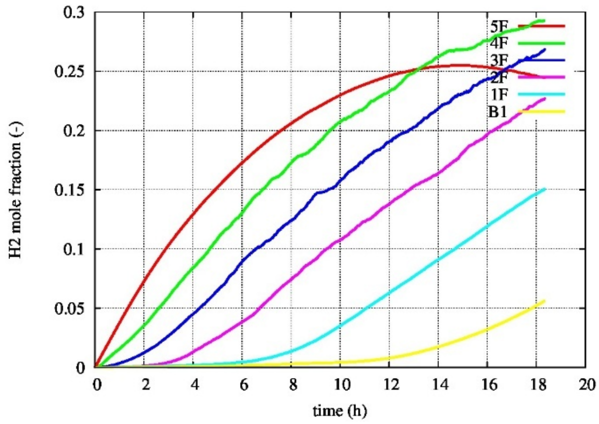
図 3　水素量 1,300kg・水蒸気量 150,000kg 流入時の質量変化(ケース 3)

| 計算ステップ | 時間[s] | 窒素[kg] | 酸素[kg] | 水素[kg] | 水蒸気[kg] |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0.000000E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 0.000000E+00 | 7.845721E+02 |
| 1 | 1.000000E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 9.841905E-05 | 7.845835E+02 |
| 2 | 2.000000E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 3.936762E-04 | 7.846175E+02 |
| 3 | 3.000000E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 8.857714E-04 | 7.846743E+02 |
| 4 | 4.000000E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.574705E-03 | 7.847538E+02 |
| 5 | 5.000000E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 2.460476E-03 | 7.848560E+02 |
| 6 | 6.440000E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 4.081792E-03 | 7.850430E+02 |
| 7 | 8.513600E+00 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 7.133549E-03 | 7.853950E+02 |
| 8 | 1.149958E+01 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.301498E-02 | 7.860698E+02 |
| 9 | 1.579940E+01 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 2.456747E-02 | 7.873901E+02 |
| 10 | 2.199114E+01 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 4.759645E-02 | 7.900165E+02 |
| 11 | 3.090724E+01 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 9.401552E-02 | 7.952734E+02 |
| 12 | 4.374642E+01 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.883494E-01 | 8.058628E+02 |
| 13 | 6.223485E+01 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 3.811943E-01 | 8.273221E+02 |
| 14 | 8.885818E+01 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 7.770948E-01 | 8.710101E+02 |
| 15 | 1.271958E+02 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.489685E+00 | 9.491346E+02 |
| 16 | 1.824019E+02 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 2.576352E+00 | 1.067596E+03 |
| 17 | 2.618988E+02 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 4.141153E+00 | 1.235122E+03 |
| 18 | 3.763742E+02 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 6.394466E+00 | 1.468194E+03 |
| 19 | 5.412189E+02 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 9.639237E+00 | 1.784428E+03 |
| 20 | 7.785952E+02 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.431171E+01 | 2.224199E+03 |
| 21 | 1.120417E+03 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 2.104006E+01 | 2.858121E+03 |
| 22 | 1.612641E+03 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 3.072890E+01 | 3.785055E+03 |
| 23 | 2.321442E+03 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 4.468082E+01 | 5.081513E+03 |
| 24 | 3.342117E+03 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 6.477159E+01 | 6.952721E+03 |
| 25 | 4.811889E+03 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 9.370229E+01 | 9.650362E+03 |
| 26 | 6.928360E+03 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.353625E+02 | 1.354312E+04 |
| 27 | 9.976078E+03 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.953532E+02 | 1.913623E+04 |
| 28 | 1.357608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 2.662149E+02 | 2.548167E+04 |
| 29 | 1.717608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 3.370766E+02 | 3.133241E+04 |
| 30 | 2.077608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 4.079384E+02 | 3.670504E+04 |
| 31 | 2.437608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 4.788001E+02 | 4.117756E+04 |
| 32 | 2.797608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 5.496618E+02 | 4.548985E+04 |
| 33 | 3.157608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 6.205235E+02 | 4.938481E+04 |
| 34 | 3.517608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 6.913852E+02 | 5.268186E+04 |
| 35 | 3.877608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 7.622469E+02 | 5.562173E+04 |
| 36 | 4.237608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 8.331086E+02 | 5.834475E+04 |
| 37 | 4.597608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 9.039704E+02 | 6.022013E+04 |
| 38 | 4.957608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 9.748321E+02 | 6.230306E+04 |
| 39 | 5.317608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.045694E+03 | 6.366464E+04 |
| 40 | 5.677608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.116556E+03 | 6.534940E+04 |
| 41 | 6.037608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.187417E+03 | 6.695008E+04 |
| 42 | 6.397608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.258279E+03 | 6.833469E+04 |
| 43 | 6.757608E+04 | 4.976305E+04 | 1.510912E+04 | 1.293710E+03 | 6.512715E+04 |

図 4　水素量 1,300kg・水蒸気量 150,000kg 流入時の質量変化(最大 Courant 数 160,000)

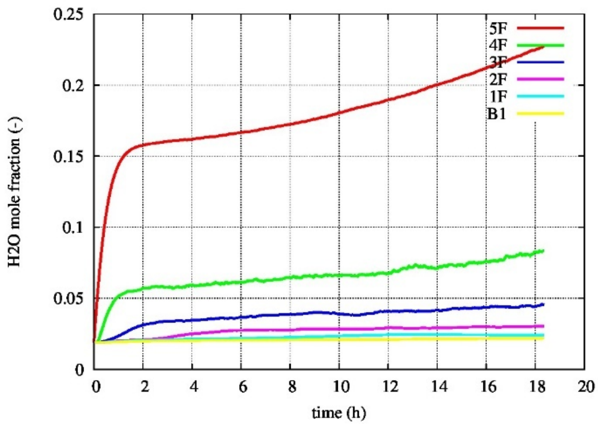



(a) 水素量 650kg・水蒸気量 75,000kg 流入時

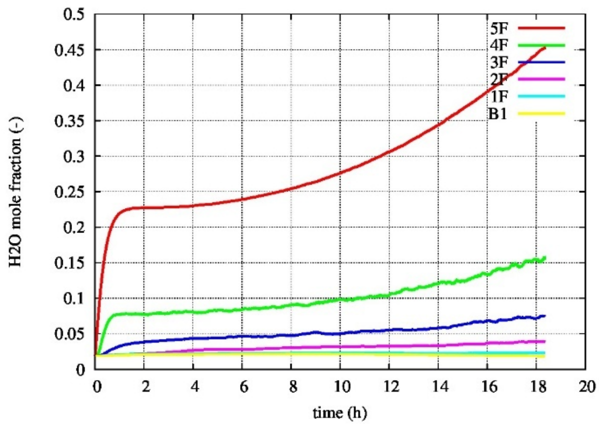



(b) 水素量 1,300kg・水蒸気量 150,000kg 流入時

図 5　各フロアの水素平均濃度変化

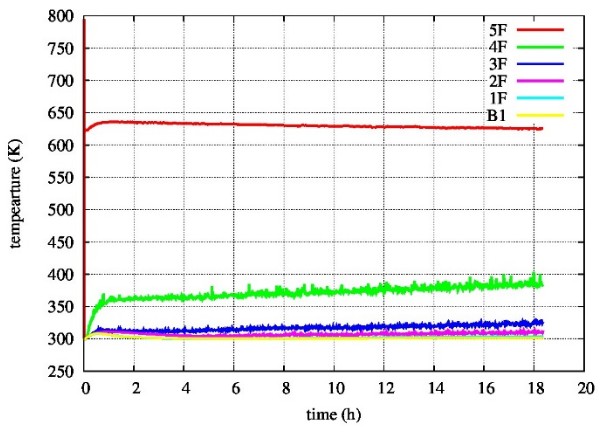



(a) 水素量 650kg・水蒸気量 75,000kg 流入時

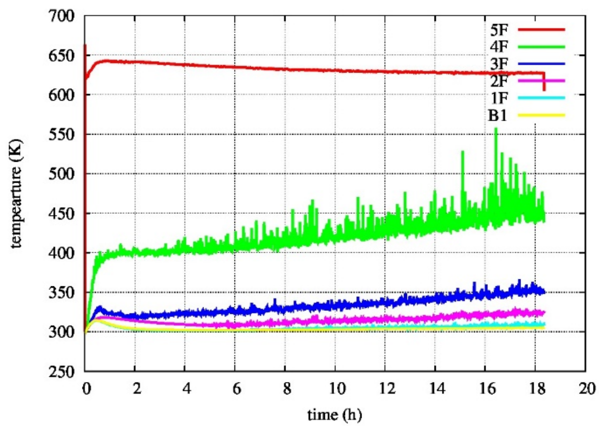



(b) 水素量 1,300kg・水蒸気量 150,000kg 流入時

図 6　各フロアの水蒸気平均濃度変化

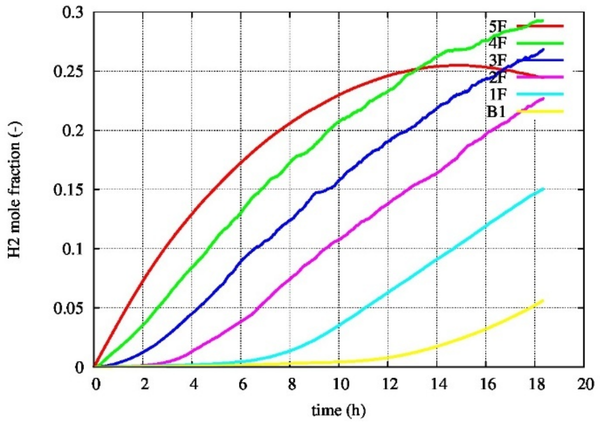



(a) 水素量 650kg・水蒸気量 75,000kg 流入時

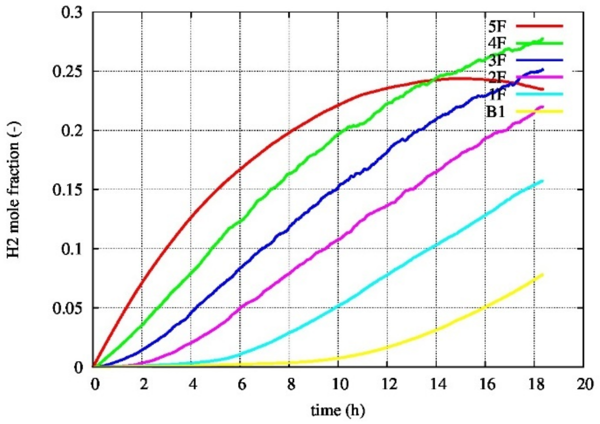



(b) 水素量 1,300kg・水蒸気量 150,000kg 流入時

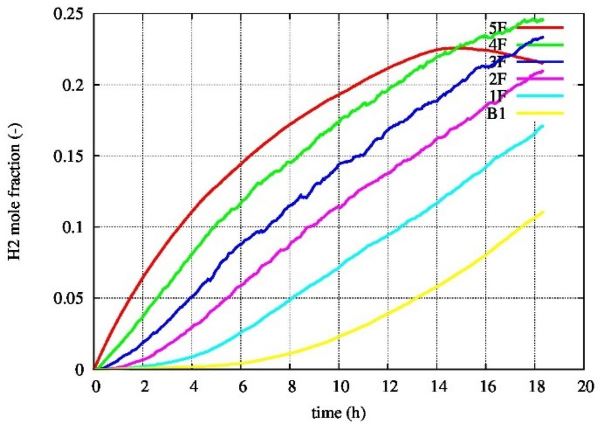
図 7　各フロアの最高温度変化



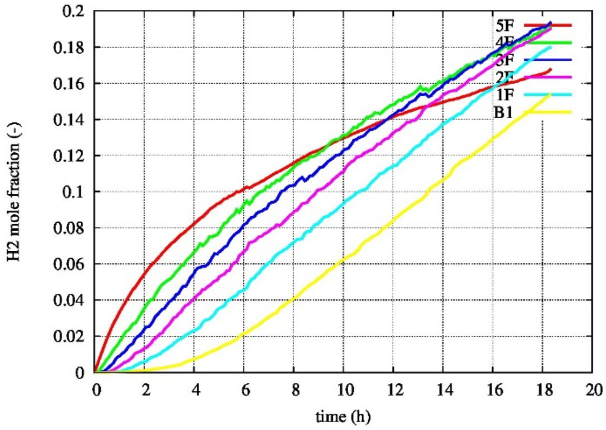

(a) 最大 Courant 数 3,000



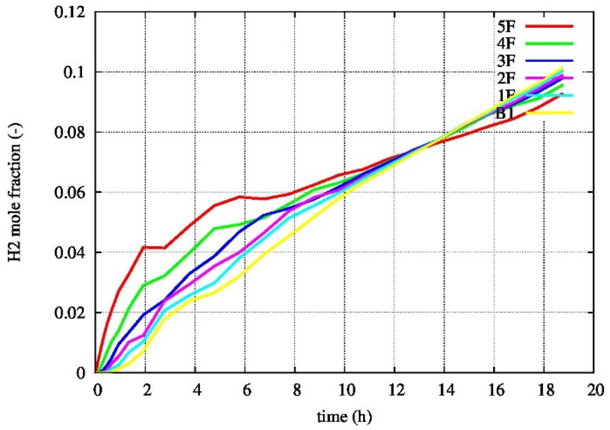

(b) 最大 Courant 数 5,000




(c) 最大 Courant 数 10,000




(d) 最大 Courant 数 20,000




(e) 最大 Courant 数 160,000

図 8　水素量 1,300kg 流入時の各フロアの水素平均濃度変化の最大 Courant 数の比較

## 5. まとめ

BAROC の数値計算法を見直し、水蒸気の凝縮項の線形化を工夫し、質量保存式、エネルギー保存式、水蒸気成分の対流拡散方程式に適用した。さらに、質量保存性を高めるために、質量保存式にガス成分濃度の拡散項の総和を加え、成分濃度の正規化を行わなくても計算できるように改良を加えた。

1F3 相当の原子炉建屋において、シールドプラグからの流入する水素量と水蒸気量を変えた 3 次元圧縮性熱流動解析の計算を行い、質量保存式に濃度拡散項の総和項を加え、かつ、ガス成分濃度の正規化を行わない改良によって質量保存性が保たれることを確認した。

引き続き、水蒸気凝縮項の線形化を工夫しガス成分濃度の質量保存式の他、密度の質量保存式やエネルギー保存式に拡張した改良によって、最大 Courant 数を非現実なところまで大きくしても原子炉建屋の 3 次元圧縮性熱流動解析を安定に計算できることを確認した。

以上から、質量保存性と水蒸気凝縮項に対する改良の有効性が確認できた。今後は BAROC の機能と適用性の拡大に注力してより良い原子力安全解析コードとして高めていきたい。

## 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 6 回進捗報告」について(添付資料 1-10)(2022)　東京電力（株）.

[2] Frank Rahn, “GOTHIC CONTAINMENT ANALYSIS PACKAGE TECHNICAL MANUAL Version 7.2b(QA)”, NAI 8907-06 Rev 17 (2009).

[3] Frank Rahn, “GOTHIC CONTAINMENT ANALYSIS PACKAGE USER MANUAL Version 7.2b(QA)”, NAI 8907-02 Rev 18 (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] https://www.advancesoft.jp/products/thermal-fluid/baroc/

[6] 大西他, "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", アドバンスシミュレーション vol.29 (2022).

[7] 大西他, "過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC によるブローアウトパネル動作時の原子炉建屋内水素濃度分布解析", アドバンスシミュレーション vol.31 (2024).

[8] 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).

[9] 富士総合研究所編, “汎用流体解析システム：FUJI-RIC/α-FLOW”, 丸善出版 (1993).


※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。また、本雑誌に記載された文献は、発行後に、JDREAMⅢ（日本最大級の科学技術文献情報データベース）に登録されます。