

# 軽水炉燃料解析コード FEMAXI-7 のモデルと構造

Light Water Reactor Fuel Analysis Code FEMAXI-7; Model and Structure

鈴木 元衛 斎藤 裕明 宇田川 豊 Motoe SUZUKI, Hiroaki SAITOU and Yutaka UDAGAWA

> 安全研究センター 原子炉安全研究ユニット

Reactor Safety Research Unit Safety Research Center **March 2011** 

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。 本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。 なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ(<u>http://www.jaea.go.jp</u>) より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2番地4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department, Japan Atomic Energy Agency 2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2011

# 軽水炉燃料解析コード FEMAXI-7のモデルと構造

日本原子力研究開発機構安全研究センター 原子炉安全研究ユニット 鈴木 元衛・斎藤 裕明\*・宇田川 豊

(2010年12月17日受理)

FEMAXI-7 は、軽水炉燃料の通常運転時及び過渡条件下のふるまい解析を目的とするコード として、前バージョン FEMAXI-6 に対して多くの機能の追加・改良を実施した高度化バージョン である。特に、ソースコードの整備及び解読の効率化を図るためにサブルーチンやファンクショ ンのモジュール化とコメント記述の充実を図り、コードのさらなる拡張を容易にした。また、新 しいモデルを追加するとともに、ユーザーの使いやすさにも考慮して多くのモデルのパラメータ を整理した。これらにより FEMAXI-7 は高燃焼度燃料の通常時のみならず過渡時ふるまいの解析 に対する強力なツールとなった。

本報告は、FEMAXI-7の設計、基本理論と構造、モデルと数値解法、改良と拡張、採用した 物性値等を詳述したものである。

原子力科学研究所(駐在):〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4 \* ㈱伊藤忠テクノソリューションズ、東京

# Light Water Reactor Fuel Analysis Code FEMAXI-7; Model and Structure

Motoe SUZUKI, Hiroaki SAITOU\* and Yutaka UDAGAWA

Reactor Safety Research Unit Safety Research Center, Japan Atomic Energy Agency Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received December 17, 2010)

A light water reactor fuel analysis code FEMAXI-7 has been developed for the purpose of analyzing the fuel behavior in both normal conditions and anticipated transient conditions.

This code is an advanced version which has been produced by incorporating the former version FEMAXI-6 with numerous functional improvements and extensions. In FEMAXI-7, many new models have been added and parameters have been clearly arranged. Also, to facilitate effective maintenance and accessibility of the code, modularization of subroutines and functions have been attained, and quality comment descriptions of variables or physical quantities have been incorporated in the source code. With these advancements, the FEMAXI-7 code has been upgraded to a versatile analytical tool for high burnup fuel behavior analyses. This report describes in detail the design, basic theory and structure, models and numerical method, and improvements and extensions.

Keywords: LWR Fuel, FEM Analysis, Transient, Pellet, Cladding, Fission Gas Release, PCMI, Burn-up

\* ITOCHU Techno-Solutions Corporation, Tokyo, Japan

Ħ	\/↓→
<b>H</b>	1八

1.	序言	i		. 1
	1.1	燃料解	術コードの性格	. 1
		1.1.1	燃料ふるまいの特徴と燃料解析コードの性格	. 1
		1.1.2	FEMAXI による燃料挙動の予測	. 2
		1.1.3	FEMAXI コード開発の歴史	. 3
		1.1.4	FEMAXI コードの利用	. 3
	1.2	FEMA	XIの構造とモデルの特徴	. 4
		1.2.1	モデルとは何か	. 4
		1.2.2	燃料モデリングとは何か	. 5
		1.2.3	解析対象	. 6
	1.3	全体構	造	. 7
	1.4	数値計	算とモデルの特徴	10
	1.5	他コー	・ドとの関係、その他	11
		1.5.1	燃焼解析コード RODBURN および PLUTON との接続	11
		1.5.2	事故解析コード RANNS との接続	12
		1.5.3	ベース照射から Re-start による試験照射への接続	12
		1.5.4	実行環境など	12
	参考	文献 1		14
2.	熱的	」解析モ	デル	16
	2.1	冷却材	への伝熱と熱水力モデル	16
		2.1.1	冷却材のエンタルピー上昇のモデル	19
		2.1.2	被覆管表面熱伝達率の決定	22
		2.1.3	熱水力プログラムの流れ	32
		2.1.4	冷却材状態の遷移	34
		2.1.5	流路相当直径および流路断面積	36
	2.2	被覆管	水側腐食モデル	38
	2.3	半径方	向一次元温度分布の計算	40
		2.3.1	半径方向リング要素数の選択	40
		2.3.2	被覆管表面温度の決定	42
		2.3.3	熱伝導方程式の解法	43
		2.3.4	ペレット熱伝導率	49

2.4	発熱密周	度プロファイルの決定	
	2.4.1	RODBURN 出力の利用	51
	2.4.2	PLUTON 出力の利用	52
	2.4.3	Robertson の式	52
	2.4.4	ペレット温度計算の精度確認	53
2.5	ギャッス	プ熱伝達モデル	57
	2.5.1	修正 Ross & Stoute モデル	57
	2.5.2	ギャップボンディングモデル	60
	2.5.3	リロケーションモデル	63
	2.5.4	スエリングと焼きしまりモデル	64
2.6	接触力詞	平価モデル	64
2.7	試験炉⇒	キャプセル内ドライアウト試験解析	65
	2.7.1	ドライアウト試験のモデル化	66
	2.7.2	物性值	69
	2.7.3	数值解法	71
2.8	FP ガス	生成・放出モデル	74
	2.8.1	FP ガス原子生成速度	
	2.8.2	熱活性拡散・放出モデルの概念	75
	2.8.3	トラッピングを伴う熱拡散	77
	2.8.4	粒内バブル半径と数密度の White+Tucker モデル(IGASP=0, GBFIS=0)	80
	2.8.5	粒内バブル半径と数密度の照射溶解モデル(IGASP=0, GBFIS=1)	83
	2.8.6	粒内バブルの Pekka Lösönen モデル(IGASP=1, 2)	87
	2.8.7	偏微分拡散方程式の Galerkin 解法	
	2.8.8	結晶粒と粒界	
	2.8.9	粒界へ移動する FP ガス原子の量	
	2.8.10	粒界に溜まる FP ガス量 G <sub>inv</sub>	
	2.8.11	放出されるガス量	
	2.8.12	粒成長に伴う粒界へのガスの掃き出し	
	2.8.13	FP ガスの再溶解	103
	2.8.14	粒界 FP ガス原子濃度の飽和値(平衡論)	104
	2.8.15	FP ガス原子の粒内拡散定数	107
2.9	速度論	モデル( <b>IGASP=2</b> )	109
	2.9.1	前提(平衡論モデルとの共通部分)	109

	2.9.2	粒界バブル成長速度式	109
2.10	バブル	成長スエリング:平衡論( <b>IGASP=0</b> )	116
	2.10.1	バブル成長	116
	2.10.2	バブルスエリング	118
2.11	バブル	成長スエリングー速度論	120
	2.11.1	バブルの合体・粗大化	120
	2.11.2	スエリング	122
2.12	圧力抑	制モデル	123
	2.12.1	簡便な方法 (IPEXT=11,12,13)	124
	2.12.2	IPEXT=14 の場合	127
	2.12.3	出力降下時の軸方向ガスコンダクタンス増加との比較考察	128
2.13	高燃焼	度リム組織モデル	129
	2.13.1	全体概念	129
	2.13.2	リム組織固相における FP ガス原子の濃度減少	130
	2.13.3	リム組織の燃料ふるまいへの影響モデル	
2.14	パラメ	ータによる計算モデルの選択	141
	2.14.1	ペレット径方向リング要素数	141
	2.14.2	ペレット熱伝導率計算	
	2.14.3	スエリングモデルの内容と選択	
	2.14.4	FGR モデルの選択	144
	2.14.5	バブル成長とスエリング	
	2.14.6	リム組織モデルと他のモデルオプションとの関係	146
2.15	ギャッ	プ内ガスの拡散・流動モデル	147
	2.15.1	拡散計算の仮定と方法	
	2.15.2	燃料棒内空間体積の求め方	156
	2.15.3	内部ガス圧力	
	2.15.4	プレナムのガス温度と被覆管温度	161
	2.15.5	照射途中における内部ガス状態変更のオプション	
2.16	タイム	ステップの制御	
	2.16.1	自動制御	
	2.16.2	FP ガスモデルにおけるタイムステップ幅の決定	
	2.16.3	温度計算におけるタイムステップ幅の決定	
参考	文献 2		166

3. 力賞	幹解析モ	テブル	170
3.1	左本基	こと非線形力学の解法	170
	3.1.1	基本式	170
	3.1.2	初期応力法・初期歪み法・剛性変化法(非線形歪みの取り扱い)	176
	3.1.3	FEMAXI コードでの基本式の解法(非線形歪みの取り扱い)	179
3.2	燃料棒	奉全長での力学的ふるまい[全長力学解析]	186
	3.2.1	全長力学解析(I)のモデルとリング要素	187
	3.2.2	有限要素マトリックスの決定	191
	3.2.3	ペレットクラック	197
	3.2.4	燃焼に伴うクラックの変化	201
	3.2.5	マトリックスにおけるクラック表現方法	204
	3.2.6	FEMAXIにおける相当応力、相当歪みの定義式	207
	3.2.7	ペレットのホットプレス	208
	3.2.8	増分法の補足説明	
3.3	非線形	/歪みの計算方法	
	3.3.1	クリープ	
	3.3.2	塑性	225
	3.3.3	剛性方程式の導出	
3.4	全体マ	・トリックスの定式化と外力	236
	3.4.1	剛性方程式と全体マトリックス	
	3.4.2	上下プレナム境界条件	239
	3.4.3	ペレット・被覆管接触モデル	
3.5	局所て	での力学的ふるまい[力学解析(II)]	252
	3.5.1	要素体系	253
	3.5.2	基本式	257
	3.5.3	剛性方程式	
	3.5.4	境界条件	
	3.5.5	ペレット・被覆管機械的相互作用と接触問題	271
	3.5.6	軸方向荷重―上部ペレットとの軸方向相互作用―	276
3.6	クリー	-プおよび応力-歪みに関する機械的性質モデル	279
	3.6.1	クリープ	279
	3.6.2	被覆管の応力歪み関係式のモデル	
	3.6.3	太田モデル	

3.7	事故時燃料解析コード RANNS との接続	290
3.8	疲労解析機能	291
	3.8.1 疲労解析概要	291
	3.8.2 ジルカロイ疲労曲線	291
	3.8.3 疲労評価	292
	3.8.4 繰り返し出力過渡解析機能	294
3.9	Skyline 法	295
参考	专文献 3	302
4. 集	勿性値モデル	303
4.1	UO2ペレット物性値	303
4.2	MOX ペレット物性値	322
4.3	ジルコニウム合金被覆管物性値	331
4.4	SUS304 ステンレス被覆管物性値	347
4.5	その他の物性値・モデル	349
4.6	燃焼度の単位換算	355
	4.6.1 燃焼度の単位換算	355
	4.6.2 ガドリニア入り燃料の燃焼度計算について	356
参考	5文献 4	359

# Contents

1. In	troductio	n	1
1.1	Nature	e of fuel performance code	1
	1.1.1	Natures of fuel performance and fuel analytical codes	1
	1.1.2	Prediction of fuel performance by FEMAXI	2
	1.1.3	History of FEMAXI code development	
	1.1.4	Utilization of FEMAXI code	
1.2	Featur	es of structure and models of FEMAXI	4
	1.2.1	What is model?	4
	1.2.2	What is fuel modeling?	5
	1.2.3	Analytical targets	6
1.3	Whole	structure	7
1.4	Featur	es of numerical calculations and models	
1.5	Compa	arison with other fuel codes, etc.	11
	1.5.1	Connection with burning analysis codes RODBURN and PLUTON	
	1.5.2	Connection with accident fuel analysis code RANNS	
	1.5.3	Re-start from base-irradiation to test-irradiation	
	1.5.4	Execution environments	
Ref	erences	1	14
2. The	ermal ana	Ilysis models	
2.1	Heat c	onduction to coolant and thermal hydraulic models	
	2.1.1	Model of coolant enthalpy increase	19
	2.1.2	Determination of cladding surface heat transfer coefficient	
	2.1.3	Flow of thermal hydraulic calculations	
	2.1.4	Transient process of coolant condition	
	2.1.5	Equivalent flow diameter and flow cross section	
2.2	Claddi	ng waterside corrosion model	
2.3	Calcul	ation of 1-D radial temperature profile	40
	2.3.1	Selection of the number of radial ring elements	40
	2.3.2	Determination of cladding surface temperature	
	2.3.3	Solution method of thermal conduction equation	
	2.3.4	Fuel pellet thermal conductivity	49
2.4	Deter	mination of radial profile of heat generation density	
	2.4.1	Usage of RODBURN output	
	2.4.2	Usage of PLUTON output	52

	2.4.3	Robertson's equation	52
	2.4.4	Accuracy confirmation of pellet temperature calculation	53
2.5	Gap the	mal conductance model	57
	2.5.1	Modified Ross & Stoute model	57
	2.5.2	Gap bonding model	60
	2.5.3	Relocation model	63
	2.5.4	Swelling and densification models	64
2.6	Contact	pressure evaluation model	64
2.7	Dry-out	test analysis model in test reactor	65
	2.7.1	Modelling of dry-out test	66
	2.7.2	Materials properties	69
	2.7.3	Numerical method	71
2.8	Fission g	gas generation and release models	74
	2.8.1	Fission gas atoms generation rate	75
	2.8.2	Concept of thermally activated diffusion/release models	75
	2.8.3	Thermally activated diffusion with trapping	77
	2.8.4	White+Tucker model of intra-grain bubble radius and number density	80
	2.8.5	Irradiation resolution model of intra-grain bubble radius and number density	83
	2.8.6	Pekka Lösönen model of intra-grain bubbles	87
	2.8.7	Galerkin solution method of partial differential diffusion equation	88
	2.8.8	Fuel grain and grain boundary	93
	2.8.9	Amount of fission gas atoms migrating to grain boundary	94
	2.8.10	Amount of fission gas retained in grain boundary	95
	2.8.11	Amount of released fission gas	97
	2.8.12	Sweeping of fission gas into grain boundary by grain growth	98
	2.8.13	Re-solution of fission gas	103
	2.8.14	Threshold density of fission gas atoms in grain boundary (equilibrium model)	104
	2.8.15	Diffusion constant of fission gas atoms in grain	107
2.9	Rate law	/ model (IGASP=2)	109
	2.9.1	Assumptions common to those of equilibrium model	109
	2.9.2	Growth rate equation of grain boundary gas bubbles	109
2.10	Bubble	growth swelling : equilibrium model (IGASP=0)	116
	2.10.1	Bubble growth	116
	2.10.2	Bubble swelling	118
2.11	Bubb	le growth swelling : rate-law model (IGASP=1)	120
	2.11.1	Coalescence and coarsening of bubbles	120

	2.11.2	Swelling	122
2.12	Pressure	e-restraint gas release model	123
	2.12.1	Simplified method (IPEXT=11,12,13)	124
	2.12.2	Case with IPEXT=14	127
	2.12.3	Comparative consideration of gap gas conductance increase during power down	128
2.13	High bu	rnup structure (rim) model	129
	2.13.1	Basic concept	129
	2.13.2	Density decrease of fission gas atoms in rim structure	130
	2.13.3	Models of effects of rim structure on fuel performance	134
2.14	Selectio	n of model options by parameters	141
	2.14.1	Number of ring elements in pellet	141
	2.14.2	Pellet thermal conductivity calculation	142
	2.14.3	Selecting swelling models	143
	2.14.4	Selecting fission gas release models	144
	2.14.5	Bubble growth and swelling	145
	2.14.6	Relationship between rim structure model and other optional models	146
2.15	Model o	f diffusion and flow of gap gas	147
	2.15.1	Assumptions and methods of diffusion calculation	148
	2.15.2	Determining internal space volume inside fuel pin	156
	2.15.3	Internal gas pressure	160
	2.15.4	Temperatures of gas and cladding at plenum region	161
	2.15.5	Options for changing internal gas state in the course of irradiation	162
2.16	Time ste	ep control	162
	2.16.1	Automatic control	162
	2.16.2	Determination of time step increment in fission gas release model	165
	2.16.3	Determination of time step increment in temperature calculation	165
Refe	erences 2		166
3. Mec	hanical and	alysis models	170
3.1	Basic equ	ations and solution method of non-linear mechanics	170
	3.1.1 E	Basic equations	170
	3.1.2 Ini	tial stress method, initial strain method, and stiffness changing method for non-line	ar
	str	ain	176
	3.1.3 S	olution method of basic equations in FEMAXI (for non-linear strain)	179
3.2	Mechanic	cal behavior of rod entire length [global mechanical analysis]	186
	3.2.1 N	Aodel and ring elements in global mechanical analysis (I)	187
	3.2.2 E	Determination of finite element matrix	191

	3.2.3	Pellet cracking	
	3.2.4	Crack change with burnup	
	3.2.5	Crack expression in matrix	
	3.2.6	Definitions of equivalent stress and equivalent strain in FEMAXI	
	3.2.7	Hot-pressing in pellet	
	3.2.8	Supplementary explanation for incremental method	
3.3	Metho	d of non-linear strain calculation	
	3.3.1	Creep	
	3.3.2	Plasticity	225
	3.3.3	Derivation of stiffness equation	
3.4	Formu	lation of total matrix and external force	
	3.4.1	Stiffness equation and total matrix	
	3.4.2	Boundary conditions at upper and lower plenums	
	3.4.3	Pellet-cladding contact model	
3.5	Local	mechanical behavior [ local mechanical analysis (II)]	
	3.5.1	Element geometry	
	3.5.2	Basic equations	
	3.5.3	Stiffness equations	
	3.5.4	Boundary conditions	
	3.5.5	Pellet-clad mechanical interaction and contact problem	
	3.5.6	Axial load - interaction with upper pellet in the axial direction	
3.6	Model	s of mechanical properties for creep and stress-strain	
	3.6.1	Creep	
	3.6.2	Model of cladding stress-strain relationship	
	3.6.3	Ohta's model	
3.7	Conne	ction with accident fuel analysis code RANNS	
3.8	Fatigu	e analysis function	
	3.8.1	Overview of fatigue analysis	
	3.8.2	Zircaloy fatigue curve	
	3.8.3	Fatigue evaluation	
	3.8.4	Analytical function for repetitive power ramps and transients	
3.9	Skylin	e method	
Ref	erences	3	
4. I	Materials	s properties models	
4.1	UO2 p	ellet properties	
4.2	MOX	pellet properties	

4.3	Zirco	nium alloy cladding properties	331
4.4	SUS3	04stainless steel properties	347
4.5	Other	properties and models	349
4.6	Unit	conversion for burnup	355
	4.6.1	Burnup conversion	355
	4.6.2	Burnup conversion of Gadolinia-containing fuel	356
References 4			359

Acknowledgement
•

1. 序 言

軽水炉が原子力発電の主流を占める期間が長期にわたるものと予想されている現在、原子力産 業界では軽水炉の高度化とともに、燃料の改良および高燃焼度化が進められている。

燃料棒において、照射を受けることにより発生する熱的、力学的、化学的状態変化とそれらの 相互作用は、出力レベル、出力履歴、出力過渡、および燃焼度に依存して変化する。さらに 50GWd/t-U 程度以上の高燃焼度領域における燃料ふるまいにおいては、ペレットの熱伝導率の顕 著な低下、FP ガス原子の蓄積、ペレット内発熱密度分布の変化、被覆管の水側酸化の進行など、 低~中程度の燃焼度領域のふるまいとは質的に異なった固有の現象が生じる。

原研機構では、1本の燃料棒において通常運転(出力過渡を含む)の出力履歴が与えられた場合に、このようにペレット、被覆管、内部ガスなどに生じる熱的、力学的、化学的な状態変化と それらの相互作用を解析するコード FEMAXI を開発してきた。

FEMAXI-7 はこうした背景の下に開発された FEMAXI シリーズの最新バージョンであり、軽水 炉燃料の、通常運転時(事故条件は対象外)における燃焼初期から高燃焼度までのふるまいを解 析する。

# 1.1 燃料解析コードの性格

## 1.1.1 燃料ふるまいの特徴と燃料解析コードの性格

燃料棒は、炉心において放射性物質が極めて高濃度で集積している物体である。その熱的、力 学的ふるまいは、温度、中性子、核分裂、核分裂生成物(FP)蓄積など原子論的ミクロレベルの現 象から工学的に操作可能なマクロスケールの現象にまたがる多くの要因の複雑な相互作用の結 果である。また、燃料集合体は、プラントの運転においては設計燃焼度(寿命末期)まで被覆管 の健全性を保って放射性物質を閉じこめつつ設計出力を維持するという、安全性と発電効率の二 つの要求を同時にかなえねばならない。この実現には、経験をふまえた多くの技術開発と研究努 力が必要である。ここに、燃料ふるまいを工学研究・安全性研究の対象にする根本的な理由があ る。

一方、燃料ふるまいが複雑な相互作用の結果であることは、実際の照射経験が大きな意味を持 つ世界であることを意味する。すなわち、理論的・決定論的モデルでは必ずしも正確に予測でき ない部分があり、炉物理のような理論モデルに乗らない、物理的理論式では明確に定義されない 性質や、微量不純物元素や結晶組織の影響、製造履歴依存性、その他の不明要因がある世界であ る。また、多くの要因がからむため、要因ごとの単純な計算の集積では各要因の全体ふるまいへ の寄与を評価するのが困難である。したがって設計やふるまい把握にとっては照射経験が不可欠 な要素となる。 しかし、燃料棒の照射(照射試験と照射後試験)は一般に大きな費用と長時間を要し、データ の質と量は限られる。燃料棒の内部に関する欲しいデータがすべて得られるわけではなく、燃料 中心温度や内圧など、特定の計測可能な物理量や、燃焼度分布など、間接的に計測した物理量に 依存して燃料ふるまいの全体を把握しなければならない場合がある。

こうした状況では、「直接・間接的に計測した物理量」を用いて燃料解析コードによっていわ ば「逆問題」を解くようにして、燃料内部の要素の連関構造を認識・再現し、ふるまいを制御す るパラメータを把握し、ふるまい予測を行うことが重要な手段となる。燃料解析コード FEMAXI は、このための工学ツールである。すなわち、FEMAXIコードの開発とは、限られた照射データ や照射経験に基づき、燃料ふるまいを構成する個々の要素間の相互作用の構造のモデルを、逆問 題を解く手段として構築し、再現・予測能力の検証を行うプロセスのことである。

#### 1.1.2 FEMAXI による燃料挙動の予測

FEMAXIコード、特にFEMAXI-7は多くの機構論的モデルと補足的な経験モデル、およびそれ らを制御するパラメータを内蔵している。一般に燃料解析コードは、未知の燃料の照射ふるまい を予測するという役割が大きく求められる。これに対し、FEMAXI-7の多くのモデルとパラメー タは、その組み合わせ次第でどの様な計算結果をももたらす可能性があるので、最終的な予測値 への信頼性が評価できないのではないかという疑問が生じる。

一方で、燃料メーカーの燃料設計コードでは、一般に FEMAXI のような機構論的なモデルはあ まり用いず、照射データベースから抽出した経験式・相関式を用いて燃料ふるまいを予測し、そ の予測値は実測データと比較検証される。したがって、その照射データベースの範囲、及びその 少し外側の範囲までは解析の予測には信頼性があり、燃料設計に有効であると言える。

FEMAXI-7 のような機構論モデルを主としたコードにおいては、できるだけ一般的な適用性を 持ったモデルとデータセットの組み合わせを検証計算の過程の中で見いだしていく必要がある。 照射結果がわかっている燃料に対して、あるモデルとパラメータセットで照射結果を再現できた 場合、同一のモデルとパラメータセットを別の燃料に適用してその照射データを再現できれば、 少なくともそれらの燃料に対してはコードおよびモデルとパラメータセットの予測性能は検証 されたことになる。こうした検証が、FEMAXIコードの場合、どのモデルとパラメータセットに 対してどの程度実施され、予測精度のどこまでの一般性が保証されるかは、解析ケース数、解析 した燃料の種類や照射条件に依存する。この意味で、FEMAXI-7の検証は現在進行中である。こ れは既に国際ベンチマーク FUMEX-III<sup>(1.1)</sup>への参加、Halden 試験照射の解析などを通じて実現され つつあり、モデルとパラメータセットの絞り込みの方向は追求されている。

同時に FEMAXI-7 コードでは、その内蔵する多くの個別モデルとそれらを制御するパラメータの組み合わせによって、従来のモデル及びパラメータセットでは再現できないような燃料照射ふるまい(照射データ)を再現する試みが可能である。これは、燃料ふるまいの機構の推定、すな

-2-

わち、(前項 **1.1.2** の繰り返しになるが)照射データから「逆問題」を解くようにして、燃料内部の要素の未知の連関構造を認識・再現し、ふるまいを制御するパラメータを把握する手段である。

さらに、実施された照射実験の範囲を超えた、あるいは照射実験計画で想定した条件(たとえ ば線出力や燃焼度)でのふるまい予測や、新しい設計の燃料のふるまい予測にも用いることがで きる。これらが燃料設計コードとは異なる、燃料研究コードとしての FEMAXI の特徴である。

## 1.1.3 FEMAXIコード開発の歴史

最新バージョンFEMAXI-7までの開発の歴史をごく簡単に振り返る(敬称略)。特徴的なことは、 FEMAXI-7に至るまで、多くの人が関わり、多くの人の知恵と努力と経験が集積されていること である。いわば、日本の燃料関係の技術者研究者の見識と経験を結集したベースに立つコードと 言ってよい。

(1) FEMAXI-I 市川が Halden Project において開発。二次元弾塑性 PCMI 解析。(1974)

- (2) FEMAXI-II 木下(電中研)がクリープモデルを付加。(1977)
- (3) FEMAXI-III<sup>(1.2)</sup> 原研、大学、日立東芝 NFD、電中研、CRC が大規模に共同開発、日本 原子力学会技術賞、国際ベンチマークで優秀な成績。→NEA-DataBank<sup>(1.3)</sup>へ公開。(1984)
- (4) FEMAXI-IV<sup>(1.4)-(1.13)</sup> 中島らが改良→NUPEC ((財)原子力発電技術機構)で利用。
  - →鈴木が引き継ぎ、Ver.2 開発。→NEA-DataBank へ公開。 (1996)
- (5) FEMAXI-V<sup>(1.14)(1.15)</sup> 鈴木らが高燃焼度用へ改良。→NUPEC, NEA-DataBank へ公開(2001)。
- (6) FEMAXI-6 鈴木らが更なる改良、高度化→JNES((独)原子力安全基盤機構)<sup>(1.16)</sup>、
  - NEA-DataBank へ公開。(2003-2010)

またこれらの開発と同時期に原研機構外で開発された、高燃焼燃料への対応を図ったコードと しては、ENIGMA<sup>(1.17)</sup>、 TRANSURANUS<sup>(1.18)</sup>などがあり、特に後者は欧州において多くのユーザ ーを持っている。

## 1.1.4 FEMAXIコードの利用

FEMAXI-6を含む、FEMAXIコードの利用目的は以下のようにまとめられる。

#### (1) 安全審査用クロスチェック

JNES において用いられている燃料安全審査用クロスチェックコードの主要部分は前バージョン FEMAXI-6 と同一である。

#### (2) 公開

コードパッケージ (ソース及び詳細マニュアル)を RIST (Research Organization for Information

Science & Technology、(財)高度情報科学技術研究機構 http://www.rist.or.jp/)を通じて国内ユーザー (主に電力会社系ソフトハウス、大学、燃料メーカーなど) へ公開している。また日本の代表的 燃料コードとして NEA DataBank に登録され、海外ユーザーへ無償公開されている。旧バージョ ン FEMAXI-VI、FEMAXI-V および FEMAXI-6 も NEA DataBank から海外ユーザーへ配布されてい るが、その総数は 30 件以上である。外部ユーザーを積極的に得て、問い合わせにもできる限り 答えており、日本の燃料コードの事実上の frame-of-reference となっている。

#### (3) 実験解析の手段、実験計画における予測手段、ふるまい理解の訓練手段

FEMAXIコードは照射試験データの解析や、照射済み燃料で事故模擬実験を行った場合の解析 における事故直前状態の解析などに用いられる。また照射試験の立案や、燃料設計の妥当性を評 価する予測手段として利用できる。さらに、燃料ふるまいを理解するために、様々な入力条件を 与えて simulation をすることにより、訓練手段としても利用できる。

#### (4) 照射データ・新モデルを評価するプラットホーム

新たに得られた照射データや物性値は、それ自体では燃料のふるまい変化や性能向上にどの程 度寄与しているかはっきり判断できない。しかしそれをコードに組み込み、モデル化されている 多くの要因の相互作用の中に投げ込んでシミュレーションをすることにより、燃料ふるまい全体 への寄与がより定量的に評価できる。FEMAXIコードはこうした目的のためのプラットフォーム としての機能を果たす。

# 1.2 FEMAXIの構造とモデルの特徴

#### 1.2.1 モデルとは何か

具体的な解析モデルを論じる前に、コードが構成要素としているモデルとは何かを考察する。 モデルとは何であろうか。ここで、モデル開発の目的は現象を正確に模写することであると答 えたとしたら不十分である。なぜなら、「では、なぜ正確に模写しなければならないのか、ある いはその場合の正確さとはどの様なものか」に答えていないからである。そもそも、対象に関す る知識が十分でない状況においてモデル開発が始められるのであるから、正確さには限界がある。 つまり、モデルは現実の近似であり、現実の観念的な、しかしある程度以上の定量性を帯びた反 映であるからこそモデルなのである。したがってモデル開発は、以下のように段階を経て高度化 していく。

①第一に、モデルを通して現象を見ると、現象がどう見えてくるか、何が見えてくるかという、現象のメカニズムに関する洞察を与える手段としての段階。

②モデルをコードに組み込んで計算を実行することにより、現象の背後の機構を推定する。背景

機構の解明手段としての性格を帯びる段階。

③モデルパラメータを動かすことによる予測手段としての性能向上、逆問題を解く手段として利 用できる段階。

しかし、あくまで①の、観念への反映と、観念から独立した現実との相互浸透による現象の機構への洞察の深化こそがモデルの本質的役割であると考えられる。

#### 1.2.2 燃料モデリングとは何か

燃料モデリングについては、発熱・熱伝導・冷却、FP ガス放出、PCMI (Pellet-Clad Mechanical Interaction; ペレット被覆管機械的相互作用)等、ふるまいを規定する主要な現象の個々のモデル 化という意味で論じられることが普通である。しかし、高燃焼度燃料のふるまいでは要因間の相 互作用が強くなるので、個々の現象のモデル化と同時に、それらを統合する連関構造もモデリン グの対象といえる。つまり、個々のモデルの連関構造自体がコード設計で必要となる。これは、 要素間の相互作用をどこまで意識的にモデル化するか、を意味する。

たとえば、温度計算と力学計算の連成、FP ガスバブル成長と変形(スエリング)計算・熱伝導 率低下との連関をどう扱うか、などである。ただしコード内の連関構造自体は、最初から複雑に はできないので、簡易的な仮定やモデルから出発することが基本的な方向である。たとえばガス バブルによるポロシティ増加はペレットの熱伝導率低下に追加的な効果を持たせるが、ペレット の機械的性質とは無関係とする、などである。

一方、核計算は熱・力学ふるまいとの相互作用が弱いので、相対的に独立させることが燃料コードにおいては一般的である。すなわち、ペレット半径方向の発熱密度プロファイルや、線出力レベルに対応した高速中性子束レベルなどは、燃焼計算コードの出力を利用する。この意味で、 FEMAXIに出力結果を与える燃焼計算コード(たとえば Refs.(1.19), (1.20))は重要である。

以上をふまえて、FEMAXI コードのモデルの特徴は、以下のようにまとめられる。

①解析対象を1本の燃料棒とその周囲の冷却材に限定し、集合体内の燃料棒間および炉心全体との熱的・力学的・核的相互作用からは切り離して考える。

②モデル設計においては、工学 tool としての性能、すなわちふるまいの予測性能を最優先目標と する立場に立つ。したがって、この意味で、個々のモデルを物理的な考察・原理に基づかせるこ とを優先課題とはしない。機構論的モデルと経験モデルを組み合わせているが、機構論モデルが 設計できない場合は経験モデルから出発する。

③計算速度向上を求めているが、炉心内の多数の燃料棒に関する統計的解析を目的とした短時間 計算のためのモデル上の工夫については、低い優先順位を与える。

-5-

## 1.2.3 解析対象

FEMAXI-7 はいうまでもなく FEMAXI-6 までの経験をふまえ、さらに構造を新たにして機能を 拡大した高度化バージョンである。FEMAXI-7 の解析対象は、FEMAXI-6 までのバージョンと同 様に、通常運転時ふるまい、負荷追従や出力急昇などの出力過渡、および BWR 燃料の過渡沸騰 遷移のような冷却過渡における燃料ふるまいである。したがって、解析範囲は、定常状態のみな らず過渡状態にも及ぶが、冷却材喪失事故(LOCA)や反応度事故(RIA)のような事故条件は含まな い。

FEMAXI-7 が扱う現象を表 1.1 に示す。物性値は MOX 燃料および Gd 入りの UO<sub>2</sub>燃料を含めて 文献上公開されているものを最大限採用した。FEMAXI-V、FEMAXI-6、および FEMAXI-7 の機 能上の主要な相違点を表 1.2 に示す。いずれも公開バージョンの比較である。各項目については 2章以降に説明される。

	熱的変化(温度に依存)	力学的変化				
ペレット	熱伝導(径方向発熱密度分布) FP ガス放出(温度と燃焼度に依存) スエリング(固体 FP、ガスバブル)	熱膨張、弾性・塑性、クリープ クラック、初期リロケーション やきしまり、ホットプレス スウェリング(固体 FP、ガスバブル)				
被覆管	熱伝導、酸化膜成長	熱膨張、弾性・塑性、クリープ 軸方向照射成長、酸化膜成長				
燃料棒	ギャップ熱伝達、ギャップガス流 動、被覆管表面熱伝達	PCMI、ペレット・被覆管の摩擦				

表 1.1 FEMAXI-7 の解析対象(現象)

表1.2 FEMAXI-7に至るまでの主要な機能の高度化

	FEMAXI-V 1999 公開	FEMAXI-6 2002 公開	FEMAXI-7
熱解析と力学解析の連成	×	0	0
ペレット熱伝導率などの燃焼度依存性	0	0	0
ペレット高燃焼度組織モデル	Δ	Δ	0
ガスバブルスエリングモデル	×	Δ	0
速度論的ガスバブル成長モデル	×	×	0
過渡沸騰解析熱水力モデル	0	0	0
入出力改良、物性値更新・追加、	0	0	Ø
事故時燃料解析コード RANNS への接続	×	×	0
モジュール化構造、詳細コメント組み込み、			
要素数選択、ベース照射から試験照射の	×	×	0
re-start 機能			

# 1.3 全体構造

本コードは図 1.1、図 1.2 および図 1.3 に概略を示すように、熱的挙動を解析する部分と力学的 挙動を解析する部分から構成される。

熱的解析部は、燃料棒全長の各セグメントにおいて温度分布やガス圧力を径方向1次元軸対称 (円筒座標系)問題として扱い、ペレット・被覆管のギャップ幅変化、FP ガス放出モデル、軸方 向ガス流動およびこれらのギャップ熱伝達へのフィードバックを考慮して解析する。軸方向出力 分布を考慮するため燃料棒発熱部の軸方向は最大 40 領域(セグメント)に分割され、熱的フィ ードバックが燃料棒全長にわたって収束するまで繰り返し計算される。

全長力学的解析部では、軸対称有限要素法(FEM)を燃料棒全長の各セグメントに適用して、ペ レットと被覆管の力学解析を行う。ここではまず熱膨張、やきしまり、スエリングおよび、ペレ ットのリロケーションによる初期ひずみを計算し、ペレットの割れ、弾塑性およびクリープを考 慮して剛性方程式を作成し、接触モードに対応する境界条件を仮定して剛性方程式を解くことに より、応力やひずみを求める。ここでは塑性、クリープおよび割れたペレットの弾性が、未知量 である応力ひずみの関数であることを考慮して、剛性マトリクスに関する繰り返し計算が行われ る。

ペレットと被覆管の非接触↔接触、弾性↔塑性の状態変化が1タイムステップ中に生じる 場合には、タイムステップ終了時の計算結果を状態変化が起こった時刻に戻し、その時刻以後に ついて状態を改めて再計算を行う。軸方向セグメントに分割された燃料において、上部セグメン トのペレットと被覆管の接触状態による下部セグメントに及ぼす軸力を評価することが可能で ある。

熱的解析部とこの全長力学解析部は連成しており、一つのタイムステップ内において反復繰り 返し計算(Iteration)により温度と変形の収束値を求める。

さらに、局所 PCMI 解析部では、熱的解析部と全長力学解析部の連成によって得られた温度分 布および内圧などの数値に基づいて、半ペレット長にわたる局所 PCMI 解析を2次元有限要素法 によって行う。



図 1.1 FEMAXI コードの解析の全体的順序





図 1.3 FEMAXI-7 のモデルの相互関連とフィードバック構造

# 1.4 数値計算とモデルの特徴

本コードの数値計算とモデルの主な特徴は以下のとおりである。主に(1)~(9)項は FEMAXI-6 及びそれ以前のバージョンから引き継いでいるが、細部を改良し、精度と安定性を向上させた。

#### (1) 要素特性

燃料全長にわたる力学計算を行うため、FEM 解析において四角形3自由度要素を導入し、計算 領域、計算時間の短縮をはかっている。

### (2) クリープ解法

陰解法計算により、高クリープ速度時における数値解の安定性の向上をはかっている。

#### (3) マトリクス解法

有限要素法の連立方程式(剛性方程式)の係数マトリクスは下図 のようにゼロ成分の多い優対角対称マトリクスである。そこで方程 式の解法として、スカイライン法を採用し、マトリクス非ゼロ成分 の記憶方式および処理手順を改良し、記憶容量のコンパクト化およ び、計算時間を短縮している。スカイライン法では右図における実 線内部だけを記憶し記憶領域を節約する。FP ガス放出モデルにおい ては、マトリクスや逆行列の演算回数が最小になるように工夫して



いる。(3.9 章参照) \*: 非ゼロ成分 .....:: スカイライン法の記憶領域

#### (4) 非平衡残差

非線形問題を解く場合、タイムステップ毎に生じる非平衡残差の累積を避けるため、平衡条件 式を増分型で表わさず、荷重と応力の全体の平衡が満足される定式化を行っている。

(5) 接触問題

ペレット・被覆管の接触状態として、ギャップ開き、固着、すべりの3つの接触モードを仮定 し、ペレット、被覆管の節点対について接触モードを判定し、それにしたがって境界条件が設定 される。

#### (6) 割れたペレットの挙動

ペレットの割れは従来のコードと同様に、剛性低下の方法で近似的に取り扱うが、割れてリロ ケーションしたペレットの PCMI における挙動をよりよく表すために、圧縮状態下におけるペレ ット剛性の回復をリロケーション量の関数として表す。

#### (7) ギャップ内ガス拡散流動モデル

ギャップ内の拡散流動をモデル化し、FP ガスのギャップ熱伝達に与える影響を評価した。

#### (8) 過渡時のふるまい解析

非定常熱伝達、ギャップガス流動、FP ガス放出の機構論的モデルにより、過渡時の解析を行う。また、各モデル毎に独自のタイムステップ制御を行い、精度の良い解と計算時間の短縮を図

った。

#### (9) 計算の簡略化

FP ガス放出モデルでは、低温領域、高温領域で、同じ形の計算を行っている場合には、一方の 要素の計算結果を他方にも用い、二重の計算をさける工夫を施した。参照回数の多い物性値等は データテーブル化し、特殊関数の使用をさけた。

#### (10) FP ガス放出モデル

FP ガスの放出機構は、等価球を用いての拡散計算(最小残差法)と、ガスバブル生成の計算に よるモデルを用いる。さらに、ペレット内熱応力による FP ガス放出抑制モデルを組み込んだ。 ガスバブル成長は平衡論モデル、速度論モデルのいずれか一方を選択できる。また粒内および粒 界のバブルスエリングの平衡論的モデルおよび速度論モデルを組み込んだ。

#### (11) 被覆管の酸化モデル

被覆管外表面の酸化をモデル化し、酸化膜による熱伝達の変化の計算を行う。

#### (12) 熱水カモデルの導入

燃料棒と冷却材間の熱伝達については、RELAP5-MOD1 モデルを導入した。

(13) リム組織の経験モデル

高燃焼度燃料ペレットの表面近くに生成するリム組織に関する経験モデルを組み込んだ。

#### (14) 疲労解析機能

FEMAXI-7 は、出力サイクルによって被覆管が受ける応力と歪みの繰り返し変化を計算し、出力する機能を持つ。

# 1.5 他コードとの関係、その他

## 1.5.1 燃焼解析コード RODBURN および PLUTON との接続

ペレットの半径方向および軸方向の出力分布プロファイルおよび燃焼度プロファイルは、燃焼 初期から燃焼が進むにつれ変化する。また、この変化は燃料棒が照射されている炉のタイプ(PWR, BWR,重水炉など)、すなわち中性子スペクトルによっても異なる。これらのプロファイルは、 当然ペレットの温度分布に影響し、また、燃焼度に依存して変化する物性モデルにも影響する。 したがってFEMAXI-7では、FEMAXI-6と同様に、燃焼計算コードRODBURN<sup>(1.19)</sup>及びPLUTON<sup>(1.20)</sup> の燃焼計算コードの計算結果のファイルを読み込んで解析に用いる機能がある。RODBURN は、 ORIGEN<sup>(1.21)</sup>や RABBLE<sup>(1.22)</sup>の一部を用いて、与えられた出力履歴と燃料棒仕様に従いペレットお よびペレットスタックの出力、燃焼度、核分裂物質などの分布プロファイルを計算し、結果のフ ァイルを生成する。

PLUTON は独自の形状関数を用いて正確かつ高速にアイソトープ分布、発熱密度分布などを

詳細に計算するコードである。またこれら以外の燃焼計算コードの出力を用いることも可能である。その場合は、FEMAXIの入力ファイルの最後の部分に燃焼計算コード出力の数値を追加記入する。

## 1.5.2 事故解析コード RANNS との接続

FEMAXI-7 は、照射初期から事故直前までの燃料棒状態の変化を計算し、事故直前状態をファ イルに出力して、事故時燃料解析コード RANNS へ渡す機能を持つ。RANNS はこのファイルを 読み込み、初期条件として燃料ふるまいを解析する。

## 1.5.3 ベース照射から Re-start による試験照射への接続

FEMAXI-7 は、ベース照射期間の解析をいったん Re-start ファイルに書き込み、その後に続く 試験照射の初期条件として読み込んで解析を続けることが可能である。

FEMAXI-6 までは、ベース照射期間が長尺燃料棒でそれを再加工して試験照射する場合の解析 に、ベース照射期間から一貫して連続して短尺燃料棒の条件で近似計算をせざるを得ず、これが 最終結果の精度に影響する場合があった。また試験照射期間だけの解析でも、必ずベース照射の 初期から解析を始めなければならないという作業の非効率性があった。FEMAXI-7 ではこれらの 問題を取り除いた。

## 1.5.4 実行環境など

## (1) マシン、ソース、コンパイラー

FEMAXI コードは FEMAXI-V 以来、Windows PC 上で稼働することを前提として開発されている。ソースコードは主に Fortran-77 であり、一部 Fortran-90 で記述されている。今回の FEMAXI-7 では Linux バージョンも開発した。

コンパイラは従来 Compaq Digital Visual Fortran v.6 or up (Compaq DVF)を用いてきた。ただし、 このコンパイラは現在発売終了となっており、今後ユーザーが新規にコンパイラをインストール して用いる場合は、Compaq DVF の機能を包含している Intel® Visual Fortran Compiler for Windows version 10.x.x (Intel VF)<sup>(1.23)</sup>を用いることとする。すなわち、FEMAXI-7 ソースからは、Compaq DVF、 Intel VF、および Linux の 3 種のコンパイラで同一の機能を持つ実行プログラムが作成できる。 Compaq コンパイラに比べて Intel VF でコンパイルしたプログラムの方が 30~40%計算速度が速い。

#### (2) プロット出力

FEMAXI-7の計算結果は、直接には数値出力、また付属のプロットプログラム EXPLOT を稼働 することによって得られるプロット出力、プロット出力に対応する EXCEL テーブル出力、の3 種の出力が得られる。

## (3) 公開とユーザーサポート

FEMAXI-7 のパッケージは、ソース、実行プログラム、コンパイルオプションファイル、プロ ットなど関連プログラム、コード説明書、入出力マニュアルからなる。公開は原研機構のプログ ラムデータベース PRODAS に登録後、機構内ユーザーは PRODAS から download、機構外ユーザ ーは RIST を経由して入手、また外国のユーザーは、RIST 経由で NEA DataBank に登録されたパ ッケージを NEA DataBank から入手することになる。

【注】本報告書は、FEMAXI-7 公開パッケージのうち、コード説明書に 当たるものであり、入出力マニュアルは本報告書の続編として別途、 JAEA-Data/Code として発刊される。

# 参考文献 1

- (1.1) Improvement of Computer Codes Used for Fuel Behaviour Simulation FUMEX III, http://www-nfcis.iaea.org/CRP/CRPMain.asp?RightP=CRPDescription&CRPID=16
- (1.2) Nakajima T., Ichikawa M., et al., FEMAXI-III : A Computer Code for the Analysis of Thermal and Mechanical Behavior of Fuel Rods, JAERI 1298 (1985).
- (1.3) OECD Nuclear Energy Agency, DataBank, http://www.nea.fr/databank/
- (1.4) Nakajima T., FEMAXI-IV: A Computer Code for the Analysis of Fuel Rod Behavior under Transient Conditions, Nucl. Eng. Design 88, p.69-84 (1985).
- (1.5) Nakajima T. and Saito H., A Comparison between Fission Gas Release Data and FEMAXI-IV Code Calculations, Nucl. Eng. Design 101, p.267-279 (1987).
- (1.6) Nakajima T., Saito H. and Osaka T., Analysis of Fission Gas Release from UO2 Fuel during Power Transients by FEMAXI-IV Code, IWGFPT-27.259, p.140-162 (1987).
- (1.7) Nakajima T. and Ki-Seob Sim, Analysis of Fuel Behavior in Power-Ramp Tests by FEMAXI-IV Code, Res Mechanica 25, p.101-128 (1988).
- (1.8) Nakajima T., Saito H. and Osaka T., Fuel Behavior Modelling Code FEMAXI-IV and Its Application, IAEA-T1-TC-659, Paper presented at IAEA Technical Committee on Water Reactor Fuel Element Computer Modelling in Steady-State, Transient and Accident Conditions, Preston, England, Sept.19-22, (1988).
- (1.9) 内田正明、斎藤裕明、実炉燃料照射データによる FEMAXI-IV コードの検証、 JAERI-M 90-002 (1990).
- (1.10) Nakajima T., Saito H., and Osaka T., FEMAXI-IV:A Computer Code for the Analysis of Thermal and Mechanical Behavior of Light Water Reactor Fuel Rods, Trans.11<sup>th</sup> Int. Conf. on SMIRT (Tokyo, Japan), 6297 PV.C-D, p.1-6 (1991).
- (1.11) Nakajima T., Saito H., and Osaka T., FEMAXI-IV:A Computer Code for the Analysis of Thermal and Mechanical Behavior of Light Water Reactor Fuel Rods, Nucl. Eng. Design 148, p.41-52 (1994).
- (1.12) 鈴木元衛、斉藤裕明、軽水炉燃料解析コード FEMAXI-IV(ver.2)の詳細構造とユ ーザーズマニュアル、
   JAERI-Data/Code 97-010 (1997).
- (1.13) Suzuki M. and Saitou H., Light Water Reactor Fuel Analysis Code FEMAXI-IV (Ver.2) -Detailed Structure and User's Manual-, JAERI-Data/Code 97-043 (1997).

 (1.14) 鈴木元衛、上塚寛、軽水炉燃料解析コード FEMAXI-V(ver.1) 一詳細構造とユ ーザーズマニュアルー、
 JAERI-Data/Code 99-046 (1999).

 (1.15) Suzuki M., Light Water Reactor Fuel Analysis Code FEMAXI-V(Ver.1), JAERI-Data/Code 2000-030 (2000).
 (1.16) Japan Nuclear Energy Safety Organization, http://www.jnes.go.jp/

(1.17) Jackson P.A., Turnbull J.A. and White R.J., ENIGMA Fuel Performance Code, Nucl.Energy 29, p.107-114 (1990).

(1.18) Lassmann K., Miettinen J. and Holmstroem H., TRANSURANUS: A Fuel Rod Analysis Code Ready for Use in Simulators and Plant Analyzers, Proc. CSNI Specialist Meeting on Simulators and Plant Analyzers, Lappeenranta, Finland (1992) VTT-SYMP-141.572P, p.185-204 (1994).

(1.19) 内田正明、斉藤裕明、燃料棒内出力分布計算コード: RODBURN, JAERI-M 93-108 (1993).

- (1.20) Lemehov, S.E. and Suzuki M., PLUTON-Three Group Neutronic Code for Burnup Analysis of Isotope Generation and Depletion in Highly Irradiated LWR Fuel Rods, JAERI-Data/Code 2001-025 (2001).
- (1.21) Bell M.J., ORIGEN The ORNL Isotope Generation and Depletion Code, ORNL-4628 (1973).
- (1.22) Kier P.H. and Robba A.A., RABBLE, A Program for Computation of Resonance Absorption in Multi-region Reactor Cells, ANL-7326 (1967).
- (1.23) <u>http://software.intel.com/en-us/intel-compilers/</u>

# 2. 熱的解析モデル

# 2.1 冷却材への伝熱と熱水力モデル

熱的解析部では、冷却材温度から決定される境界条件を用いて、各軸方向セグメントにおける 径方向一次元円筒モデルによって燃料棒内の半径方向温度分布を計算する。仮定および計算手順 を以下に示す。これらの具体的計算方法は次節で解説する。

- (1) 冷却材の温度と状態は、軸方向全セグメントにおいて、前タイムステップにおける冷却 材のエンタルピー軸方向分布に依存し、現タイムステップでの入口温度、圧力、流量速 度、各軸方向セグメントからの表面熱流束によって決定される。FEMAXIの熱水力モデル は、定常状態のみならず、出力上昇、下降、負荷追従などの過渡変化にも適用できる。 ただし、発熱部全軸長を少数のセグメントで近似した場合で、きわめて短時間で流量変 化があった場合には、設定した軸方向セグメント長、流速、タイムステップ幅の関係よ り得られる冷却材の軸方向温度(エンタルピー)分布が正しく計算できない場合がある。 この不具合を解消するために、冷却材のエンタルピー計算では、常に燃料棒の全スタッ ク部軸長を等分割 100 領域のサブセグメントに細分割し、このサブセグメントにおいて 得られたエンタルピー分布に基づいてセグメントの代表点のエンタルピーを補間して求 め、軸方向温度分布を求める方式を用いる。これによって、ユーザーは軸方向セグメン ト数およびセグメント長を、冷却材温度及び燃料温度のセグメント分布計算への誤差に 配慮することなしに自由に設定できるようになった。
- (2)各セグメントにおけるエンタルピーは、冷却材入口エンタルピーを起点として、現タイムステップ開始時におけるエンタルピー分布を基に、流量速度および各セグメントからの発熱より求められるエンタルピーの上昇より計算される。こうして求めた冷却材のエンタルピー軸方向分布から、冷却材温度の軸方向分布が与えられる。なお、(1)で述べたように、冷却材のエンタルピー軸方向分布は、細分化したサブセグメントより求めたエンタルピーを補間して求めたものである。
- (3) 次に、沸騰の各モードにおける熱伝達係数を決定する。その後、(2)で算出した冷却材温度を起点として被覆管表面温度を計算し、被覆管表面からペレット中心までの温度分布を(3)の結果を境界条件として半径方向1次元体系で計算する。

- (4) 燃料棒の軸方向の直接の伝熱(軸方向セグメント間の伝熱)は考慮しない。燃料棒においては軸方向の出力分布差に起因する軸方向伝熱は、ペレット端面におけるディッシュや空隙の抵抗により抑制され、軸方向の温度勾配は半径方向に比べてきわめて小さく、軸方向の次元を熱計算に追加して計算時間を大幅に拡大するだけの意義に乏しいからである。
- (5) また、以上のような冷却材への伝熱と燃料棒内部からの熱流束から被覆管表面温度を計算する通常のモード以外に、被覆管表面温度の時間履歴を入力で指定し、この温度を境 界条件として燃料棒内部の温度を計算する(Dirichlet 問題)モードも FEMAXI では適用 可能である。

径方向一次元温度分布の計算、ギャップ熱伝達モデル、接触力モデル、FP ガス放出モデルの具体的内容については、2.3~2.7節で解説する。熱計算のフローを次に示す。



図 2.1.1 燃料棒熱計算のフロー

## 2.1.1 冷却材のエンタルピー上昇のモデル

このモデルでは、各タイムステップ毎の質量流束および圧力を一定として扱う<sup>(2.1)</sup>。軸方向位置 z(m)、時刻 t(s)における、冷却材(水または蒸気)のエンタルピーH(z,t)(J/kg)は、冷却材入口からの 履歴を積分することにより以下のように与えられる。

$$H(z,t) = H(0,t_{\rm in}) + \int_{t_{\rm in}}^{t} \frac{V(z')Q(z')}{S(z')} d\tau$$
(2.1.1)

ここで、

*H*(0, *t*<sub>in</sub>):入口エンタルピー(J/kg)

tin:時刻 t で軸方向位置 z にある冷却材が入口を通過した時刻(s)

V:比容積(m<sup>3</sup>/kg)

Q: 単位長さ当たりの熱流入量(W/m)

S: 流路断面積(m<sup>2</sup>)

 $z'(\tau)$ :時刻 t で軸方向位置 z にある冷却材の時刻  $\tau$  における軸方向位置(m)  $\tau$ :時間

である。

ある時刻 toからto+Δtのタイムステップ間に着目すれば、(2.1.1)式を

$$H(z,t_0 + \Delta t) = H(z_0,t_0) + \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \frac{V(z')Q(z')}{S(z')} d\tau$$
(2.1.2)

と書ける。ここで、

 $z_0$ :時刻 $t_0$  +  $\Delta t$  で軸方向位置 z にある冷却材の時刻  $t_0$ における軸方向座標(m)

である。

次に、燃料有効長を、入力で与えるセグメント長に関わりなく、等間隔に 100 サブセグメント に分割する。この 100 サブセグメントに対して、エンタルピー上昇モデル図を図 2.1.2 に示す。 図に示すように軸方向座標 *z* をサブセグメント *j* の代表点とし、軸方向座標 *z*<sub>0</sub> を含むサブセグメ ントを *k* とする。時刻  $t_0 + \Delta t$  で軸方向位置 *z* にある冷却材が *z*<sub>0</sub> から *z* に移動する際、サブセグメ ント *i* を通過するのに要する時間を  $\delta t_i$  とすれば、タイムステップ増分  $\Delta t$  は以下のように表示で きる。

$$\Delta t = \delta t_k + \delta t_{k+1} + \dots + \delta t_{i-1} + \delta t_i$$
(2.1.3)

 $\delta t_i$ 及びサブセグメント*i*における V, Q, Sの平均値  $V_i, Q_i, S_i$ を用いて(2.1.2)式の積分を書き換

えれば、時刻 $t_0 + \Delta t$ におけるサブセグメントjのエンタルピー $H_j$ は

$$H_{j}(t_{0} + \Delta t) = H_{0}(t_{0}) + \sum_{i=k}^{j} \frac{V_{i}Q_{i}}{S_{i}} \delta t_{i}$$
(2.1.4)

として与えられる。



図 2.1.2 冷却材エンタルピー上昇モデル

 $\Delta t_i$ は、セグメント*i*における流速を $u_i$ (m/s)として、

$$\delta t_i = \frac{\Delta L_i}{u_i} = \frac{\Delta L_i}{G_i V_i} = \frac{S_i \Delta L_i}{WV_i}$$
(2.1.5)

ここで、

$$\Delta L_i$$
: サブセグメント $i$ のセグメント長(m)  
 $G_i$ : 質量流束(kg/m<sup>2</sup>s)  
 $W$ : 質量流量(kg/s)

である。また、 $\Delta L_i$ は次のように与える。

$$\Delta L_{i} = \begin{cases} \frac{z_{j+1} - z_{j}}{2} & (i = j) \\ z_{i+1} - z_{i} & (k \neq i \neq j) \\ z_{k+1} - z_{0} & (i = k) \end{cases}$$
(2.1.6)

 $H_0(t_0)$ は、 $z_k$ 、 $z_{k+1}$ におけるエンタルピーを補間して

$$H_0(t_0) = H_k(t_0) + \left(H_{k+1}(t_0) - H_k(t_0)\right) \frac{z_0 - z_k}{z_{k+1} - z_k}$$
(2.1.7)

で与えられる。ここで、(入力指定した)セグメントの代表点エンタルピーとは、サブセグメントの上下のノードにおけるエンタルピーの平均エンタルピーである。これらの具体的な計算順序については図 2.1.3 に示す。

なお、FEMAXIコードでは、冷却材入口温度と圧力の関係において、蒸気単相の入口条件を扱 わない。入口温度と圧力が入力された場合、入力温度のわずかな数値のまるめや数値誤差によっ て、FEMAXIコードの持つ蒸気表では飽和温度を超えた入口温度と判断される場合がある。この 場合には、入口エンタルピーが決定できない。そこで、入口温度が冷却材圧力条件下での飽和温 度以上の値に入力指定された場合には、入口温度はコード内部では液相単相の飽和温度として扱 い、入口エンタルピーを決定する。(name-list parameter SUBCL 参照)

このようにして得られた、100 等分割したセグメントのエンタルピー分布を基に、FEMAXI コードで入力した軸方向セグメントのエンタルピーを(2.1.7)式によって補間して求める。





## 2.1.2 被覆管表面熱伝達率の決定

主に RELAP5/MOD1 のモデル<sup>(2.2)</sup>により、被覆管表面熱伝達係数を決定する。

(1) 沸騰の分類

沸騰は、液温により飽和沸騰と表面沸騰(サブクール沸騰)に、流れの有無により管内沸騰とプ ール沸騰に、現象のモードにより核沸騰・遷移沸騰・膜沸騰に、それぞれ分類される。沸騰のモ ード及び伝熱特性を熱流束及び伝熱面過熱度に対応させて定性的に図 2.1.4 に示す。図 2.1.4 の横
軸の伝熱面過熱度 $\Delta T_{sat}$ は、

$$\Delta T_{\rm sat} = T_{\rm w} - T_{\rm sat} \tag{2.1.8}$$

ここで、

Tw: 伝熱面の表面温度

# T<sub>sat</sub>:水の飽和温度

で与えられる。 T<sub>sat</sub> は、冷却材の圧力および温度から蒸気表を用いて求める。

### (2) 単相伝熱

図 2.1.4 で示した単相領域(非沸騰域)に対して、FEMAXI コードでは、管内強制対流熱伝達率計 算式である Dittus-Boelter 式を用いる。

<u>Dittus-Boelter</u>式<sup>(2.3)</sup>

$$q = h(T_{\rm w} - T_{\rm B}) \tag{2.1.9}$$

ここで、

$$h = 0.023 \frac{K}{D_e} Pr^{0.4} Re^{0.8}$$
  
 $Re = GD_e/\mu$   
 $q: 熱流束(W/m^2)$   
 $h: 単相流の熱伝達率(W/m^2·K)$   
 $T_w: 被覆管表面温度(K)$   
 $T_B: クーラント温度(K)$   
 $K: 熱伝導度(W/m·K)$   
 $D_e: 等価直径(m)$   
 $Pr: プラントル数(-)$   
 $Re: レイノルズ数(-)$   
 $G: 質量流束(kg/m^2·s)$   
 $\mu : 動粘性係数(kg/m·s)$ 

である。



伝熱面過熱度  $\log \Delta T_{sat}$ 

図 2.1.4 沸騰の分類と伝熱特性曲線

## (3) 核沸騰伝熱

核沸騰では、気泡底部に残存する薄液膜が急激に蒸 発することによって、伝達面温度が周期的に飽和温度 近くまで下がるため、きわめて高い熱伝導率が得られ

#### る。

FEMAXIコードでは、核沸騰熱伝達は、伝達面からサブクール水への熱伝達と伝達面から核 沸騰領域への熱伝達との和で与えられる。伝達面からサブクール水への熱伝達率計算式は(2.1.9) 式で与えた Dittus-Boelter 式を用い、伝達面から核沸騰領域への熱伝達率計算式とは Chen の式、 Jens-Lottes の式のいずれかを用いる。核沸騰熱伝達の表式は、

$$q = h(T_W - T_B) = h_W(T_W - T_B) + h_B(T_W - T_{sat})$$

$$q: 熱流束 (W/m^2)$$

$$h: 被覆管表面熱伝達係数 (W/m^2 \cdot K)$$

$$(2.1.10)$$

- h<sub>w</sub>: 単相領域(非沸騰域)への熱伝達係数 (W/m<sup>2</sup>·K)
- h<sub>B</sub>: 核沸騰領域への熱伝達係数 (W/m<sup>2</sup>·K)
- Tw: 被覆管表面温度 (K)
- T<sub>B</sub>: 冷却水温度 (K)
- *T*<sub>sat</sub>: 飽和温度 (K)

である。

核沸騰領域への熱伝達係数の Chen の式では、核沸騰の熱流束は伝熱面過熱度  $\Delta T_{sat}$  を用いて整理されており、主にボイド率の大きい出力過渡あるいは LOCA の初期などの状態に適用される。 また、Jens-Lottes の式はボイド率(気相の占める流路中の断面積/全流路断面積)の低い領域で適用できる評価式で、主に BWR 条件あるいは水のサブクール沸騰状態に適用される。

Chen の式<sup>(2.4)</sup>

$$h_{\rm B} = 0.0012 \frac{K_{\rm f}^{0.79} C_{\rm Pf}^{0.49} \rho_{\rm f}^{0.49}}{\sigma^{0.5} \mu_{\rm f}^{0.29} H_{\rm fg}^{0.24} \rho_{\rm g}^{0.24}} \Delta T_{\rm sat}^{0.24} \Delta P^{0.75} S$$
(2.1.11)

h<sub>B</sub>:核沸騰領域の表面熱伝達係数(W/m<sup>2</sup>・K)

K: 熱伝導率(W/m・K)

- C<sub>P</sub>:定圧比熱(J/kg)
- $\rho$ :密度(kg/m<sup>3</sup>)
- $\sigma$ :表面張力(N/m)
- $\mu$ :粘性係数(kg/m·s)

H<sub>fg</sub>: 潜熱(J/kg)

 $\Delta T_{sat}$ : 伝熱面過熱度(K)

$$\Delta P = P_{\rm sat} - P_{\rm cool}$$

Psat: 被覆管表面温度を飽和温度とする圧力(MPa)

Pcool: 冷却材圧力(MPa)

S: Chen の抑制係数(表 2.1.1 参照)

ここで、添え字のf は液相、g は気相を示す。

Jens-Lottes の式<sup>(2.5)</sup>

$$h_B = 0.1263 \exp\left(\frac{P_w}{6.201 \times 10^6}\right) \phi_s^{0.75}$$
(2.1.12)

h<sub>B</sub>:核沸騰領域の表面熱伝達係数(W/cm<sup>2</sup>・K)

Pw: 冷却水圧力(MPa)

 $\phi_{s}$ :被覆管外表面熱流束(W/cm<sup>2</sup>)

$$r = \left(\frac{x_{\rm e}}{1 - x_{\rm e}}\right)^{0.9} \left(\frac{\rho_{\rm f}}{\rho_{\rm g}}\right)^{0.5} \left(\frac{\mu_{\rm g}}{\mu_{\rm f}}\right)^{0.1}$$

x<sub>e</sub>: クオリティ(-)

р	:	密度(kg/m <sup>3</sup> )、	μ	:	粘性係数(kg/m・s)
---	---	-------------------------	---	---	--------------

r	F
0.0	1.00
0.1	1.07
0.2	1.21
0.3	1.42
0.4	1.63
0.6	2.02
1.0	2.75
2.0	4.30
3.0	5.60
4.0	6.75
6.0	9.10
10.0	12.10
20.0	22.00
50.0	44.70
100.0	76.00
400.0	200.00

表2.1.1(2) CHEN のサプレッションファクター,S

Re<sub>f</sub>:液相(冷却材)のレイノルズ数

C	$c_{\rm f}$ . TRATE (TEAPPERTY) of $c_{\rm f}$				
	$\operatorname{Re}_{\mathrm{f}} F^{1.25}$	S			
	10 <sup>3</sup>	1.000			
	10 <sup>4</sup>	0.893			
	$2x10^{4}$	0.793			
	3x10 <sup>4</sup>	0.703			
	$4x10^{4}$	0.629			
	6x10 <sup>4</sup>	0.513			
	10 <sup>5</sup>	0.375			
	$2x10^{5}$	0.213			
	$3x10^{5}$	0.142			
	$4x10^{5}$	0.115			
	6x10 <sup>5</sup>	0.093			
	10 <sup>6</sup>	0.083			
	10 <sup>8</sup>	0.000			

#### (4) バーンアウトと限界熱流束

沸騰モードが急に変化して熱伝達特性が劣化することを一般に沸騰危機といい、この沸騰危機 が生じる熱流束を限界熱流束と呼ぶ。沸騰危機には、核沸騰から膜沸騰に向けての沸騰遷移によ って生じるもの(DNB = departure from nucleate boiling)と、環状液膜などの破断によるものとの2 種類がある。前者はプール沸騰やサブクールないしは低クオリティ域の強制対流沸騰で発生し、 この場合の限界熱流束(CHF = critical heat flux)はバーンアウト熱流束と通称されている。一方、 後者は高クオリティの強制対流沸騰で発生し、ドライアウトと通称されている。

いわゆるバーンアウトは発熱体の急速な焼損を伴うので、高速バーンアウトと呼ばれ、ドライ アウトは沸騰危機後の発熱体温度上昇が比較的に緩やかであるため、低速バーンアウトと呼ばれ る。FEMAXI コードでは、沸騰危機が核沸騰から膜沸騰に向けての沸騰遷移によって生じるもの (高速バーンアウト)と環状液膜などの破断(低速バーンアウト)を区別するために、Bjornard と Griffith のモデル<sup>(2.6)</sup>を用いる。Bjornard 等のモデルでは、気泡の生成速度を規格化する流速として、 飽和蒸気の流速比 $J_g^*$ と飽和水の流速比 $J_f^*$ を用いて、沸騰危機が低クオリティ域で発生する(高速 バーンアウト)か、高クオリティ域で発生する(低速バーンアウト)かを区別する。

すなわち、

$$J_{g}^{*} = G x_{e} \left\{ g D_{e} \rho_{g} \left( \rho_{f} - \rho_{g} \right) \right\}^{-1/2}$$
(2.1.13)

$$J_{\rm f}^* = G(1 - x_{\rm e}) \{ g D_{\rm e} \rho_{\rm f} (\rho_{\rm f} - \rho_{\rm g}) \}^{-1/2}$$
(2.1.14)

ここで、

$$J_{g}^{*}$$
: 飽和蒸気の流速比(-)  
 $J_{f}^{*}$ : 飽和水の流速比(-)  
 $x_{e}$ : クオリティ(-)  
 $G$ : 質量流速(kg/m<sup>2</sup>·s)  
 $g$ : 重力加速度(m/s<sup>2</sup>)  
 $D_{e}$ : 等価直径(m)  
 $\rho_{g}$ : 飽和蒸気の密度(kg/m<sup>3</sup>)  
 $\rho_{f}$ : 飽和水の密度(kg/m<sup>3</sup>)

である。高速と低速状態の区別は、次の条件で判定する。

$$\begin{cases} J_{g}^{*1/2} + J_{f}^{*1/2} \leq J_{crit} & (低速) \\ J_{g}^{*1/2} + J_{f}^{*1/2} \geq 1.2 \times J_{crit} & (高速) \\ J_{crit} < J_{g}^{*1/2} + J_{f}^{*1/2} < 1.2 \times J_{crit} & (低速と高速の間を補間する) \end{cases}$$
(2.1.15)

ここで、J<sub>crit</sub>は通常の流れ状態では、1.36を用いる。

なお、クオリティ(気相質量流量/全質量流量)は、

$$x_{\rm e} = (H - H_{\rm s}) / H_{\rm fg}$$
 (2.1.16)

H:水蒸気の比エンタルピー(J/kg) H<sub>s</sub>: 飽和水の比エンタルピー(J/kg) H<sub>fg</sub>:蒸発潜熱(J/kg)

で与えられる。

次に、限界熱流束(CHF)を決定する計算について示す。

高速バーンアウトの CHF 評価式として、一様発熱の加圧水流路における DNB 熱流束  $q_{\text{DNB}}$ の実験値の最適合曲線として Tong は次の W-3 式と呼ばれる式を導いた。<sup>(2.7)</sup>

$$\begin{aligned} q_{\text{DNB}}(=q_{W3_{DNB}}) &= 3.154 \times 10^{6} \times \left\{ (2.022 - 6.2379 \times 10^{-8} P) \right. \\ &+ \left( 0.1722 - 1.4268 \times 10^{-8} P \right) \exp\left[ \left( 18.177 - 5.98705 \times 10^{-7} P \right) x_{\text{e}} \right] \right\} \\ &\times \left\{ (0.1484 - 1.596 x_{\text{e}} + 0.1729 x_{\text{e}} | x_{\text{e}} |) G / 1.3563 + 1.037 \right\} \\ &\times \left\{ 1.157 - 0.869 x_{\text{e}} \right\} \\ &\times \left\{ 0.2664 + 0.8357 \exp\left( -124.05487 D_{\text{e}} \right) \right\} \\ &\times \left\{ 0.8258 + 3.41292 \times 10^{-7} \left( H_{\text{f}} - H_{\text{in}} \right) \right\} \end{aligned}$$
(2.1.17)

*q*<sub>DNB</sub>: DNB 熱流束(W/m<sup>2</sup>) *P*: 圧力(MPa) *x*<sub>e</sub>: クオリティ(-) *G*: 質量流速(kg/m<sup>2</sup>·s) *D*<sub>e</sub>: 熱水力的等価直径(m) *H*<sub>f</sub>: 飽和比エンタルピー(液相)(J/kg) *H*<sub>in</sub>: 入口比エンタルピー(J/kg)

本式の適用範囲は、

$$6.9 \times 10^{6} \le P \le 15.8 \times 10^{6} \text{ (Pa)}, \quad 1.4 \le G \le 6.8 \text{ (kg/m}^{2} \cdot \text{s)},$$
  
 $x_{e} \le 0.1, \quad H_{in} \ge 9.3 \times 10^{5} \text{ (J/kg)}$ 

である。

 $x_2 > 0.1$ の場合には、W-3式の補正式 (Hsu and Beckner<sup>(2.8)</sup>)が与えられており、

$$q_{\rm DNB} = \sqrt{1.76 \times (0.96 - \alpha)} q_{W3_{DNB}} \Big|_{\substack{x_{\rm e} = 0, \\ H_{\rm f} = H_{\rm in}}}$$
(2.1.18)

である。

一方、低速バーンアウトの CHF 評価式としては、修正 Zuber の式<sup>(29)</sup>を用いる。

$$q_{\rm DNB} = 0.23164 H_{\rm fg} (0.96 - \alpha) \left[ \sigma g (\rho_{\rm f} - \rho_{\rm g}) \right]^{0.25} \left( \frac{\rho_{\rm f} \rho_{\rm g}}{\rho_{\rm f} + \rho_{\rm g}} \right)^{1/2}$$
(2.1.19)

 $H_{
m fg}$ : 潜熱(J/kg)lpha: ボイド率(一)ho: 密度(kg/m<sup>3</sup>) $\sigma$ : 表面張力(N/m)

ここで、添え字のf は液相、g は気相を示す。

#### (5) 遷移沸騰、膜沸騰伝熱

核沸騰域で熱流束 q を増加させると、沸騰モードが急変し熱伝達特性が劣化する。限界熱流束 点(図 2.1.4 の B 点)を過ぎると伝熱面は蒸気膜で覆われ、図 2.1.4 の B 点から点線に沿って右に移 動し、D 点の位置に飛び移る。

D点は膜沸騰の領域であり、核沸騰の現象は一転して膜沸騰に移行する。逆にD点から次第に q値を下げていくと、曲線に沿ってD点からC点に達する。ところがC点を過ぎると急に核沸騰 に変化し、図の点線に沿ってAB上のE点に移行する。C点が極小熱流束点である。さてBC間 は $\Delta T_{sat}$ の上昇につれて、逆に熱流束 qが減少するという特性を示す領域で、この間の現象はき わめて不安定になる。この領域を遷移沸騰という。

FEMAIX コードの過渡沸騰遷移解析では、このうち、核沸騰から膜沸騰への沸騰モードの急変 について取り扱う。高速バーンアウト後の遷移沸騰、膜沸騰の熱伝達率評価式として修正 Condie-Bengstonの評価式<sup>(2.2)</sup>を用いる。すなわち、

$$q_{\text{total}} = (h_{\text{TB}} + h_{\text{FB}})\Delta T_{\text{sat}}$$
(2.1.20)

 $q_{\text{total}}: \,\underline{\mathfrak{R}}\,\overline{\mathfrak{R}}\,(\text{W/m}^2)$   $h_{\text{TB}} = \left(q_{\text{DNB}} - q_{\text{FB}}\right)_{\Delta T_{\text{DNB}}} \exp\left(\frac{\Delta T_{\text{DNB}}}{2} - \sqrt{\frac{\Delta T_{\text{sat}}}{2}}\right) \frac{\Delta T_{\text{sat}}}{\Delta T_{\text{DNB}}}$  (2.1.21)

$$h_{\text{TB}}$$
: 遷移沸騰熱伝達率(W/m<sup>2</sup>·K)  
 $q_{\text{DNB}}$ : 限界熱流束(W/m<sup>2</sup>) (2.1.17)、(2.1.18)式参照  
 $q_{\text{FB}}\Big|_{\Delta T_{\text{DNB}}}$ : DNB における膜沸騰による熱流束(W/m<sup>2</sup>)

$$q_{\rm FB}\Big|_{\Delta T_{\rm DNB}} = h_{\rm FB}\Delta T_{\rm DNB}$$
 $\Delta T_{\rm sat}$ : 伝熱面過熱度(K) $\Delta T_{\rm DNB}$  : DNB 時における $\Delta T_{\rm sat}$ (K)

$$h_{FB} = 0.081033 \frac{K_g^{0.4376} \Pr_w^{2.3070} \operatorname{Re}_g^{[0.6004+0.2456\ln(1+x_e)]}}{D_e^{0.7842} (1+x_e)^{2.59028}} - 13.89471 \exp[1.4504 \times 10^{-7} P \cdot \Pr_w] (2.1.22)$$

$$h_{FB} : 膜沸騰熱伝達率(W/m^2 \cdot K)$$

$$K : 熱伝導度(W/m \cdot K)$$

$$\Pr : \mathcal{T} \exists \mathcal{V} \land \mathcal{V} \end{pmatrix} (-), \qquad \operatorname{Re} : \mathcal{V} \land \mathcal{I} \mathcal{V} \mathcal{I} \mathcal{X} \end{pmatrix} (-)$$

$$D_e : 等価直径(m)$$

$$x_e : \mathcal{I} \Rightarrow \mathcal{I} \exists \mathcal{T} \land \mathcal{I} = \mathcal{I} \land \mathcal{I} \rightarrow \mathcal{I} \land \mathcal{I} = \mathcal{I} \land \mathcal{I} \rightarrow \mathcal{I} \rightarrow \mathcal{I} \land \mathcal{I} \rightarrow \mathcal{I} \land \mathcal{I} \rightarrow \mathcal{I$$

ここで、添え字のwは壁温を意味し、gは飽和温度を用いた値である。

一方低速バーンアウト後の遷移沸騰、膜沸騰の熱伝達率評価式としては RELAP5-MOD1<sup>(2.2)</sup>の 下式を用いる。

$$q_{\text{total}} = q_{\text{liquid}} + q_{\text{vapor}} \tag{2.1.23}$$

$$q_{\rm vapor} = h_{\rm v} (T_{\rm w} - T_{\rm f}) = \alpha h_c (T_{\rm w} - T_f)$$
 (2.1.24)

$$h_{\rm c} = \max \begin{cases} 3.15144 \frac{K_{\rm film}}{D_e} (\text{Gr Pr}_{\rm film})^{0.25} \\ 0.73817 \frac{K_{\rm film}}{D_e} (\text{Gr Pr}_{\rm film})^{0.33} \end{cases}$$
(2.1.25)

$$Gr = g(D_e/2)^3 \beta_{film} (T_w - T_f) (\rho/\mu)_{film}^2$$
 (2.1.26)  
 $q_{vapor}: 蒸気の熱流束(W/m^2)$   
 $h_v: 蒸気の熱伝達率(W/m^2 \cdot K)$   
 $T_w: 被覆管表面温度(K), T_f: 冷却材温度(K)$ 

$$\alpha$$
:ボイド率(-)、
 K:熱伝導度(W/m・K)

  $Gr$ :グラスホフ数(-)、
  $g$ :重力加速度(m/s<sup>2</sup>)、

  $\beta$ :熱膨張率(K<sup>-1</sup>)
  $\rho$ :密度(kg/m<sup>3</sup>)、

  $\mu$ :粘性係数(kg/m・s)

$$K_{\text{film}} は T_{\text{film}} = \frac{T_{\text{w}} + T_{\text{f}}}{2} における値を用いて求める。$$

$$q_{\text{liquid}} = \begin{cases} (h_{\text{TB}} + h_{\text{FB}}) \Delta T_{\text{sat}} (0.96 - \alpha) & (\Delta T_{\text{sat}} > \frac{1}{B}) \\ q_{\text{DNB}} & (\Delta T_{\text{sat}} \le \frac{1}{B}) \\ 0 & (\alpha \ge 0.96) \end{cases}$$

$$(2.1.27)$$

$$h_{TB} = 2.71 \left[ B \left( q_{\text{DNB}} - q_{\text{vapor}} \right) - \left( 0.96 - \alpha \right) h_{\text{FB}} \Big|_{\Delta T_{\text{sat}} = \frac{1}{B}} \right] e^{-B\Delta T_{\text{sat}}}$$
(2.1.28)

$$h_{\rm FB} = 5.52677 \left(\frac{D_{\rm e}}{\lambda_{\rm c}}\right)^{0.172} \left[\frac{K_{\rm g}^{3} \rho_{\rm g} (\rho_{\rm f} - \rho_{\rm g}) H_{\rm fg} g}{D_{\rm e} \mu_{\rm g} \Delta T_{\rm sat}}\right]^{0.25}$$
(2.1.29)

$$\lambda_{\rm c} = \left[\frac{\sigma}{g(\rho_{\rm f} - \rho_{\rm g})}\right]^{0.5} \tag{2.1.30}$$

$$B = \begin{cases} B = 0.01368 (\mathrm{K}^{-1}) & \text{at } P = 413700.0 (\mathrm{N/m}^2) \\ B = 0.01476 (\mathrm{K}^{-1}) & \text{at } P = 620550.0 (\mathrm{N/m}^2) \end{cases}$$

$$q_{\text{liquid}}$$
:液相の熱流束(W/m<sup>2</sup>)  
 $h_{TB}$ : 遷移沸騰熱伝達率(W/m<sup>2</sup>・K)  
 $h_{FB}$ : 膜沸騰熱伝達率(W/m<sup>2</sup>・K)  
 $\Delta T_{sat}$ : 伝熱面過熱度(K)  
 $\alpha$  : ボイド率(-)  
 $q_{\text{DNB}}$  : 限界熱流束(W/m<sup>2</sup>) (2.1.18)式参照  
 $K$ : 熱伝導度(W/m・K)  
 $H_{\text{fg}}$ : 潜熱(J/kg)  
 $\mu$  : 粘性係数(kg/m・s)  
 $\sigma$  : 表面張力(N/m)

ここで、添え字のfは液相、gは気相を示す。

## (6) 蒸気単相伝熱

クオリティ  $x_e$ が 1 になると、冷却材は蒸気単相(superheated steam)となるので、(2)項で示した Dittus-Boelter 式((2.1.9)式参照)を再び適用する。

#### (7) 凝縮伝熱

凝縮二相流の熱伝達については Collier の評価式<sup>(2.10)</sup>を用いる。

$$q = h(T_w - T_{sat}) \tag{2.1.31}$$

$$h = max(h_{laminar}, h_{turbulent})$$
(2.1.32)

$$h_{la\min ar} = 0.296 \left[ \frac{\rho_f (\rho_f - \rho_g) g H_{fg} K_f^{\ 3}}{D_e \mu_f (T_{sat} - T_w)} \right]^{0.25}$$
(2.1.33)

$$h_{turbulent} = 0.065 \frac{K_f \sqrt{\rho_f}}{\mu_f} \sqrt{\frac{\mu_f C_{pf}}{K_f}} \sqrt{\frac{0.023 \mu_g |V_g|}{D_e}}$$

$$= 9.85774 \times 10^{-3} \sqrt{\frac{K_f \rho_f C_{pf} \mu_g |V_g|}{\mu_f D_e}}$$
(2.1.34)

- q: 熱流束(W/m<sup>2</sup>)
- T<sub>w</sub>:被覆管表面温度(K) T<sub>sat</sub>:飽和温度(K)
- ρ:密度(kg/m<sup>3</sup>)
- K: 熱伝導度(W/m・K)
- H<sub>fg</sub>:潜熱(J/kg)
- $\mu$ :粘性係数(kg/m·s)
- *C<sub>p</sub>*:定圧比熱(J/kg)

## 2.1.3 熱水カプログラムの流れ

FEMAXI コードにおける冷却材温度および被覆管表面熱伝達率算出のロジックを図 2.1.5 に示 す。図で示すとおり、軸方向セグメントレベルの冷却材温度は、冷却材の圧力およびセグメント レベルのエンタルピーより、蒸気表を用いて算出する。また冷却材の熱伝導度、粘性係数、密度、 プラントル数等の算出にも蒸気表を用いる。このため、FEMAXI コードは参照する蒸気表を内蔵 している。



図 2.1.5 熱水力プログラムの流れ図

### 2.1.4 冷却材状態の遷移

FEMAXI コードで取り扱う過渡沸騰現象は、熱流束の変化に伴う過渡沸騰ではなく、流量変化 に伴う過渡沸騰であるので、伝熱特性を伝熱過熱度と熱流束という観点ではなく、クオリティと 伝熱面過熱度の関係により整理する。この観点からの伝熱特性の分類を図 2.1.6 に示す。また、 各熱伝達モードの設定条件を表 2.1.2 に示す。次に図 2.1.6 を用いて、FEMAXI コードでの過渡沸 騰遷移計算の推移の概要を説明する。図においては、縦軸の $\Delta T_{sat}$ は伝熱面の過熱度、すなわち 飽和温度からの上昇分を表し、横軸の物理量=クオリティ $x_{s}$ は、(2.1.15)式により定義される。

ここで  $x_e$ : クオリティ(-) (=気相質量流量/全質量流量) であるから、本来 $0 \le x_e \le 1$  である。しかし、(2.1.15)式での計算結果は、

> $H < H_s$ のとき(サブクール水の場合)  $x_e < 0$  $H > H_s + H_{fg}$ のとき(過熱蒸気の場合)  $x_e > 1$

となる。したがって計算出力の表記では、 $x_e$ の値が $0 \sim 1$ の間は QUALITY、1以上の領域では水 蒸気過熱度 (magnitude of super-heating; MSUPHTG)、0以下の領域ではサブクール度(magnitude of sub-cooling; MSUBCOOL)とする。

#### (1) 通常運転条件

通常運転時は、[A]および [B]の領域に属する。すなわち、被覆管表面温度が飽和温度以下のと きは $(\Delta T_{sat} \leq 0)$ 、被覆管表面から水相への強制対流熱伝達([A]の領域)であり、被覆管表面温度が 飽和温度を超える $(\Delta T_{sat} > 0)$ と、核沸騰(サブクール沸騰を含む)熱伝達の [B]の領域に入る。

#### (2) 冷却材流量の低下

熱流束が一定で冷却材流量を低下させていくと、クオリティが増加してやがて限界熱流束点に 到達する。すると、[C]、[D]の領域に移行する。低クオリティ域での高速バーンアウトでは、管 壁温度は急速に上昇し、高クオリティ域での低速バーンアウトでは管壁温度は緩やかに上昇する。 この挙動は、流量変化時における熱流束と、流量低下後の流量によって決まる。

また、冷却材流量を極端に絞った場合には、[E]の(過熱)蒸気単相領域に入る。[E]の領域では 冷却材のエンタルピー(温度)の上昇に伴い、伝熱過熱度 $(\Delta T_{sat})$ は増加する。すなわち、被覆管温 度は、[E]の領域に入る軸方向位置および冷却材圧力によって決定される。

#### (3) 冷却材流量の回復

冷却材流量が回復すると、比容積 Vの低下に伴って、急激に冷却材中のエンタルピーが低下す

る((2.1.1)式参照)。膜沸騰領域 [D]では、低クオリティほど $\Delta T_{sat}$ が大きい。このため、 $\Delta T_{sat}$ が一 定状態では、エンタルピーが低下すれば、クオリティは低下し((2.1.15)式参照)、膜沸騰領域 [D] から核沸騰領域 [B]へ移行する。[B]の領域では熱伝達が非常によいので急速に被覆管壁温度は低 下し、通常運転状態が回復される。

また、[E]の蒸気単相領域で冷却材流量を回復させると、エンタルピーの低下により、冷却材温 度が低下する。これに伴い、伝熱面過熱度 $\Delta T_{sat}$ も低下する。すなわち被覆管壁温度も低下する が、クオリティが1の状態での低下であるので、 $\Delta T_{sat}$ が十分小さくなった状態で核沸騰領域[B] に移行し、[B]の領域で急激にクオリティを低下させる。すなわち、最初に入った水は $\Delta T_{sat}$ の低 下に消費され、それ以降の水がクオリティを低下させる。クオリティが十分低下すると通常運転 状態が回復される。

[F]の領域( $0 < x_e < 1$ )では液滴と水蒸気が流れる。過渡沸騰遷移には無関係である。



図 2.1.6 クオリティ、過熱度、サブクール度と伝熱面過熱度による伝熱特性の分類

## 表 2.1.2 各熱伝達モードの設定条件

Tw: 被覆管表面温度、T<sub>B</sub>:冷却材バルク温度

熱伝達モード	モデル		設定条件		
		$T_W < T_B$	・被覆管表面温度が飽和温度以下の場合(水単相)		
対流熱伝達	Dittus-Boelter		<ul> <li>・クオリティが 0.99 以上の場合(蒸気単相)</li> </ul>		
(単相)	の式		・クオリティが0の場合(水単相)		
		$T_W > T_B$	・被覆管表面温度が飽和温度以上の場合		
			(蒸気単相)		
	Jens-Lottes の式、またけ Chen の式*1		・被覆管表面温度が飽和温度以上の場合(二相)		
核沸騰熱伝達	+	$T_W > T_B$	で、 熱流束が限界熱流束以下の場合		
(二相)	Dittus-Boelter*2 式				
遷移沸騰			・被覆管表面温度が飽和温度以上かつ熱流束が		
+膜沸騰熱伝達	修正 Condie-	T > T	限界熱流束以上の場合で、クオリティが 0.99 以		
「二相 」	Bengston の式	$I_W > I_B$	下の場合(二相)、かつ冷却材流速が high-flow の		
L high-flow			場合		
遷移沸騰			・被覆管表面温度が飽和温度以上かつ熱流束が		
+膜沸騰熱伝達	RELAP-5		限界熱流束以上の場合で、クオリティが 0.99 以		
「二相  ]	MOD-1 モデル	$I_W > I_B$	下の場合(二相)、かつ冷却材流速が low-flow の		
Low-flow			場合		
凝縮					
〔二相〕	Collier の式 T <sub>v</sub>	$T_W < T_B$	・クオリティが止であり、かつ彼復官表面温度		
し液化す			が飽和温度以下の場合(二相)		

## 2.1.5 流路相当直径および流路断面積

流路相当直径および流路断面積はともに被覆管表面温度を求めるために必要なパラメータで ある。流路相当直径 De は被覆管表面熱伝達係数を求めるために(2.1.9)式等で使用され、流路断面 積は各軸方向セグメントノードのエンタルピーを計算するために(2.1.1)式で使用されている。

これら2つのパラメータは入力により直接指定されるものであるが、FEMAXIでは、値が入力 により指定されていない場合には、互いに換算する方法や燃料棒間ピッチを用いて計算する方法 が用意されている。したがって、流路相当直径、流路断面積、燃料棒ピッチのうち少なくとも一 つは入力で指定しなければならない。以下にこれらの値の関係と算出方法を示す。

#### (1) 流路相当直径

①流路相当直径を入力した場合は、その値を用いる。

②流路相当直径は入力されていないが流路断面積は入力されている場合は、

次式により流路相当直径を求める。

$$D_{\rm e} = \frac{4S}{2\pi\bar{r}} \tag{2.1.34}$$

ここで、



である。

③流路相当直径、流路断面積ともに入力しない場合には燃料棒間のピッチを用いてこれらの値を 計算する。図 2.1.7 におけるチャンネル C1 を想定し、その流路断面積*S* を次式で与える。

$$S = l_1^2 - \pi \overline{r}^2 \tag{2.1.35}$$

ここで $l_1$ は燃料棒間ピッチである。ただし図 2.1.7 において $l_2$ は、別の流路 $S_2$ に接している被覆 管の部分円周である。

流路相当直径は流路断面積が求められた後、(2.1.34)式により計算される。

ピッチ: Name-list parameter: **PITCH** 

#### (2) 流路断面積

①流路断面積を入力した場合は、その値を用いる。

②流路断面積は入力されていないが流路相当直径は入力されている場合は、次式により流路断面 積を求める。

$$S = \frac{2\pi \overline{r} D_{\rm e}}{4} \tag{2.1.36}$$

③流路相当直径、流路断面積ともに入力しない場合には燃料棒間のピッチを用いて(2.1.35)式により流路断面積を計算する。



図 2.1.7 チャンネルモデル

## 2.2 被覆管水側腐食モデル

高燃焼領域では、被覆管の水側腐食(酸化)が大きくなり、これによる被覆管の冷却材への熱 伝達や力学的挙動への影響は無視できなくなる。酸化膜の成長速度は主に温度の関数であり、 FEMAXIコードでは金属・酸化膜界面の温度の関数として計算される。界面温度は次節の熱計算 により求める。

この熱計算に用いられる酸化膜の熱伝導率モデルは、入力により選択可能である。また酸化膜の比熱は MATPRO-A<sup>(2.11)</sup>により与えられる(第4章参照)。

酸化膜の成長(厚み増加)モデル(経験式)は入力で選択する。その際、初期酸化膜厚みは、 軸方向の各セグメントごとに入力で指定可能である。どのモデルにおいても、腐食速度は酸化膜 と金属相の界面温度T(ただし、これは次節の熱計算によって求められた値である)の関数とし て与えられる。

ところで、酸化膜の熱伝導率の式では、温度依存の項が定数項よりも1桁程度小さいため、酸 化膜内の半径方向温度分布はほぼ直線で近似できることが期待できる(図 2.2.2 参照)。そこで、 FEMAXIコードでは、熱伝導率を酸化膜内で一様とし、酸化膜外表面温度と金属相との界面の温 度の平均値を酸化膜温度として熱伝導率の値を決定するものとした。

腐食の進行に伴う被覆管金属相の厚みの減少は,酸化相の体積と定量的な関係がある。ジルコ ニウム合金被覆管の場合、酸化相の体積は、その生成に費やされた金属相の体積の約 1.56 倍とな る。この比率を Piling-Bedworth Ratio(PBR)という。(図 2.2.1 参照)

酸化膜の厚みはSであるから、被覆管健全層の厚みの減少、被覆管外径の増加はそれぞれ

S/PBR,  $S\times(PBR-1)/PBR$ 

であたえられる。熱計算の熱伝導方程式の差分リング要素、力学計算の半径方向有限要素(リング) は、この厚み変化にもとづいてタイムステップ毎にリング要素厚みを update して解く。



図 2.2.1 被覆管腐食による体積増加



 Name-list input: ① 酸化モデル選択: ICORRO =0: 酸化がない; =1: EPRI モデル<sup>(2.12)</sup>; =2:MATPRO-09(PWR)モデル<sup>(2.13)</sup>; =3: MATPRO-09(BWR)モデル (Default=1)
 ②酸化膜成長速度調整係数: RCORRO (Default=1.0): 酸化膜成長速度を RCORRO 倍する。
 ③酸化膜熱伝導率調整パラメータ: OXFAC (Default=1.0) 酸化膜の熱伝導度は次式で調整される。 C<sub>N</sub> = C<sub>N</sub> × OXFAC
 ④PX: 酸化膜成長による体積増分率 X=PBR-1.0 のうち、半径方向への増分割合(%)。 (default=99)
 ⑤PBR: 酸化膜成長による体積増分比率 Piling-Bedworth ratio. (default=1.56)

被覆管の変形出力 全長力学計算において被覆管の直径の変化や半径方向の変位を出 力する場合、IDNO=174 においては、金属一酸化膜界面の位置を参照し、IDNO=7,11 にお いては酸化膜表面の位置を参照する。局所力学解析(2-D)では酸化膜を考慮していない。

## 2.3 半径方向一次元温度分布の計算

## 2.3.1 半径方向リング要素数の選択

FEMAXI-7では、熱的解析および力学解析において、1軸方向セグメントにおけるペレットス タックおよび被覆管の半径方向の要素数を以下のように選択できる。第3章の力学解析でも説明 する。

#### (1) ペレット内径方向リング要素分割数

表 2.3.1 に示すように、name-list parameter MESH を指定することにより、ペレットスタック のリング要素数を指定できる。Default は MESH=3 である。等体積リング要素では、図 2.3.1 に示 すようにペレットスタックの外側に行くにつれてリングの厚みが減少する。ペレットの外側には 発熱密度と燃焼度のピーキングがあり、またリム組織もできるので、こうした急速な変化の領域 を細かく要素に分けることは計算精度向上に大きく貢献する。

Parameter 值	1 次元熱解析	1次元力学解析	2 次元局所力学解析			
MESH=0	等間隔 10 リング要素	等間隔 10 リング要素	等間隔 5 リング要素			
MESH=1	等体積 36 リング要素	   等体積 18 リング要素	等体積9リング要素			
MESH=2	等体積 72 リング要素	等体積 18 リング要素	等体積9リング要素			
MESH=3	等体積 36 リング要素	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素			
MESH=4	等体積 72 リング要素	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素			

表 2.3.1 熱解析と力学解析におけるペレット内径方向リング要素分割数

ただし、後述する高燃焼度組織モデルオプション HBS を指定した場合は、常に MESH>0 としなければならない。HBS を指定した場合は MESH=0 を指定しても、自動的に MESH=3 として計算される。

なお、name-list parameter ISHAPE=1 を選択した場合には、MESH>0 における要素数は2 倍となり、より細かな計算が可能となる。なお、事故解析コード RANNS において IREST>0 として FEMAXIの計算結果を初期条件として用いる場合は、MESHの値は FEMAXI で指定した値が自動 的に引き継がれる。

#### (2) 被覆管径方向リング要素分割数

被覆管のリング要素は、上記 MESH の指定にかかわらず、1 次元熱解析と1 次元力学解析では 共通である。すなわち、

①Zr ライナーなしの場合:

内表面酸化膜1リング要素+金属要素8リング要素+外表面酸化膜2リング要素

②Zr ライナー有の場合:

内表面酸化膜1リング要素+Zrライナー2リング要素+金属要素8リング要素+外表面酸化膜 2リング要素

ただし、内面酸化膜リング要素については要素幅 0.1µm と非常に薄く設定し、かつ、その厚 みは固定である。これは、現行の FEMAXI-7 コードでは、内面酸化膜成長モデルについて扱っ ていないが、将来のプログラムの拡張に配慮して、内面酸化膜をリング要素として与えている ためである。

また2次元局所力学解析では、

③Zr ライナーなしの場合: 金属要素 4 リング要素 + 外表面酸化膜 1 リング要素
 ④Zr ライナー有の場合:

Zr ライナー1 リング要素+金属要素 4 リング要素+外表面酸化膜 1 リング要素 である。すなわち、内外面の酸化膜は扱わない。

ただし、3.7 章に説明する RANNS コードとの接続において、RANNS においては ⑤Zr ライナーなしの場合: 金属要素 4 リング要素

⑥Zr ライナー有の場合: Zr ライナー1 リング要素+金属要素 4 リング要素

となる。

ただし、ISHAPE=1 の場合は、2-D 力学計算(局所 PCMI 解析)では上記の 2 倍のリング要素 数となる。



図 2.3.1 ペレットと被覆管の1セグメントにおける一次元リング要素体系

このような、ペレットスタックの 36、あるいは 72 等体積リング要素系は、半径方向の詳細な 発熱密度分布を用いて伝熱計算を行う場合に有効である。たとえば、RODBURN (36 要素) や PLUTON コード(36 or 72 要素)の結果ファイルを読み込む場合、あるいは半径方向の詳細な発熱 密度分布の数値を入力ファイルに書き込む場合がこれに当たる。また 36,72 要素系は、2.11.1 節 に述べるペレット高燃焼度組織モデル (HBS モデル) を選択する場合には必ず必要である。し かし、36,72 要素系自体は HBS モデルを用いない場合でも使用可能である。MESH=0 の 10 リン グ要素系は、FEMAXI-6 までのように従来通り用いることができる。この場合、PLUTON 結果 ファイルの読み込み及び HBS モデルは使用できない。なお、第3章でもリング要素数について 説明する。

### 2.3.2 被覆管表面温度の決定

FEMAXI コードでは燃料内部の熱伝導差分式から、各軸方向セグメントにおいて、次の式を得る。(2.3.3 章参照)

$$\phi_N = AT_N + B \tag{2.3.1}$$

ここで、

$$\phi_N$$
:被覆管表面熱流束 (W/m<sup>2</sup>)  
 $T_N$ :被覆管表面温度 (K)  
 $N$ :被覆管表面メッシュ点番号  
 $A, B$ :熱伝導差分式より求まる係数

である。

(2.3.1)式と、決定された被覆管表面熱伝達係数から表面温度 T<sub>N</sub>を求めることができる。

すなわち、冷却材温度を T<sub>B</sub>とすると、被覆管熱流束はこの式を用いて、

$$\phi_N = h_W (T_N - T_B) \tag{2.3.2}$$

となる。ここで、

$$\phi_N$$
:被覆管表面熱流束 (W/m<sup>2</sup>)  
 $h_W$ :表面熱伝達係数 (W/m<sup>2</sup>·K)  
 $T_N$ :被覆管表面温度(酸化膜表面)(K)  
 $T_B$ :冷却材温度 (K)

である。(2.3.1)、(2.3.2)式より $\phi_N$ を消去することにより $T_N$ が得られる。

ただし、FEMAXIコードには、被覆管の温度履歴を計算せず、入力により指定するオプション もある。このオプションには、被覆管外面温度(酸化膜外表面温度)を指定するオプション1とジ ルカロイ金属相一酸化膜界面温度を指定するオプション2がある。オプション1では name-list parameter ITCP=0とする。この場合、酸化膜外表面温度を境界条件として温度計算が行われる。 ジルカロイ金属相一酸化膜界面温度を指定するオプション2では、ITCP=1とする。この場合、温 度計算において境界条件として用いる酸化膜外表面温度を、

$$T_{N} = T_{OX} - \frac{q}{(2\pi K_{OX})} \cdot \ln\left(\frac{r_{N}}{r_{OX}}\right)$$
(2.3.3)

として求める。ここで、

*T<sub>N</sub>*:被覆管表面温度(酸化膜表面)(K)

 *T<sub>OX</sub>*:金属相一酸化膜界面温度(入力値)(K)

 *q*:線出力 (W∕m)

 *K<sub>OX</sub>*:酸化膜熱伝導率 (W∕m·K)

 *r<sub>N</sub>*:被覆管表面半径(酸化膜表面)(m)

 *r<sub>ox</sub>*:金属相一酸化膜界面半径(m)

である。

 Name-list Parameter IS, ICTP
 IS=3 あるいは4とおくと、被覆管の温度履歴を入力で指定するモードとなる。このとき、ICTP=1:金属-酸化膜界面温度を指定(default)、

 ICTP=0:酸化膜外表面温度を指定、である。
 ・IS=3 or 4 の場合、本来は熱水力計算は不要である。したがって、さらに IS3P=0 とおくと熱水力計算を停止させ、計算時間を短縮することができる。すなわち、IS3P=1:熱水力計算 On (default)、IS3P=0:熱水力計算 Off。また、被覆管の表面熱流束(IDNO=62)および表面熱伝達係数(IDNO=63)を出力する場合、IS3P=0 として熱水力計算を省略した場合は表面熱伝達係数は計算されず、プロット出力はされない。

## 2.3.3 熱伝導方程式の解法

燃料棒内の半径方向の温度分布の解析においては、軸方向の熱伝導を無視して、半径方向一次 元熱伝導方程式を用いる。以下、簡単のため等厚み10リング要素系を前提に計算法を説明する。

ここで、燃料内の各要素における物性値は温度依存であると仮定し、軸方向の各セグメント位

置でのギャップ熱伝達係数および被覆管表面温度は変化すると仮定する。これらの仮定に基づけ ば、あるセグメントにおける燃料棒内の熱伝導は次の式で表現される。

$$\frac{\partial}{\partial t} [c_{v}(T,r)T(r,t)] = \nabla [k(T,r) \cdot \nabla T(r,t)] + q(r,t)$$
(2.3.4)

ここで、

T:温度 (K)

r:径方向座標 (m)

t:時間 (s)

C<sub>v</sub>:体積比熱 (J/m<sup>3</sup>)

k: 熱伝導率 (W/m-K)

*q*:単位体積あたりの発熱量 (J/m<sup>3</sup>·s)

である。



図 2.3.2 リング要素モデル

(2.3.4)式について体積積分を行う。ただし、積分体積は図 2.3.2 の破線で挟まれた部分の体積である。

$$\iiint_{V} \frac{\partial}{\partial t} C_{v}(T,r)T(r,t)dV = \iiint_{V} \nabla [k(T,r) \cdot \nabla T(r,t)]dV + \iiint_{V} q(r,t)dV$$
(2.3.5)

1次元問題であるので、体積の次元は径方向rを除いて、他は1とおく。共通ファクター2πを 省略し、時間微分に対して前進差分法を用いると、(2.3.5)式の左辺第1項は、

$$\iint_{V} \frac{\partial}{\partial t} [C_{v}(T,r)T(r,t)] dV \approx \iiint_{V} C_{v}(T,r) \frac{\partial T}{\partial t}(r,t) dV$$

$$\approx \frac{\left(T_{n}^{m+1} - T_{n}^{m}\right)}{\Delta t} \left[C_{v,pn} \frac{h_{pn}}{2} \left(r_{n} - \frac{h_{pn}}{4}\right) + C_{v,sn} \frac{h_{sn}}{2} \left(r_{n} + \frac{h_{sn}}{4}\right)\right]$$
(2.3.6)

となる。 $T_n^m$ は座標  $r_n$ 、時間  $t_n$ における温度であり、 $T_n^{m+1}$ は座標  $r_n$ 、時間  $t_{m+1}$ における温度である。(2.3.5)式の右辺第1項は、

$$\iint_{V} \nabla [k(T,r) \cdot \nabla T(r,t)] dV = \iint_{S} k(T,r) \nabla T(r,t) \cdot d\overline{S}$$
  
$$\approx -\frac{k_{pn} \left(T_{n}^{m+1} - T_{n-1}^{m+1}\right)}{h_{pn}} \left(r_{n} - \frac{h_{pn}}{2}\right) + \frac{k_{sn} \left(T_{n+1}^{m+1} - T_{n}^{m+1}\right)}{h_{sn}} \left(r_{n} + \frac{h_{sn}}{2}\right)$$
(2.3.7)

となる。ここで境界面にそった面積分の評価に当たって、内部境界での熱流束の連続条件を用いた。

ここで、便宜上、次の項目を定義する。

$$h_{pn}^{V} = \frac{h_{pn}}{2} \left( r_{n} - \frac{h_{pn}}{4} \right) , \quad h_{sn}^{V} = \left( r_{n} + \frac{h_{sn}}{4} \right)$$

$$h_{pn}^{s} = \frac{1}{h_{pn}} \left( r_{n} - \frac{h_{pn}}{2} \right) , \quad h_{sn}^{s} = \frac{1}{h_{sn}} \left( r_{n} + \frac{h_{sn}}{2} \right)$$

$$D_{n} = C_{v,pn} h_{pn}^{V} + C_{v,sn} h_{sn}^{V}$$

$$(2.3.8)$$

次に(2.3.5)式の右辺第2項での発熱項q(r,t)を変数分離し、

$$q(r,t) = Q(r)P_f P(t)$$
 (2.3.9)

として与える。ここで、Q(r)は径方向相対出力分布、 $P_f$ は発熱密度の基準値であり、P(t)は時間に対する相対変化である。すると(2.3.5)式の右辺第2項は、

$$\iiint_{V} q(r,t) dV \approx \left( Q_{pn} h_{pn}^{V} + Q_{sn} h_{sn}^{V} \right) P_{f} P(t_{m+1})$$
(2.3.10)

となる。

以上の(2.3.5)式各項の近似式、(2.3.6)、(2.3.7)、および(2.3.10)式の右辺を合わせることにより、 (2.3.5)式は n 番目のメッシュ点(リング要素)について、

$$\frac{\left(T_{n}^{m+1}-T_{n}^{m}\right)D_{n}}{\Delta t} = -\left(T_{n}^{m+1}-T_{n-1}^{m+1}\right)k_{pn}h_{pn}^{s} + \left(T_{n+1}^{m+1}-T_{n}^{m+\theta}\right)k_{sn}h_{sn}^{s} + \left(Q_{pn}h_{pn}^{V}+Q_{sn}h_{sn}^{V}\right)P(t_{m+\theta})$$
(2.3.11)

という差分近似式に変換される。(2.3.11)式についてクランクーニコルソン法を完全陰解法で適用 すると、

$$\frac{\left(T_{n}^{m+1}-T_{n}^{m}\right)D_{n}}{\Delta t} = \left(\frac{\left(T_{n}^{m+1}+T_{n}^{m}\right)}{2}-\frac{\left(T_{n-1}^{m+1}+T_{n-1}^{m}\right)}{2}\right)k_{pn}h_{pn}^{s} + \left(\frac{T_{n+1}^{m+1}+T_{n+1}^{m}}{2}-\frac{T_{n}^{m+1}+T_{n}^{m}}{2}\right)k_{sn}h_{sn}^{s} + \left(Q_{pn}h_{pn}^{V}+Q_{sn}h_{sn}^{V}\right)P_{f}\frac{P(t_{m+1})+P(t_{m})}{2}$$

$$(2.3.12)$$

となる。ここで、熱伝導度 $k_{pn}$ および $k_{sn}$ はメッシュ点n-1とnの平均温度およびメッシュ点nとn+1の平均温度より求める。

(2.3.12)式を書きかえて、中間領域のメッシュ点 nの差分方程式を次のように与える。

$$a_n T_{n-1}^{m+1} + b_n T_n^{m+1} + c_n T_{n+1}^{m+1} = d_n^m$$
(2.3.13)

ここで、

$$a_{n} = -\frac{k_{pn}h_{pn}^{s}\Delta t}{2} , \quad c_{n} = -\frac{k_{sn}h_{sn}^{s}\Delta t}{2}$$

$$b_{n} = D_{n} - a_{n} - c_{n}$$

$$d_{n}^{m} = -a_{n}T_{n-1}^{m} + (D_{n} + a_{n} + c_{n})T_{n}^{m} - c_{n}T_{n+1}^{m}$$

$$+ \Delta t (Q_{pn}h_{pn}^{V} + Q_{sn}h_{sn}^{V})P_{f} \left\{ \frac{P(t_{m+1}) + P(t_{m})}{2} \right\}$$
(2.3.14)

である。

$$\frac{\left(T_{n}^{m+1} - T_{n}^{m}\right)D'_{n}}{\Delta t} = -\left(T_{n}^{m+1} - T_{n-1}^{m+1}\right)k_{pn}h_{pn}^{s} + \left(T_{n+1}^{m+1} - T_{n}^{m+1}\right)h_{g} 
+ Q_{pn}h_{pn}^{V}P_{f}P(t_{m+1})$$

$$\frac{\left(T_{n+1}^{m+1} - T_{n+1}^{m}\right)D''_{n+1}}{\Delta t} = -\left(T_{n+1}^{m+1} - T_{n}^{m+1}\right)h_{g} + \left(T_{n+2}^{m+1} - T_{n+1}^{m+1}\right)k_{s,n+1}h_{s,n+1}^{s} 
+ Q_{s,n+1}P_{f}P(t_{m+1})$$
(2.3.16)

となる。ここで、 $D'_n = C_{v,pn} h^v_{pn}$ ,  $D''_{n+1} = C_{v,s,n+1} h^v_{s,n+1}$ ,  $h_g$  はギャップ熱伝達係数である。



また、燃料棒中心領域を図 2.3.4(a)、被覆管表面領域を図 2.3.4(b)に示す。ただし、被覆管の外 表面には酸化膜が生成しており、この膜は金属相より熱伝導率が低い。



燃料棒中心については(2.3.11)式は、

$$\frac{\left(T_{0}^{m+1}-T_{0}^{m}\right)}{\Delta t}C_{\nu,s0} = \left(T_{1}^{m+1}-T_{0}^{m+1}\right)k_{s0}h_{s0}^{s} + Q_{s0}h_{s0}^{V}P_{f}P(t_{m+1})$$
(2.3.17)

である。

被覆管表面の境界方程式は、

$$\frac{\left(T_{n}^{m+1}-T_{n}^{m}\right)}{\Delta t}C_{\nu,pn}h_{pn}^{\nu}=-\left(T_{n}^{m+1}-T_{n-1}^{m+1}\right)k_{pn}h_{pn}^{s}-r_{n}\phi_{n}+Q_{pn}h_{pn}^{\nu}P_{f}P\left(t_{m+1}\right)$$
(2.3.18)

である。

(2.3.18)式の差分近似式を

$$a_n T_{n-1}^{m+1} + b_n T_n^{m+1} = d_n (2.3.19)$$

の形式で表すと係数 $a_n, b_n, d_n$ は、

$$a_n = -\frac{k_{pn}h_{pn}^s\Delta t}{2} \tag{2.3.20}$$

$$b_n = C_{\nu,pn} h_{pn}^{\nu} - a_n \tag{2.3.21}$$

$$d_{n} = -a_{n}T_{n-1}^{m} + \left(C_{V,pn}h_{pn}^{V} - a_{n}\right)T_{n}^{m} -\Delta t r_{n}\left(\frac{\phi_{n}^{m+1} + \phi_{n}^{m}}{2}\right) + \Delta t Q_{pn}h_{pn}^{V}P_{f}\left\{\frac{P(t_{m+1}) + P(t_{m})}{2}\right\}$$
(2.3.22)  
$$= d_{n}' + d_{n}''\phi_{n}^{m+1}$$

となる。ここで $\phi_n$ は被覆管表面熱流束である。

ただし、(2.3.22)式中の時刻  $t_m$ における熱流束 $\phi_n^m$ については、定常計算では

$$\phi_n^{\ m} = q^m / 2\pi r_n \quad , \tag{2.3.23}$$

#### *q*:線出力(W/m)

で与える。これは、再メッシュ切りなどによって発生する差分誤差が、算出された熱流束に累積 することを避けるためである。

(2.3.19)~(2.3.23)式において未知数は、 $T_{n-1}^{m+1}, T_n^{m+1}, \phi^{m+1}$ である。

次に、ガウスの消去法により、第1点から始めて第*n-1*点までの前進消去により得られた係数 を*E、F*とおくと、次式を得る。

$$T_{n-1}^{m+1} = -E_{n-1}T_n^{m+1} + F_{n-1}$$
(2.3.24)

(2.3.20)~(2.3.22)式および(2.3.24)式を(2.3.19)式に代入すると、

$$A_1 T_n^{m+1} + B_1 = \phi^{m+1} \tag{2.3.25}$$

ここで

$$A_{1} = \left(b_{n} - a_{n}E_{n-1}\right) / d_{n}^{\prime\prime}$$
(2.3.26)

$$B_{1} = \left(a_{n}F_{n-1} - d_{n}'\right) / d_{n}''$$
(2.3.27)

である。すると $A_1$ 、 $B_1$ は既知量である。しかし(2.3.25)式は(2.3.1)式と等価であり、(2.3.1)式においてはA、Bは既知となるので、2.3.2 項で述べたように $T_n^{m+1}$ を求めることができる。したがって、ガウスの消去法による後退代入を行えば、順次 $T^{m+1}$ を求めることができる。

## 2.3.4 ペレット熱伝導率

## (1) 熱伝導率モデル

燃焼度が進むとペレットの熱伝導率λは低下する。熱伝導率の代表例(NFI モデル<sup>(2.14)</sup>および Halden モデル<sup>(2.15)</sup>)を図 2.3.5 に示す。 熱伝導率は下記のオプションから Name-list input により 選択できる。(式の詳細および文献は 4.1 節参照)





ペレット熱伝導率のモデル(物性式)オプション: IPTHCN. 詳細は第4章参照 =3: Hirai, =4: Halden (Wiesenack), =1: MATPRO-09, =2: Washington, =5: Modified Hirai, =6: Forsberg, =7: Kjaer-Pedersen, =8: Baron&Couty, =10: Lucta, Matzke, & Hastings, =11: Tverberg, Amano, Wiesenack (UO<sub>2</sub>, ガドリニア燃料), =13:Fukushima (UO<sub>2</sub>,ガドリニア燃料), =15:Daniel Baron (UO<sub>2</sub>, ガドリニア燃料), =16: CRIEPI (Kitajima & Kinosita), =17:Halden new (Wiesenack)  $(UO_2)$ , =18: PNNL-modified Halden model(UO<sub>2</sub>), =90: Ohira & Itagaki ( $UO_2$ ), =91: Ohira & Itagaki (NFI) latest Model for 95%TD UO<sub>2</sub> and MOX pellets. =92: Ohira & Itagaki Modified in FRAPCON 3.3. for 95%TD UO<sub>2</sub> pellet =30:Martin (MOX), =31:MATPRO-11(MOX), =32:Martin+Philipponneau (MOX), =33:Duriez et al.(MOX). =34:Philipponneau (MOX), =35: Halden (new, MOX), =36:Daniel Baron (MOX, UO<sub>2</sub>, ガドリニア燃料), =38: FRAPCON-3: PNNL Modified model, =39: FRAPCON-3: PNNL-modified Halden model,

#### (2) ポロシティの影響

また、熱伝導率λの経験式の値は、4 章にも示すようにペレットのポロシティ p (あるいは理論 密度比 TD)にも影響される。ここでポロシティ p と理論密度比 TD=D(I)の関係は、

$$p(I) = 1.0 - D(I)$$
(2.3.28)

I: ペレットスタックリング要素番号

である。

FEMAXIコードでは、ペレット熱伝導率に対するp(またはD)の影響に関するオプションをパラ メータ**IPRO**によって以下のように選択可能である。

**IPRO** =0: D(I)=Di:初期理論密度比、としたときの初期ポロシティ $p_0$ を用いる。

=1: 
$$p = p_0 + \frac{\Delta V_{swg}}{V_0}$$
としたポロシティを用いる。  
=2:  $p = p_0 + \frac{\Delta V_{dens}}{V_0} + \frac{\Delta V_{hot}}{V_0}$ としたポロシティを用いる。  
=3:  $p = p_0 + \frac{\Delta V_{swg}}{V_0} + \frac{\Delta V_{dens}}{V_0} + \frac{\Delta V_{hot}}{V_0}$ としたポロシティを用いる。  
ただし、  $\frac{\Delta V_{swg}}{V_0}$ : FP ガスバブル体積スエリング率、  
 $\frac{\Delta V_{dens}}{V_0}$ : 焼きしまり体積率、  $\frac{\Delta V_{hot}}{V_0}$ : ホットプレスによる体積減少率  
である。  
Name-list input parameter: IPRO (Default=0)

ただし、この計算は径方向リング要素毎に行うのではなく、軸方向セグメント毎に実施して、 セグメント平均のポロシティを算出する。プロット出力は、IDNO=57:ペレット密度=1-pに よる。

また、これに関連した別のname-list parameter MPORO は、ペレット熱伝導率に影響するポロシ ティの扱い方を指定するオプションである。すなわち、

MPORO=0: IPROの指定に基づいて計算された軸方向セグメント毎のポロシティを用いてペレ ット熱伝導率を計算する。(Default)

MPORO=1: 径方向リング要素ごとに  $p = p_0 + \frac{\Delta V_{swg}}{V_0} + \frac{\Delta V_{dens}}{V_0}$ 

としたポロシティを用いてペレット熱伝導率を計算する。

ここで、スエリングと焼きしまりの定義は IPRO と同様である。ただし、HBS モデルによるペレット熱伝導率の(リング要素ごとの)変化は MPORO とは独立であり、HBS モデルによるリン

グ要素ごとのポロシティの影響は、MPOROの入力にかかわらず計算に入れることができる。 対応するプロット出力は、IDNO=257:全ポロシティ、IDNO=260:ガスバブルポロシティ。

#### (3) ポロシティと熱伝導率モデルの関係

(1)項で説明した熱伝導率モデルは、ポロシティp=0.05を標準値としている。燃焼とともにポロ シティが0.05から変化した場合、ペレット熱伝導率も変化するのであり、その効果を計算に入れ るために上述のIPROを用いるのであるが、注意すべきは、熱伝導率モデルによってはこの効果を 既に含んだ形で定式化されているものがあることである。

たとえばHalden (IPTHCN=4, 17) モデルでは、燃料棒の照射における線出力と被覆管温度のデ ータからペレット熱伝導率を導いているので、そこには自ずとペレットのポロシティ変化が implicitに含まれている。もし、このモデルに対してIPRO=1,2,3を指定すれば、モデルに既に含ま れているポロシティ変化の効果と、FEMAXIによるポロシティ変化の効果を二重に計算すること になり、誤った計算となる。

このように、ポロシティの変化の効果を熱伝導率に反映させようとする場合は、熱伝導率モデ ルが導出された条件を確認することが必要である。

## 2.4 発熱密度プロファイルの決定

ペレットの半径方向の発熱密度プロファイルについては、4 通りの指定方法がある。1 番目は、 燃焼度の関数 (テーブル) として入力で数値を指定する方法であり、2 番目は、燃焼計算コード RODBURN<sup>(1.20)</sup>の出力を用いる方法、3 番目は、燃焼計算コード PLUTON<sup>(1.21)</sup>の出力を用いる方法、 4 番目はコードが内蔵する Robertson の公式 (Halden 実験式)<sup>(2.16)</sup>による分布関数 *Q*(r) を用いる 方法である。

 燃焼計算コード選択 Name-list input parameter
 IFLX
 =-2: RODBURN より入力;

 =-1: PLUTON ファイルより入力;
 =0: Robertson の公式を利用。

 ≥ 1: 数値入力。ただし、IFLX≠0の場合、発熱密度分布は複数個の燃焼度値に対応した値が入力で指定されるが、指定した燃焼度の間の発熱密度分布は内挿で決定される。

## 2.4.1 RODBURN 出力の利用

燃焼計算コード RODBURN は、与えられた燃料サイズ、形状、温度、出力履歴ないしは熱中性 子束履歴から、燃料棒の軸方向および半径方向の出力密度プロファイルや高速中性子束などを算 出し、ファイルを生成する。FEMAXIコードはこのファイルを計算条件として読み込むことが可 能である。

## 2.4.2 PLUTON 出力の利用

燃焼計算コード PLUTON<sup>(1.21)</sup>は、与えられた燃料サイズ、形状、温度、出力履歴から、燃料棒の軸方向および半径方向の出力密度プロファイル、燃焼度プロファイル、高速中性子束、Puアイソトープ生成分布、その他 FP 元素生成分布などを正確かつ高速に算出し、出力ファイルを生成する。FEMAXI コードはこのファイルを計算条件として読み込むことが可能である。

## 2.4.3 Robertson の式

Robertson は Halden 炉におけるペレットの燃焼初期の発熱分布に関し次の表式を与えた<sup>(2.16)</sup>。

$$Q_{1}(R) = I_{0}(k \cdot R) + \frac{I_{1}(k \cdot R_{1})}{K_{1}(k \cdot R_{1})} \cdot K_{0}(k \cdot R)$$
(2.4.1)

ここで、

I : 第1種変形ベッセル関数  $R_1$  : ペレット中心孔半径 (cm) K : 第2種変形ベッセル関数 R : ペレット半径方向位置 (cm) k : 中性子拡散距離の逆数 (cm<sup>-1</sup>)

である。

k は次式で計算される。

$$k = 0.328 (E \cdot D)^{0.8} + 0.54 \left(\frac{0.5}{R_p}\right)^{0.82} \cdot (E \cdot D)^{0.19}$$
(2.4.2)

ここで、

$$E$$
 : <sup>235</sup>U 濃縮度(%)  
 $D$  : ペレット理論密度比 (-)  
 $R_p$  : ペレット半径 (cm)

である。

Robertson の公式を二次関数で近似すると、以下のようになる。

$$Q_{2}(r) = \frac{(b+2)(1-h^{2})[(1-a)r^{b} + (a-h^{b})]}{b(1-h^{2})(a-h^{b}) + 2(1-h^{b})(1-ah^{2})}$$
(2.4.3)

ここで、 r: 規格化半径 (0≤r≤1)

a:ペレット内面対外面発熱密度比 (-)

b:発熱密度関数 Q(r)における形状指数 (-)

である。

(2.4.3)式の2つの形状パラメータaおよびbは、ハルデン炉の場合、次のように求める。

形状指数 *b* は、(2.4.1)式が 2 次関数でよく近似できることから *b*=2 とする。内面対外面発熱密 度比 *a* は(2.4.1)式を用いて、次のように表す。

$$a = \frac{Q_1(R_1)}{Q_1(R_p)}$$
(2.4.4)

### 2.4.4 ペレット温度計算の精度確認

FEMAXIにおける半径方向温度分布の数値計算の正確さを確認するために、以下に解析解との 比較を行った結果を示す。

#### (1) ペレット径方向出力分布

軸方向単位長さのペレット内の温度分布および発熱密度分布を考える。線出力 LHR (W/cm)は 次式で表される。

$$LHR = \int_{T_{po}}^{T} \lambda_{p} dT = \int_{r}^{r_{po}} \frac{1}{r} \left[ \int_{r_{pi}}^{r} r \cdot q \cdot dr \right] dr$$
(2.4.5)

ここで、  

$$\lambda_p$$
:ペレット熱伝導率(W/(cm・K))  
r:ペレット内径方向位置(cm)  
T:位置rにおける温度(K)  
Tpo:ペレット表面温度(K)  
 $r_{po}$ :ペレット半径(cm)  
 $r_{pi}$ :ペレット中心孔半径(cm)  
q:位置rにおける発熱密度(W/cm<sup>3</sup>).

(2.4.5)式を位置 r について規格化し、発熱密度 q を規格化位置  $\overline{r}$ の関数として  $q(\overline{r})$  (W/cm<sup>3</sup>)と書く と、

$$\int_{T_{po}}^{T} \lambda_{p} dT = \int_{\overline{r}}^{1} \frac{1}{\overline{r}} \left[ \int_{h}^{\overline{r}} \overline{r} \cdot q(\overline{r}) \cdot d\overline{r} \right] d\overline{r}$$
(2.4.6)

ここで、  $\overline{r}: ペレット規格化半径位置$ 

h:ペレット中心孔規格化半径

(2.4.6)式の発熱密度分布 q(r) は次式で与えられる。

$$q(\overline{r}) = \frac{P_{LHR}}{\pi \left(1 - h^2\right)} \cdot \phi(\overline{r})$$
(2.4.7)

ここで、 $\phi(\overline{r})$ は、発熱密度分布関数、 $P_{LHR}$ は線出力である。

(2.4.6)式と(2.4.7)式を用いれば、ペレット熱伝導率 $\lambda_p$ が一定、発熱密度分布関数 $\phi(\overline{r})$ が一様の 場合には、簡単にペレット内温度分布を得ることができる。例えば、ペレット中心項規格化半径 h=0、線出力 P<sub>LHR</sub>=400(W/cm)、発熱密度分布関数 $\phi(\overline{r})=1$ 、ペレット熱伝導率 $\lambda_p=0.03$  (W/(cm·K)) のときは、(2.4.7)式を(2.4.6)式に代入して、

$$\int_{T_{po}}^{T} \lambda_{p} dT = \int_{\overline{r}}^{1} \frac{1}{\overline{r}} \left[ \int_{0}^{\overline{r}} \overline{r} \cdot \frac{P_{LHR}}{\pi} \cdot d\overline{r} \right] d\overline{r} = \int_{\overline{r}}^{1} \frac{1}{\overline{r}} \cdot \frac{P_{LHR}}{\pi} \left[ \frac{\overline{r}^{2}}{2} \right]_{0}^{\overline{r}} d\overline{r}$$

$$= \int_{\overline{r}}^{1} \frac{P_{LHR}}{2\pi} \overline{r} d\overline{r} = \frac{P_{LHR}}{2\pi} \left[ \frac{\overline{r}^{2}}{2} \right]_{r}^{1} = \frac{P_{LHR}}{4\pi} \left( 1 - \overline{r}^{2} \right)$$
(2.4.8)

したがって、 $\lambda_p[T]_{T_{po}}^T = \frac{P_{LHR}}{4\pi} (1 - \overline{r}^2) となるので、<math>\lambda_p$ 、 $P_{LHR}$ 及びペレット外表面温度 T\_{PO} を

与えれば、ペレット内温度の解析解が得られる。T<sub>PO</sub>=450 (°C)とすると、規格化半径rの位置での温度 T は、

$$T = T_{PO} + \frac{P_{LHR}}{4\pi\lambda_p} \left(1 - \overline{r}^2\right) = 450 + \frac{400}{4\pi \cdot 0.03} \left(1 - \overline{r}^2\right)$$

で与えられる。

次に Robertson 式を用いて、ペレット内面対外面の発熱密度比を a、発熱密度関数の形状指数を b としたとき、発熱密度分布関数  $\phi(\overline{r})$  は、

$$\phi(\overline{r}) = \frac{(b+2)(1-h^2)\left[(1-a)\overline{r}^b + (a-h^b)\right]}{b(1-h^2)(a-h^b) + 2(1-h^b)(1-ah^2)}$$
(2.4.9)

(2.4.9)式を(2.4.7)式に代入し、更に(2.4.6)式に代入すると次式が得られる。

$$\int_{T_{po}}^{T} \lambda_{p} dT = \frac{P_{LHR}}{4\pi} \cdot F(\overline{r})$$
(2.4.10)

ここで、

$$F(r) = \left\{ \frac{4(1-a)(1-\overline{r}^{b+2})}{b+2} + (b+2)(a-h^{b})(1-\overline{r}^{2}) + 2\left[2(1-a)h^{b+2} + (a-h^{b})(b+2)h^{2}\right]\ln\overline{r} \right\}$$
  
/\[b(1-h^{2})(a-h^{b}) + 2(1-h^{b})(1-ah^{2})\]

h=0の場合には(2.4.9)、(2.4.10)式は簡略化されて、

$$\phi(r) = \frac{(b+2)\left[(1-a)\overline{r}^b + a\right]}{ba+2}$$
(2.4.11)

$$F(\overline{r}) = \begin{cases} \frac{4(1-a)(1-\overline{r}^{b+2})}{b+2} + (b+2)a(1-\overline{r}^{2}) \\ (ba+2) \end{cases}$$
(2.4.12)

となる。例えば、a=0.7、b=2とすると、

$$\varphi(r) = \frac{4\left(0.3\overline{r}^{2} + 0.7\right)}{3.4}, \quad F(r) = \frac{\left\{0.3(1 - \overline{r}^{4}) + 2.8(1 - \overline{r}^{2})\right\}}{3.4} \qquad \text{Etsi}.$$

したがって、F(0)を求めると、F(0)=3.1/3.4=0.912 となって、出力分布が一様の場合に比べ、 (2.4.10)式の右辺は 0.912 倍になることがわかる。

また、 $\phi(\overline{r})$ については、中心を 0.7、表面を 1 とした[ $0.3\overline{r}^2 + 0.7$ ]の式より、積分値を 1 にす るためには 4/3.4=1.176 倍する必要があることがわかる。このとき、ペレット半径を 10 等分した ときの各リングに適用される相対出力密度分布は、ペレット内側から、0.8244、0.8315、0.8456、 0.8668、0.8950、0.9303、0.9727、1.0221、1.0785、1.1421 となる。これらは、(2.4.11)式を用いて リング毎に体積平均して求めた相対出力密度分布である。

 $F(\bar{r})$ が(2.4.12)式より得られたので、 $\lambda_p$ =0.03 (W/cm-K) と一定にした場合には、(2.4.10)式よ りペレット温度分布の解析解が得られる。この解析解の値と、半径距離を 10 メッシュ及び 100 メッシュに離散化して計算した FEMAXI の数値解との比較を表 2.4.1 に示す。表 2.4.1 における径 方向出力分布を与えたときの数値解は、上記のリング毎に体積平均して求めた相対出力密度分布 のテーブルを用いて得られた結果であり、100 メッシュ系は、上記の 10 個のデータ点を次式で補 間して 100 点の値を決定して計算した結果である。

$$f(x) = a \cdot r^{b} + C$$
  
$$f(x) = (1 - CSFR) \cdot \overline{r}^{PFAC} + CSFR$$

(ただし上式は厳密には $f(x) = \frac{(b+2)[(1-a)x^b+a]}{ba+2}$ である。ここで、a=CSFR、b=PFAC)

また、CSFR=0.7、PFAC=2.0を与えたときの数値解は、10メッシュ及び100メッシュ系とも各

メッシュの中央座標のr(rはペレット半径を1.0に規格化した値)を求め、このrに対応する $\varphi(\bar{r})$ を(2.3.11)式から求めて計算したときの数値解である。

o° Leve b		汉士向山力八	同左	CSFR=0.7、	同左
マナウト	積分方程式	住力回口力力	(ペレット	PFAC=2.0 を与	(ペレット径方
(至 <b>万</b> 円) 中對应揮	の解析解	巾を与えた	径方向メッ	えたときの	向メッシュ数
伯刈座係		とさり剱値牌	シュ数 100)	数值解	100)
0.0	1417.41	1418.73	1417.58	1417.87	1417.58
0.1	1408.67	1409.97	1408.83	1409.12	1408.83
0.2	1382.31	1383.58	1382.46	1382.76	1382.46
0.3	1338.01	1339.22	1338.14	1338.44	1338.14
0.4	1275.21	1276.33	1275.30	1275.60	1275.30
0.5	1193.11	1194.12	1193.17	1193.46	1193.17
0.6	1090.71	1091.58	1090.75	1091.01	1090.75
0.7	966.78	967.47	966.79	967.01	966.79
0.8	819.84	820.33	819.84	820.01	819.84
0.9	648.22	648.48	648.22	648.31	648.22
1.0	450.00	450.00	450.00	450.00	450.00

表 2.4.1 解析値と FEMAXI の数値解の比較

この結果からわかるように、出力(密度)分布がある場合のペレット温度の解析解と数値解の 差は0.1%以下であることが確認できた。また、体積平均して得られた相対出力密度分布(径方向 出力分布を与えたときの数値解)を用いるより、単純に座標中心の相対出力密度分布(CSFR=0.7、 PFAC=2.0 を与えたときの数値解)を用いた方が解析解との適合性が高い。これは、ペレット温 度分布計算は径方向に1次元であり、体積平均して得られた相対出力密度の値は体積の大きい外 周側(相対出力密度の高い側)の値が内周側の値より影響が大きいためである。

#### (2) ペレット熱伝導率

ペレット熱伝導率が温度依存性、燃焼度依存性、密度依存性を持つ場合、熱伝導方程式は非 線形となり、解析解は得られない。燃焼度依存性、密度依存性等の要因は、実効的には温度依存 性の感度が異なることに相当するので、プログラムと数値解精度の検査には温度依存性のみを考 慮しておけばよい。あとは、プログラムの物性値が正しくコーディングされているか否かの問題 である。解析解をベースにした数値解との比較には、Wiesenack の熱伝導率の式(IPTHCN=6)を用 いた。Wiesenack (Halden)の熱伝導率の式の燃焼度依存性を無視すると次式が得られる。

 $K = 1/(0.1148 + 2.475 \times 10^{-4} \cdot T) + 0.0132 \exp(0.00188 \cdot T) \quad (W/mK)$ (2.4.13)

#### *T*:温度(℃)

上式を適用して FEMAXI の計算を実施した。なお、解析解をベースとした計算では、(2.4.10) 式の左辺の中心温度誤差を 0.1℃に設定した。熱伝導率の式が温度依存の式であるので、温度分 布が決定されないと熱伝導率は正確には求まらない。また、熱伝導率が求まらないと温度分布も 求まらないため繰り返し計算が必要となる。繰り返し計算は、ペレット表面温度を境界条件として、ペレット内を10領域に等分割し、1回目の温度分布の決定は、各領域の外側の温度を用いて 熱伝導率を計算し、内側の温度を求める。2回目以降は、前段の繰り返しにおける温度の計算結 果を用いて、領域毎に内側と外側の平均温度を算出し、これを用いて熱伝導率を求め、内側の温 度を求める。この繰り返し計算の結果、ペレット中心温度の評価値の差が0.1℃以下になったら 収束したと仮定した。

この結果得られた表2.4.2を見ると、解析解と数値解の差は0.2%以下であることが確認できた。

ペレット 径方向	積分方程式 の解析解	径方向出力分 布を与えたと	同左 (ペレット径 方向メッシュ	CSFR=0.7、 PFAC=2.0 を与え たときの	同左 (ペレット径方 向 メ ッ シ ュ 数
相对坐標		さの数値解	数 100)	数値解	100)
0.0	1375.12	1377.94	1375.35	1376.86	1375.07
0.1	1364.08	1366.88	1364.30	1365.81	1364.03
0.2	1331.09	1333.81	1331.29	1332.78	1331.06
0.3	1276.61	1279.19	1276.77	1278.23	1276.58
0.4	1201.51	1203.88	1201.63	1203.02	1201.49
0.5	1107.26	1109.37	1107.34	1108.63	1107.25
0.6	996.07	997.84	996.11	997.25	996.06
0.7	870.88	872.27	870.90	871.82	870.87
0.8	735.33	736.28	735.34	735.99	735.33
0.9	593.57	594.05	593.57	593.91	593.57
1.0	450.00	450.00	450.00	450.00	450.00

表 2.4.2 解析解と FEMAXI の数値解との比較

# 2.5 ギャップ熱伝達モデル

ギャップ熱伝達率は、**IGAPCN=0** - 6 の 7 個のオプションから選択が可能であるが、標準的に は修正 Ross & Stoute モデル<sup>(2.17)</sup>の(2.5.1)式 (**IGAPCN=0**) により表す。さらにボンディングモデル を用いる場合は、**IGAPCN=5**, =6 とおく。

## 2.5.1 修正 Ross & Stoute モデル

修正 Ross\_&\_Stoute モデルは次式で表現される<sup>(2.17)</sup>。

$$h = \frac{\lambda_{gas}}{C(R_{eff} + R_2) + (g_1 + g_2) + GAP} + \frac{\lambda_m \cdot P_c}{0.5 \cdot R^{1/2} \cdot H} + h_r$$
(2.5.1)

右辺第1項はガスによる熱伝達成分、第2項は固体接触による成分、第3項は輻射による成分 である。ここで、

$$\begin{split} \mathcal{C} &= 2.77 - 2.55 \times 10^{-8} \cdot P_{c} \\ \lambda_{m} &= \frac{2\lambda_{p}(T_{po}) + \lambda_{c}(T_{ci})}{\lambda_{p}(T_{po}) + \lambda_{c}(T_{ci})} \qquad (W/cm \cdot K) \\ \lambda_{p} : \prec \cup \gamma \land \δ = W/cmK), \quad \lambda_{c} : 被覆管熱伝導率 (W/cmK) \\ T_{po} : \prec \cup \gamma \land \δ = \δ$$

が必要である。FEMAXI-6 および FEMAXI-7 においては、全長力学解析で計算された接触圧力が そのままギャップ熱伝達の計算に用いられる。

#### Name-list input parameter **R1**, **R2**

である。

ペレットおよび被覆管の見かけの表面粗さ R<sub>eff</sub>および R<sub>2</sub>は、それぞれ R1 および R2 で指定できる。標準値はいずれも1µm。
### (1) 混合ガス熱伝導率

混合ガス熱伝導率 $\lambda_{gas}$ の表式は、MATPRO-09 モデルより次のように表される<sup>(2.13)</sup>。

$$\lambda_{gas} = \sum_{i=0}^{n} \left( \frac{\lambda_i}{1 - \sum_{i=1}^{n} \phi_{ij} \frac{x_j}{x_i}} \right)$$
(2.5.2)

ただし、

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2}{2^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{\frac{1}{2}}} \left[1 + \frac{2.41 \left(M_i - M_j\right) \left(M_i - 0.142M_j\right)}{\left(M_i + M_j\right)^2}\right]$$
(2.5.3)

ここで、

 $x_i$ :ガスiのモル比  $\lambda_i$ :ガスiの熱伝導率(W/cm·K)  $M_i$ :ガスiモル重量

である。ガスの種類として、ヘリウム、窒素(またはアルゴン)、クリプトンおよびキセノンを 考える。ガス組成は、クリプトンおよびキセノンが FP ガスであるため、FP ガス放出に依存する。 これについては 2.1.4 項で述べる。

ガスの熱伝導率を示す<sup>(2.13)</sup>。

$$k_{He} = 3.366 \times 10^{-3} T^{0.668}$$

$$k_{Ar} = 3.421 \times 10^{-4} T^{0.701}$$

$$k_{Xe} = 4.0288 \times 10^{-5} T^{0.872}$$

$$k_{Kr} = 4.726 \times 10^{-5} T^{0.923}$$

$$k_{N2} = 2.091 \times 10^{-4} T^{0.846}$$

$$(2.5.4)$$

ただし、 *k*(W/mK), *T*(K) である。なお、He の圧力が 1MPa から 10MPa に増大してもその 熱伝導率は 3%程度しか増加しない<sup>(2.18), (2.19)</sup>。

Name-list input Parameter IARガスの種類はヘリウム、窒素、クリプトン、キセノンであるが、IAR='AR'と指定すると、窒素の代わりにアルゴンを指定できる。

## (2) 固気間温度ジャンプ距離

固気間温度ジャンプ距離は次式で与えられる。

$$g_1 + g_2 = \sum_{i=1}^{n} (g_1 + g_2)_j \cdot \frac{10^5}{P_{gas}}$$
(2.5.5)

ここで、

 $(g_1 + g_2)$ :ガス*i*の固気間温度ジャンプ距離(cm)

P<sub>oas</sub>:ガス圧力 (Pa)

である。

 $(g_1 + g_2)_i$ は、Ross & Stoute の結果から、ヘリウム、窒素(又はアルゴン)、クリプトンおよび キセノンに対してそれぞれ 10×10<sup>-4</sup>、5×10<sup>-4</sup>、1×10<sup>-4</sup>および 1×10<sup>-4</sup>(cm)を用いる。

全ガス圧力 Pgas の計算については、後の 2.13 章(2.13.56)式で説明する。

# 2.5.2 ギャップボンディングモデル

### (1) 現象

軽水炉燃料は 40GWd/tU 付近からペレットと被覆管のギャップが閉じ、その後、ペレットと被 覆管の間に化学反応としてのボンディングが生じる<sup>(2.20)</sup>。ボンディングが生じた後は、ギャップ 熱伝達は(2.5.1)式から予測される値より有意に増加する。また PCMI ふるまいも、接触圧力の大 小に関わらず固着状態を考慮した2軸応力解析が必要となる。高燃焼度になり、燃料ふるまいに 占める PCMI の重要度が再び大きくなってきた状況では、ボンディングのモデル化は避けては通 れない。そこで、燃焼度、接触力、経過時間の関数としてボンディング層が生じ、ギャップ熱伝 達が変化し、同時にペレットと被覆管との固着が進行すると仮定し、以下のモデルを考える。

## (2) ボンディング進行度の計算と仮定

以下は、全長力学解析を前提に考える。PCMI における接触状態においてボンディング反応が 開始され、進行する。その際、進行度に応じてギャップ熱伝達率が変化(増加)する。

ここで、ボンディング進行度を BD とし、次式で定義する。

$$BD = \int_{t_{start}}^{t} P_C dt / X, \qquad (0 \le BD \le 1.0) \qquad (2.5.6)$$

ここで Pc:ペレット被覆管接触圧 t<sub>start</sub>:接触開始時刻

X: パラメータ (hour・MPa)

#### JAEA-Data/Code 2010-035

(2.5.6)式は、全長力学計算において接触が生じている期間について積算する。途中、接触が中断したら、その時間は積算を中断し、再び接触したらその接触期間について積算を再開し、最初の接触時からの全積算値をモニターしていく。BDの値が1.0に達したらボンディング層完成と見なし、BDはそれ以上は増大しないものとする。

### Xの値: Name-list input parameter: **BDX=100000.0** hr・MPa (Default)

(\*)注:(2.5.6)式は以上のボンディングモデルを用いるか否かにかかわらず常に計算される。

### (3) ギャップ熱伝達

**IGAPCN=5** or 6 と指定した場合、Gap Conductance; GC を以下のように定義する。

- ボンディングが生じない場合、従来通りの GC1 = Ross & Stoute モデル(IGAPCN=0 の場 合と同じ)を用いる。
- 既にボンディングが始まっていて、かつ接触状態と判定された場合:
   その状態での Gap Conductance GC2 は、(2.5.1)式が与える GC を OpenGC とすると、

$$GC2=(1-BD)\cdot OpenGC + BD\cdot BondGC \quad (W/cm^{2}K)$$
(2.5.7)

BondGC= 
$$F\{\theta \cdot \lambda_n(T_n) + (1-\theta) \cdot \lambda_{or}(T_c)\}, \quad (0 \le \theta \le 1, \quad 0 < F)$$
 (2.5.8)

とする。 $\lambda_p(T_p)$ ,  $\lambda_{ox}(T_c)$ は、それぞれペレット外表面および被覆管内表面の温度におけるペレット及び被覆管酸化膜の熱伝導率である。ただし酸化膜の熱伝導率は以下の MATPRO-A モデルを用いる<sup>(2.13)</sup>。

$$k = 0.835 + 1.81 \times 10^{-4} T$$
 (W/mK) (2.5.9)  
 $T :$  温度 (K)

また、ペレットの熱伝導率はペレット外表面部での燃焼度に対応した値とする。*F*および θは経験的に決められる入力パラメータで、下記の default 値を持つ。

#### Name-list input parameter: **F** : **FBONDG=10.0** (Default), θ : **SBONDG=0.01** (Default)

3) 既にボンディングが生じているセグメントにおいて、低出力、ないしは高内圧になってギ ャップが開いたと力学計算において判断された場合、IGAPCN=5 であれば以下の GC3 を用 いる。

GC3=OpenGC · (1.0+
$$\alpha$$
·BD),  $\alpha$ :調整パラメータ(>0) (2.5.10)

αは経験的に決められる入力パラメータで、下記の default 値を持つ。

### Name-list input parameter: α: ALBD=0.7 (default)

4) 既にボンディングが生じているセグメントにおいて、低出力、ないしは高内圧になってギャップが開いたと力学計算において判断された場合、IGAPCN=6 であれば (2.5.8)式の BondGC をそのまま用いる。すなわち、この場合の力学計算ではペレットをあくまで連続体として扱って、ギャップ幅を計算している。しかし現実には、ボンディングしたペレットの破片が被覆管に固着した状態を維持している場合があり、このとき被覆管の外側へのクリープ膨張あるいはペレットの収縮によるギャップの計算上の再開は、ペレット片の間のクラック空間の増加に対応すると考えられる。この場合、ギャップ熱伝達にはボンディング状態の値がそのまま適用される。これが IGAPCN=6 の物理的な意味である。

### (4) ギャップ固着状態(全長力学解析)

全長力学解析では、ギャップ熱伝達モデルを指定する **IGAPCN** とは無関係(独立)に、 Name-list input parameter **IBOND** によりペレットと被覆管の固着状態を以下のように指定するこ とができる。これは**3**章でも説明する。

#### **IBOND=0:** 固着状態を適用しない(default); **IBOND=1:** 固着状態を適用する。

#### IBOND=1の場合、

①いったんボンディング反応が開始された後は、出力の大小や内圧の大小に関わらず、その進行度に応じて、ペレットと被覆管の接触が存在すると仮定する。したがって、一旦ボンディングが生じた(あるいは進行中の)セグメントにおいては、ボンディングの進行のある時点以降(BDのある値以上)では、計算上の接触の有無あるいは接触圧力の大小に関わらず固着状態とする。

BD のある値: Name-list input parameter: BDTR=0.5 (default)

②ボンディングによる固着が生じたセグメントにおいては、ギャップが再度開いた場合でも、ペレットと被覆管の軸方向変位を常に(接触してなくても)同一にして力学計算を行う。

#### IBOND=2の場合、

いったんボンディング反応が開始された後は、出力の大小や内圧の大小に関わらず、その進行 度に応じて、ペレットと被覆管の接触が存在すると仮定する。したがって、一旦ボンディングが 生じた(あるいは進行中の)セグメントにおいては、ボンディングの進行のある時点以降(BD のある値以上)ではボンディング状態とするが、接触圧が PCPRES 以下に低下したら、ボンディ ング状態、すなわち固着状態は解除され、通常のギャップ状態に変化する。

PCPRES : Name-list input parameter: PCPRES =0.01(MPa) (default)

#### IBOND=3の場合、

いったんボンディング反応が開始された後は、出力の大小や内圧の大小に関わらず、その進行 度に応じて、ペレットと被覆管の接触が存在すると仮定する。したがって、一旦ボンディングが 生じた(あるいは進行中の)セグメントにおいては、ボンディングの進行のある時点以降(*BD* のある値以上)ではボンディング状態とするが、もし片側ギャップ幅が GWD(mm)以上開いた場 合にはボンディング状態、すなわち固着状態は解除され、通常のギャップ状態に変化する。

GWD : Name-list input parameter: GWD =0.1(mm) (default)

## 2.5.3 リロケーションモデル

ペレットの温度を規定するギャップ熱伝達に影響する要因として、ギャップ幅を左右するリロ ケーションについて FEMAXI コードのモデルを説明する。

#### (1) リロケーションの基本モデル

未照射燃料の状態で最初に出力を上げていくと、ペレットの温度が上昇し、熱応力が発生して 放射状のクラックが生じ、ペレットはいくつかの破片に割れる。この破片同士が熱膨張のために 互いに押し合って、ギャップを埋める方向に外側にせり出していく。これをリロケーションとい う。このリロケーション量は直接計測することは不可能で、燃料棒の温度や線出力から間接的に 推定するしかない。

FEMAXI コードのリロケーションモデルは、照射の初期にペレット半径方向および軸方向に一 定の値を入力で指定する方法をとる。Name-list parameter FRELOC (=0.35 as default) は、初期 start-up 直後のギャップ (ペレット直径、熱膨張、被覆管熱膨張、被覆管の弾性変形によって決ま る) がリロケーションによりどれだけ減少したかの割合を指定する。

照射とともにギャップは減少するが、ギャップが閉じて PCMI 接触力が発生すると、ペレット 片は被覆管から押し返されて、初期リロケーションは減少していく。この過程は、力学解析 (3.2、 3.3 章) で説明される。

ところで、Halden 炉のような試験研究炉での照射の場合、燃料棒は頻繁な出力変動、出力サイ クルを受ける。これによりペレット片が繰り返し熱応力を受けて、その都度リロケーション量が 細かく変化する可能性がある。こうした状況を再現するため、FEMAXIコードでは以下のような 制御機能を備えている。

#### (2) 力学解析リロケーションと熱解析リロケーションの分離

本機能においては、力学解析では従来通り、FRELOCを用いるが、熱解析では、(2.5.1)式中の、 力学解析での結果の半径ギャップ幅 GAP に修正項 DELTAR を入れることができる。 ① ユーザーが任意の履歴点において、軸方向各セグメントのペレットの熱的な半径リロケーションの修正量 DELTAR (µm)を入力で指定可能である。すなわち、i-step の力学計算の結果としてのギャップ幅を GAP<sub>i</sub> とするとき、熱的なギャップ幅 GAP1<sub>i</sub>は

$$GAP1_{i}=GAP_{i}-\Sigma_{i}(DELTAR)$$
(2.5.11)

となる。ただし  $\Sigma_i$ (DELTAR)は i-step までの DELTAR の積算値である。

② 入力変数を DELTAR(IZ, IN), (Default : DELTAR(IZ, IN)=0, ( $1 \le IZ \le NAX$ ,  $1 \le IN \le NHIST$ )) とする。DELTAR は前の履歴点における総和値 $\Sigma_{i-1}$ (DELTAR)に対する増分である。指定が無い履 歴点については、DELTAR=0 とみなす。

③ GAP1<sub>i</sub>= GAP<sub>i</sub> -  $\Sigma_i$ (DELTAR)=0 となったとき、それ以降の履歴点でたとえ DELTAR>0 が指定 されていても、GAP1=0 とする。

④ 力学解析において PCMI が発生した瞬間、それまでの DELTAR の総和( $\Sigma_i$ (DELTAR)) はゼロ にリセットされる。またギャップが再開した場合、それ以降の履歴点でたとえ DELTAR>0 が指定 されていても、 $\Sigma_i$ (DELTAR)=0 として計算する。

⑤ Σ<sub>i</sub>(DELTAR)の値は、ギャプコンダクタンスモデルの、ペレット-被覆管の半径ギャップの値 に修正項として入れる。すなわち、(2.5.1)式の第1項の GAP 値が修正される。

ここで DELTAR が影響するのは PCMI が生じていない場合のみであり、第2項(固体接触項) は、その場合は0であり、DELTAR の影響を何ら受けない。

## 2.5.4 スエリングと焼きしまりモデル

照射が進むにつれてペレット内には核分裂生成物(FP)が蓄積し、ペレットの体積膨張が生じる。これをスエリングという。固体 FP による燃焼度に比例するスエリングと、Xe や Kr のような気体 FP によるバブル形成による、燃料温度に依存するスエリングがある。

FEMAXI コードのスエリングモデルは、経験モデルと FP ガスバブルスエリングモデルに大別 される。詳細は 2.7 章~2.13 章で、FP ガスバブルモデルとの関連において説明する。

# 2.6 接触力評価モデル

連成オプションを用いない(IFEMOP≤0)場合、FEMAXI-Vまでのバージョンと同様に、3章 で述べる燃料棒の力学的ふるまいの解析とは独立に、ギャップ熱伝達率の計算に目的を限定した 接触力評価モデルを用いる。詳細は文献(1.13)および(1.14)の第2.6節を参照。

# 2.7 試験炉キャプセル内ドライアウト試験解析

FEMAXI-7 では、JMTR におけるドライアウト試験条件について予測解析を実施する機能がある。解析体系を図 2.7.1 に示す。また典型的な試験条件は以下の通りである。

燃料:BWR9x9A型,出力100W/cm程度

加熱蒸気層:入口条件は、圧力7.2MPa, クオリティ1.0, 流速パラメータ

流路管:2 重管による断熱層。管は SUS316

循環水:加熱蒸気層からの戻り水。圧力7.2MPa,温度50℃,流速0.01m/s

キャプセル外筒:SUS316

冷却水: 圧力 0.4MPa, 入口温度 40℃, 流速 1.9m/h





# 2.7.1 ドライアウト試験のモデル化

## (1) 基本方針

 ① 境界条件は、流路管内管の内面温度を固定するか、キャプセル外筒の外面温度を固定する かを検討する。基本的には、キャプセル外筒の外面温度40℃で固定することを想定する。
 ② 加熱蒸気層、循環水のみ流路を考慮し、ヘリウムガス層(断熱層)については、ヘリウム ガスの流動による熱除去は無視する。

③したがって、加熱蒸気層、循環水のみ軸方向への熱の移動を考慮する。

## (2) 基本式

図 2.7.2 に被覆管温度制御体系モデル図を示す。図 2.7.2 において j は軸方向セグメント番号である。

	1	<b>?</b> 」 加秀	<i>R<sub>2</sub></i> 热蒸気 層	, F	R3 R.	4	R5	$R_6 R$	·7 4( 匡	0℃ 引定
ペレット	被 覆 管	T	•	内 管 • <i>T<sub>2,j</sub></i>	ヘリウム ガス層 ・ <i>T<sub>3,j</sub></i>	外 管 ● T <sub>4,j</sub>	♥ 循環水 <i>T<sub>5,j</sub></i>	キャプセ ル外筒 ・ T <sub>6,j</sub>		l <sub>j</sub> 7.j
			<b>-</b>				+			<u>v</u>

図 2.7.2 被覆管温度制御体系モデル図

図 2.7.2 の加熱蒸気層において、セグメント j-1 とその上部セグメント j の境界での蒸気エンタルピーを H<sub>2,j-1</sub>、セグメント j とその上部セグメント j+1 の境界での蒸気エンタルピーを H<sub>2,j</sub> とすると、

$$\rho_{2,j}C_{2,j}\frac{\partial T_{2,j}}{\partial t} + \frac{W_{2,j}}{V_{2,j}}\left(H_{2,j} - H_{2,j-1}\right) = \frac{2}{R_2^2 - R_0^2}\left(R_2q_{2,j} - R_1q_{1,j}\right)$$
(2.7.1)

が成り立つ。ここで、

- $\rho$ : 密度(kg/m<sup>3</sup>)
- C : 比熱(J/kg·K)
- T : 温度(K)
- W : 質量速度(kg/s)
- V: 体積(m<sup>3</sup>)
- H : 蒸気エンタルピー(J/kg)
- R : 半径(m)
- *q* : 熱伝達による熱流速(W/m<sup>2</sup>)

である。(2.7.1)式を書き換えると、(2.7.1)式は、軸方向への質量速度変化を無視して、  $\rho_{1,j}C_{1,j}\frac{\partial T_{1,j}}{\partial t} + \frac{W_1}{\pi (R_2^2 - R_1^2)}C_{1,j}\frac{\partial T_{1,j}}{\partial z} = \frac{2}{R_2^2 - R_1^2}(R_2q_{C2,j} - R_1q_{C1,j}^*)$ (2.7.2)

と書き換えることができる。

内管については、軸方向への熱の出入りを無視すると、

$$\rho_{2,j}C_{2,j}\frac{\partial T_{2,j}}{\partial t} = \frac{2}{R_3^2 - R_2^2} (R_3 q_{C3,j} - R_2 q_{C2,j})$$
(2.7.3)

同様に、ヘリウムガス層(断熱層)についても、軸方向への熱の出入りを無視すると、

$$\rho_{3,j}C_{3,j}\frac{\partial T_{3,j}}{\partial t} = \frac{2}{R_4^2 - R_3^2} (R_4 q_{C4,j} - R_3 q_{C3,j})$$
(2.7.4)

同様に、外管についても、軸方向への熱の出入りを無視すると、

$$\rho_{4,j}C_{4,j}\frac{\partial T_{4,j}}{\partial t} = \frac{2}{R_5^2 - R_4^2} (R_5 q_{C5,j} - R_4 q_{C4,j})$$
(2.7.5)

循環水については、加熱蒸気層と同様に軸方向流動項を考慮して、

$$\rho_{5,j}C_{5,j}\frac{\partial T_{5,j}}{\partial t} + \frac{W_5}{\pi (R_6^2 - R_5^2)}C_{5,j}\frac{\partial T_{5j}}{\partial z} = \frac{2}{R_6^2 - R_5^2}(R_6q_{C6,j} - R_5q_{C5,j})$$
(2.7.6)

キャプセル外筒については、軸方向への熱の出入りを無視すると、

$$\rho_{6,j}C_{6,j}\frac{\partial T_{6,j}}{\partial t} = \frac{2}{R_7^2 - R_6^2} (R_7 q_{C7,j}^* - R_6 q_{C6,j})$$
(2.7.7)

である。ここで、

ρ:密度(kg/m<sup>3</sup>)
 C:比熱(J/kg·K)
 W:質量速度(kg/s)

*R*: 半径(m)

*q*:熱伝達による熱流速(W/m<sup>2</sup>)

である。

また、(2.7.2)~(2.7.7)式での
$$q_{C1,j}^*, \cdots, q_{C7,j}^*$$
は、  
 $q_{C1,j}^* = -(A_j \cdot T_{0,j} - B_j) \quad (= -\phi_{N,j})$ 
(2.7.8)

なお、A<sub>j</sub>, B<sub>j</sub>は、熱伝導差分式より求まる係数である。

 $\phi_{N,j}$ :被覆管外面熱流束 (W/m<sup>2</sup>K)

T<sub>0,j</sub> : 被覆管外面温度 (K)

$$q_{C2,j} = h_2(T_{2,j} - T_{1,j})$$
(2.7.9)

$$q_{C3,i} = h_3(T_{3,i} - T_{2,i}) \tag{2.7.10}$$

$$q_{C4,j} = h_4(T_{4,j} - T_{3,j}) \tag{2.7.11}$$

$$q_{C5,j} = h_5 (T_{5,j} - T_{4,j}) \tag{2.7.12}$$

$$q_{C6,j} = h_6(T_{6,j} - T_{5,j}) \tag{2.7.13}$$

$$q_{C7,j}^* = h_7 (T_{7,j}^* - T_{6,j})$$
(2.7.14)

$$h_2 = \frac{1}{\frac{1}{h_1'} + \frac{R_2}{\lambda_2} \ln \frac{R_2 + R_3}{2R_2}}$$
(2.7.15)

h': 過熱蒸気層の強制対流熱伝達率(輻射込)(W/m<sup>2</sup>・K)

$$\lambda_{2} : 内管の熱伝導率(W/m·K)$$

$$h_{3} = \frac{1}{\frac{R_{3}}{\lambda_{2}} \ln \frac{2R_{3}}{R_{2} + R_{3}} + \frac{R_{3}}{\lambda_{3}} \ln \frac{R_{3} + R_{4}}{2R_{3}}}$$

$$\lambda_{2} : 内管の熱伝導率(W/m·K)$$

$$\lambda_{3} : \sim \cup \phi \Delta \mathcal{I} \land \mathbb{R} \text{ (断熱層) } \text{ の等価熱伝導率(W/m·K)}$$

$$h = 1$$

$$(2.7.16)$$

$$h_{4} = \frac{1}{\frac{R_{4}}{\lambda_{3}} \ln \frac{2R_{4}}{R_{3} + R_{4}} + \frac{R_{4}}{\lambda_{4}} \ln \frac{R_{4} + R_{5}}{2R_{4}}}$$
(2.7.17)  
 $\lambda_{3} : \sim \cup \dot{\mathcal{O}} \sqcup \dot{\mathcal{I}} \lor \mathcal{I} \land \mathcal{I} \land$ 

$$\begin{split} \lambda_{4} : \text{ 外管の熱伝導率(W/m·K)} \\ h_{5} &= \frac{1}{\frac{R_{5}}{\lambda_{4}} \ln \frac{2R_{5}}{R_{4} + R_{5}} + \frac{1}{h_{5}'}} \quad (2.7.18) \\ \lambda_{4} : \text{ 外管の熱伝導率(W/m·K)} \\ h_{5} : 循環水の強制対流熱伝達率(輻射込)(W/m^{2}·K) \\ h_{6} &= \frac{1}{\frac{1}{\frac{1}{h_{5}'} + \frac{R_{6}}{\lambda_{6}} \ln \frac{R_{6} + R_{7}}{2R_{6}}} \\ h_{5}' : 循環水の強制対流熱伝達率(輻射込)(W/m^{2}·K) \\ \lambda_{6} : \pm \tau \mathcal{T} \tau \nu \mathcal{N} 简の熱伝導率(W/m·K) \\ h_{7} &= \frac{1}{\frac{R_{7}}{\lambda_{6}} \ln \frac{2R_{7}}{R_{6} + R_{7}}} \\ \lambda_{6} : \pm \tau \mathcal{T} \tau \nu \mathcal{N} 简 0 熱伝導 \infty (W/m·K) \end{split}$$
 (2.7.20)

# 2.7.2 物性值

(1) 物性值

被覆管温度制御体系モデルで必要な物性値は、加熱蒸気層及び循環水については水の物性値、 流路管及びキャプセル外筒については SUS316 の物性値、断熱層(He ガス)については、He の 物性値である。以下に、SUS316、He ガス、水、蒸気の熱伝導率、密度、定圧比熱の物性値を示 す。

① SUS316

・熱伝導率: (非公開)、 ・密度: p=7830 (kg/m<sup>3</sup>)、 ・定圧比熱: (非公開)

② He ガス

・ 熱伝導率<sup>(2.11)</sup>:  $\lambda = 2.93 \times 10^{-3} T^{0.69} \cdot \eta$  (W/mK)  $T(K) \subset \eta$ :調整係数  $a\rho^2 + b\rho + c = 0$  (kg/m<sup>3</sup>)

・密度<sup>(2.21)</sup> : 
$$a = 4.5 \times 10^{-4} + \frac{5.42}{1890 + T}, b = 1, c = -\frac{P}{RT}$$
  
T(K), P(bar), R = 0.0207723(bar<sup>3</sup>/(kg·K))

・定圧比熱<sup>(2.22)</sup>:  $C_P = 5.19 \times 10^3$  at 773K  $(J/(kg \cdot K))$ 

③ 加熱蒸気および循環水

- ・蒸気表より算出(循環水)50℃
- ・熱伝導率:  $\lambda = 0.653$  (W/mK)、 ・密度:  $\rho=736.45$  (kg/m3)
- ・定圧比熱:  $C_p = 5456 \left( J/(kg \times K) \right)$  (加熱蒸気層)
- ・熱伝導率:  $\lambda = 0.064(290^{\circ}C), 0.065(400^{\circ}C), 0.088(600^{\circ}C), 0.100(800^{\circ}C)$  (W/mK)
- ・密度: p=37.66 (kg/m3)
- ・定圧比熱: C<sub>P</sub>=5153 (J/(kg×K))

## (2) 熱伝達率

熱伝達率 hw は、対流項と輻射項の和で与えることにする。対流項については、加熱蒸気層は 蒸気単相領域 (クオリティ=1 (=気相質量流量/全質量流量))、循環水は水単相領域であるので、 いずれも Dittus-Boelter 式<sup>(2.3)</sup>を適用することにする。

## <u>Dittus-Boelter</u>式

$$h_{W} = 0.023 \frac{K}{D_{e}} Pr^{0.4} Re^{0.8}$$
(2.7.21)  
ここで、 Re =  $GD_{e}/\mu$   
K: 熱伝導度(W/m·K)  
 $D_{e}$ : 等価直径(m)  
Pr: プラントル数(-)  
Re: レイノルズ数(-)  
G: 質量流束(kg/m<sup>2</sup>·s)  
 $\mu$ : 動粘性係数(kg/m·s)

である。

また、輻射熱伝達は、

$$\begin{split} h_{r} &= \left[\frac{1}{\varepsilon_{1}} + \frac{1}{\varepsilon_{2}} - 1\right]^{-1} \cdot \sigma \cdot \frac{T_{1}^{4} - T_{2}^{4}}{T_{1} - T_{2}} \end{split} \tag{2.7.22} \\ \sigma &: \ &\subset \mathcal{F} \\ \mathcal{F} \\ \tau \\ &= 5.67 \times 10^{-8} \end{split}$$

である。

# 2.7.3 数值解法

2.2 節のモデル化の項に基づいて以下の様に差分化する。ただし、差分化に当っては、出口代 表形式(軸方向への熱移動は流体の流れ方向に対して上流側からの熱移動をもとに差分化し、径 方向への熱移動は対応する軸方向メッシュの出口温度を基準として差分化する)を用いる。

## (1) 構成方程式の差分化

加熱蒸気層

$$\rho_{1,j}C_{1,j} \frac{T_{1,j}^{n+1} - T_{1,j}^{n}}{\Delta t} + \frac{W_{1}}{\pi (R_{2}^{2} - R_{1}^{2})l_{j}} \left(C_{1,j-1} \cdot T_{1,j-1}^{n+1} - C_{1,j} \cdot T_{1,j}^{n+1}\right) 
= \frac{2}{R_{2}^{2} - R_{1}^{2}} \left(R_{2}h_{2}(T_{2,j}^{n+1} - T_{1,j}^{n+1}) + R_{1}(A_{j} \cdot T_{0,j}^{n} - B_{j})\right) 
\frac{W_{1}C_{1,j-1}}{\pi (R_{2}^{2} - R_{1}^{2})l_{j}} T_{1,j-1}^{n+1} + \left(\frac{\rho_{1,j}C_{1,j}}{\Delta t} - \frac{W_{1}C_{1,j}}{\pi (R_{2}^{2} - R_{1}^{2})l_{j}} + \frac{2R_{2}h_{2}}{R_{2}^{2} - R_{1}^{2}}\right)T_{1,j}^{n+1} 
- \frac{2R_{2}h_{2}}{R_{2}^{2} - R_{1}^{2}} T_{2,j}^{n+1} = \frac{\rho_{1,j}C_{1,j}}{\Delta t} T_{1,j}^{n} + R_{1}(A_{j} \cdot T_{0,j}^{n} - B_{j}))$$
(2.7.23)

内管

$$\rho_{2,j}C_{2,j}\frac{T_{2,j}^{n+1}-T_{2,j}^{n}}{\Delta t} = \frac{2}{R_{3}^{2}-R_{2}^{2}}\left\{R_{3}h_{3}(T_{3,j}^{n+1}-T_{2,j}^{n+1}) - R_{2}h_{2}(T_{2,j}^{n+1}-T_{1,j}^{n+1})\right\}$$
(2.7.25)

$$-\frac{2R_{2}h_{2}}{R_{3}^{2}-R_{2}^{2}}T_{1,j}^{n+1} + \left(\frac{\rho_{2,j}C_{2,j}}{\Delta t} + \frac{2(R_{3}h_{3}+R_{2}h_{2})}{R_{3}^{2}-R_{2}^{2}}\right)T_{2,j}^{n+1} - \frac{2R_{3}h_{3}}{R_{3}^{2}-R_{2}^{2}}T_{3,j}^{n+1} = \frac{\rho_{2,j}C_{2,j}}{\Delta t}T_{2,j}^{n} \quad (2.7.26)$$

ヘリウムガス層

$$\rho_{3,j}C_{3,j}\frac{T_{3,j}^{n+1}-T_{3,j}^{n}}{\Delta t} = \frac{2}{R_4^2 - R_3^2} \left\{ R_4 h_4 (T_{4,j}^{n+1} - T_{3,j}^{n+1}) - R_3 h_3 (T_{3,j}^{n+1} - T_{2,j}^{n+1}) \right\}$$
(2.7.27)

$$-\frac{2R_{3}h_{3}}{R_{4}^{2}-R_{3}^{2}}T_{2,j}^{n+1} + \left(\frac{\rho_{3,j}C_{3,j}}{\Delta t} + \frac{2(R_{4}h_{4}+R_{3}h_{3})}{R_{4}^{2}-R_{3}^{2}}\right)T_{3,j}^{n+1} - \frac{2R_{4}h_{4}}{R_{4}^{2}-R_{3}^{2}}T_{4,j}^{n+1} = \frac{\rho_{3,j}C_{3,j}}{\Delta t}T_{3,j}^{n} \quad (2.7.28)$$

外管

$$\rho_{4,j}C_{4,j}\frac{T_{4,j}^{n+1} - T_{4,j}^{n}}{\Delta t} = \frac{2}{R_{5}^{2} - R_{4}^{2}} \left\{ R_{5}h_{5}(T_{5,j}^{n+1} - T_{4,j}^{n+1}) - R_{4}h_{4}(T_{4,j}^{n+1} - T_{3,j}^{n+1}) \right\}$$
(2.7.29)

$$-\frac{2R_4h_4}{R_5^2 - R_4^2}T_{3,j}^{n+1} + \left(\frac{\rho_{4,j}C_{4,j}}{\Delta t} + \frac{2(R_5h_5 + R_4h_4)}{R_5^2 - R_4^2}\right)T_{4,j}^{n+1} - \frac{2R_5h_5}{R_5^2 - R_4^2}T_{5,j}^{n+1} = \frac{\rho_{4,j}C_{4,j}}{\Delta t}T_{4,j}^n \quad (2.7.30)$$

循環水

$$\rho_{5,j}C_{5,j}\frac{T_{5,j}^{n+1}-T_{5,j}^{n}}{\Delta t} + \frac{W_{5}}{\pi(R_{6}^{2}-R_{5}^{2})l_{j}}\left(C_{5,j+1}\cdot T_{5,j+1}^{n+1}-C_{5,j}\cdot T_{5,j}^{n+1}\right) 
= \frac{2}{R_{6}^{2}-R_{5}^{2}}\left(R_{6}h_{6}\left(T_{6,j}^{n+1}-T_{5,j}^{n+1}\right)-R_{5}h_{5}\left(T_{5,j}^{n+1}-T_{4,j}^{n+1}\right)\right) 
- \frac{2R_{5}h_{5}}{R_{6}^{2}-R_{5}^{2}}T_{4,j}^{n+1} + \left(\frac{\rho_{5,j}C_{5,j}}{\Delta t}-\frac{W_{5}C_{5,j}}{\pi(R_{6}^{2}-R_{5}^{2})l_{j}}+\frac{2\left(R_{6}h_{6}+R_{5}h_{5}\right)}{R_{6}^{2}-R_{5}^{2}}\right)T_{5,j}^{n+1} 
+ \frac{W_{5}C_{5,j+1}}{\pi(R_{6}^{2}-R_{5}^{2})l_{j}}T_{5,j+1}^{n+1} - \frac{2R_{6}h_{6}}{R_{6}^{2}-R_{5}^{2}}T_{6,j}^{n+1} = \frac{\rho_{5,j}C_{5,j}}{\Delta t}T_{5,j}^{n}$$
(2.7.31)

キャプセル外筒

$$\rho_{6,j}C_{6,j}\frac{T_{6,j}^{n+1} - T_{6,j}^n}{\Delta t} = \frac{2}{R_7^2 - R_6^2} \left\{ R_7 h_7 (T_{7,j}^* - T_{6,j}^{n+1}) - R_6 h_6 (T_{6,j}^{n+1} - T_{5,j}^{n+1}) \right\}$$
(2.7.33)

加熱蒸気層入口境界

$$\rho_{1,1}C_{1,1} \frac{T_{1,1}^{n+1} - T_{1,1}^{n}}{\Delta t} + \frac{W_{1}}{\pi (R_{2}^{2} - R_{1}^{2})l_{1}} \left(C_{1,in} \cdot T_{1,in}^{n+1} - C_{1,1} \cdot T_{1,1}^{n+1}\right) \\
= \frac{2}{R_{2}^{2} - R_{1}^{2}} \left(R_{2}h_{2}(T_{2,1}^{n+1} - T_{1,1}^{n+1}) + R_{1}(A_{1} \cdot T_{0,1}^{n} - B_{1})\right) \\
T_{1,in}^{n+1} \wr \square \, \text{Ax} \, \text{KA} \, \text{A} \, \square \, \text{Agg}$$
(2.7.35)

循環水入口境界

$$\rho_{5,N}C_{5,N} \frac{T_{5,N}^{n+1} - T_{5,N}^{n}}{\Delta t} + \frac{W_{5}}{\pi (R_{6}^{2} - R_{5}^{2})l_{N}} \left(C_{5,in} \cdot T_{5,in}^{n+1} - C_{5,N} \cdot T_{5,N}^{n+1}\right)$$

$$= \frac{2}{R_{6}^{2} - R_{5}^{2}} \left(R_{6}h_{6}(T_{6,N}^{n+1} - T_{5,N}^{n+1}) - R_{5}h_{5}(T_{5,N}^{n+1} - T_{4,N}^{n+1})\right)$$

$$T_{5,in}^{n+1} は循環水入口温度, N は軸方向セグメント数$$
(2.7.36)

## (2) 差分式の解法

以上の差分式を n+1 のステップの温度について整理した代数方程式を解く。 未知数は、 $T_{1,1}^{n+1} \sim T_{6,1}^{n+1}, \dots, T_{1,N}^{n+1} \sim T_{6,N}^{n+1}$ の 6×N 個である。左記の順の未知数を並べると(2.7.23), (2.7.26), (2.7.28), (2.7.30), (2.7.32), (2.7.34), (2.7.36)式より係数マトリックスは(2.7.37)式のようにな る。なお、(2.7.37)式は軸方向セグメント数4の場合である。



(2.7.37)

上記マトリクスをガウスの消去法により解けば、n+1のステップの温度を求めることができる。 上記より加熱蒸気層の軸方向温度分布及び被覆管表面熱伝達率が求まるので、被覆管外面温度お よび燃料温度を求めることができる。

# 2.8 FPガス生成・放出モデル

FEMAXIコードでは、ペレットスタックを軸方向に分割した各セグメントについて、径方向 温度分布の計算結果に基づいて、FPガス原子の拡散、バブル形成、放出を計算する。図2.8.1に、 モデルのフローを示す。



図 2.8.1 平衡論・速度論における FP ガス生成・放出計算の過程

## 2.8.1 FP ガス原子生成速度

軸方向セグメント*j*、径方向領域(リング要素)*i*における FP ガス原子生成速度は、次式で表される。

$$P^{ij} = \frac{Y \cdot f^{ij} \cdot q^j}{E_f \cdot N_A} \tag{2.8.1}$$

ここで、

$$P^{ij}$$
: 領域 *ij* の単位長当りの FP ガス生成速度 (mol/cm<sup>3</sup>s)  
 $f^{ij} = 2\pi \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \phi(r) r dr$   
 $\phi(r)$ : 径方向発熱密度分布関数、  
 $q^{j}$ : 軸方向セグメント j の平均発熱密度(W/cm<sup>3</sup>) =  $\frac{P_{LHR}^{j}}{\pi r_{pout}^{2} (1-h^{2})}$   
 $P_{LHR}^{j}$ : 軸方向セグメント j の線出力(W/cm)  
 $h$ : ペレット中心孔規格化半径 (-)  
 $E_{f}$ : 1 fission 当りに発生するエネルギー、3.204×10<sup>-11</sup> joule (=200 MeV)  
Y: FP ガス原子( $K_{r} + X_{e}$ )の核分裂収率、0.3 とする。  
 $N_{A}$ : アボガドロ数=6.02×10<sup>23</sup>

である。

#### 【参考】 FEMAXI コードにおけるヨウ素 (lodine) 放出

PCMIにおける被覆管のヨウ素 SCC を評価するために、FEMAXI コードではヨウ素の放出を 見積もる機能(関数)がある。ここでは、Xe 収率に対してヨウ素の収率比は 0.05(I<sub>2</sub>の収率比と しては 0.025)として、ヨウ素の原子量=126.9045g/mol を用いて、燃料棒単位軸長(cm)当りのヨ ウ素の放出量(g)を算出する。また、燃料中ではヨウ素は単体で存在するのではなく、ほとんどが CsI の形で存在すると考えられるが、一つの参考値として、単体ヨウ素量を燃料棒単位長さ当た りの被覆管の内面表面積(cm<sup>2</sup>)で割って、ヨウ素の被覆管内表面の表面濃度(g/cm<sup>2</sup>)を算出する。

# 2.8.2 熱活性拡散・放出モデルの概念

## 2.8.2.1 平衡論と速度論

FP ガスの拡散・放出モデルでは、結晶粒界のガスバブルの成長を計算する方法について、ガス 圧力が周囲の固体マトリックスからの圧力と平衡状態を維持しつつ成長するという平衡論モデ ルと、バブル半径の変化速度がバブル内外の圧力差や温度などに依存して変化するという速度論 モデルのいずれか一方を選択する。

### 2.8.2.2 放出機構の仮定

FEMAXI コードにおける FP ガス放出モデルの仮定を以下に説明する。

#### (1) 平衡論における放出の仮定

UO<sub>2</sub>粒内で生成された FP ガス原子は、ガス原子の粒内拡散および粒成長による粒界への掃き 出しの 2 つの機構により粒界へ移動し、そこにガスバブルを形成し、蓄積すると仮定する。

照射が進むにつれ、粒界でバブル密度が高くなり、かつバブルが成長すると、バブルは広範囲 にわたって連結する。そして連結バブルの一点がクラックや自由空間に通じる通路に接触すると、 すなわちペレット自由表面へのトンネルが形成されるとバブルは開気孔となり、バブル内のガス は燃料棒の自由空間に放出されると仮定する。

平衡論モデルでは、粒界における FP ガス蓄積量を常に計算し、その粒界面積当たりの蓄積量 が温度、バブル半径、バブルの粒界カバー率などで決まるある限界値(後述の飽和値 $N_f^{\text{max}}$ )を 超えると、その限界値を超えた分の FP ガスが自由空間へ放出されると仮定している。すなわち、 トンネルが形成された状態(=蓄積量が $N_f^{\text{max}}$ を超えている状態)では、粒内より粒界へ拡散し てくる追加のガス ( $N_f^{\text{max}}$ を超えた量)はトンネルへ入り、ペレット自由表面へ直ちに放出され ると仮定する。ただし、いったん放出を開始しても温度低下などによって蓄積量が $N_f^{\text{max}}$ 以下と なれば、放出は停止する計算方法をとっている。

#### (2) 速度論

FP ガス原子の粒内拡散と粒界への蓄積、放出に関する現象の理解は平衡論モデルと同一である。 ただし速度論モデルでは、粒界バブルの半径の変化速度(バブル成長速度)を計算し、バブル半 径あるいは粒界カバー率がある限界値に達したら、バブル内ガスは自由空間への流出を開始する と仮定している。

#### (3) 両モデルにおける共通項

①粒内から粒界への FP ガス原子の拡散計算は共通である。ここではガス原子の粒内バブルへの トラッピングあるいは、粒内バブルから固相への再溶解を取り扱う。また、粒界に溜まっている ガスも一定の割合で粒内へ再溶解すると仮定する。ただし粒内バブルサイズの計算方法が異なる。 ②Recoil, Knock-out 等によるペレット(片)表面からの自由空間への直接放出は、FP ガス原子生 成量の 0.5% (default) として評価している。すなわち、FP ガスバブルからの放出がない場合でも、 0.5%の放出は存在すると仮定している。ただし、この値には任意の量を入力で指定可能であり、 0%と仮定することもできる。

③リム組織における FP ガスポアからのガス放出、およびリム組織からの直接的な放出は、リム 組織からの追加的な放出量として経験式により別途評価する。

## 2.8.3 トラッピングを伴う熱拡散

図 2.8.2 にペレット断面の粒内ガス気泡と粒界ガス気泡の状態を、図 2.8.3 に理想化された結晶 粒モデルを示す。



図 2.8.2 ペレット粒内ガス気泡と粒界ガス気泡の状態の模式図





図 2.8.3 の粒界は粒界バブルの球殻ブランケットで覆われているように描かれているが、実際

の粒界は隣り合った結晶粒を分離する薄い膜状組織である。なお、これ以降の記述は、すべて1 結晶粒が対象である。

以下の記述では、各タイトルの右に添えたパラメータは、モデルの制御に用いる name-list parameter とその数値である。たとえば (IGASP=0, 1, 2)と示される場合は、name-list parameter IGASP に 0、1、2 のいずれかの値を入力で指定することにより、それに対応した計算が実行される。パラメータの説明は 2.14 節および 4 章を参照。

### 2.8.3.1 固体内 FP ガス原子の粒内バブルとの分配と拡散方程式 (IGASP=0, 1, 2)

固体内に溶解しているガス原子と粒内バブル中のガスとの間の分配は、粒内バブルによるガス 原子トラッピングと固相への再溶解との平衡により支配されると仮定する。固体内に溶解してい るガス原子は濃度勾配を駆動力とし、拡散により粒界に移動する。半径*a*の球形固体マトリック ス内におけるガス原子の拡散は、トラッピングと再溶解を考慮して、Speightのモデル<sup>(2.23)</sup>を適用 する。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial c}{\partial r}\right) - gc + b'm + \beta$$
(2.8.3-1)

ここで、

- c : 固体マトリックス単位体積あたりに溶解している FP ガス原子数 (atoms / cm<sup>3</sup>)
- *D* : ガス原子の拡散係数 (cm<sup>2</sup>/s)
- g: 粒内バブルにトラップされるガスの割合  $(s^{-1})$
- b': 固体内への再溶解率 (s<sup>-1</sup>)
- m : バブルの空間単位体積あたりに存在するガス原子数(atoms/cm<sup>3</sup>)
- $\beta$ : ペレット単位体積あたりのガスの生成率 (atoms/cm<sup>3</sup>/s)

である。

(2.8.3-1)式に示したペレット領域 *i*, *j* の単位体積あたりのガス原子生成率  $\beta_{ij}$  (atoms/cm<sup>3</sup>/s)は、 $P_{ij}$ より

$$\beta_{ij} = P_{ij}N_A / \pi (r_{i+\frac{1}{2},j}^2 - r_{i-\frac{1}{2},j}^2)$$
(2.8.3-2)

ここで  $N_A$ :アボガドロ数  $r_{i+\frac{1}{2},j}$ :領域 ij の径方向外側半径(cm)  $r_{i-\frac{1}{2},j}$ :領域 ij の内側半径(cm) である。

粒内バブルにトラップされたガス原子の再溶解との差は次式で表される。

$$\Delta mt = \frac{\partial m}{\partial t} = gc - b'm \neq 0 \tag{2.8.3-3}$$

ここで、各タイムステップの終わりには計算により、

$$gc - b'm = 0$$
 (2.8.3-4)

という平衡関係が成り立つことを仮定する。

そこで(2.8.3-2)式および(2.8.3-4)式を辺々加えると、

$$\frac{\partial (c+m)}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r}\right) + \beta$$
(2.8.3-5)

となる。ここで(2.8.3-3)式を変形して、

$$gc - b' \left( 1 - \frac{\Delta mt}{mb'} \right) m = 0 \tag{2.8.3-6}$$

$$\Xi \Xi \mathfrak{T} \qquad \qquad \alpha_i = b' \left( 1 - \frac{\Delta m t_{i-1}}{m_{i-1} b'} \right) \tag{2.8.3-7}$$

と定義して、前タイムステップ i-1 での値を用いて現タイムステップでの $\alpha_i$ (初期値)を決定する。すると、  $c = \frac{\alpha_i}{\alpha_i + g} (c + m)$ (2.8.3-8)

の関係が得られる。これを(2.8.3-5)式に代入すると、

$$\frac{\partial(c+m)}{\partial t} = \frac{D\alpha_i}{\alpha_i + g} \left( \frac{\partial^2(c+m)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial(c+m)}{\partial r} \right) + \beta$$
(2.8.3-9)

を得る。ここで、固体マトリックス内および粒内バブル内のガス原子数の和を

$$\Psi = c + m \tag{2.8.3-10}$$

で表すと、トラッピングを伴う粒内での球座標系の拡散方程式は最終的に次のように表される。

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = D' \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \beta$$
(2.8.3-11)

ここで

$$D' = \frac{\alpha_i D}{\alpha_i + g} \tag{2.8.3-12}$$

である。Ψ はガス原子が固相に存在するか、粒内バブル内に存在するかに関係なく、粒内のみか

けの単位体積あたりの平均ガス原子数(atoms/cm<sup>3</sup>)を表す。*D*′は見かけの拡散係数であり、トラッ ピング、再溶解、核分裂片によるバブルの部分破壊の効果はこの中に含まれている。こうして、 (2.8.3-11)式の有限要素法による数値解と、粒内ガスバブルの半径*R*、数密度*N*の値とは相互にリ ンクしている。

次に(2.8.3-11)式を解くために、g、b'、R および D を求める。まず、ペレット単位体積あたり に半径 R の粒内気泡が N 個存在するとする。実際の R にはサイズ分布があるが、その重み付き平 均値 (代表値)を考える。この R と N を以下の 2.8.4 - 2.8.5 項に示す方法のいずれかで決定する。

# 2.8.4 粒内バブル半径と数密度の White+Tucker モデル (IGASP=0, GBFIS=0)

照射中、平衡状態においては、 $\overline{R}$  と N の間には White と Tucker により次の関係が成立していると考える<sup>(2.24)</sup>。

$$N = 1.52\alpha / \pi \lambda (R + Z_o)^2$$
 (2.8.4-1)

ここで、

N : 粒内バブル数密度 (bubbles/cm<sup>3</sup>)  

$$R$$
 : 粒内バブル平均半径 (cm)  
 $Z_o$ : 核分裂の影響範囲(= $10^7$ cm)  
 $\alpha$  : バブルの生成率 (= 24 *bubbles/fission fragment*)  
 $\lambda$  : 核分裂片の飛程 (= $6 \times 10^{-4}$ cm)

である。

*R*の初期値は name-list parameter APORE で決められる。(初期粒内バブル半径, default=1 nm)

粒内バブルへのトラッピング率gは次式で与えられる<sup>(2.25)</sup>。

$$g = 4\pi DRN, \qquad (2.8.4-2)$$

$$R:$$
粒内バブル平均半径 (cm),  
 $N:$ 粒内バブル数密度 ( $bubbles/cm^3$ )

なお、(2.8.4-2)式中のバブル数密度 Nは(2.8.4-1)式により求められる。

固相への再溶解率は次式で与えられる<sup>(2.24)</sup>。

$$b' = 3.03F\pi\lambda (R + Z_0)^2$$
(2.8.4-3)

ここで、

F:核分裂速度(fissions/cm<sup>3</sup>/s)

 $\lambda: 飛程 (=6 \times 10^{-4} \text{ cm})$ 

Z<sub>o</sub>:影響範囲(cm)

Namelist input	BFCT				
固相への再溶解率はBFCTにより調整でき					
$b' = b' \times BFC$	Т	(Default=1.0)			

である。

また、(2.8.4-3)式中の核分裂速度 F には下限値  $10^{13}$  (fissions/cm<sup>3</sup>s)が設定されている。これは出 力低下したときb'の値が急変して不自然な数値計算結果になることを避けるためである。

FP ガス原子の拡散係数 D は 2.8.14 項で説明する。

さて、(2.8.4-1)、(2.8.4-2)、(2.8.4-3)式より、粒内気泡平均半径 *R* が与えられれば *g、b* および D が決まり、(2.8.3-12)式より *D* を得ることができる。したがって、(2.8.3-11)式を解くことにより Ψ を求めることができる。(2.8.3-11)式の偏微分方程式の解法については 2.8.6 項に示す。

粒内バブル平均半径 R (cm)は van der Waals の状態方程式により求める。これを

$$\left(P_{ext} + \frac{2\gamma}{R}\right)\left(V - m^*B\right) = m^*kT$$
(2.8.4-4)

$$P_{gas} \cdot (V - m^*B) = m^* kT$$
 (2.8.4-5)

と書く。ここで、

 $P_{ext}$ :外界からの静水圧(dyn/cm<sup>2</sup>)  $P_{gas}$ : ガス圧力 (dyn/cm<sup>2</sup>)  $\gamma$ :表面張力(626 erg/cm<sup>2</sup>)<sup>(2.25)</sup> V: 粒内ガスバブル体積(= $\frac{4}{3}\pi R^3$  cm<sup>3</sup>) B: van der Waals 定数(= 8.5 × 10<sup>-23</sup> cm<sup>3</sup>/atom)  $m^*$ : 1 バブル当たりのガス原子数 (atoms/bubble) k: ボルツマン定数 (= 1.38 × 10<sup>-16</sup> erg/K) T: 温度(K)

である。

ただし、本モデルでは粒内バブルの圧力は外部固相マトリックスからの静水圧 $P_{ext}$ と平衡していると仮定しているので、

$$P_{gas} = P_{ext} + \frac{2\gamma}{R} \tag{2.8.4-6}$$

である。

(2.8.4-4)式を*m*\*について解けば、 $V = \frac{4}{3}\pi R^3$ を用いて

$$m^* = \frac{4\pi R^3}{3} \cdot \frac{P_{ext}R + 2\gamma}{B(P_{ext}R + 2\gamma) + kTR}$$
(2.8.4-7)

となる。

一方、ガス原子の粒内バブルによるトラップとバブルからの再溶解との間の平衡関係(2.8.3-3)式より: $gc-b'm-\Delta mt=0$ (2.8.4-8)

において $\Delta mt = 0$ を仮定すると、次式が成り立つ。

$$gc = b'm \tag{2.8.4-8a}$$

この式を、m=m\*N、 $c = \Psi - m$ によりm\*を用いた式に書き換えると

$$(b'+g)m^*N = g\Psi$$
(2.8.4-9)

となる。(2.8.4-9)式に(2.8.4-2)、(2.8.4-3)式を代入すると、

$$(3.03F\pi\lambda(R+Z_0)^2 + 4\pi DRN)m^* = 4\pi DR\Psi$$
(2.8.4-10)

(2.8.4-7)式を代入して、

$$\left(3.03F\pi\lambda\left(R+Z_0\right)^2+4\pi DRN\right)\cdot\frac{R^3(P_{ext}R+2\gamma)}{B\left(P_{ext}R+2\gamma\right)+kTR}=3D\Psi$$
(2.8.4-11)

となる。さらに(2.8.4-1)式を代入し、整理することによりRについての方程式、

$$\left\{3.03F\pi\lambda\left(R+Z_0\right)^2 + \frac{6.08D\overline{R}\alpha}{\lambda\left(R+Z_o\right)^2}\right\} \cdot \frac{R^3(P_{ext}R+2\gamma)}{B\left(P_{ext}R+2\gamma\right)+kTR} = 3D\Psi \qquad (2.8.4-12)$$

を得る。この式を解けば粒内ガスバブル半径 Rが求められる。(2.8.4-12)式より、Rは $\Psi$ に依存することがわかる。

粒内ガスの数密度*N*は、*R*が決定されれば(2.8.4-1)式より決定される。トラッピング率及び再 溶解率は(2.8.4-2)、(2.8.4-3)式に*R*および*N*を代入して決定される。

ただし実際の数値計算では、(2.8.4-7)式より求められる $m^* c m_1^*$ とし、(2.8.4-8a)式より求められる $m^* c m_2^*$ としたとき、 $m_1^* = m_2^*$ となる $\overline{R}$ を求める。なお、Rの範囲は $10^{-15}$ (cm)~ $10^{-5}$ (cm)とし、 $\log_{10} R$ について2分法を用いて、Rを算出する。

## 2.8.5 粒内バブル半径と数密度の照射溶解モデル (IGASP=0, GBFIS=1)

**2.8.4** 項と同様に、燃料の単位体積あたりに平均半径 *R* (cm) の粒内 FP ガスバブルが *N* 個存在 すると仮定する。粒内ガスバブルの数密度 *N* (bubbles/cm<sup>3</sup>)の変化速度を求めるために以下の仮定 をおく。

1個の核分裂からα個の気泡核が発生する。

② fission fragment は matrix 中のガスバブル以外の体積において気泡核を発生する。

すなわち、ガスバブル半径を R とすれば、  

$$\left(1-N\cdot\frac{4}{3}\pi R^3\right)$$
の係数がかかった固相体積において気泡核を発生する。

③ 発生した気泡核はすぐに別の fission fragment によって破壊されるが、その破壊速度を  $2\pi F \cdot l(R+Z)^2 f(R)N$  (2.8.5-1)

とする。ここで、f(R)は、バブルがあるサイズ以上になれば fission fragment によっても破壊さ れない効果を現す。すなわち、バブル半径 R が  $R_0$ 以下であれば破壊率は 1.0、 $R_0$ 以上であれば Rに依存した部分的な破壊率となる。

$$f(R) = \begin{cases} 1.0 & (R \le R_0) \\ \left(\frac{R_0}{R}\right)^k & (R \ge R_0) \end{cases}$$
(2.8.5-2)

Namelist Parameters: k= KFIS (default=2.0),  $R_0$ = RFIS (default= 20 nm)

以上の仮定に基づいて、粒内ガスバブルの数密度 N (bubbles/cm<sup>3</sup>)の照射中の変化速度は、White と Tucker の式に f(R) を組み込んで、

$$\frac{dN}{dt} = 2F\alpha \left(1 - N \cdot \frac{4}{3}\pi R^3\right) - 2\pi F \cdot l(R + Z_0)^2 f(R)N$$
(2.8.5-3)

ここで、 F:核分裂速度 (fissions/cm<sup>3</sup>/s)  $\alpha$ :気泡の生成率 (=24 bubbles/fission fragment) R:粒内気泡平均半径 (cm) l:飛程 (= $6 \times 10^{-4}$  cm)  $Z_0$ :核分裂の影響範囲 (= $10^{-7}$  cm)

である。

$$\frac{dN}{dt} = 2F\alpha - 2F\left(\frac{4}{3}\pi\alpha R^3 + \pi l(R+Z_0)^2 f(R)\right) \cdot N$$
$$= 2F\alpha - 2FKN$$
$$K = \left(\frac{4}{3}\pi\alpha R^3 + \pi l(R+Z_0)^2 f(R)\right)$$
(2.8.5-4)

ここで、(2.8.5-4)式の数値解は、

$$N^{i} = (N^{i-1} - 2FK) \exp(-2F\alpha \cdot \Delta t) + 2FK$$
(2.8.5-5)

となる。

また、1個のガスバブル中に含まれるガス原子の総数を*m*\*とすると、単位体積中のガスバブ ル中のガス原子数*m*(atoms/cm<sup>3</sup>)と、粒内ガスバブルの数密度N(bubbles/cm<sup>3</sup>)より、

$$m^* = m / N$$
 (2.8.5-6)

である。*m*\*および*m*の変化は、トラッピングによってバブルに入り込むガス原子数と、fission fragment によってバブル中からはじき出されるガス原子数(matrix への再溶解)の差によって決定される。FP ガス原子の粒内バブルへのトラッピング率g(s<sup>-1</sup>)は次式で与えられる。

$$g = 4\pi DRN$$
 (2.8.5-7)  
ここで、 D : FP ガス原子の拡散係数 (cm<sup>2</sup>/s)

また、*c*をマトリックス単位体積あたりに溶解している FP ガス原子数Ψ (atoms/cm<sup>3</sup>)をガスが固 相に存在するか、粒内バブル内に存在するかに関係なく、粒内バブルを含んだ燃料の単位体積あ たりの平均 FP ガス原子数(atoms/cm<sup>3</sup>)とすれば、

$$\Psi = c + m \tag{2.8.5-8}$$

である。固相への再溶解率を

$$b' = 3.03F\pi l(R + Z_0)^2 \tag{2.8.5-9}$$

として、

$$\frac{dm}{dt} = 4\pi DRNc - 3.03F\pi l(R + Z_0)^2 \cdot m$$
  
=  $gc - b'm = g\Psi - (g + b')m$  (2.8.5-10)

である。よって(2.8.5-10)式の数値解は、

$$m^{i} = (m^{i-1} - g\Psi) \exp(-(g + b')\Delta t) + g\Psi$$
(2.8.5-11)

となる。

同時に、バブル内ガスには状態方程式も近似的に成り立つと仮定して、

$$\left(P + \frac{2\gamma}{R}\right) \cdot \left(\frac{4\pi R^3}{3} - m^* \cdot B\right) = m^* kT$$
(2.8.5-12)

である。ただし、本モデルでは粒内バブルの圧力は外界からの静水圧 $P_{ext}$ と平衡していると仮定しているので、

$$P_{gas} = P_{ext} + \frac{2\gamma}{R}$$
(2.8.5-13)

である。

ここで、*m*, *m*\*, *R*, *N*の4変数のiステップにおける値を決定するためには、(2.8.5-5), (2.8.5-6), (2.8.5-11), (2.8.5-12)式を同時に満たすような数値解を得る。

同時に、バブル内ガスには vacancy の流入により体積が増大するので、vacancy 濃度を n<sub>v</sub>、vacancy 拡散定数を D<sub>v</sub> とおけば、

$$\frac{dn_{\nu}}{dt} = \frac{4\pi D_{\nu}R}{kT} \left\{ \sigma_{H} + P_{gas} - \frac{2\gamma_{P}}{R} \right\}$$
(2.8.5-14)

$$P_{gas} = \frac{m^* kT}{n_v \Omega_v} \tag{2.8.5-15}$$

$$V = n_{v}\Omega_{v} + m * B$$
  
=  $\frac{4}{3}\pi R^{3}$  (2.8.5-16)

である<sup>(2.26)</sup>。

ただし  

$$\Omega_{\nu}$$
: vacancy 体積(4.09·10<sup>-29</sup> m<sup>3</sup>)  
 $\gamma_{P}$ : UO<sub>2</sub> pore 表面 energy (J/m<sup>2</sup>)  
 $\gamma_{P} = \mathbf{GSV} \cdot \gamma_{SV} = 0.41 \gamma_{SV},$   
 $\gamma_{SV} = 0.85 - 1.40 \times 10^{-4} T$  (J/m<sup>2</sup>) (0GSV=0.41 <sup>(2.27)</sup>

である。また Turnbull<sup>(2.28)</sup>より

$$D_{v} = k_{v}S^{2}j_{v} \cdot C$$
(2.8.5-17)
  
ここで
  
S:原子ジャンプ距離= $\Omega^{\frac{1}{3}} = 3.4454\text{E-10 m}$ 
  
 $\Omega:原子容積= 4.09 \times 10^{-29} (\text{m}^{3})$ 
  
 $j_{v} = 10^{13} \exp(-5.52 \times 10^{4} / RT)$ 
  
R:ガス定数=1.987 cal/mole/K
  
T:温度(K)
  
 $k_{v}$ : 調整係数(KV=1.0, default)

C: vacancy のジャンプ先の結晶格子点存在濃度=1.0 と近似する<sup>(2.28)</sup>。

-85-

ここで、 $m, m^*, R, N の 4 変数の$  time step -i- における値を決定するためには、(2.8.5-5), (2.8.5-6), (2.8.5-11)~(2.8.5-14)式を同時に満たすような数値解を得る。このために(2.8.5-12)式において、time step -i- における $n_v$ の新しい値 $n_v^i$ を決定するために

$$n_{v}^{i} = n_{v}^{i-1} + \frac{dn_{v}}{dt} \cdot \Delta t$$
 (2.8.5-18)

$$\frac{dn_{\nu}}{dt} = \frac{4\pi D_{\nu}^{i} R^{i-1}}{kT^{i}} \left\{ \sigma_{H}^{i} + P_{gas}^{i-1} - \frac{2\gamma}{R^{i-1}} \right\}$$
(2.8.5-19)

とする。これより求めた $n_v^i \epsilon(2.8.5-14)$ 式に入れて、m\*の値も用いて、新しい半径 $R^i \epsilon$ 求める。 ここで $n_v^i$ は、 $\frac{dn_v}{dt} = 0$ から得られる $\overline{n_v}$ を越えることはできない。何故なら $n_v$ は無限時間経過後の値であるからである。(2.8.5-18)、(2.8.5-19)式から $n_v^i \epsilon$ 計算すると、 $n_v^i$ が $\overline{n_v} \epsilon$ 越えない保障はない。したがって(2.8.5-18)、(2.8.5-19)式から $n_v^i \epsilon$ 算出する場合には、十分 $\Delta t \epsilon$ 小さくとる必要があるのであるが、 $\Delta t$ の設定は状態量により変わりきわめて難しい。

そこで、限界値 n<sub>v</sub>を算出したのち、この限界値 n<sub>v</sub> を超えないように注意しながら、(2.8.5-19) 式をクランク-ニコルソン法によって変換する。すなわち、(2.8.5-20)式が(2.8.5-19)式をクランク-ニコルソン法に変換した式である。

$$\frac{dn_{\nu}}{dt} = \frac{4\pi D_{\nu}^{i} \frac{R^{i-1} + R^{i}}{2}}{kT^{i}} \left\{ \sigma_{H}^{i} + \frac{P_{gas}^{i+1} + P_{gas}^{i}}{2} P_{gas}^{i} - \frac{2\gamma}{\underline{R}^{i-1} + R^{i}}}{2} \right\} \quad (2.8.5-20)$$

当然、(2.8.5-20)式を用いる場合はくり返し計算によって収束を図る必要である。 まず、 $\frac{dn_v}{dt} = 0$ とする $\overline{n_v}$ の算出について述べる。 $\overline{n_v}$ より得られる $R \in \overline{R}$ 、 $P_{gas} \in \overline{P_{gas}}$ とおく

$$\frac{dn_{v}}{dt} = \frac{4\pi D_{v}^{i}\overline{R}}{kT^{i}} \left\{ \sigma_{H}^{i} + \overline{P_{gas}} - \frac{2\gamma}{\overline{R}} \right\} = 0$$
(2.8.5-21)

より、

$$(\sigma_H^i + \overline{P_{gas}})\overline{R} - 2\gamma = 0$$
(2.8.5-22)

である。また、(2.8.5-13)、(2.8.5-14)式を下式で与える。

$$\overline{P_{gas}} = \frac{A}{n_v}$$
(2.8.5-23)

$$\overline{R}^3 = \alpha \overline{n_v} + \beta \tag{2.8.5-24}$$

(2.8.5-20)、(2.8.5-21)式を(2.8.5-19)式に代入するために、(2.8.5-19)式の両辺を3乗する。すなわ

ち、

$$(\sigma_H + \overline{P_{gas}})^3 \overline{R}^3 = 8\gamma^3$$
(2.8.5-25)

(2.8.5-20)、(2.8.5-21)式を(2.8.5-22)式に代入して整理すると、  $\alpha \sigma_{H}^{3} \overline{n_{v}^{4}} + (3\alpha \sigma_{H}^{2}A + \beta \sigma_{H}^{3} - 8\gamma^{3})\overline{n_{v}^{3}} + (3\alpha \sigma_{H}A^{2} + 3\beta \sigma_{H}^{2}A)\overline{n_{v}^{2}} + (\alpha A^{3} + 3\beta \sigma_{H}A^{2})\overline{n_{v}} + \beta A^{3} = 0$  (2.8.5-26)

である。(2.8.5-23)式より $n_v > 0$ の解を N-R 法により求める。

# 2.8.6 粒内バブルの Pekka Lösönen モデル (IGASP=1, 2)

このモデルでは、粒内バブルの成長を Lösönen の経験式<sup>(2.29)</sup>を用いて予測する。 ① 初期バブル径  $\overline{R}_0 = 0.01$  nm と仮定する。すると数密度が以下のように決められる。

数密度 
$$N_0(Bu, T) = \frac{-0.0762 \cdot \text{Bu} + 10.4}{9.8} N_0(T)$$
 (cm<sup>-3</sup>) (2.8.6-1)  
 $N_0(T) = (15.7 - 0.00578 \cdot T) \times 10^{17}$  (cm<sup>-3</sup>) (2.8.6-2)

Bu: burn up (MWd/kgU), T: Kelvin.

ただし、(2.8.6-1), (2.8.6-2)式は、T≥2173K では、T=2173K での値に固定する(Cut-off)。

②粒内バブルの平均半径

次に、粒内バブルが成長していく場合の平均的半径を決める。  

$$\overline{R} = \left(\frac{3m'M}{4\pi\rho N_0}\right)^{1/3}$$
(2.8.6-3)

ここで M は分子量、 $\rho = 4$  (g/cm<sup>3</sup>) と仮定する。 **GROU**=4.0 (default) 。

次に1個の結晶粒内に存在するすべての粒内バブル中のガスの総計(mole)を結晶粒体積(cm<sup>3</sup>)で 割った「ガス濃度」=m'(mole/cm<sup>3</sup>)を計算する。

$$\frac{dm'}{dt} = 4\pi \overline{R} Dc(r_g, t) N_0(r_g, t) - Fbm'(r_g, t) \qquad (2.8.6-4)$$
  

$$b = 3 \times 10^{17} = \text{BBC} \quad (\text{cm}^3) \qquad \textbf{BBC} = 3 \times 10^{-17} \text{ (default)} \qquad .$$
  

$$F : \text{fission rate } (1/\text{cm}^3 \cdot \text{s})$$

ただし、初期ガス濃度 $m'_0$ は、 $\overline{R}_0 = 0.01 nm$ と(2.8.6-3)式より計算される。

③合体成長

粒内バブルの合体は、合体しきい温度Tmg を越えた場合に、以下の経験式を与える。

$$T_{mg} = \frac{8000}{\ln\left(\frac{Bu-9}{0.005}\right)} + 273.15$$
(2.8.6-5)

$$\overline{R}(r_g, t) = \overline{R}_F \left(1 - \exp(-8.3 \times 10^{-4} t)\right) + \overline{R}_{ini}(r_g, t) \exp(-8.3 \times 10^{-4} t) \quad (2.8.6-6)$$

$$\overline{R}_F = 100 \text{ nm : coarsened radius.} \quad \textbf{RADMG} = 100 \text{ nm (default)} \quad .$$

 $R_{ini}$ : radius before coarsening.

Bu: burn up (MWd/kgU), T: Kelvin.

t:バブル合体開始時刻からの経過時間(sec)。

(2.8.6-5)式において、Bu ≤ 9.1の場合は、Bu=9.1に固定する。

(2.8.6-6)式より、約 1.5 hour で合体は終了し、半径 RAMDG (nm)のバブルに移行する。すると この移行過程で数密度  $N_0$  およびバブルガス濃度 m'は変化するが、近似として m'は移行直前の値 を移行後も、一つの平衡状態として保持すると仮定する。すなわち、合体後は、(2.8.6-4)式を用 いず、粒内バブルへのガス流入と再溶解は平衡状態を維持するものとする。

ここで、合体が始まってから合体後まで、及びそれ以降の粒内バブル数密度は

$$N_0(r_g, t) = \frac{3m'(r_g, t)M}{4\pi \bar{R}^3 \rho}$$
(2.8.6-7)

1)  $\overline{R} < \overline{R}_{\rho}$   $\rho = \rho_0$ ,  $R\rho$ : **RROU** (Default=10 nm)

2) 
$$\overline{R} \ge \overline{R}_{\rho}$$
  $\rho = \rho_0 \left(\frac{\overline{R}_{ini}}{\overline{R}}\right)^{N,\rho}$ ,  $N\rho : \mathbb{NROU} (\text{default}=1.0)$ .

と表される。

温度が一旦*T<sub>mg</sub>*を越えたのち、*T<sub>mg</sub>*より低下した場合、粒内バブルサイズは 100 nm で変化しないものとする。粒内バブルの「収縮」には非常に多くの要因が関係しており、実測データも乏しい。バブルの収縮の考慮は、将来の課題とする。

## 2.8.7 偏微分拡散方程式の Galerkin 解法

FP ガス原子拡散計算における偏微分方程式(2.8.3-11)の解法には、結晶粒を球と近似し、球座標系における有限要素法を用い、要素内において Galerkin の重み付き残差法により定式化する。

FEM の一種である Galerkin 法を用いた理由は、少ない節点数(計算時間の節約になる)で精度 良い解が得られるからである。また、再溶解が扱い易く、過渡変化にも原理的に対応可能である。 (2.8.3-11)式を、

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - D' \nabla^2 \Psi - \beta = 0$$
(2.8.7-1)

と書く。ここで関数  $\Psi(t,r)$  の近似関数を次式のようにおく。

$$\Psi(t,r) \approx \hat{\Psi}(t,r) = \sum_{j} \Psi_{j}(t) \phi_{j}(r)$$

ここで $\phi_j(r)$ は基本関数と呼ばれる任意の既知関数であり、 $\Psi_j$ は未知係数である。このとき残差は、

$$R_{\Psi}(t,r) = \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} - D' \nabla^2 \hat{\Psi} - \beta$$
(2.8.7-2)

である。この残差が最小となるような係数 $\{\Psi_j\}$ を決定する。係数 $\{\Psi_j\}$ は重みをかけた積分がゼロになることを要請することで決定できる。重み関数として基本関数を選べば(Galerkin の方法、 $\omega_i = \phi_i$ )この要請は次式で与えられる。

$$\int_{V} R_{\Psi}(t,r) \phi_{i} dv = 0$$
 (2.8.7-3)

(2.8.7-3)式は、任意の重み関数 $\phi_j$ に対して満足するためには、 $R_{\Psi}(t,r) = 0$ であることが必要であるので(2.8.7-1)式と等価である。(2.8.7-3)式の積分を行うと、

$$\int_{V} \left( \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} - D' \nabla^{2} \hat{\Psi} - \beta \right) \phi_{i} dV = 0$$

$$\int_{V} \left( \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} - \beta \right) \phi_{i} dV - \int_{V} D' \nabla^{2} \hat{\Psi} \phi_{i} dV = 0 \qquad (2.8.7-4)$$

(2.8.7-4)式の第2項は、

$$-\int_{V} D' \nabla^{2} \hat{\Psi} \phi_{i} dV = -D' \Big[ \int_{V} \nabla \cdot (\phi_{i} \nabla \hat{\Psi}) dV - \int_{V} (\nabla \hat{\Psi}) \cdot (\nabla \phi_{i}) dV \Big]$$
  
$$= -D' \int_{\mathcal{N}} \phi_{i} \nabla \hat{\Psi} \cdot d\vec{s} + D' \int_{V} (\nabla \hat{\Psi}) \cdot (\nabla \phi)_{i} dV$$
(2.8.7-5)

と書ける。ここで、重み関数として粒境界  $\partial V$ 上で $\phi_j = 0$ になるもののみを選べば、すなわち粒界 上では FP ガス原子濃度は 0 であるという境界条件を適用すれば、上式の表面積分項は消えて、 (2.8.7-4)式は、

$$\int_{V} \left( \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} - \beta \right) \phi_{i} dv + D' \int_{V} \left( \nabla \hat{\Psi} \right) \cdot \left( \nabla \phi_{i} \right) dv = 0$$
(2.8.7-6)

となる。

次に、この(2.8.7-6)式で、ある有限要素  $V_e$ において、 $\hat{\Psi} = \phi_j \Psi_j$ とおく。ここで、 $\Psi_j$ は有限 要素 $V_e$ の節点(3点)の FP ガス原子の濃度で、 $\phi_j$ は要素内の補間関数である。本来先に定義し た $\phi_i$ は任意の関数属であったが、この $\phi_i$ を上記のように補間関数 $\phi_j$ と同じ関数と定義しても (2.8.7-3)式からの導出はそのまま成り立つ。そこで、関数 $\phi_i = \phi_j$ として同じ関数として扱う。

すると、(2.8.7-6)式は FP ガス原子の生成項βは要素内で一定であるので、

$$\int_{V} \left( \phi_{j} \frac{\partial \Psi_{j}}{\partial t} - \beta \right) \phi_{i} dV + D' \int_{V} \left( \nabla \phi_{j} \Psi_{j} \right) \cdot \left( \nabla \phi_{i} \right) dV = 0$$
(2.8.7-7)

と書ける。(2.8.7-7)式において、節点濃度 $\Psi_i$ 、生成項 $\beta$ は体積積分の外に出せるので、

$$\int_{V} \phi_{j} \phi_{i} dV \cdot \frac{\partial \Psi_{j}}{\partial t} - \int_{V} \phi_{i} dV \cdot \beta + D' \int_{V} \nabla \phi_{j} \cdot \nabla \phi_{i} dV \cdot \Psi_{j} = 0 \qquad (2.8.7-8)$$

となる。したがって、ある要素 $V_e$ について (2.8.7-9)式とその次の 3 式が導出される。すなわち、 有限要素法では、(2.8.7-7)式を以下のように有限要素 ((2.8.7-9)式の $\Sigma$ の中) に分割する。

$$\sum_{j} \left( \dot{\Psi}_{j} E_{ji} + D' \Psi_{j} A_{ji} \right) - \beta H_{i} = 0$$
(2.8.7-9)

となる。ここで

$$E_{ji} = \int_{V_e} \phi_j \phi_i dV$$

$$A_{ji} = \int_{V_e} \frac{\partial \phi_j}{\partial r} \frac{\partial \phi_i}{\partial r} dV$$

$$H_i = \int_{V_e} \phi_i dV$$
(2.8.7-10)

である。

次に、この体系の有限要素を二次要素とし、基本関数 $\phi_i$ として、次の二次関数を用いる。

$$\phi_{1}(\xi) = -\frac{1}{2}\xi(1-\xi)$$

$$\phi_{2}(\xi) = 1-\xi^{2}$$

$$\phi_{3}(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1+\xi)$$
(2.8.7-11)

く有限要素を導入する場合、座標値をそのまま用いると取り扱いが不便なので、後の式の展開が便利であるように、実際の要素区間を-1~1の区間に変換して取り扱う。二次要素では、要素内に3点の節点を用いる。この相対座標を上では、ξ=-1,

0,1の点が節点である。このとき、要素内の任意な点の示量変数(この場合は FP

 ガス原子濃度)の値は近似関数を用いて与えられ、これらの値は節点での値から

 決定できる。すなわち、節点での値を保証する近似関数でなければならない。

 (2.8.7-11)式が二次要素での基本関数(補間関数)であるが、各節点での値は連続

 性を担保する必要があるので、

 
$$\phi_1(\xi) = -\frac{1}{2}\xi(1-\xi)$$
は、 $\xi = -1$ で1、 $\xi = 0, 1$ で0、

  $\phi_2(\xi) = 1 - \xi^2$ は、 $\xi = 0$ で1、 $\xi = -1, 1$ で0、

  $\phi_3(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1+\xi)$ は、 $\xi = 1$ で1、 $\xi = -1, 0$ で0になる。

したがって、要素内の基本関数(補間関数=粒内ガス原子濃度の半径方向プロファイル)は、  

$$\Psi(\xi) = (-\frac{1}{2}\xi(1-\xi))\Psi_1 + (1-\xi^2)\Psi_2 + (\frac{1}{2}\xi(1+\xi))\Psi_3$$
 (2.8.7-12)

であり、

$$\Psi(-1) = \Psi_1, \quad \Psi(0) = \Psi_2, \quad \Psi(1) = \Psi_3$$
 (2.8.7-13)

が成り立つ。



図 2.8.4 球体で近似した結晶粒の有限要素における FP ガス原子の濃度 プロファイル

図 2.8.4 では、結晶粒中の(2.8.7-11)式を赤い破線で、(2.8.7-13)式を赤い実線で模式的に示す。 次に(2.8.7-10)式中での*E<sub>ji</sub>, A<sub>ji</sub>, H<sub>i</sub>*は、要素 *k* (中点座標を *R<sub>k</sub>*, 要素幅の 1/2 を Δ*R* とする) の場合について求めると、

$$E_{ji} = \int_{\gamma_{e}} \phi_{j} \phi_{i} dV = 4\pi \int_{R_{k} - \Delta R}^{R_{k} + \Delta R} \phi_{j} \phi_{i} r^{2} dr$$

$$= 4\pi \Delta R \int_{-1}^{1} \phi_{j} \phi_{i} (R_{k} + \Delta R \xi)^{2} d\xi$$

$$A_{ji} = \int_{\gamma_{e}} \frac{\partial \phi_{j}}{\partial r} \frac{\partial \phi_{i}}{\partial r} dV = 4\pi \int_{R_{k} - \Delta R}^{R_{k} + \Delta R} \frac{\partial \phi_{j}}{\partial r} \frac{\partial \phi_{i}}{\partial r} r^{2} dr$$

$$= \frac{4\pi}{\Delta R} \int_{-1}^{1} \frac{\partial \phi_{j}}{\partial \xi} \frac{\partial \phi_{i}}{\partial \xi} (R_{k} + \Delta R \xi)^{2} d\xi$$
(2.8.7-14)
$$(2.8.7-15)$$

$$H_{i} = \int_{V_{e}} \phi_{i} dV = 4\pi \int_{R_{k} - \Delta R}^{R_{k} + \Delta R} \phi_{i} r^{2} dr = 4\pi \Delta R \int_{-1}^{1} \phi_{i} \left( R_{k} + \Delta R \xi \right)^{2} d\xi \quad (2.8.7-16)$$

である。

次に、(2.8.7-10)式を陰解法形式で表すと、

$$\sum_{j} \left\{ \frac{\Psi_{j}^{n+1} - \Psi_{j}^{n}}{\Delta t} E_{ji} + D^{*} \left( (1 - \theta) \Psi_{j}^{n} + \theta \Psi_{j}^{n+1} \right) A_{ji} \right\} - \beta^{*} H_{i} = 0 \qquad (2.8.7-17)$$

ここで、

$$D^* = (1 - \theta)D'^n + \theta D'^{n+1}$$
  

$$\beta' = (1 - \theta)\beta^n + \theta\beta^{n+1}$$
(2.8.7-18)

ここで陰解法を使う理由は、次の通りである。拡散方程式は FP ガス放出モデルの中 にあり、FP ガス放出モデルは温度計算収束計算中にある。このため、温度は第 n ステッ プ(前段)の T<sup>n</sup>、第 n+1 ステップ(現段)の T<sup>n+1</sup> があり、この収束計算中に陰解法を 用いて現段の情報を持ち込んでいる。また、FP ガス原子濃度についても  $\Psi_j^n$ 、 $\Psi_j^{n+1}$  が あるが、陰解法を使えば、例えば $\theta$ =1 とすることで、 $\Psi_j^{n+1}$ による濃度勾配によって FP ガス原子は拡散する。(2.8.7-17)式の拡散方程式は、マトリックス演算で $\theta$ =1 とすること で、未知数  $\Psi_j^{n+1}$ を基にした濃度勾配( $\Psi_j$ についての陰解法)で、 $\Psi_j^{n+1}$ を求めること ができる。陰解法の導入することは、タイムステップ幅を大きく取れるメリットがあ り、計算時間を節約することができる。

(2.8.7-17)式について未知数と既知数を整理すれば、

$$\sum_{j} \left( \frac{1}{\Delta t} E_{ji} + D^* \theta A_{ji} \right) \Psi_{j}^{n+1} = \sum_{j} \left( \frac{1}{\Delta t} E_{ji} - D^* (1 - \theta) A_{ji} \right) \Psi_{j}^{n} + \beta^* H_i$$
(2.8.7-19)

したがって要素マトクリス $W_{ii}$ ,要素ベクトル $Q_i$ は

$$W_{ij} = \frac{1}{\Delta k} E_{ji} + D^* \theta A_{ji}$$
(2.8.7-20)

$$Q_{i} = \sum_{j} \left( \frac{1}{\Delta t} E_{ji} - D^{*} (1 - \theta) A_{ji} \right) \Psi_{j}^{n} + \beta^{*} H_{i}$$
(2.8.7-21)

である。

全要素について重ね合わせ、粒界では濃度ゼロという仮定にしたがい、結晶粒表面における  $\Psi^{n+1} = 0$ の境界条件を与えて

$$\left[W_{ij}\right]\left\{\Psi_{j}^{n+1}\right\} = \left\{Q_{i}\right\}$$
(2.8.7-22)

の連立方程式を解けば、粒内のガス原子濃度 $\left\{ \Psi_{j}^{n+1} \right\}$ を求めることができる。

## 2.8.8 結晶粒と粒界

これまで説明してきた拡散計算、および以下で議論す る「粒界蓄積量 n<sup>n</sup>」などを決める論理は、<u>1 個の結晶</u> <u>粒があたかも単独で空間に存在して、その表面を「結晶</u> <u>粒界」が包んでいるような状態を想定</u>していることに注 意しなければならない。実際にはペレットは多結晶であ り、ペレットのリング要素も非常に多くの結晶粒の集合 である。結晶粒界は隣接する 2 個の結晶粒によって共有 されているので、粒界における FP ガス原子の濃度や量 を考える場合は、こうした現実の状態を考慮する必要が ある。

ここで一つの結晶粒に着目すると、粒界のガス原子濃 度は隣接する 2 個の結晶粒からの拡散流束によって増 加するので、粒界に蓄積する実際の FP ガス原子濃度は、 拡散計算の結果の 2 倍に相当する。

今、右図 2.8.5 において結晶粒を二次元の六角形で表 現すると、中央の結晶粒 A (半径 a)の部分粒界 PBの 面積は全粒界の 1/6 である。この PB には隣接する結晶 粒 B からの拡散流束が A からの拡散流束と同様に流入



結晶粒界模式図

する。残りの 5/6 の粒界においても同様であるので、結局、粒界バブルを含む粒界に蓄積する実際の FP ガス原子の濃度は、拡散計算の結果の2倍に相当する。

図 2.8.5

しかし以下の 2.8.9 項で説明する粒界 FP ガスインベントリ(2.8.9-1) 式では、ペレットの一つの

リング要素に含まれる結晶粒個数に、各結晶粒から粒界に移行したガス原子の量を掛けているので、2倍する必要はない。また 2.8.10項で説明する放出ガス量の計算ではリング要素当たりの結 晶粒の個数を考慮している。

さらに 2.8.13 項で説明するガス放出の限界濃度 N<sub>f</sub><sup>max</sup> は、単に、固相と圧力平衡にある粒界バブルの代表としての1個のバブルにたまったガスに気体の状態方程式を適用して導いたものであるので、これ自体は変更する必要はない。

すなわち、FEMAXIコードの計算では、各リング要素における結晶粒と粒界を、1個の結晶粒 とそれを取り巻く粒界に代表させて考えているので、実際の粒界のように「2倍に相当する量」 などを考える必要はない。

## 2.8.9 粒界へ移動する FP ガス原子の量

タイムステップ $\Delta t$ 内に拡散により、<u>1</u>個の結晶粒内部からその粒界へ</u>移動するガス量 $\Delta n_f^{n+1}$ (atoms)は、粒内での FP ガス量の変化を基準として計算する。すなわち、

- ・タイムステップ n での粒内 FP ガス総量: $\bar{\Psi}_{total}^{n}$  (atoms)、
- ・ $\Delta t$  間での FP ガス生成量:  $\int \beta \Delta t dV$  (atoms)
- ・ $\Delta t$ 時間が進んだ (タイムステップ n+1) 後の粒内 FP ガス総量:  $\overline{\Psi}_{total}^{n+1}$  (atoms)、

として与えると、

$$\Delta n_f^{n+1} = \overline{\Psi}_{total}^n + \int_V \beta \Delta t dV - \overline{\Psi}_{total}^{n+1}$$
(2.8.9-1)

として与えられる。ただし $\overline{\Psi}_{total}^{n}$ および $\overline{\Psi}_{total}^{n+1}$ は、粒内要素数が3要素のとき、2.8.7項の結果を用いて次式によって求める。

$$\overline{\Psi}_{total}^{k} = \sum_{e=1}^{3} \int_{V_{e}} 4\pi r^{2} \widehat{\Psi}^{k}(r) dr$$

$$\widehat{\Psi}^{k}(r) = \sum_{j=1}^{3} \Psi_{j}^{k} \phi_{j}(r)$$

$$k = n, \quad n+1$$
(2.8.9-2)

ただし、粒成長がある場合は、粒成長以前の粒半径を $a_n$ 、粒成長後の粒半径を $a_{n+1}$ とするとき [次の 2.8.10 項参照]、 $\Delta t$ 内で粒界へ移動する FP ガス量 $\Delta n_f^{n+1}$ は、粒半径 $a_{n+1}$ を基準にして、 実効的な FP ガス生成率  $\tilde{\beta}$ を用いて( $\tilde{\beta}$  は後の(2.8.12-2)式で定義する)

・ タイムステップ n での粒内 FP ガス量は、
(粒半径
$$a_{n+1}$$
を基準にして)  $\left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \cdot \overline{\Psi}_{total}^{n+1}$  (2.8.9-3)

・ 
$$\Delta t$$
 間での FP ガス生成量は  $\tilde{\beta} \cdot \Delta t \left(\frac{4}{3}\pi a_{n+1}^3\right) \left(=\int_V \tilde{\beta} \Delta t dV\right)$  (2.8.9-4)

であるから、

$$\Delta n_f^{n+1} = \left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \overline{\Psi}_{total}^n + \int_V \tilde{\beta} \Delta t dV - \overline{\Psi}_{total}^{n+1}$$
(2.8.9-5)

で与えられる。

# 2.8.10 粒界に留まる FP ガス量 G<sub>inv</sub>

これまでのガス原子拡散計算では、粒内ガスバブルを除いて、ガス原子は原子状態にあると想定していたが、結晶粒界では気相状態を想定する。

タイムステップnにおいて、(ある1リング要素内の)ペレット単位体積中の全結晶粒界に留まっている全 FP ガス量=粒界インベントリ密度*G<sub>inv</sub>をそのリング*要素内の単位体積中の全結晶粒の個数で割った値を考える。

体積 $V_{ring}^{i}$ のリング要素 i 内の全結晶粒界を考え、ペレット単位体積は $N_{grain}^{i}$  個の半径 $a_{g}$ の結晶 粒から成るとすると、

$$N_{grain}^{i} = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi a_{g}^{3}}$$
(2.8.10-1)

である。

以下に説明する粒界蓄積量 n<sup>n</sup><sub>f</sub> (あるいは n<sup>n+1</sup><sub>f</sub>)の決定には、1 個の結晶粒を囲む粒界における、 結晶粒内からの FP ガス原子の原子状態としての移動(拡散)と外部への気相状態での移動(放 出)を想定している。したがって、

$$G_{inv} = n_f^n N_{grain}^i$$
(2.8.10-2)

の関係が成り立っている。

 $G_{inv}$ に各リング要素の体積をかけたものがそのリング要素におけるインベントリ値となる。

(1) 平衡論

 $\Delta t$ 時間の後の粒界滞留 FP ガス量(=結晶粒1個あたりの粒界インベントリ) は $n_f^n + \Delta n_f^{n+1}$ と

 $n_f^{\max}$ の小さい方の値となる。すなわち、

$$n_f^{n+1} = \min(n_f^n + \Delta n_f^{n+1}, n_f^{\max, n+1})$$
(2.8.10-3)

ここで $n_f^{\max}$ は、粒界に留まるガス量の最大値で、粒界での単位面積あたりのガス原子数の飽和 値を $N_f^{\max}$  (atoms/cm<sup>2</sup>)とするとき、

$$n_f^{\max,n+1} = 4\pi a_{n+1}^2 \cdot N_f^{\max,n+1} \qquad \text{(atoms)} \tag{2.8.10-4}$$

で与えられる。すなわち、本モデルでは粒界の FP ガス量が $n_f^{\max}$  ( $N_f^{\max}$ )を越えたとき、越えた 分の FP ガスが直ちにペレット外へ放出されると仮定している。放出が生じた場合の(結晶粒1 個あたりの)粒界インベントリは $n_f^{\max}$ である。

粒成長がある場合には [次の 2.8.11 項参照] 、タイムステップ n で粒界に留まっている FP ガス量は

$$\left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \cdot n_f^n \tag{2.8.10-5}$$

であり、 $\Delta t$ 内に粒界へ移動する FP ガス量を $\Delta n_f^{n+1}$ として[前項参照]、 $\Delta t$ 時間の後の粒界滞留 FP ガス量は

$$n_{f}^{n+1} = \min\left(\left(\frac{a_{n+1}}{a_{n}}\right)^{3} \cdot n_{f}^{n} + \Delta n_{f}^{n+1}, \quad n_{f}^{\max,n+1}\right)$$
(2.8.10-6)

で与えられる。

#### (2) 速度論

 $\Delta t$ 時間の後の粒界滞留 FP ガス量は $n_f^n + \Delta n_f^{n+1}$ から放出された量 $n_f^{rls}$ を引いた値となる。すなわちこれは放出が生じた場合の(結晶粒1個あたりの)粒界インベントリであり、

$$n_f^{n+1} = n_f^n + \Delta n_f^{n+1} - n_f^{rls,n+1}$$
(2.8.10-7)

となる。ここで

$$n_f^{rls,n+1} = \dot{n}_{release} \times \Delta t \tag{2.8.10-8}$$

 $\dot{n}_{release}$ はガス放出速度であり 2.9 章で説明される。リング要素からの全放出量は、

$$N_{grain}^{i} \times n_{f}^{rls,n+1}$$
(2.8.10-9)

で与えられる。

粒成長がある場合には [次の 2.8.11 項参照] 、タイムステップ n で粒界に留まっている FP ガス量は

$$\left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \cdot n_f^n \tag{2.8.10-10}$$

であり、 $\Delta t$ 内に粒界へ移動する FP ガス量を $\Delta n_f^{n+1}$ として[前項参照]、 $\Delta t$ 時間の後の粒界滞留 FP ガス量は

$$n_f^{n+1} = \left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \cdot n_f^n + \Delta n_f^{n+1} - n_f^{rls,n+1}$$
(2.8.10-11)

で与えられる。

# 2.8.11 放出されるガス量

(1) 平衡論

 $\Delta t$ 内でペレット外に放出される(結晶粒一個当たりの) FP ガス量を $\Delta n_r^{n+1}$ (atoms)とすると、仮定に基づき、粒成長がないとき、

$$\Delta n_r^{n+1} = 0 \qquad \left( n_f^n + \Delta n_f^{n+1} \le n_f^{\max, n+1} \right) \qquad (2.8.11-1)$$

$$\Delta n_r^{n+1} = n_f^n + \Delta n_f^{n+1} - n_f^{\max, n+1} \left( n_f^n + \Delta n_f^{n+1} > n_f^{\max, n+1} \right)$$
(2.8.11-2)

である。また粒成長があるときは [次項参照]、

$$\Delta n_r^{n+1} = 0 \qquad \left( \left( \frac{a_{n+1}}{a_n} \right)^3 \cdot n_f^n + \Delta n_f^{n+1} \le n_f^{\max, n+1} \right) \tag{2.8.11-3}$$

$$\Delta n_r^{n+1} = \left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \cdot n_f^n + \Delta n_f^{n+1} - n_f^{\max, n+1} \qquad \left(\left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \cdot n_f^n + \Delta n_f^{n+1} > n_f^{\max, n+1}\right)$$
(2.8.11-4)

である。

また  $\Delta t$  間に放出したガスによる粒界ガスの濃度減少量  $\Delta N_r^{n+1}$  (atoms/cm<sup>3</sup>)は

$$\Delta N_r^{n+1} = \frac{\Delta n_r^{n+1}}{\pi a_{n+1}^2}$$
(2.8.11-5)

で与えられる。

リング要素からの全放出量は、

$$N_{grain}^{i} \times \Delta n_{r}^{n+1} \tag{2.8.11-6}$$

で与えられる。

## (2) 速度論

前項 2.8.10 参照。

#### (3) FP ガス放出率 (Fission gas release rate; FGR)

第1ステップから第nステップまでにΔt内で結晶粒1個当たりの、ペレット外に放出されるガスの総量は

$$\sum_{k=1}^{n} \Delta n_{r}^{k} \tag{2.8.11-7}$$

であり、ガス放出率 FGR は第nステップにおける燃焼度に対応した(結晶粒一個当たりの) 全 FP ガス原子生成量を FPG<sup>n</sup><sub>total</sub> とすれば、

$$FGR = \frac{\sum_{k=1}^{n} \Delta n_r^k}{FPG_{total}^n}$$
(2.8.11-8)

である。

# 2.8.12 粒成長に伴う粒界へのガスの掃き出し

## (1) 平衡論

粒成長に伴い、粒内ガスは粒界へ掃き出される。粒界へ掃き出されるガスの割合 fg は次式で表される。

$$f_g = \left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 - 1$$
 (2.8.12-1)

ここで、

 $a_{n+1}$ : 粒成長後の結晶粒半径 (cm)

 $a_n$ : 粒成長前の結晶粒半径 (cm)

である。

$$\begin{bmatrix} Namelist input FGG \\ f_g = f_g \times FGG \\ o$$
ように調整される。(Default=1.0)

図 2.8.6 に粒成長の概念図を示す。図中の斜線部に相当する部分のガスが、粒成長に伴い粒界 へ掃き出される。



図 2.8.6 粒成長概念図

粒成長モデルとしては、以下の Itoh らのモデル<sup>(2.30)</sup>を(Ainscough モデル<sup>(2.31)</sup>の修正式として) 標準的に用いる。

$$\frac{da}{dt} = K \left( \frac{1}{a} - \frac{1 + N_f / N_f^{\text{max}}}{a_m} \right) \quad (\mu \text{m/h}) , \qquad (2.8.12-2)$$

$$K = 5.24 \times 10^7 \exp\left(-2.67 \times 10^5 / RT\right) (\mu \text{m}^2/\text{h}), \\
a : 現ステップでの粒径(\mu m), \\
a_m : 最大限界粒径(= 2.23 \times 10^3 \exp(-7620 / T)) (\mu m), \\
R : ガス定数 (= 8.314 J/mol/K) , \\
N_f : 粒界でのガス原子密度(atoms/cm2), \\
N_f^{\text{max}} : 粒界でのガス原子密度の飽和値(atoms/cm2)$$



Namelist input IGRAIN 粒成長モデルは IGRAIN により次のように選択できる。 IGRAIN=0:Itoh モデル(Default)、=1:Ainscough モデル、=2:MacEwan モデル、 =3:Lyons モデル、=4:MATPRO-09 モデル

粒内要素は最大5要素まで構成され、最外層要素は境界層として再溶解を考慮するための特別

な要素とする。また、粒成長が起こった場合には、粒内の球殻メッシュを切り直す。

境界層幅を2Δ*R*とすると、第1層、第2層の要素 内のノードの座標*r*は、

$$r^{n+1} = \frac{a_{n+1} - 2\Delta R}{a_n - 2\Delta R} r^n$$
(2.8.12-3)

ノード座標は、それぞれ  $a_{n+1} - 2\Delta R$ 、 $a_{n+1} - \Delta R$ 、 $a_{n+1}$ として与える。



ノード座標は、それぞれ  $a_{n+1} - 2\Delta R$ 、 図 2.8.7 ペレット結晶粒内有限要素メッシュ

 Namelist input NODEG, RREL
 粒内要素数は NODEG により指定できる。

 標準値は 3、最大値は 5 である。最外層以外、すなわち NODEG-1 の要素に対する要素
 幅は RREL によりその比を指定する。標準値は 5, 1,である。
 これは第 1 層と第 2 層の

 要素幅の比が 5:1 であることを意味する。

現在のモデルでは、粒内要素は図と同様に3要素に切っている。また、境界層でのみ 再溶解を考慮して生成項βの値を変えている。また、この要素は「3節点二次要素」 である。境界条件として、粒界での FP ガス原子濃度はゼロと見なしている。

このときリメッシュされた新しい座標での FP ガス原子濃度 Ψ については、

$$\Psi^{n+1,0}(r) = \Psi^{n}(r) \qquad (0 \le r \le a_{n}) \qquad (2.8.12-4)$$
$$\Psi^{n+1,0}(r) = 0 \qquad (a^{n} \le r \le a_{n+1})$$

とする。ここで、

 $\Psi^{n}(r)$ : 粒成長前の FP ガス原子濃度分布 (atoms/cm<sup>3</sup>)

 $\Psi^{n+1,0}$ : 粒成長後の FP ガス原子濃度の初期分布 (atoms/cm<sup>3</sup>)

である。すなわち、粒成長による粒界への掃き出しは瞬時に起こると仮定する。

次に、粒界に滞留している FP ガスの、粒界単位面積あたりの FP ガス原子濃度  $N_f$  (atoms/cm<sup>2</sup>) を求める。これは、放出しきい値および粒界ガスインベントリを求めるために必要である。

(2.8.10-3)式を再記すると、  $n_f^{n+1} = \min(n_f^n + \Delta n_f^{n+1}, n_f^{\max, n+1})$ 

である。ここで、粒成長がない場合は $a_n = a_{n+1}$ より

$$N_{f}^{n+1} = \min\left(\frac{n_{f}^{n} + \Delta n_{f}^{n+1}}{4\pi a_{n+1}^{2}}, N_{f}^{\max, n+1}\right) (\text{atoms/cm}^{2})$$

$$= \min\left(N_{f}^{n} + \Delta N_{f}^{n+1}, N_{f}^{\max, n+1}\right)$$
(2.8.12-5)

となる。

しかし、本項では粒成長を考慮しているので

$$N_{f}^{n+1} = \min\left(\frac{\left(\frac{a_{n+1}}{a_{n}}\right)^{3} \cdot n_{f}^{n} + \Delta n_{f}^{n+1}}{4\pi a_{n+1}^{2}}, N_{f}^{\max, n+1}\right)$$

$$= \min\left(\frac{\left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \cdot 4\pi a_n^2 N_f^n + \Delta n_f^{n+1}}{4\pi a_{n+1}^2}, N_f^{\max, n+1}\right)$$
(2.8.12-6)

$$= \min\left(\frac{a_{n+1}}{a_n} \cdot N_f^n + \Delta N_f^{n+1}, N_f^{\max, n+1}\right)$$

$$\geq \tan \delta_{\circ} \quad \tan \delta_{\circ} \quad n_f^n = \frac{n_f^n}{4\pi a_n^2}, \quad \Delta N_f^{n+1} = \frac{\Delta n_f^{n+1}}{4\pi a_{n+1}^2} \quad \dim \delta_{\circ}$$

(2) 速度論

粒成長を考慮した場合(粒成長がない場合は $a_n = a_{n+1}$ とおく):

$$N_{f}^{n+1} = \frac{\left(\frac{a_{n+1}}{a_{n}}\right)^{3} \cdot n_{f}^{n} + \Delta n_{f}^{n+1}}{4\pi a_{n+1}^{2}}$$

$$= \frac{\left(\frac{a_{n+1}}{a_{n}}\right)^{3} \cdot 4\pi a_{n}^{2} N_{f}^{n} + \Delta n_{f}^{n+1}}{4\pi a_{n+1}^{2}}$$

$$= \frac{a_{n+1}}{a_{n}} \cdot N_{f}^{n} + \Delta N_{f}^{n+1}$$
(2.8.12-7)

となる。ただし、
$$N_{f}^{n} = \frac{n_{f}^{n}}{4\pi a_{n}^{2}}$$
、 $\Delta N_{f}^{n+1} = \frac{\Delta n_{f}^{n+1}}{4\pi a_{n+1}^{2}}$ である。

(3) N<sup>n+1</sup>の数値計算方法

ここで、粒成長が起こった時のタイムステップ n→n+1 における変化  $N_f^n \to N_f^{n+1}$ の計算方法を 説明する。 $N_f^{n+1}$ を決定するには、粒成長期間  $\Delta t$  における粒内から表面への輸送と再溶解を考慮 する必要があるので、繰り返し計算が必要となる。この繰り返し計算の初期値を  $N_f^{n+1,0}$ とすると、 次式の関係が成り立つ。

$$\left(\frac{a_{n+1}}{a_n}\right)^3 \left(\bar{\Psi}_{total}^n + 4\pi a_n^2 \cdot N_f^n\right) = \bar{\Psi}_{total}^n + 4\pi a_{n+1}^2 \cdot N_f^{n+1,0}$$
(2.8.12-8)

ここで、

 $\overline{\Psi}_{total}^{n}$ : 粒成長前の結晶粒内の FP ガス原子総数 (atoms)

である。(2.8.12-1)式を用い、(2.8.11-8)式を $N_f^{n+1,0}$ について解くと、

$$N_f^{n+1,0} = \frac{f_g \overline{\Psi}_{total}^n}{4\pi a_{n+1}^2} + \frac{a_{n+1}}{a_n} N_f^n$$
(2.8.12-9)

となる。ただし、(2.8.12-9)式右辺において、 $\frac{f_g \overline{\Psi}_{total}^n}{4\pi a_{n+1}^2}$ は粒成長による掃き出し分、 $N_f^n$ は、タイ

ムステップ開始時の結晶粒表面濃度である。

ここで、iを繰り返しのカウントとすると、

$$N_{f}^{n+1,i} = \frac{f_{g}\Psi_{total}^{n}}{4\pi a_{n+1}^{2}} + \frac{a_{n+1}}{a_{n}}N_{f}^{n} - D\frac{\partial\Psi}{\partial r}\Big|_{r=a_{n+1}} \cdot \Delta t - \int\beta^{*i}\Delta t dV$$
(2.8.12-10)

が成り立つ。(2.8.12-10)式の右辺第3項は、結晶粒の内部から外表面に到達した FP ガス原子の量、 第4項は再溶解によって結晶粒内に戻る量であり、 *β*<sup>"</sup>は以下の式で定義される再溶解率である。

$$\beta'^{i} = \frac{b}{2} \left\{ \left( 1 - \theta \right) N_{f}^{n} + \theta N_{f}^{n+1,i-1} \right\} \frac{1}{2\Delta R} \left( ADDF \right)$$
(2.8.12-11)

(2.8.12-11)式は次項でさらに説明する。

さて、(2.8.12-10)式において、右辺第1項と第2項は(2.8.12-9)式により既知である。

① (2.8.12-11)式で与えられる β"を用いて(2.8.4-11)式に代入し、式を解いて

 $\Psi^{n+1}(a_{n+1}), \Psi^{n+1}(a_{n+1} - \Delta r), \Psi^{n+1}(a_{n+1} - 2\Delta r)$ 

をそれぞれ求める。

② 次に、これらの値を用いて(2.8.12-10)式右辺の第3項、

$$-D\frac{\partial\Psi}{\partial r}\bigg|_{r=a_{n+1}}\cdot\Delta t \tag{2.8.12-12}$$

を決定する。

③ (2.8.112-11)および(2.8.12-12)式を(2.8.12-10)式に代入すれば、繰り返しのカウントが1
 進むので、N<sup>n+1,i</sup><sub>f</sub>が得られる。これにより(2.8.12-11)式のβ'を更新する。

以下、①~③の繰り返しである。この繰り返し計算において
$$\frac{\left|N_{f}^{n+1,i}-N_{f}^{n+1,i-1}\right|}{N_{f}^{n+1,i}} < \varepsilon$$

になれば収束したと見なすことができる。

ただし実際の計算では、(2.8.11-10)式と等価な  

$$N_{f}^{n+1} = \frac{a_{n+1}}{a_{n}} N_{f}^{n} + \frac{(1+f_{g})\overline{\Psi}_{total}^{n} - \overline{\Psi}_{total}^{n+1} + \int_{V} \beta \Delta t dv}{4\pi a_{n+1}^{2}} \qquad (2.8.12-13)$$
を用いて  $N_{f}^{n+1}$ を計算する。ここで、  
 $\overline{\Psi}_{total}^{n+1} : タイムステップ後の結晶粒内の FP ガス原子数 (atoms)$   
 $\beta \Delta t dv : タイムステップ間での、再溶解分を含まない FP ガス原子生成量$   
(atoms) である。ただし、 $\int_{V} dv = \frac{4}{3}\pi a_{n+1}^{3}$ である。

## 2.8.13 FPガスの再溶解

粒界から粒内への再溶解の取り扱いでは、粒界は隣り合った結晶粒を分離していることを考慮 する。2.8.8 項~2.8.10 項では、1 個の結晶粒が粒界に蓄積する FP ガス原子の量 $(n_f, N_f)$ を考 えた。2.8.8 項で説明したとおり、実際の粒界には隣接する 2 個の結晶粒からの拡散流束によっ て、粒界に蓄積する FP ガス原子の量は $(n_f, N_f)$ の 2 倍となる。しかし、粒界からの結晶粒内部 への再溶解は、2 個の隣接する結晶粒に対して同時に生じるので、1 個の結晶粒に対しては、粒 界にとどまっている単位面積当たりの FP ガス原子の量 $N_f$ に対して再溶解率を考えればよい。

すなわち、再溶解する量は

$$bN_{f} \cdot \text{ADDF}$$
 (atoms/cm<sup>2</sup>/s) (2.8.13-1)

ここで、  $\boldsymbol{b}$ : 再溶解率  $(10^{-6}/s)$ 

である。再溶解は粒界から粒内へ FP ガスが原子状態で移行するのであるが、粒内からみれば FP ガス原子が生成したのと同じである。このため、FP ガス原子が再溶解する厚みを境界層(200Å)とすれば、境界層におけるみかけの FP ガス原子生成率 β' を与えることで再溶解をモデル化できる。

そこで、β'を以下のように与える。

$$\beta' = \frac{b}{2} \{ (1 - \theta) N_f^n + \theta N_f^{n+1} \} \frac{1}{2\Delta R} (\text{ADDF}) \quad (\text{atoms/cm}^3/\text{s}) \quad (2.8.13-2)$$

したがって、(2.8.13-2)式中のβは境界層においては、

$$\beta = \beta + \beta' \tag{2.8.13-3}$$

として、 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ を仮想的 FP ガス原子生成率とする。

|調整パラメータ ADDF | 再溶解するガス原子の量は ADDF により調整できる。標準値は 9.0。

## 2.8.14 粒界 FP ガス原子濃度の飽和値(平衡論)

前記 2.8.1 放出機構の仮定(White+Tucker モデル)では、粒界の FP ガス原子数(粒界面積濃度) が飽和値を超えると、それまで孤立していた粒界バブルが連結し自由空間へのトンネルが形成さ れ、粒内より移動してくる追加のガス原子は直ちに自由空間に放出されると仮定した。すなわち、 2.8.1 節のモデルでは拡散方程式を解いているが、粒界ガスバブルの成長を直接計算はしていな い。また、粒界におけるバブル数密度の概念もない。しかし、粒界ガスバブル半径を含む定義式 によってガス放出が生じる threshold=飽和値(放出しきい値)を計算する。

この飽和値、すなわち粒界におけるガス原子濃度 $N_f^{\text{max}}$ の決定方法を次に説明する $^{(2.24)}$ 。

#### (1) 粒界ガスバブル半径 (平衡論、速度論に共通)

以下の議論において図 2.8.8 に示すように、 $r_f$  はレンズ状バブルの曲率を決める半径であり、 $r_b$  はレンズ状バブルの粒界面への正射影の円の半径である。すなわち、

$$r_b = r_f \sin \theta$$
 (2.8.14-1)  
 $b = c_f \sin \theta$  (2.8.14-1)  
 $c_b = c_f \sin \theta$  (2.8.14-1)  
 $c_$ 

図 2.8.8 粒界ガスバブルの球面半径と正射影半径

### (2) 粒界ガスの平均濃度と放出限界

バブルガスに気体の状態方程式を適用して

$$F \cdot P_{gas} V_{bubble} = m_1 kT \tag{2.8.14-2}$$

ここで*m*<sub>1</sub>は1個の結晶粒体系で計算されたガス原子の量である。すなわち、1個の結晶粒内部 からその粒界に拡散移行したガス原子の総量であり、バブルサイズはこの量がすべて仮想的な1 個のバブルに集中した状態に対応する。

ただし、van der Waals constant *B*を用いて理想気体からの修正係数 *F*を

$$F = \frac{1}{1 + \frac{P_{gas}B}{kT}}$$
 (2.8.14-3)

とおく。

で

バブルの体積は 
$$V_{bubble} = \frac{4}{3}\pi r_f^3 \cdot f_f(\theta)$$
 (2.8.14-4)

平衡論の仮定より 
$$P_{gas} = P_{ext} + \frac{2\gamma}{r_{e}}$$
(2.8.14-5)

またガスモル量  $m_1$ をバブル 1 個が粒界に占める面積で割って、バブル平均の粒界ガス原子密 度  $N_f$ を求めると

$$N_{f} = \frac{m_{1}}{\pi (r_{f} \sin \theta)^{2}}$$
$$= \frac{4r_{f} f(\theta)}{3kT \sin^{2} \theta} \left( P_{ext} + \frac{2\gamma}{r_{f}} \right) F$$
(2.8.14-6)

である。 粒界全面積当たりで考えたときの限界値 $N_f^{\max}$ は、 レンズ状バブルが 粒界を覆う割合を $f_b$ として

$$N_f^{\max} = N_f \cdot f_b \tag{2.8.14-7}$$

となる。(2.8.14-6)、(2.8.14-7)式から次式が得られる<sup>(2.24)</sup>。

$$N_{f}^{\max} = \frac{4r_{f}f_{f}(\theta)}{3kT\sin^{2}\theta}f_{b}\left\{\frac{2\gamma}{r_{f}} + P_{ext}\right\}F \qquad (\text{atoms/cm}^{2}) \qquad (2.8.14-8)$$

ここで  $N_f^{\max}$  : 粒界での単位面積あたりのガス原子数の飽和値 $\left(\operatorname{atoms/cm}^2\right)$ 

$$r_f$$
 : 粒界でのガスバブルの曲率半径(=0.5 µm)

 RF=5×10<sup>-5</sup>(cm) (default)

  $f_f(\theta)$ 
 : 球体積に対するレンズ状バブル体積比

  $f_f(\theta) = 1 - \frac{3}{2}\cos\theta + \frac{1}{2}\cos^3\theta$ 
 $\theta$ 
 : レンズ状バブル角(=50° as default)

  $k$ 
 : ボルツマン定数(=1.38×10<sup>-16</sup> erg/K)

  $T$ 
 : 温度(K)

  $\gamma$ 
 : 表面張力(=626 erg/cm<sup>2</sup>)<sup>(2.25)</sup>
 $f_b$ 
 : レンズ状バブルが粒界を覆う面積割合

 FBCOV=0.25 (default)

  $P_{ext}$ 
 : 外部からの圧力(dyne/cm<sup>2</sup>)

である。

すなわちここでは、粒界バブルの個数や実際の大きさを直接考えずに、粒界へ移行したガス原子の量のみをまず考え、ガス放出が生じる時に粒界に存在する(平均的)ガス原子濃度を(2.8.13-8) 式で定義している。Ref.(2.24)では $N_f^{\text{max}}$ の具体的な値を決めるパラメータ値として、 $r_f = 0.5 \mu m$ 、  $\theta = 50^\circ$ 、 $f_b = 0.25$ が示されているが、 $r_f = 0.5 \sim 1.0 \mu m$ 、 $f_b \cong 0.5$ 程度が PIE 観察などのデータから、より現実的と思われる。

入力パラメータ **OPORO**, **FBSAT**, **ALHOT FP** ガス放出モデルでは、放出に寄与する バブルは粒界ガスバブルなので常に外表面に通じているバブルの割合を **OPORO** で指定す る(default=0.0)。**FBSAT** は粒界ガスバブルの飽和値に対する拡大係数である(default=1.0)。

## 2.8.15 FP ガス原子の粒内拡散定数

#### (1) 拡散定数モデル

FEMAXI-7 が内蔵する FP ガス原子粒内拡散定数モデルの詳細は 4 章に示す。また代表的モデルを用いて計算した拡散定数の温度依存性を図 2.8.9 に示す。



図 2.8.9 FP ガス原子の結晶粒内拡散定数の代表的モデルの比較

### (2) 拡散定数の温度特性フィッティング機能

FEMAXI-7 では、FP ガス原子拡散定数に以下のファクターFGDIF をかけて、温度依存性を調節 する機能を追加した。ただし、FGDIFX=0 (default)の場合はこのモデルは効かず、=1 の場合に有 効となる。

FGDIF = FGDIF0 - 
$$\frac{(FGDIF0-1) \cdot a}{\left(a+9 \cdot a \cdot \exp\left(-a\left(\frac{10000}{T}-7\right)\right)\right)}$$

a = 6 (default), T (Kelvin): Name-list parameter a = EFA=6 (default), FGDIF0=10 (default), FGDIFX =0 (default).

このファクターの温度依存性を図 2.8.10 に示す。この場合、高温部で拡散定数の値が増加する。 したがって、図 2.8.11 に示すように、Default 条件では Turnbull のオリジナルの曲線は約 1250K 以 上で 10 倍の値となる。ただしこれはあくまで一例であり、こうしたファクター値は実験データ による最適化が必要である。



図 2.8.10 FP ガス原子拡散定数にかかる温度依存性調整ファクターFGDIF の例



図 2.8.11 温度依存性調整ファクターFGDIF による、Turnbull model 高温部拡散定数の 増加の例

# 2.9 速度論モデル (IGASP=2)

速度論モデルについては 2.8.2.2 (3)項で部分的に説明したが、本章では本質的な説明を行う。

## 2.9.1 前提(平衡論モデルとの共通部分)

## (1) 拡散計算および粒内バブル計算

速度論においても、FP ガス原子の粒内から粒界への拡散、途中の粒内バブルによるトラップ、 粒内バブルの成長による実効的拡散速度への影響などは、平衡論と同じである。すなわち、粒 界バブルの成長とガス放出に関する部分のみに速度論を適用する。

#### (2) ガス放出の criteria

粒界バブルからのガス放出は、原理的には粒界バブルとペレット自由表面を結ぶガス通過経路の conductance と、自由空間と粒界バブル内のガスの圧力差、および温度に依存する。しかし、本モデルではガス conductance の定量的評価が困難であること、従来の「粒界バブルの連結 tunneling による放出」仮定がかなりよく現象を表現できていることを考慮して、この仮定の論理を用いる。

### 2.9.2 粒界バブル成長速度式

#### (1) 粒界バブル半径と数密度・粒界インベントリ

2.7.7 項の考察をふまえ、最初に、1個の結晶粒があたかも単独で空間に存在して、その表面 を「結晶粒界」が包んでいるような状態を想定する。またその粒界バブルは、1個の結晶粒の内 部からのガス原子の拡散移行によって生じたものと考える。

すると、1個の結晶粒の粒界バブル個数N<sub>bb</sub>は、以下の式で定義される。

$$N_{bb} = 4\pi a_g^2 N_{dens}$$
(2.9.2-1)

ここで $a_{g}$ は結晶粒半径、 $N_{dens}$ は粒界バブル数密度= $N_{dens}$ (cm<sup>-2</sup>)である。

 $N_{\rm dens}$ は name-list input parameter である。ここで

$$N_{dens} = 1/d \ \mu m^2$$
, d=1.83x1.83  $\ \mu m^2$ . (2.9.2-2)

とする。 すなわち、 **NDENS=**  $3x10^{11}$  m<sup>-2</sup> (default) である。またバブルが合体 したら、 $N_{bb}$  ( $N_{dens}$ )は合体個数 M に逆比例して減少する。

バブルの内圧 $P_b$ (MPa)は、バブル半径を $r_f$ (cm)として、状態方程式より

$$P_b \cdot \left(\frac{4}{3}\pi r_f^3 f(\theta) - mB\right) = mkT$$
(2.9.2-3)

となる。

ここで

m: 1個の結晶粒の内部から拡散によりその粒界へ移行してきたガス
 原子の、1バブル当たりの原子個数(atoms)、(2.9.2-24)式参照。

B: van der Waals 定数( $8.5 \times 10^{-23}$  cm<sup>3</sup>/atoms)

である。

また粒界カバー率は

$$f_b = \pi r_f^2 \sin^2 \theta \cdot N_{bb} / 4\pi r_g^2 = \frac{r_f^2}{4r_g^2} N_{bb} \sin^2 \theta \qquad (2.9.2-4)$$

$$\Xi \Xi \mathfrak{T} \qquad \qquad F_c = \frac{\pi r_f^2 \sin^2 \theta}{s^2} \qquad (2.9.2-5)$$

とすると、 
$$F_c = f_b$$
 (= **FBCOV**) (2.9.2-6)

である。粒界カバー率は(2.7.2-4)式で計算するので、FBCOVは、ガス放出のしきい値として効 く。

## (2) 粒界バブル半径を決定する速度式

粒界バブルの半径サイズは、Kogai らのモデル<sup>(2.32)</sup>にしたがい、下記の成長速度 $\frac{dr_f}{dt}$ を時間で 積分して決定する。すなわち、

$$r_f = \sum_{k=1}^n \frac{dr_f}{dt} \Delta t_k \tag{2.9.2-7}$$

$$\frac{dr_f}{dt} = \text{FRAD} \cdot \frac{s^2 \delta_{bd} D_{gb}^V \Omega}{4r_f^2 f(\theta) \text{kT}} \left( P_b - P_{ext} - \frac{2\gamma}{r_f} \right) \cdot k_f^2 \qquad (2.9.2-8)$$

ここで、  $P_{ext}$ : 計算しているセグメントのギャップガス圧力。プレナム圧に等しく置く。

## r<sub>f</sub>: 2.8.14 項 (1)粒界ガスバブル半径 で定義された半径

FRAD:調整係数

である。

また
$$rac{dr_f}{dt}$$
 <  $0$ 、すなわちバブル収縮の場合もある。

ここで、 $N_{dens}$ がバブル半径 $r_b$ の二乗に反比例すると仮定する<sup>(2.26)</sup>。すなわち、

$$N_{dens} = \frac{H}{r_{f}^{2}}$$
(2.9.2-10)

ただしHは比例常数である。また $r_f = 0.5$  µm のとき、 $N_{dens} = \frac{H}{r_f^2} = 3 \times 10^{11} (\text{m}^{-2})$ としてHを決定する。すなわち、H = 0.07465である。

Name-list parameter **HGBPR**=0.07465 (default)

① $r_f \ge \text{RF}$  (Default=0.5 µm)の場合:

合体しない場合は、 $N_{dens} = \frac{H}{r_{f}^{*2}}$   $r_{f}^{*} = \operatorname{RF}(\mu \mathbf{m})$ で、一定値を保つ。 合体する場合は、合体個数 M に反比例して減少する。

② $r_f < \text{RF}$ の場合

$$\begin{split} N_{bb} &= 4\pi a_g^2 N_{dens}, \ N_{dens} = \frac{H}{r_f^2}, \ m = \frac{G_{inv}}{N_{bb}} \text{ ordicity}, \ \textit{バブル個数} \ \textit{km} \ \textit{toghtargentarge$$

【注】  $\dot{r}_{f}$ の $r_{f}$ 依存性は極めて高いので、数値不安定が生じるおそれがある。これを回避 するため、計算では以下の近似的な方法を適用する。 ① (2.9.2-7)式:  $r_f = \sum_{i=1}^{n} \frac{dr_f}{dt} \Delta t_k$  の計算について、あるタイムステップで半径成長速度が 0 となるとき、すなわち $\frac{dr_f}{dt} = 0$ で平衡状態になるまで成長することを仮想する。これは  $P_{b} = P_{ext} + \frac{2\gamma}{r_{ext}} となるときの平衡サイズ \overline{r_{f}} を求めることと同値である。これは、$  $\left(P + \frac{2\gamma}{r_c}\right) \cdot \left(\frac{4\pi r_f^3}{3}f(\theta) - m^* \cdot b\right) = m^* kT$ (a) を満たす $r_f = \overline{r_f}$ を算出することにより得られる。ただし速度論が扱う現実は $r_f < \overline{r_f}$ である。 ②次に、現在の $r_f$ が $\bar{r}_f$ に成長するまでの時間を算出する。これには、(2.9.2-8)式を用いる。 算出手順として、まず、この $r_f \rightarrow \overline{r_f}$ となる変化の過程を100段階に等分割する。すなわち、  $r_f \rightarrow r_f + \frac{\overline{r_f} - r_f}{100}, \quad r_f + \frac{\overline{r_f} - r_f}{100} \rightarrow r_f + 2\frac{\overline{r_f} - r_f}{100}, \quad \square \square, \quad r_f + (100 - 1)\frac{\overline{r_f} - r_f}{100} \rightarrow \overline{r_f}$ (b) とする。次に、100分割した各区間において、それぞれの変化量が生じるまで、すなわち各 区間の成長量が実現するまでの時間を算出する。 例えば i 番目の区間の変化を $r_{f,i} 
ightarrow r_{f,i+1}$ と表記したとき、 $r_{f,i}$ から $r_{f,i+1}$ まで成長する時間は、 $r_f$ の変化速度が小さければ、(2.9.2-8) 式を用いて、 $r_{f,i} \rightarrow r_{f,i+1}$ の時間を $\Delta t_i$ として以下のように求めることができる。  $r_{f,i} - r_{f,i+1} = \frac{dr_{f,i}}{dt} \Delta t_i$ (c) ③この算出した時間 $\Delta t_i$ から得られる時間 $t_i = \sum_{i=1}^{l} \Delta t_j$ と、実際のタイムステップ増分 $\Delta t$ を 比べることにより以下のようにしてr,を決定する。  $r_{f} = r_{f_{i}} + (r_{f_{i+1}} - r_{f_{i}})(\Delta t - t_{i})/(t_{i+1} - t_{i})$ (d) すなわち、 $\Delta t$ は100分割した区間のi番目の時間 $t_i$ とi+1番目の時間 $t_{i+1}$ の間にあるので、 時間 $t_i \circ r_f \circ de r_{f,i}$ 、時間 $t_{i+1} \circ r_f \circ de r_{f,i+1}$ としたとき、 $r_f \circ d$ 、)式で決定する。 また、 $\Delta t > t_{100}$ なら、 $r_f = \bar{r}_f$ である。

③ $r_f$ の初期値を RINIT とする。バブルが微少な期間の「異常な値の数値計算」を回避するため、 Name-list parameter **RINIT** の default=0.01 $\mu$ m とする。

また、
$$\frac{dr_f}{dt} > 0$$
の場合、すなわち成長期では vacancy は粒界拡散であり、

## FRAD= **HP** (=1.0 default)

$$\frac{dr_f}{dt} \leq 0$$
の場合、すなわち収縮期では vacancy は格子拡散となるので

FRAD= HN (=0.2 default) とする。

ここで粒界バブルの vacancy sink 強度は<sup>(2.33)</sup>

Vacancy sink 强度: 
$$k_f^2 = \frac{8(1-\phi)}{s^2 \{(\phi-1)(3-\phi)-2\ln\phi\}}$$
 (2.9.2-11)

$$\phi = \left(\frac{r_f \sin\theta}{s}\right)^2 = \frac{r_f^2 \sin^2\theta}{s^2} = \frac{f_b}{\pi}$$
(2.9.2-12)

$$P_{ext} = \frac{\sigma_z + \sigma_\theta + \sigma_r}{3} \tag{2.9.2-13}$$

 $s^2$  (cm<sup>2</sup>) : bubble spacing area

(bubble1 個の、粒界上の、バブル自身を含めた縄張り領域面積)

$$N^{Dens} \cdot s^2 = 1 \tag{2.9.2-14}$$

$$s^{2} = \frac{\pi r_{f}^{2} \sin^{2} \theta}{f_{b}}$$
(2.9.2-15)

 $\delta_b$ : 粒界厚み  $5x10^{-10}$  m= $5x10^{-8}$  cm=0.5nm

= name-list parameter **GBTHIK** (default= $5 \times 10^{-10}$  m)

 $D_{gb}^{V}$ : vacancy の粒界拡散定数 (=Xe 原子と同一と近似する)

$$D_{gb}^{V} = 1.38 \times 10^{-6} \exp(-2.876 \times 10^{4} / T)$$
 (m<sup>2</sup>/s)

Ω: Xe の原子容 = 4.09x10<sup>-29</sup> m<sup>3</sup>

ただし、単位換算に注意する。ここで  $\phi = N_{dens}r_f^2\sin^2\theta = \frac{H}{r_f^2}r_f^2\sin^2\theta = H\sin^2\theta$ であるので、  $\phi = 0.07465 \times 0.58682 = 0.0438$ すなわち(2.9.2-11)式において、 $s^2 \cdot k_f^2$ の部分は 値が一定である。



図 2.9.1  $s^2 \cdot k_t^2 \mathcal{O} \phi$ 依存性

## (3) 粒界バブルからのガス放出速度

粒界バブルは、 $r_f = 0.5 \mu m$  (RF で指定;  $r_b = r_f \sin \theta$ )か $f_b = 0.25$  (FBCOV で指定)のどち らか一方の条件を満たしたとき、Van Uffelen モデル<sup>(2.34)</sup>にしたがい次式で表現する放出速 度をもって放出を開始する。

$$\dot{n}_{release} = \text{FGCND} \cdot \frac{V_c N_{bb} P_b^2 S_{gb}}{\eta kT}$$
(2.9.2-16)

$$\eta = 26.69 \frac{\sqrt{MT}}{\varsigma^2}$$
 : gas viscosity (2.9.2-17)

$$S = \pi a^4 (P_b^2 - P_{plenum}^2) / 16\eta^2 L$$
 (2.9.2-18)

 $S_{gb} = 4\pi a_g^2$  grain boundary surface area. (原理式)

**FGCND**: ガス放出コンダクタンスの調整係数(Default= $N_{bb} = 4\pi a_g^2 N_{dens}$ 

ここで $r_f = =$ **RF**のとき、Bubble density  ${}^*N_{dens} = 3 \times 10^{12} (\text{m}^{-2})$  でありバブルが RF に成長するまではバブル半径の二乗に反比例するとする。

さらに Xe の原子量: M=131 (Xe)  
固体球近似としての直径: 
$$\varsigma = 4.047 \times 10^{-10}$$
 (m)  
細管体積:  $V_c = V_c^0 f(F_c) g(\sigma_e)$ , (2.9.2-19)  
 $V_c^0 = \frac{2\pi a^4}{16L} = 10^{-12}$  (m<sup>3</sup>) (2.9.2-20)

$$f(F_{c}) = 1 - \exp[-(F_{c} / F_{c}^{0})^{NFC}] \quad \mathbf{NFC} = 10. : \text{default}$$
(2.9.2-21)  

$$F_{c}^{0} = 0.78 = \frac{\pi}{4}$$
  

$$g(\sigma_{e}) = 1 - \exp[-(\sigma_{e}^{0} / \sigma_{e})^{\text{NSC}}] \quad \mathbf{NSC} = 10. : \text{default}$$
(2.9.2-22)  

$$\sigma_{e}^{0} = 10 \text{ MPa} \quad \mathbf{SIG0} = 10. : \text{default}$$

.

ただし、バブルが合体したら基準のカバー率 $F_c^0$ は大きくなるはずである。すなわち、バブル 間隔が増加し、バブル連結 tunneling ができにくくなる。したがって、

バブルが1回合体した後は 
$$F_c^0 = 0.85$$
 FC1=0.85 default  
バブルが2回合体した後は  $F_c^0 = 0.9$  FC2=0.9 default  
バブルが3回合体した後は  $F_c^0 = 0.95$  FC3=0.95 default

バブルが4回合体した後は  $F_c^0 = 0.99$  **FC4=0.99** default とする。

これらの name-list parameter は暫定値であり、今後多くの要因との関係を考慮し、実測データにより最適化を図る必要がある。

#### (4) 粒界に蓄積するガス原子量

ここで*G<sub>inv</sub>をペレット単位体積に含まれる粒界の FP ガスインベントリ*(蓄積量)とし、バブ ル1個あたりのガス量を m(atoms)、結晶粒界のバブル個数を前項(1)と同様に*N<sub>bb</sub>*とする。2.8.8 項で説明したように、実際の結晶粒界は隣接する 2 個の結晶粒によって共有され、その粒界に 存在するガスバブルも共有されるが、ここでは<u>1個の結晶粒があたかも単独で空間に存在して、</u> <u>その表面を「結晶粒界」が包んでいるような状態</u>を想定する。

ペレット単位体積は $N^i_{grain}$  個の半径 $a_g$ の結晶粒から成るとすると、

$$G_{inv} = mN_{bb} \cdot N^i_{grain} \tag{2.9.2-23}$$

が成り立つ。したがってバブル1個あたりのガス量 m(atoms)は

$$m = \frac{G_{inv}}{N_{bb} \cdot N^i_{grain}}$$
(2.9.2-24)

である。したがって、 $G_{inv}$ に各リング要素の体積をかけたものがそのリング要素におけるインベントリ値となる。

### (5) 粒界に働く実効的応力

$$\sigma_e = \frac{\sigma_h s^2 + \pi r_f^2 \sin^2 \theta \cdot P_b}{s^2 - \pi r_f^2 \sin^2 \theta} = \frac{\sigma + F_c P_b}{1 - F_c}$$
(2.9.2-25)

$$\sigma_h = P_{ext} + P_{gap} \tag{2.9.2-26}$$

(↑この計算でのみ、通常とは符号が逆で、圧縮力が正値となる)

$$F_c = \frac{\pi r_f^2 \sin^2 \theta}{s^2} = \frac{f_b \pi r_f^2 \sin^2 \theta}{\pi r_f^2 \sin^2 \theta} = f_b \qquad (2.9.2-27)$$

# 2.10 バブル成長スエリング: 平衡論 (IGASP=0)

## 2.10.1 バブル成長

バブル成長によるスエリングを計算することを目的として、粒界ガス原子濃度の飽和値(ガス 放出 threshold)に達するまでの粒界ガスバブル成長を、温度、圧力、ガス原子数などから算出す る方法を説明する。

#### (1) 粒界ガスバブルの数密度 ― バブル個数密度の計算

1結晶粒界面積当たりのバブル個数密度 K を以下のように定義する。

各時点において、粒界ガスバブルの数密度を一定と仮定し、[外圧+表面張力圧]と平衡する粒 半径を計算する。

粒界ガスバブル半径 $r_f$ の粒界面への正射影半径は $r_f \sin \theta^{(2.24)}$ 、粒界全表面積は結晶粒の半径を $a_g$ として、 $4\pi a_g^2$ である(2.8.14(1)項参照)。飽和状態に至ってガス放出開始時のバブル個数密度を $K^*$ とすると、飽和状態では粒界面を覆うバブルの面積は $K^* \cdot \pi r_f^2 \sin^2 \theta$ である。これが全粒界表面積に占める割合は $f_h$ であるので、次式が成り立つ。

$$K^* \cdot \pi r_f^2 \sin^2 \theta = 4\pi a_g^2 \cdot f_b \tag{2.10.1-1}$$

すなわち、

$$K^* = \frac{4a_g^2 \cdot f_b}{r_f^2 \sin^2 \theta}$$
(2.10.1-2)

ここで、粒界上の個数 K は粒界上のガスバブル半径  $r_f$ の二乗に反比例すると仮定し<sup>(2.32)</sup>、  $r_f = 0.5 \mu m$ 、 $\theta = 50^{\circ}$ として(2.10.1-2)式を計算すると、

$$K^* = \frac{6.816f_b \cdot a_g^2}{r_f^2}$$
(2.10.1-3)

となる。すなわち、飽和時のバブル個数は(2.10.1-3)式で代表されるが、同時に、飽和以前の状態におけるバブルの個数は、(2.10.1-3)式に $a_g$ 、 $f_b$ および $r_f$ の値を代入すれば得られる。

すなわち、粒界バブルの個数は(2.10.1-3)式で表される。式(2.10.1-3)の K の値には、 $f_b$  =FBCOV をもちいて、 $N_f^{\text{max}}$  と同時に調整する。2.8.14 (2)項参照。

#### (2) 粒界バブルの成長

タイムステップ n において 1 個の結晶粒の粒界に留まっている FP ガス量を $n_f^n$  (atoms)とすれば、

$$n_f^n = K \cdot n^* \tag{2.10.1-4}$$

$$-116-$$

が成り立つ。n<sup>n</sup><sub>f</sub>は拡散方程式の解として(2.8.10-3)式で与えられる。n\*は1個のバブル内のFP ガ ス原子数(atoms)である。すなわち粒界のガス原子はすべて粒界バブルに集中していると近似する。 最初に生成した微小粒界ガスバブルに対し、拡散により FP ガス原子が流入し、バブル内ガス 圧力が高まり、バブル成長が始まる。ここで平衡論では 2.8.14(1)項に述べたように、バブルガス 圧 P<sub>gas</sub>は、常に [外圧+表面張力圧] に等しいと仮定する。すなわち、

$$P_{gas} = \frac{2\gamma}{r_f} + P_{ext} \tag{2.10.1-5}$$

である。

次に、成長中のバブルのガス圧力  $P_{gas}$  は以下の式において $r_f$ ,  $n^*$ , B, Tの値から決定する。

$$P_{gas} \cdot \left[\frac{4\pi r_f^3}{3} \cdot f_f(\theta) - n^* \cdot B\right] = n^* \cdot kT \qquad (2.10.1-6)$$

言い換えれば、(2.10.1-3)、(2.10.1-4)、(2.10.1-5)式及び(2.10.1-6)式を連立させて $P_{gas}$ と $r_{f}$ を求める。

(2.10.1-3)、(2.10.1-4)式より、

$$n^* = \frac{r_f^2 \cdot n_f^n}{6.816 f_b \cdot a_g^2}$$
(2.10.1-7)

これを(2.10.1-6)式に代入し(2.10.1-5)式を利用して

$$\left(\frac{2\gamma}{r_f} + P_{ext}\right) \cdot \left[\frac{4\pi r_f^3}{3} \cdot f_f(\theta) - \frac{r_f^2 \cdot n_f^n}{6.816f_b \cdot a_g^2} \cdot B\right] = \frac{r_f^2 \cdot n_f^n}{6.816f_b \cdot a_g^2} \cdot kT \qquad (2.10.1-8)$$

 $r_f^2$  で両辺を割り、 $Q = \frac{n_f^n}{6.816 f_b \cdot a_g^2}$ として

$$\left(\frac{2\gamma}{r_f} + P_{ext}\right) \cdot \left[\frac{4\pi r_f}{3} \cdot f_f(\theta) - QB\right] = QkT \qquad (2.10.1-9)$$

(2.10.1-6)式により、

$$\frac{4}{3}\pi f_f(\theta)P_{ext}\cdot r_f^2 + \left(\frac{4}{3}\pi\cdot 2\gamma\cdot f_f(\theta) - QBP_{ext} - QKT\right)r_f - 2\gamma QB = 0 \qquad (2.10.1-10)$$

この2次方程式を解いてrfを求める。

上式で、

$$a = \frac{4}{3}\pi f_f(\theta)P_{ext}, b = \frac{4}{3}\pi \cdot 2\gamma \cdot f_f(\theta) - QBP_{ext} - QKT, c = -2\gamma QB \quad (2.10.1-11)$$

とおくと、a>0, c<0 であるので2つの実根が求まる。

この大きい方の解が求めるrfであるので、

$$r_f = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{2.10.1-12}$$

となる。すると(2.10.1-5)式により P<sub>gas</sub>が決定される。

こうして  $r_f$  が 0.5µm (=RF で指定可能)に成長するまで平衡論的バブルサイズの計算を行い、 0.5µm に達した瞬間、後述する従来モデルのようにガス放出が生じるとする。ガス放出が生じた バブルにおいては、 $r_f$ =0.5µm 以上のバブル成長はない。

なお、本モデルは、IFSWEL=1と指定した場合に固体スエリング FEMAXI モデルと組み合わせて実行される。

(3) 粒成長がある場合 — 2.7.8 項~2.7.11 項と同様なので省略する —

(4) バブル成長の限界とガス放出 — 2.7.13 項と同様なので省略する —

## 2.10.2 バブルスエリング

- (1) 粒界バブルスエリング
- ①1 個の結晶粒の粒界バブル個数

(2.10.1-3)式を再記して、

$$K = \frac{6.816 f_b \cdot a_g^2}{r_f^2}$$
(2.10.1-3)

飽和時および飽和以前のバブル個数は(2.10.1-3)式に $a_g$ 、 $f_b$ および $r_f$ の値を代入すれば得られる。

#### ②バブル体積とスエリング

以上のようにして算出した平衡論バブルサイズ $r_f$ に対し、バブル体積 $V_{bb}$ と体積スエリング量を定義する。まず、1個のバブル体積は

$$V_{bb} = \frac{4\pi r_f^{3}}{3} \cdot f_f(\theta)$$
 (2.10.2-1)

であり、結晶粒体積 $V_{gr}$ は、 $a_g$ を結晶粒半径として

$$V_{gr} = \frac{4\pi a_g^3}{3} \tag{2.10.2-2}$$

となる。すると体積ガススエリング量は

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)^{Bubble} = \frac{V_{bb} \cdot K}{V_{gr}}$$
(2.10.2-3)

となる。ただし実際のペレットでは、粒界には隣接結晶粒からの拡散で生じたバブルがもう一個 存在するので、実際のペレットにおける「体積ガススエリング量」は (2.10.2-3)式の分子分母を それぞれ2倍することになる。したがって、(2.10.2-3)式は実際のペレットでも成り立つ。

#### (2) 粒内バブルスエリング

粒内バブルの数密度をN (bubbles/cm<sup>3</sup>)、粒内バブルの半径を $R_{intra}$  (cm)とすれば、(2.10.2-3) 式と同様に考えて、体積スエリング量は

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)^{Bubble} = \frac{4}{3}\pi R_{intra}^3 \cdot N$$
(2.10.2-4)

となる。

#### (3) ポロシティと密度変化

バブル成長によるポロシティ変化  $\Delta p$  と密度変化  $\Delta \rho$  は、全バブルスエリングと以下のような関係にある。

全バブルスエリング: 
$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{Total}^{Bubble} = \frac{4}{3}\pi R_{intra}^3 \cdot N + \frac{V_{bb} \cdot K}{V_{gr}}$$
 (2.10.2-5)

であり、

$$\Delta p = \left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{Total}^{Bubble}$$
(2.10.2-6)

$$\Delta \rho = -\Delta p \tag{2.10.2-7}$$

である。

# 2.11 バブル成長スエリングー速度論

バブル成長と、関連する粒界ガスバブルの数密度や粒界バブルの成長、ガス放出については、 既に 2.8 章で記述済みである。また粒成長がある場合についてのバブル成長やガス放出について は、2.8.12 節と同様なので省略する。

## 2.11.1 バブルの合体・粗大化

本モデルは速度論におけるバブル合体・粗大化に関する試行モデルであり、検証を経ていな い。ここではその基本的な仮定を述べるに留めておく。

#### (1) しきい条件

合体はペレットがあるしきい温度  $T_{MG}$  (TMG=1200K, default)以上になった時、および、バブル に対する外圧がバブル内圧以上になること、の2条件が満たされた時生じることとする。バブル は単に接触しただけでは合体しない。接触により連結、tunneling が生じ、ガス放出へと進む。し かし、ガス放出によりガス圧が低下し、外圧が高くなれば tunneling path はクリープにより閉塞す る。この後、連結バブルは表面張力と Ostwald 成長により孤立の粗大バブルになる。このプロセ スを「合体」と表現する。

この合体を生じるための圧力条件は、

$$P_b \le P_{ext} + P_{gap} + \frac{\gamma}{2r_b} \tag{2.11.1-1}$$

$$F_c = f_b \ge 0.3 = \mathbf{FCON}$$
 (2.11.1-2)

2.11.1 2)

と表現される。ただし、 $P_{gap}$ は軸方向セグメントのギャップガスの圧力であり、当面  $P_{gap} = P_{plenum}$ と近似する。近い将来の展開として、 $P_{gap}$ を、ギャップ流路断面積 $S_{gap}$ を用いた軸 方向ガス流動計算により算出するように改良する。この場合、 $S_{gap}$ はギャップ状態(開ギャップ、 閉塞ギャップ、ボンディング状態)に依存して変化する。

#### (2) 合体個数

合体は1回に M 個のバブルが合体し、合体後は孤立バブルとして、ガス放出無しで成長・収縮 する。粒界表面数密度は1/M となる。バブルとしての成長は Ostwald 成長などの効果が混じるの で、それまでの「粒内からの拡散支配」によるモデルからは逸れていくはず。

**IGASP=0**; =1 にかかわらず、以下の parameter で制御する。

すなわち、

#### 合体個数 Namelist Input for "M": NGB; default=4 .

合体回数 Namelist Input for "MGB": MGB; default=10 .

ここで、NGB=0と指定した場合は合体なし、また MGB≥1とする。

#### (3) 粒界バブル再閉鎖は合体後生じると仮定する

粒界バブルは、ガス放出によって内部ガス圧が減少し、マトリックスからの圧縮応力が大きく なれば、クリープダウンにより閉鎖する。すなわち、バブルの連結による tunneling の「開通孔」 が閉じる。しかしこのモデルでは、合体の有無にかかわらず、外部圧縮力による tunnel の閉塞は 速度論モデルの中に細管コンダクタンスの変化として包含されている。

#### (4) 合体の幾何学

ガスバブルの成長、合体による連結に基づいて考える。今、(球面) 半径 $r_f = r_1$ のバブル#1 が M 個合体して1 個の半径  $r_2$ のバブル#2 を形成したとする。まず、M 個のバブル#1 が粒界表面を 占めていた面積 S は

$$S = M \cdot \pi r_1^2 \sin^2 \theta \tag{2.11.1-3}$$

であり、これを、S を不変として仮想的に1個のバブルに置き換えた時の、仮想バブルの実効的な半径 r<sub>1</sub>\*は

$$r_1^* = \sqrt{M} \cdot r_1 \tag{2.11.1-4}$$

である。

#### (5) バブル半径の変化

次に、M 個のバブル#1 が合体して1 個の半径 r<sub>2</sub>のバブル#2 を形成したとき、ガス圧力、表面 エネルギーγ、外部からの圧力 *P<sub>ext</sub>*を合体の前後で不変とする。また合体は一瞬にして生じ、合 体の間に新たな FP ガス原子の拡散流入はないと仮定する。

このとき、レンズ状形態が維持されているので、半径の増加により表面張力は $\frac{2\gamma}{r_1}$ から $\frac{2\gamma}{r_2}$ に低 下し、バブル内平衡圧力は合体後、低下する方向にあるが、これもモデル C の場合と同じように 考えて、微小なので無視する。

このとき、バブル#2の体積はバブル#1の M 倍となるが、半径 r,は

$$\frac{4}{3}\pi r_1^3 \times M = \frac{4}{3}\pi r_2^3,$$

$$r_2 = \sqrt[3]{M} \cdot r_1$$
(2.11.1-4)

より、 $\sqrt[3]{M}$  倍となる。したがって、この1個の合体バブル#2 が粒界表面に占める面積は $\sqrt[3]{M^2}$  倍となる。すなわち、合体によってできたバブル#2 の半径は、合体後の仮想的バブルの実効半径  $r_1$ \*から

$$\Delta r = r_1^* - r_2 = \sqrt{M}r_1 - \sqrt[3]{M}r_1 \qquad (2.11.1-5)$$

だけ減少した。このとき、粒界表面上のバブル個数は

$$K^* = \frac{4a_{gr}^2 \cdot f_b}{r_f^2 \sin^2 \theta}$$
(2.11.1-6)

で表現される個数の $\frac{1}{M}$ に減っており、粒界を覆う面積割合は

$$f_b \cdot \left(\frac{r_2}{r_1^*}\right)^2 = \frac{f_b}{\sqrt[3]{M}}$$
(2.11.1-7)

に減っている。

#### (6) 合体バブルの成長

ここで合体バブル成長による再放出の条件を考える。合体バブル半径  $r_2$  がもとの実効半径  $r_1*$  にまで増加するには、つまりもとの  $f_b$  値に達するためには、合体後のバブル#2 の半径は

$$r_2^* = r_1^* = \sqrt{M} \cdot r_1 \sin \theta$$
 (2.11.1-8)

まで速度論モデルにより成長する必要がある。すなわち半径増加量は、

$$\Delta r = r_2^* - r_1^{**} = (\sqrt{M} - \sqrt[3]{M}) \cdot r_1 \sin \theta \qquad (2.11.1-9)$$

である。

このとき、バブルの体積は合体直後に比べて

$$\frac{1}{M} \left(\frac{r_2^*}{r_1}\right)^3 = \sqrt{M}$$
(2.11.1-10)

倍となる。

# 2.11.2 スエリング

速度論モデルのバブルスエリングについては、2.10.2章に記述した平衡論と同様である。すな

わち、粒内・粒界バブルの体積(半径)と個数密度が算出されれば、平衡論と同様の定義により 算出される。ポロシティと密度の変化についても同様である。

# 2.12 圧力抑制モデル

FP ガス放出平衡論モデル(IGASP=0, 1)において、粒界 FP ガスバブルに働く外部圧力  $P_{\text{ext}}$ による、バブルからのガス放出の抑制効果については、name-list parameter IPEXT の選択によりプレナム圧力、ペレット被覆管(PCMI)接触圧力、およびペレット内熱応力を考慮して評価される。すなわち、たとえば(2.8.14-8)式において、 $P_{\text{ext}}$ の値を増加させれば限界値  $N_f^{\text{max}}$ が増加し、ガス放出が抑制され、その逆も成り立つ。ただし、パラメータ IFBSAT=1 のときに FBSATS=  $N_f^{\text{max}}$  (atoms/cm<sup>3</sup>) (default=5E15)と入力で指定すれば、下記パラメータ IPEXT の値にかかわらず、 $N_f^{\text{max}}$ はその値に固定される。

また FP ガス放出速度論モデル (IGASP=2)においては、ガス放出の threshold はバブル半径  $r_f$  あるいは粒界に占める割合  $f_r$  で決まり、 $P_{ext}$  は直接関係しない。すなわち IPEXT の選択とは無関係であるが、ガス放出速度は(2.9.2-16) - (2.9.2-22) 式に表されるように、バブルガス圧力、プレナムガス圧力、およびペレット内部応力の関数であり、外部圧力  $P_{ext}$ によるガス放出の抑制効果についてはモデル中に含まれている。

また、ペレット内熱応力については、IFSWEL で選択するスエリングモデルにも影響される。 このときバブルスエリングモデルを指定した場合は、IGASP によって選択する FGR モデルにも 影響される。

オプション選択 IPEXT  $P_{ext}$ の評価方法は、IPEXT により次の 8 つから選択できる。 IPEXT=0: 常に  $P_{ext}$ =0 と想定する、 =1:  $P_{ext}$ =プレナム圧(default)、 =2:  $P_{ext}$ =ペレット被覆管間接触圧、 =3:  $P_{ext}$ =max(プレナム圧、接触圧)、 =11:  $P_{ext}$ =熱応力(ペレット内の熱応力+プレナム圧)、 =12:  $P_{ext}$ =熱応力(ペレット内の熱応力+ペレット被覆管間接触圧) =13:  $P_{ext}$ =熱応力(ペレット内の熱応力+プレナム圧+PC 接触圧)、 =14:  $P_{ext}$ =3.3 章の一次元全長力学解析の応力計算で求めた平均応力。

この、ガス放出への圧力抑制モデルにおいてペレット内の熱応力を求めるためには、以下の2 通りのいずれかを用いる。

①温度の解析解を利用して近似的な温度分布とペレット内の熱応力を求める簡便な方法 (IPEXT=11, 12, 13)。ここではプレナム圧と P-C 接触圧を加えることが可能であるが、これは、 Lame の条件式を用いてペレット内の応力分布を算出するための境界条件として、以下の (2.12.3)、(2.12.4)式においてペレット表面境界でプレナム圧 と接触圧 (=  $P_i$ )の少なくとも一つ を荷重として与えるという意味である。

②熱的解析部において計算した温度分布に基づいて力学解析部で計算した熱応力(IPEXT=14)を  $P_{ext}$ とする方法。

# 2.12.1 簡便な方法 (IPEXT=11, 12, 13)

この方法では、Lame の条件式を用いるために、ペレット内部の温度分布を

$$T - T_s = (T_c - T_s) \left\{ 1 - (r / R)^2 \right\}$$
(2.12.1)

- とおく。ただし、 T: 半径 r の 位置での 温度
  - *T<sub>s</sub>*: 熱的解析から求めたペレット表面温度
     *T<sub>c</sub>*: 熱的解析から求めたペレット中心温度
     *R*: ペレット外半径
  - すると、Lame の条件式よりペレット内熱応力は

$$\sigma_r = \frac{E}{4(1-\nu)} a(T_c - T_s) \left\{ \left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1 \right\} - P_i$$
(2.12.2)

$$\sigma_{\theta} = \frac{E}{4(1-\nu)} a(T_c - T_s) \left\{ 3 \left(\frac{r}{R}\right)^2 - 2 \right\} - P_i$$
(2.12.3)

$$\sigma_{z} = \frac{E}{4(1-\nu)} a(T_{c} - T_{s}) \left\{ 4 \left(\frac{r}{R}\right)^{2} - 1 \right\} - P_{f}$$
(2.12.4)

となる。ここで

 $\sigma_r$ ,  $\sigma_{\theta}$ ,  $\sigma_z$  :  $r, \theta, z$  方向応力

$$E: ペレットヤング率
 $\nu: ペレットポアソン比$   
 $a: ペレット熱膨張係数$   
 $P_i: ペレット被覆管接触圧力 (>0)$$$

-124-

$$P_f$$
: ペレット軸力

である。

ただし $P_i$  (>0) は熱的解析計算で求めたペレットー被覆管の接触圧力を用い、便宜上ペレットの軸力は接触圧力に等しい ( $P_f = P_i$ ) とする。 ペレット内熱応力は圧縮の場合は負値を取る。

ここで平均応力 $\overline{\sigma}$ を、

$$\overline{\sigma} = \frac{1}{3}(\sigma_r + \sigma_\theta + \sigma_z)$$
(2.12.5)

として、熱応力の算出方法を以下に示す。

第nステップで内部応力 $\sigma_{r,n}$ 、 $\sigma_{\theta,n}$ 、 $\sigma_{z,n}$ が求められた後、第n+1ステップの応力 $\sigma_{r,n+1}$ 、 $\sigma_{\theta,n+1}$ 、  $\sigma_{z,n+1}$ を算出する方法を考える。ただし第0ステップ(hot stand-by)では $\sigma_{r,0}$ 、 $\sigma_{\theta,0}$ 、 $\sigma_{z,0}$ はプレナムガス圧とする。

(2.12.2)、(2.12.3)、(2.12.4)式を用いてタイムステップ間での熱応力増分は

$$\Delta \sigma_{r,n+1}^{th} = \frac{E_{n+1}}{4(1-\nu)} a_{n+1} (T_{c,n+1} - T_{s,n+1}) \left\{ \left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1 \right\} - P_{i,n+1} - \left\{ \frac{E_n}{4(1-\nu)} a_n (T_{c,n} - T_{s,n}) \left\{ \left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1 \right\} - P_{i,n} \right\}$$
(2.12.6)

$$\Delta \sigma_{\theta,n+1}^{th} = \frac{E_{n+1}}{4(1-\nu)} a_{n+1} (T_{c,n+1} - T_{s,n+1}) \left\{ \left( 3\frac{r}{R} \right)^2 - 2 \right\} - P_{i,n+1} - \left\{ \frac{E_n}{4(1-\nu)} a_n (T_{c,n} - T_{s,n}) \left\{ \left( 3\frac{r}{R} \right)^2 - 2 \right\} - P_{i,n} \right\}$$
(2.12.7)

$$\Delta \sigma_{z,n+1}^{th} = \frac{E_{n+1}}{4(1-\nu)} a_{n+1} (T_{c,n+1} - T_{s,n+1}) \left\{ 4 \left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1 \right\} - P_{i,n+1} - \left\{ \frac{E_n}{4(1-\nu)} a_n (T_{c,n} - T_{s,n}) \left\{ 4 \left(\frac{r}{R}\right)^2 - 1 \right\} - P_{i,n} \right\}$$
(2.12.8)

と求められる。

第n+1タイムステップでの応力の第0近似値を

$$\sigma_{r,n+1}^0 = \sigma_{r,n} + \Delta \sigma_{r,n+1}^{th}$$
(2.12.9)

$$\sigma_{\theta,n+1}^{0} = \sigma_{\theta,n} + \Delta \sigma_{\theta,n+1}^{th}$$
(2.12.10)

$$\sigma_{z,n+1}^{0} = \sigma_{z,n} + \Delta \sigma_{z,n+1}^{th}$$
(2.12.11)

とおく。(2.12.9)、(2.12.10)、(2.12.11)式を(2.12.5)式に代入すれば平均応力の第0近似値 $\overline{\sigma}^0_{n+1}$ は

$$\overline{\sigma}_{n+1}^{0} = \frac{1}{3} \left( \sigma_{r,n+1}^{0} + \sigma_{\theta,n+1}^{0} + \sigma_{z,n+1}^{0} \right)$$
(2.12.12)

である。ただし $\overline{\sigma}^0_{n+1}$ がプレナムガス圧を $P_{gas}$ としたとき、 $-P_{gas}$ より大きい場合には

$$\bar{\sigma}_{n+1}^0 = -P_{gas,n+1} \tag{2.12.13}$$

とする。また、 $\overline{\sigma}_{n+1}^{0}$ が降伏応力 $\sigma_{
m Y}$ としたとき、 $-\sigma_{
m Y}$ より小さい場合には

$$\bar{\sigma}_{n+1}^{0} = -\sigma_{\mathrm{Y},n+1} \tag{2.12.14}$$

とおく。

次に相当応力 $\sigma_{eq}$ を $\sigma_{eq} = -\overline{\sigma}_{n+1}^0$ とおいてペレットのクリープ計算を行う。

応力緩和に寄与するペレット相当ひずみの変化は、クリープ速度関数 *f* に比例すると仮定し、 この比例定数を *η* とすると

$$\Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^c = -f(T, \sigma_{eq}, G, f_d, \dot{F}) \cdot \eta \cdot \Delta t$$
(2.12.15)

で与えられる。ここで

$$T: 温度
 $\sigma_{eq}: 相当応力$   
 $G: 結晶粒サイズ$   
 $f_d: ペレット理論密度比$   
 $\dot{F}: 核分裂密度$   
 $\Delta t: タイムステップ幅$$$

である。ただし、比例定数は、実験データから求めたフィッティングパラメータとして $\eta = 10^4$ を用いる。このようにして求めたクリープ歪み増分 $\Delta \overline{\varepsilon}^c_{n+1}$ を用いて

$$\overline{\sigma}_{n+1}^1 = \overline{\sigma}_{n+1}^0 - E\Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^c \tag{2.12.16}$$

より平均応力の第1近似値 $\overline{\sigma}_{n+1}^{1}$ を求められる。ただし、クリープ変形における $\sigma$ と $\Delta \varepsilon$ の比例定数は、ヤング率Eに線形依存すると仮定して、ヤング率E自体を用いる。以降ニュートン・ラプソン法を用いて $\sigma_{n+1}$ について収束計算を行う。ただし $-\sigma_{Y,n+1} \leq \overline{\sigma}_{n+1} \leq -P_{gas,n+1}$ とする。

こうして求められた $\bar{\sigma}_{n+1}$  (<0)が、粒界ガス気泡にかかる熱応力(外部圧力)、すなわち、(2.7.62) 式における $P_{ext}$ である。

第 n+1 ステップの応力  $\sigma_{r,n+1}$ 、  $\sigma_{_{\theta,n+1}}$ 、  $\sigma_{_{z,n+1}}$ は

$$\sigma_{r,n+1} = \sigma_{r,n} + \Delta \sigma_{r,n+1}^{th} - E \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{c}$$

$$\sigma_{\theta,n+1} = \sigma_{\theta,n} + \Delta \sigma_{\theta,n+1}^{th} - E \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{c}$$

$$\sigma_{z,n+1} = \sigma_{z,n} + \Delta \sigma_{z,n+1}^{th} - E \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{c}$$
(2.12.17)

として求められる。ここで、 $\sigma_{i,n+1} < 0$ 、すなわち、応力は圧縮応力であり、

$$\Delta \sigma_{i,n+1} \times \Delta Temp. < 0$$

すなわち、応力の変化と温度変化とは、互いに異符号である。また(2.12.17)式は、次の n+2 ステ ップに対する初期値として用いられる。

## 2.12.2 IPEXT=14 の場合

IPEXT=14 を指定した場合は、熱的解析部において計算した温度分布に基づいて全長力学解 析部で計算された応力分布より得られる平均応力 $\overline{\sigma}_{n+1}$ より、FP ガスバブルに働く外部圧力  $P_{ext}$ を求める。このとき、 $-P_{gas,n+1} < \overline{\sigma}_{n+1}$ の領域においては、 $P_{ext} = -P_{gas,n+1}$ とする。すなわち、FP ガスバブルに働く外部圧力  $P_{ext}$ は次式によって与える。

$$P_{ext} = \overline{\sigma}_{n+1} \qquad (\overline{\sigma}_{n+1} < -P_{gas,n+1})$$

$$P_{ext} = -P_{gas,n+1} \qquad (-P_{gas,n+1} \le \overline{\sigma}_{n+1}) \qquad (2.12.18)$$

【注】 IPEXT の使用法の詳細については、入力マニュアルを参照のこと。

## 2.12.3 出力降下時の軸方向ガスコンダクタンス増加との比較考察

試験炉中でのある程度以上の燃焼度の燃料の照射試験において、その出力が急速に低下した場合にそれに伴って、あるいはその直後に再び出力を上昇させた場合に、FP ガス放出が一時的に増加する現象が観察されることがある。より正確に言えば、プレナム部に取り付けた内圧計によって測定されたガス圧の上昇が見られる。この一時的ガス圧上昇(FP ガス放出増加)については、以下のような二通りの解釈が成り立つ。

#### (1) ガスコンダクタンス増加説

高出力時にはペレット温度が高いので FP ガス原子の拡散が盛んであり、ペレット外部の自由 空間へのトンネル形成も生じて、粒界バブルからの FP ガス放出が生じているが、ペレットの熱 膨張により P-C ギャップが閉じているかあるいは非常に狭くなっていて、あるいはペレットのク ラックがほとんど閉じているので、放出された FP ガスはペレットの残されたわずかな空隙に局 所的に滞留し、プレナム部まで流れていかない。言い換えればガスの軸方向のコンダクタンスが 非常に低い状態にある。

ところが出力が低下すれば、ペレット熱膨張は減少し、ギャップやクラックが開くのでガスの 軸方向のコンダクタンスが復活し、それまで局所に滞留していたガスがプレナム部へ流入して、 プレナム部の内圧の増加として観測される。

#### (2) 粒界ガスバブルの閉じ込めから解放への変化説

高出力時にはペレット温度が高いので FP ガス原子の拡散が盛んであり、粒界ガスバブルが成 長しているが、粒界ガスバブルは周囲の固体マトリックスから熱応力を受けており、ペレット外 部の自由空間へのトンネル形成による放出が困難である。ところが出力が低下すれば、ペレット 熱膨張は減少し、トンネル形成は容易となり、自由空間へ放出されたガスはギャップやクラック が開いて増加した軸方向のガスコンダクタンスのために、プレナム部へ流入して、プレナム部の 内圧の増加として観測される。この状態は、(2.8.14-8)式において *P*<sub>ext</sub>の値を低下させれば限界値 *N*<sup>max</sup> が低下し、ガス放出が生じることに対応する。これは、(2.8.14-8)式の物理的な意味を示すも のである。

【考察】 以上の解釈を考察すると、現実には二つの解釈(現象)のいずれも同時に生じている可

能性があり、どちらか一方の解釈にモデルを限ることは必ずしも正当化されないと考えられる。 FEMAXIコードのモデルでは従来から②の解釈の立場を取ってきた。①の解釈でのモデル化もも ちろん可能であろう。しかし、②の解釈でもプレナム部の内圧上昇を十分良く表現・予測できる と考える。

# 2.13 高燃焼度リム組織モデル

## 2.13.1 全体概念

リム組織の生成や関連して生じるポロシティ、FP ガス放出、固相 FP ガス原子濃度、swelling、 熱伝導率への影響などについては、多くの研究がある<sup>(2.36)-(2.43)</sup>。しかし、リム組織のすべての主要 局面を包括的に表現してマクロな (engineering level の)燃料ふるまいに結びつけたモデル化は実 現していない。またリム組織の生成に対して「燃料は複雑系である」という観念を表明しても、 それだけでは認識が具体的に深化するわけではない。

これはリム組織の生成が、ペレット製造仕様、燃焼度、温度、結晶粒径、濃縮度、出力履歴、 高速中性子束、被覆管とのボンディングなどの多くの要因が絡み合って進行する現象であること に本質的に起因し、同時に、重照射された燃料を実験的に扱うことの困難さにも起因する。

したがって、燃料解析コードに要求されるリム組織のモデリングとして、考えられる要因の相 互作用を機構論的に構成して多くのパラメータや現象の側面を整合的に、かつ個々の観測データ に合うように調整することはきわめて多大な労力を要するのみならず、結果として得られる予測 精度は、現象の複雑さゆえに、エンジニアリングレベルから評価して多大な労力に十分釣り合う ものになるという保証がない。

ここで、リム組織の生成は燃料ふるまい全体にとって、比較的独立に、付加的な影響を与える のみ(たとえば燃料温度の若干の上昇、swelling の付加的増加など)であることに注目すれば、 モデリングは経験モデルに基づいた単純な構成として、複雑な現象をある程度の誤差を伴いつつ も包絡していく方法をとる方が、燃料ふるまいの予測全体の目的に照らして合理的な戦略である。 もちろんその場合のモデルパラメータや経験式は、実測データの蓄積に合わせて容易に改良する ことが可能である。

リム組織生成率

ペレットの各リング要素におけるリム組織の生成(体積)割合 Fv は燃焼度 Bu と温度 T の関数 とする。 ②ポロシティとガス原子インベントリ

ポロシティは、FvとBuの関数とし、Fv=100%に対して一定値をとる。

ポアサイズ分布、ポアのガス圧力は計算しない。一方、FP ガス原子のポア内ガスインベントリ、 燃料固相内保持量、(非熱活性拡散などによる)ガス追加放出量は、empirical model を用いて決定 する。

③ポロシティの Swelling および熱伝導率への影響

Swelling はポロシティから直接計算する。熱伝導率へは、井勝の式によって低減係数を算出する。

④拡散計算の条件

ペレット外層部のような低温領域での FP ガス原子拡散速度はきわめて低い。このため、無意味な計算を避けるために、原則として温度が TDIFF (default =600C) 以下の部分では、TDIFF での計算結果をコピーして用いるオプションを設けた。ただし、リム組織部の局所燃焼度が非常に高い場合にはこのオプションの適用はあまり適切ではないので注意が必要である。

⑤事故条件下におけるリム組織の粒界分離

事故時燃料解析コード RANNS でもリム組織のモデルを用いる。これは FEMAXI-7 のモデルと 関連しているので、若干の説明を追記する。RANNS モデルでは、リム組織部のマクロな引張り応 力の、粒界分離破断を生じるしきい値を仮定する。またリム相の何%が 粒界分離したとか、粒界 蓄積ガス inventory が開放されたとかの仮定を置く。

なお、以下に述べるリム組織の影響モデルが適用されるのは、name-list parameter HBS=1 の場合 であるが、2.13.2 項における FP ガス原子のリム組織固相内の濃度減少(depletion)については、 name-list parameter HBS=0 と指定し、name-list parameter IRIM=1,2,3 の指定によってモデルを選択 する。

## 2.13.2 リム組織固相における FP ガス原子の濃度減少

まず、燃料ふるまい計算には直接関係しないが、もっとも単純な経験モデルとして、リム組織 形成による FP ガス原子の固相マトリックスにおける depletion を評価する方法を示す。

この減少量を以下の3方法によって評価する。ただしIRIM=0とすればこれらの適用はない。
### (1) Battelle モデル<sup>(2.36)</sup> (HBS=0, IRIM=1)

Battelle 高燃焼時諸効果研究計画で得られたモデルにおいては、FP ガスをキセノンで代表させ 次式で計算する。

$$F_r = 0.00625(B_u - 62.2), B_u > 62.2 (MWd/kgU)$$
 (2.13.2-1)

ただし、*F*<sub>r</sub>は、リム相で生成された全 FP ガス原子のうち、リム相形成により固相マトリック スから分離された(ガスポアの形成に与った、あるいはペレット外へ放出された)ガス原子の割 合であり、*B*<sub>u</sub>はペレット端部(リム相)における局所燃焼度である。

また、リム相領域の発達を燃焼度の関数として次式で与える。

$$W = 2.19(B_u - 48.8) \tag{2.13.2-2}$$

ここで、Wはリム相厚み(µm)である。さて(2.13.2-2)式から、リム相厚みはペレット端部燃焼度 が 150MWd/kg-U にいたっても高々220µm であり、FEMAXI の温度計算で用いているペレット領 域分割の最外層リングに十分収まる程度であることがわかる。したがって、リム化の影響は最外 層リング領域 V,でのみ計算する。

(2.13.2-1)、(2.13.2-2)式から、最外層リングにおいて生成されたキセノンのうち、リム組織化に よって固相マトリックスから分離される Xe の割合 *R*,を次式で与えることができる。

$$R_r = V_r \cdot F_r \tag{2.13.2-3}$$

$$V_{r} = \pi \left\{ r_{o}^{2} - \left( r_{o} - W \right)^{2} \right\} / \pi \left( r_{o}^{2} - r_{i}^{2} \right)$$
(2.13.2-4)

ここで、r<sub>i</sub>は最外層リングの内側半径、r<sub>o</sub>はペレット半径である。

<u>固相マトリックスから分離された FP ガス原子がペレット外へガスとして放出されると仮定す</u> <u>れば、</u>リム相化による最外層リングでの FP ガスの追加放出は、粒界バブルガス放出モデルとの 統一性を維持するために粒界ガスバブルからなされると近似仮定する。すると、粒成長したとき の n+1 タイムステップでの FP ガス原子の粒界濃度は、(2.8.12-13)式の代わりに次式を用いる。

$$N_{f}^{n+1} = \frac{a_{n+1}}{a_{n}}N_{f}^{n} + \frac{\left(1+f_{g}\right)\overline{\Psi}_{total}^{n} - \overline{\Psi}_{total}^{n+1} + \int_{V}\beta\Delta t dv + \left(R_{r}^{n+1}M^{n+1} - R_{r}^{n}M^{n}\right)}{4\pi a_{n+1}^{2}}$$
(2.13.2-5)

ここで、

 $M^{n+1}$ : 時刻 $t^{n+1}$ までに半径 $a_{n+1}$ の結晶粒で生成された FP ガス原子数 (atoms)  $M^{n}$ : 時刻 $t^{n}$  までに半径 $a_{n+1}$ の結晶粒で生成された FP ガス原子数 (atoms)  $R_{r}^{n+1}$ : 時刻 $t^{n+1}$ でのリム組織化による FP ガス放出率  $R_{r}^{n}$ : 時刻 $t^{n}$ でのリム組織化による FP ガス放出率

である。

## (2) Cunningham モデル<sup>(2.42)</sup> (HBS=0, IRIM=2)

Cunningham によれば、やはり FP ガス原子をキセノンで代表させ、次式によって固相濃度の減少(分離)量を計算する。このモデルは、あくまで実験データに対する相関式として求めた経験 モデルである。

$$R_r = F_r P_r \tag{2.13.2-6}$$

ここで、  $R_r$ : リム領域から分離された FP ガス量の、ペレット全体の FP 生成量に対する比、  $F_r$ : (リム相面積/ペレット面積) × (リム相 FP ガス分離量/リム相 FP 生成量)

 $P_r$ :リム領域の平均燃焼度の、ペレット全体の平均燃焼度に対する比(=1.3)である。また、

 $F_r = 7.90 \times 10^{-3} - 6.98 \times 10^{-4} \cdot B_u + 8.34 \times 10^{-6} \cdot B_u^2$  ( $B_u > 65$ MWd/kgU) (2.13.2-7) とする。ただし、 $B_u$ はペレット端部のリム相領域における局所燃焼度である。こうして、分離減 少が、全体の FP 生成量に対する比として求められる。

なお、(2.13.2-7)式において  $F_r = 0$ の解を求めると、Bu=13.49, 70.20 となる。したがって、 $F_r$ は、Bu<13.49の領域と Bu>70.20の領域で正の値を取る。したがって Bu>65MWd/kgU の領域で  $F_r$ が正になる範囲は 70.20 MWd/kgU 以上であるので、コード内の扱いとしては(2.13.2-7)式の Buの範囲を Bu>70.2MWd/kgU とした。

FEMAXI コードでは、ペレットの各リング要素での FP ガス放出率を積算してペレット全体の FP ガス放出率を求めているので、(2.13.2-6)式での定式化は FEMAXI コードのこうした方法には 馴染まない。そこで、FEMAXI コードでは(2.13.2-6)式の定式化を以下のように変更して扱ってい る。

(2.13.2-6)式はリム領域から放出された FP ガス量の、ペレット全体の FP 生成量に対す る比を与える式であるが、この(2.13.2-6)式からリム領域の FP ガス放出率 F<sub>rim</sub>を算出することを 考える。ここで、FP 生成量は燃焼度に比例すると仮定すると、

である。



図 2.13.1 Cunningham モデルにおけるペレット局所燃焼度とリム組織の領域割合の変化

# (3) 修正 Cunningham モデル (HBS=0, IRIM=3)

次に、Cunningham のモデルでは、リム領域の平均燃焼度の、ペレット全体の平均燃焼度に対 する比P<sub>r</sub>は(2.13.2-6)式で補正率として扱っているので、この補正の取り扱いをオプションとした。 すなわち、Cunningham のモデルで用いている P<sub>r</sub>=1.3 を採用する場合と、FEMAXI コード内で計 算された P<sub>r</sub>を用いる場合である。

P<sub>r</sub>=1.3 を採用する場合(IRIM=2)は、(2.13.2-8)式を用いて F<sub>rim</sub>を求める。このとき、(2.13.2-8) 式中の(ペレット平均燃焼度) / (リム相平均燃焼度)の値は、FEMAXI で計算されたペレット 平均燃焼度とリム相平均燃焼度の比を用いるので、一般には 1/1.3 とは異なる。

これに対して、コード内で計算された  $P_r$ を用いる場合(IRIM=3)は、(2.13.2-6)式中の  $P_r$ と(2.13.2-8)式中の(ペレット平均燃焼度)/(リム相平均燃焼度)の値は1であるとして、

$$F_{rim} = F_r \times (^{\circ} \lor \lor \lor \lor \land hata f)$$
 (2.13.2-9)

として与える。いずれの場合もリム相面積が必要となるが、Cunninghamのモデルはリム相の面積 (幅)を意識していないので、つじつまが合うように決めてやればよい。そこで、便宜上(2.13.2-2) 式で得られたリム相領域の発達モデルからリム相面積を求めることにする。

	調整パラメ	ータ RFGFAC	リム化によ	る FP	・ガスの追加放出量は RF	FGFAC により
III,	周整できる。	標準値は1.0 で	ある。 $F_r$	$= F_r$	$\times RFGFAC$	

オプション選択 IRIM	リム化による FP ガス追加放出のモデルは、次の 3 オプショ
ンから選択できる。IRIN	<b>1=</b> 0:適用せず、 =1: Battelle モデル(標準)、
=2: Cunninghum モデル、	=3: 修正 Cunninghum モデル。

# 2.13.3 リム組織の燃料ふるまいへの影響モデル

FEMAXI コードでは、リム組織の生成がペレットに及ぼす影響を系統的にモデル化する。ただ しこのモデルは name-list parameter HBS=1, =2 の場合に有効であるが、この場合同時に自動的に IRIM=0 となり前項の depletion モデルは適用できない。(HBS=0 の場合は IRIM の指定は有効で あるが、本影響モデルの適用は行わない。)

# 2.13.3-1 リム組織の燃焼度 (HBS=1, 2)

リム組織の生成を考える場合、どの程度の局所燃焼度において生成が始まり、燃焼度の伸長と ともに組織の性質がどう変化していくかが現象のモデル化において重要なポイントである。ここ では、リム組織に関する燃焼度について、二通りのオプション、すなわち、局所燃焼度と実効燃 焼度を設け、name-list parameter HBS の指定によってリム組織の体積やポロシティなどを計算する。

#### (1) 局所燃焼度 (HBS=1)

このオプションでは、ペレット半径方向の局所的な燃焼度 Bu<sub>local</sub> をそのままリム組織の生成と 性質のモデリングに用いる。

### (2) 実効燃焼度の概念 (JAEA モデル; HBS=2)

リム組織の生成とその体積の増加は、燃焼度のみならず温度によっても規定される。このため、 以下の考察と仮定に基づき、「実効燃焼度」という概念モデルを導入する。

① リム組織は燃焼度が一定レベル以上の部分に発生し、時間とともにその占有割合を増加させて いく<sup>(2.36) - (2.41)</sup>。これは、高燃焼度の部分では結晶格子の欠陥密度と歪みエネルギーが高まり、リ ム組織への結晶構造変化が促進されるからである。 ② しかし、高燃焼度部分の結晶格子は、一方で熱活性過程により焼鈍され、回復する。温度が上 昇すればこの回復速度は顕著になり熱伝導率は回復し<sup>(2.42)</sup>、リム組織を発生させるために必要な 格子欠陥密度や歪みエネルギーは減少するので、リム組織は生じにくくなる<sup>(2.43)</sup>。

③ このため、モデルにおいては、リム相生成の予測を燃焼度と温度履歴の2条件から規定する 必要がある。したがって、燃焼計算の結果である燃焼度の半径方向プロファイルに対して、温度 による結晶回復効果を加味した「実効燃焼度」を仮定し、この実効燃焼度がある threshold レベル 以上に達した領域においてリム組織が生成、発達すると仮定する。

④ 実効燃焼度は、燃焼度の伸長と温度履歴との複合である。

まず、n タイムステップにおいて、n-1 タイムステップまでの実効燃焼度 $B_{eff}^{n-1}$ は、タイム 実 効燃焼度は、燃焼度の伸長と温度履歴との複合である。まず、n タイムステップにおいて、 n-1 タイムステップまでの実効燃焼度 $B_{eff}^{n-1}$ は、タイムステップ期間 $\Delta t$ における回復によって減少 すると考える。すなわち、回復過程は熱活性過程であるから、n タイムステップにおける局所温 度 $T_n$ によって

$$B_{eff}^{n-1} \cdot \exp\left\{-k_1(T_n - T_0) \cdot \Delta t\right\}$$
(2.13.3-1)

に減少する。一方、n タイムステップにおいては燃焼度は $\Delta B''$ だけ増加するので、結局、あるタ イムステップ n における燃料ペレットの実効燃焼度は

である。

ただし、 内は Name-list input parameter とその Default 値である。(2.13.3-2)式によっ て算出される実効燃焼度がある threshold レベル以上のペレット領域においてリム組織が生成、増 加すると考える。



図 2.13.2 燃料の複数の軸方向位置における燃焼度と実効燃焼 度の半径方向プロファイルの比較

# 2.13.3-2 リム組織の FP ガスの放出 (HBS=1, 2)

### (1) リム相からのポアへの FP ガス原子移行率モデル

2.13.2 項においては、FP ガス原子の depletion (ガスポアへの移行)を Battelle および Cunningham モデルを用いて表現した (HBS=0)。本モデル(HBS=1,=2)ではそれらのモデルに代わり Lassmann empirical model<sup>(2.43)</sup>を適用して、リム相において生成した全 FP ガス原子のうち、固相マトリック スに残る割合を FSOLID とし、固相からガスポア内およびペレット外部の自由空間へ移行する割 合 FPOR を燃焼度 Bu ( $Bu_{local}$  or  $B_{eff}$ )の関数として表す。Lassmann モデルによれば Xe でリム組 織内のガスを代表させており、固相内の Xe 濃度 Xe<sub>1</sub> は

$$Xe_{1}(wt.\%) = FPINF + (GEN1 \cdot Bu - FPINF)exp(-GEN2 \cdot (Bu - Bu_{0})) \quad (2.13.3-3)$$

したがって、固相に残る FP ガス原子の割合 FSOLID は

$$FSOLID = Xe_1 / [Total Xe generation(wt.\%)]$$
(2.1.2.3-4)

したがって、固相から出て行く FP ガス原子の割合は

$$FPOR = 1.0 - FSOLID$$
  
= 1.0 - Xe<sub>1</sub> / [Total Xe generation(wt.%)] (2.13.3-5)

となる。ただし、 $Bu \leq Bu_0$ のときは、すべて固相内保持とする。

ここで

$$Xe$$
[Total generation(wt.%)] = GEN1 ·  $Bu$  (GWd/t) (2.13.3-6)

Default: **FPINF=0.25**(wt.%),  
**GEN1=0.0145**, **GEN2=0.1**, 
$$Bu_0$$
=**BURIM=60.0**.

である。図 2.13.3 に Xe の固相濃度の燃焼度による変化を示す。

また非熱活性放出により固相から外部空間へ(直接)移行したガス原子の割合を ATHMR (default=0.0)とおくと、 $0 \le ATHMR \le FPOR$  である。

ただし Xenon における A wt.% ←→ B atoms/cm<sup>3</sup>への相互変換は:

B (atoms/cm<sup>3</sup>)=A (wt.%) × 
$$\frac{0.01 \times \rho$$
[pellet density(g/cm<sup>3</sup>)]}{131 (g/mol)} (2.1.2.3-7)  
× 6.022 · 10<sup>23</sup> (atoms/mol)

を用いる。

ここで(繰り返しになるが)リム組織の固相に存在するガス原子 GS0 は、生成量 GG から、熱 拡散で粒界バブルへ移行した量 GB1、粒内バブルへ移行した量 GB2、リム組織から FPOR の割合 で移行した量 GR、の3者を引いたもの、すなわち、

$$GS0 = GG - GB1 - GB2 - GR$$

である。したがって、HBS=1,2の場合、以下の処理をすることとする。

① あるリング要素でリム組織がいったん生成した後は、その時点でその要素におけるそれまでの 熱拡散計算を凍結する。このとき、固相内のガス原子の量 GS0a、およびガスバブルに蓄積した量 GB1、GB2 はそのときまでの拡散計算の結果を反映している。

② 次に、リム組織生成に伴い、GB1 と GB2 は変化せず、固相内のガス原子の量は GS0a から GR を引いて算出する。



図 2.13.3 Lassmann モデルによる固相内 Xe 濃度の変化

### (2) リム相からの FP ガス放出率 (HBS=1, 2, ROPGR=0,1,2)

リム組織の内部からの FP ガス原子のペレット外への移行は経験式を適用し、リム層からの「追加放出量」を求める。(ただし RMOGR=0 の場合はガスポアからのガス放出は無いものとする)

すなわち、リム相となったリング要素における全生成 FP ガスのうち、固相マトリックスから ポアおよび自由空間へ移行する FP ガス原子の割合は前記 Lassmann モデルにより FPOR であるが、 この(2)項で説明するモデルでは、ポアへ移行したガス原子はすべてポアに集積していると仮定す る。また、リム相の全ポアに含まれている FP ガス原子のうちオープンポアの割合 OPR だけが外 部へ放出されるとする。すると、リム要素における全生成 FP ガス原子のうちリム相ポアからの FP ガス放出率 FGRIM は、

#### FGRIM=OPR $\cdot$ FPOR (2.13.3-8)

となる。またリム相のマトリックス(ガスポア以外の粒界、粒内ガスバブルを含む)に保持されている FP ガス原子の相対割合は生成量の(1-FPOR)となる。

したがってリング要素の放出率 FGR は、通常の熱拡散モデルによる放出率を FGR として、

$$FGR(Bu) = FGR_0 + FGRIM$$
(2.13.3-9)

Bu: 局所燃焼度( $Bu_{local}$  or  $B_{eff}$ )(GWd/t)

となる。オープンポアの割合 OPR は下記の①あるいは②で決定する。

### 放出割合指定オプション (RMOGR=1)

2.13.3.2 (1) 項で説明した ATHMR を用いて

#### OPR=ATHMR (2.13.3-10)

とする。ただし0≤OPR = ATHMR ≤ FPOR である。すなわち、リム組織が生成した後は常に、

リム組織で生成した FP ガス原子のうち(ATHMR x 100)%は外部へ(熱拡散放出に追加して)放出 される。

### ② オープンポア比率指定モデル (RMOGR=2)

リム相ポロシティ  $p_{rim}$ に対するオープンポアの比率 **OPR** を  $p_{rim}$ の関数

$$OPR = \frac{0.03}{0.23} \cdot p_{rim} \qquad (0 \le p_{rim} \le 0.23) \tag{2.13.3-11}$$

$$OPR = 0.03 + (0.15 - 0.03)(100 \cdot p_{rim} - 23) \qquad (0.23 \le p_{rim} \le 0.24) \quad (2.13.3-12)$$

OPR =  $0.15 + (0.45 - 0.15)(100 \cdot p_{rim} - 24)$  ( $0.24 \le p_{rim} \le 0.25$ ) (2.13.3-13) とする<sup>(2.41)</sup>。ただしリム相ポロシティ  $p_{rim}$ は次項 **2.13.3-3** 項で決定される。

# 2.13.3-3 ポロシティ、熱伝導率、スエリング (HBS=1, 2, RMPST=0,1,2)

リム組織における FP ガスポアの生成によるポロシティ変化と、それによるリム組織に部分の 熱伝導率およびスエリングへの影響をモデル化する。ポロシティは name-list parameter RMPST に より指定する。RMPST=0 の場合、特にリム組織のポロシティ変化を計算せず、*p<sub>rim</sub>*=0.05 とする。

### (1) NFD データ相関経験式 RMPST=1

リム組織のポロシティ primを以下の経験式により算出する<sup>(2.40)</sup>。

PROMAX = 
$$0.005 \cdot (Bu - 40)^2 + 2.5$$
  
PROMIN =  $0.0013 \cdot (Bu - 40)^2 + 2.5$  (2.13.3-14)  
 $p_{rim}$  = PROMAX  $\cdot (1.0 - 0.6) + 0.6 \cdot \text{PROMIN}$ 

Bu:燃焼度( $Bu_{local}$  or  $B_{eff}$ ) (GWd/t)

ただし、*p<sub>rim</sub>*の最大値を PMX=0.254 とする。(RMPRS=2 と共通)。



図 2.13.4 NFD 相関式における Porosity の燃焼度による変化

#### (2) Billaux モデル RMPST=2

FP ガスポア量は計算せず、リム相ポロシティ $p_{rim}$ を燃焼度に対する経験的な相関式により求める。すなわち、Billaux らの相関式<sup>(2.46)</sup>を部分的に適用して

$$p_{rim} = AP1 \cdot Bu - AP2, \quad BP1 \le Bu \le BP2 \quad GWd/tM$$
 (2.13.3-15)

(3.1)

$$p_{rim} = PMX$$
  $Bu > BP2$  GWd/tM (2.13.3-16)

Default: AP1=0.0024, AP2=0.106,

p = as-fabricated porosity.

Bu: 局所燃焼度( $Bu_{local}$  or  $B_{eff}$ )(GWd/t)

とする。ただし、 $p_{rim}$ は増加していって、ある一時的な最高値  $p_{rim,max}$  をとった後、たとえば温度が大きく上昇しても、最高値  $p_{rim max}$  を維持するものとする。

#### (3) 熱伝導率への影響 (RMPRO=0, 1)

リム組織のポロシティのペレット熱伝導率んへの影響としては、リム相を含むリング要素の熱 伝導率に対して修正を加えて算出する。すなわち、リム組織が生成したリング要素の熱伝導率を  $\lambda_{rim}$ とすると

Ikatsu<sup>(2.47)</sup>, Bekker<sup>(2.48)</sup> 
$$\delta \mathcal{O} \neq \lambda_{rim} = \lambda_{Bx} \cdot (1 - p_{rim})^{1.6}$$
 (2.13.3-17)

Billaux らの式 
$$\lambda_{rim} = \lambda_{Bx} \cdot \left(\frac{1-p_{rim}}{0.95}\right)^{2.5}$$
 (2.13.3-18)

のいずれかを入力で選択する。ただし *p<sub>rim</sub>*は (2.13.3-13)~(2.13.3-15)式で定義した、リング要素の ポロシティである。

### **RMPRO=0;** Ikatsu model (Default), =1; Billaux model

ここで  $\lambda_{Bx}$  は、rim 相の生成により、燃料マトリックスの歪みが消滅し、FP ガス原子の濃度が 減少してマトリックスの熱伝導率が上昇するので、マトリックスの(実効的な)燃焼度が減少し た (燃焼度の伸長による熱伝導率低下の効果が減少した)と等価と考えた場合の、マトリックス の等価な燃焼度 Bx における熱伝導率である。すなわち、

$$\lambda_{Bx} = \lambda(T, Bx, \dots) \tag{2.13.3-19}$$

*Bx*:等価燃焼度、 **BXEQ=40** (GWd/tU) (Default)

#### T:局所温度(K)

である。また RMPRO は RMPST の指定とは独立である。

(4) スエリング

RIMSWL=1 のとき、IFSWEL の値には無関係に、リム組織に変化したリング要素の体積スエリングを [ポロシティ+固体スエリング率] に等しくおく。(RIMSWL の default=0)

# 2.14 パラメータによる計算モデルの選択

FEMAXI コードでは熱的解析において複数の入力パラメータ(Name-list input parameter)の組み 合わせで解析条件やオプションを決める。このため、パラメータの相互関係を以下に整理して説 明する。なお、Name-list parameter によるオプションの指定は、解析方式→Geometry→熱的・ 機械的性質モデル の順に指定することを原則とする。また、以下の説明は IFEMOP=2 (熱解 析-力学解析の完全連成)を前提とする。IFEMOP≠2 の場合は、以下に示すオプションの選択 は一部不可能となることがある。

# 2.14.1 ペレット径方向リング要素数

ペレット径方向要素数は燃焼計算コードの選択(半径方向発熱密度モデル)および HBS モデルと結びついている。2.3.1 項で示した表 2.3.1 を再記する。

衣 2.3.1 一款時間と刀子時間におけるペレクト内住力回りング安系力討数				
Parameter 值	1次元熱解析	1次元力学解析	2 次元局所力学解析	
MESH=0	等間隔 10 リング要素	等間隔10リング要素	等間隔5リング要素	
MESH=1	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素	等体積 9 リング要素	
MESH=2	等体積 72 リング要素	等体積 18 リング要素	等体積 9 リング要素	
MESH=3	等体積 36 リング要素	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素	
MESH=4	等体積 72 リング要素	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素	

表 2.3.1 熱解析と力学解析におけるペレット内径方向リング要素分割数

ただし、HBS(高燃焼度組織モデルオプション)を指定した場合は、MESH>0としなければならない(MESH=0を指定しても、自動的に MESH=3として計算する)。

なお、ISHAPE=1 を選択した場合には、MESH>0 における要素数は 2 倍となり、より細かな 計算が可能となる。また RANNS において IREST>0 として FEMAXI の計算結果を初期条件とし て用いる場合は、MESH の値は FEMAXI で指定した値が自動的に引き継がれる。

## 2.14.2 ペレット熱伝導率計算

ペレット熱伝導率はポロシティにも影響される。以下では、計算されたポロシティとの関連を 説明する。

### (1) リム組織の影響としてリム組織からの FP ガス放出のみを考える場合 (HBS=0)

(通常のモデル通り) IFEMOP と MESH の値にかかわらず、

ペレット熱伝導率: 
$$\lambda = F(p) \cdot \lambda_{100\%TD}(T, Bu, \dots)$$
 (2.14.2-1)

とする。ここで、 F(p) : ポロシティファクター であり、この関数と $\lambda_{100\%7D}(T, Bu,.....)$ は第4章に記載する。

変数=ポロシティ pを Name-list パラメータ IPRO の値にしたがって以下のように計算する。

IPRO=0 (Default)
 (2.3.4 節参照)

 1) IPRO=0
 
$$p = p_0$$
 $\Delta V$ 
 (2.14.2-2)

2) **IPRO**=1 
$$p = p_0 + \frac{\Delta V_{swg}}{V_0}$$
 (2.14.2-3)

3) **IPRO=**2 
$$p = p_0 + \frac{\Delta V_{dens}}{V_0} + \frac{\Delta V_{hot}}{V_0}$$
 (2.14.2-4)

4) **IPRO=**3 
$$p = p_0 + \frac{\Delta V_{swg}}{V_0} + \frac{\Delta V_{dens}}{V_0} + \frac{\Delta V_{hot}}{V_0}$$
 (2.14.2-5)

ここで、
$$p_0: 初期ポロシティ、 \frac{\Delta V_{swg}}{V_0}: FP ガスバブルスエリング、$$
  
 $\frac{\Delta V_{dens}}{V_0}: 焼きしまり、 \frac{\Delta V_{hot}}{V_0}: ホットプレス$ 

ただし、IFSWELの選択によって、 $\frac{\Delta V_{swg}}{V_0}$ の内容が決定される。

### (2) 生成したリム組織の熱的影響(ポロシティ変化)を考える場合 (HBS=1, 2)

リム組織のあるペレットリング要素の熱伝導率は、2.12.3.3 項の(2.12.3-16)、(2.12.3-17)式を再 記して

Ikatsu, Bekker らの式 
$$\lambda_{rim} = \lambda_{Bx} \cdot (1 - p_{rim})^{1.6}$$
 (2.14.2-6)

Billaux らの式 
$$\lambda_{rim} = \lambda_{Bx} \cdot \left(\frac{1-p_{rim}}{0.95}\right)^{2.5}$$
 (2.14.2-7)

とする。(2.12.3-3 項のリム組織モデルの説明参照)

リム組織が無いペレット要素の熱伝導率については、(2.14.2-1)式を適用する。

### (3) 密度低下効果

**IFEMOP, MESH, HBS, IPRO**の値にかかわらず、**IFSWEL=0** or 1の場合(Chubb & Zimmermann + FEMAXI-III model=FEMAXI model) は、(2.14.2-1)式にスエリングの影響係数をかけることができる。すなわち、固体スエリングを $\frac{\Delta V_{sws}}{V_0}$ 、固体スエリングによる密度低下のファクターを $f_D$ と

して、

$$\lambda^* = f_D \cdot \lambda = f_D \cdot F(p) \cdot \lambda_{100\%TD}(T, Bu, \dots)$$
(2.14.2-8)

とする。ただし Name-list parameter FDENSF を用いて、

**FDENSF=0** (Default) の場合、 $f_D = 1.0$ ,

=1 の場合 
$$f_D = 1.0 - \frac{\Delta V_{sws}}{V_0}$$
 (2.14.2-9)

とする。これは、リム組織が生成したリング要素には適用しない。

# 2.14.3 スエリングモデルの内容と選択

### (1) 定義と内容

- ① 粒内ガスバブルによるスエリングを $S_{intra}$ とする。
- ② 粒界ガスバブルによるスエリングを $S_{inter}$ とする。
- ③ ガスバブルスエリング全体を $S_{sg} = S_{intra} + S_{inter}$ とする。
- ④ 固体 FP スエリングを  $S_{solid} = S_{ss}$  とする。
- ⑤ リム相生成によるポロシティ増加によるスエリングを*S<sub>rim</sub>と*する。

これらが入力パラメータによって指定されるモデルにより定義され、以下のように組み合わされて算出される。

### (2) スエリングモデルのオプション指定:

① **IFSWEL=0**;  $S_{sg}$  = Chubb & Zimmermann model<sup>(2.49)</sup> + FEMAXI-III<sup>(1.2)</sup>のモデル、すなわち

$$S_{solid} = \left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{ss} = 0.0025 \cdot SWSLD \text{ per } 10^{20} \text{ fissions/cm}^3$$
(2.14.2-10)

SWSLD=1.0 (Default)

とする。

$$-143-$$

② IFSWEL=1; FEAMXI model

1) FP ガスバブルから 
$$S_{sg} = S_{intra} + S_{inter}$$
 を計算する。  
2)  $S_{solid} = \left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{ss} = 0.0025 \cdot SWSLD$  per 10<sup>20</sup> fissions/cm<sup>3</sup> (2.14.2-11)  
SWSLD=1.0 (Default)

とする。

- ③ IFSWEL=2; MATPRO-9、
- (4) **IFSWEL=3**; Kosaka model<sup>(2.50)</sup>,
- (5) **IFSWEL=**4; Studzvik<sup>(2.51)</sup>,
- 6 **IFSWEL=5**; Hollowell model<sup>(2.52)</sup>,

(以上の各モデルについては第4章参照)

 ⑦ DENSWEL=1; Swelling と Densification の各モデルが融合されて、ペレット体積変化が算 出される。

### (3) FGR モデルとの関係

**IFSWEL=0**, 2, 3, 4, 5 の場合、swelling は FP ガスバブルの成長計算とは無関係に決まる。

**IGASP=0**,1 + IFSWEL=1 の場合、平衡論的バブル成長モデルによる swelling。

**IGASP=2** + IFSWEL=1 の場合、速度論的バブル成長モデルによる swelling。

# 2.14.4 FGR モデルの選択

平衡論: IGASP=0,1 か、 速度論: IGASP=2 のいずれかを選択する。

(1) IGASP=0(平衡論)の場合

結晶粒内 FP ガス原子の粒内バブル半径と数密度モデルの選択

- A) White+Tucker model 厳密解方式の平衡論モデル → GBFIS=0 とする。
- B) 照射再溶解モデル(fission 片による気泡破壊、vacancy model を含む) → GBFIS=1 とする。

### (2) IGASP=1(平衡論)の場合、および IGASP=2(速度論)の場合

固体内 FP ガス原子の粒内バブル半径と数密度モデルは Lösönen モデル(半径と数密度を計算)のみ実行される。他モデルの選択指定はできない。

(3) FP ガス原子の拡散定数 (IDCNST=0,1,2,3,4,5,6,....,)

IDCNST による拡散定数モデルは IGASP などの指定とは無関係に指定できる。

# 2.14.5 バブル成長とスエリング

IFSWEL=0, 2, 3, 4, 5 ではバブルスエリングを計算しない。IFSWEL=1 ではバブルスエリング を計算する。DENSWL=1 と指定すると、DENSF と IFSWEL の指定に従って焼きしまり効果とス エリング効果をスムーズに融合したペレット体積変化を計算する。

## (1) 粒界バブルスエリングと粒内バブルスエリング

①**IGASP=0,1**では、IFSWEL=1で計算可能。 粒界・粒内バブルに対して、どのようなモデルで その半径や数密度を計算してスエリングを算出するかは、粒合体成長モデルに依存する。

②IGASP=2 では、IFSWEL=1 でバブルスエリングを計算可能である。すなわち、粒界・粒内バブ ルのサイズと数密度からスエリング量を算出する(IGASP=0,1 と同じ)。ただし、閉塞・合体は、 モデルと制御パラメータは前述したように暫定的であり、未検証である。

(2) ポロシティ(密度): ポロシティ(密度)は、IPRO, IDENSWEL で制御する。計算上、ペレット熱 伝導率に影響を与えることができる。

## (3) IGASP=0,1におけるバブルの合体・粗大化

IFSWEL=1においては、①~④で計算されたバブル体積によるスエリングが計算される。

# (4) IGASP=2 におけるバブルの合体・粗大化、再閉塞と成長・再放出

暫定的なモデルを入れてある。IFSWEL=1 においては、暫定モデルで計算されたバブル体積に よるスエリングが計算される。

表 2.14.1	FP ガス放出モデルとス:	エリングモデル	~の組み合わせの-	一覧
----------	---------------	---------	-----------	----

	A 2.1 1.1		
A	IGASP=0 IFSWEL=0, 2,	成長は状態方程式による平衡論。 (White-Speight-Tucker model)	平衡論・状態方程式により粒内 バブル半径を厳密に計算。
	3, 4, 5	バブル swelling は考えない。	Swelling は考えない。
В	IGASP=0 IFSWEL=0-5	成長は状態方程式による平衡論。	平衡論・状態方程式により粒内 バブル半径を厳密に計算。 Swelling への寄与を計算。
С	IGASP=1 IFSWEL=0-5	IFSWEL ねよい parameter により、swelling への寄与を計算可能。	粒内バブル成長は Lösönen モ デル。IFSWEL 指定により Swelling への寄与を考慮可能。
D	IGASP=2, IFSWEL=0-5	Kogai 速度論モデルに基づく。IFSWEL およ び他の parameter により、swelling への寄 与、合体・粗大化を計算可能。ただしその 論理は IGASP=0,1 とは異なる。	粒内バブル成長は Lösönen モ デル。IFSWEL 指定により Swelling への寄与を考慮可能。

# 2.14.6 リム組織モデルと他のモデルオプションとの関係

# (1) HBS の指定

**HBS=0**: HBS=0 の場合、IGASP の値にかかわらず IRIM、RFGFAC によってリム組織からの追加 FP ガス放出率を指定できる。

HBS=1,2:リム組織の燃焼度を設定する。IRIM、RFGFACの指定は無効であるが、IGASPの値にかかわらず「リム組織モデル」を使用できる。

ただし、HBS=0,1,2のいずれも MESH=2,3,4 の指定が必要である。

# 2.15 ギャップ内ガスの拡散・流動モデル

ギャップ内ガスの拡散と流動に関する計算方法を説明する。



図 2.15.1 ギャップ内ガスの拡散・流動計算の過程

### 2.15.1 拡散計算の仮定と方法

以下のような仮定および方法にもとづいてギャップ内のガスの拡散(流動)の計算を行う。ただしこれは IST=1 の場合のみであり、IST=0 (default)の場合は瞬時完全混合を仮定する。

- ヘリウムと異種のガス、すなわちキセノン、クリプトン、窒素(またはアルゴン)はそれ ぞれ瞬時に完全混合するものと仮定する。窒素(またはアルゴン)の拡散はヘリウムの拡 散で代表させ、クリプトンの拡散はキセノンの拡散で代表させ、ヘリウムとキセノンのみ の2成分系混合ガスの成分濃度差による相互拡散について計算を行う。
- ② ヘリウムとキセノンはペレットー被覆管のギャップ部を通って相互拡散するものとする。
- ③ 相互拡散の計算は Fick の第1法則により陰解法的に行い、燃料棒内圧力差によるガス流動 とは独立とする。
- ④ 拡散の計算が行われている間、燃料棒内圧は一様であるとする。
- ⑤ 燃料棒内圧力差による軸方向セグメント間のガス流動は各タイムステップにおいて瞬時に生じて、燃料棒内の圧力平衡は瞬時に達成せられると仮定する。
- (1) 計算方法

最初に、記号の一覧を示す。

N:ガスモル数 (mole) n:モル密度 (mole/m<sup>3</sup>)  $D^{12}$ :相互拡散定数 (m<sup>2</sup>/s) ( $D^{12} = D^{21}$ ) T:温度 (K) V:体積 (m<sup>3</sup>) C: モル分率 ( $C_1 = n_1 / (n_1 + n_2)$ ) 添え字として i:ガスの種類 ( $1 = \pm t / \lambda, 2 = - y - y - \lambda$ ) j:軸セグメント ( $j = P_L, 1, 2, 3, \dots, N, P_U$ )

 $(P_L: 下部プレナム、 P_U: 上部プレナム)$ 

特にモル密度については、添え字を、

 $n_{i,j}$ : セグメントjにおけるガスiの密度  $n_j$ : セグメントjにおける全ガスの密度

のように用いるものとする。

仮定から体系は次の図 2.15.2 のようにモデル化することができる。



図 2.15.2 ガス拡散・流動モデル

セグメントjにおいてガスiの総量は

$$N_{i,j} = n_{i,j} V_j$$
  
=  $C_{i,j} n_j V_j = \frac{P}{R} C_{i,j} \frac{V_j}{T_j}$  (2.15.1)

である。

ここで各セグメントは流路断面積 $S_j$ をもち、各セグメントの長さを $2l_j$ とし、またセグメント  $j \ge j+1$ の境界位置を \* で表すとする。

単位時間にセグメント*j*から \* を越えて*j*+*l*に流入するガス 1(Xe)の量 $G_1(j \rightarrow j+1)$ を求める。 単位時間にセグメント*j*から \* を越えて流出するガス 1(Xe)の量は、 Fick の法則により、

$$G_{1}(j \to *) = S_{j} D_{j}^{12} \frac{n_{1,j} - n_{1,*}}{l_{j}}$$
(2.15.2)

と書ける。同様に、単位時間に \* を越えて j+1 に流入するガス 1(Xe)の量は、

$$G_{1}(* \to j+1) = S_{j+1}D_{j+1}^{12} \frac{n_{1*} - n_{1,j+1}}{l_{j+1}}$$
(2.15.3)

と書ける。連続性の条件により

$$G_1(j \to *) = G_1(* \to j+1)$$

が成り立つことから

$$S_{j}D_{j}^{12} \frac{n_{1,j} - n_{1,*}}{l_{j}} = S_{j+1}D_{j+1}^{12} \frac{n_{1*} - n_{1,j+1}}{l_{j+1}}$$
(2.15.4)

を得る。これを $n_{1*}$ について解けば

$$n_{1,*} = \frac{S_j D_j^{12} l_{j+1} n_{1,j} + S_{j+1} D_{j+1}^{12} l_j n_{1,j+1}}{S_{j+1} D_{j+1}^{12} l_j + S_j D_j^{12} l_{j+1}}$$
(2.15.5)

となる。(2.15.2)式を用いることにより

$$G_{1}(j \to j+1) = G_{1}(j \to *)$$

$$= \frac{S_{j}D_{j}^{12}S_{j+1}D_{j+1}^{12}}{S_{j+1}D_{j+1}^{12}l_{j} + S_{j}D_{j}^{12}l_{j+1}} (n_{1,j} - n_{1,j+1})$$
(2.15.6)

を得る。ここで 
$$F_{j,j+1} = \frac{S_j D_j^{12} S_{j+1} D_{j+1}^{12}}{S_{j+1} D_{j+1}^{12} l_j - S_j D_j^{12} l_{j+1}}$$
(2.15.7)

として

$$G_1(j \to j+1) = F_{j,j+1}(n_{1,j} - n_{1,j+1})$$
 (2.15.8)

### の様に書く。

一方、ガス2(He)についても同様に

$$G_2(j \to j+1) = F_{j,j+1}(n_{2,j} - n_{2,j+1})$$
(2.15.9)

を得る。

(2.15.8)式と(2.15.9)式を加えることにより混合ガス全体の流入量を得ることができる。

$$G(j \to j+1) = F_{j,j+1}(n_j - n_{j+1})$$
(2.15.10)

ここで、

$$n_j = n_{1,j} + n_{2,j}$$
,  $n_{j+1} = n_{1,j+1} + n_{2,j+1}$  (2.15.11)

である。

一般にセグメントjとj+1のギャップ部の温度が異なることから、平衡状態においても

 $n_i \neq n_{i+1}$ 

しかるに(2.15.10)式によれば、セグメント *j* と *j*+1 が平衡していても、数値計算上セグメント *j* から *j*+1 に向かう正味の流れが生じてしまうことになる。これは温度勾配を持つ場に Fick の第1 法則(濃度勾配による拡散)のみを適用した結果である。この数値計算上の流れを打消すためには(2.15.9)式及び(2.15.10)式にそれぞれ温度差の効果を表わす第2項を加える必要がある。

(2.15.10)式に加えるべき第2項は、

$$G(j \to j+1) = F_{j,j+1} \left\{ \left( n_j - n_{j+1} \right) - \left( \overline{n}_j - \overline{n}_{j+1} \right) \right\}$$
(2.15.12)

であり、 $\overline{n}_{i}$ ,  $\overline{n}_{i+1}$ は理想気体の法則からそれぞれ

$$\overline{n}_{j} = \frac{P}{R} \frac{1}{T_{j}}, \, \overline{n}_{j+1} = \frac{P}{R} \frac{1}{T_{j+1}}$$
(2.15.13)

で与えられる。

各成分についての流量、(2.15.8)式及び(2.15.9)式はそれぞれ

$$G_{1}(j \to j+1) = F_{j,j+1}\left\{\left(n_{1,j} - n_{1,j+1}\right) - \left(\overline{n}_{1,j} - \overline{n}_{1,j+1}\right)\right\}$$
(2.15.14)

$$G_{2}(j \rightarrow j+1) = F_{j,j+1}\left\{\left(n_{2,j} - n_{2,j+1}\right) - \left(\overline{n}_{2,j} - \overline{n}_{2,j+1}\right)\right\}$$
(2.15.15)

となる。ここで、

$$\overline{n}_{1,j} = \frac{P}{R} \frac{\overline{C}_1}{T_j} , \quad \overline{n}_{1,j+1} = \frac{P}{R} \frac{\overline{C}_1}{T_{j+1}}$$
(2.15.16)

$$\overline{C}_{1} = \frac{N_{1,j} + N_{1,j+1}}{V_{j} + V_{j+1}} = \frac{n_{1,j}V_{j} + n_{1,j+1}V_{j+1}}{V_{j} + V_{j+1}}$$
(2.15.17)

$$\overline{n}_{2,j} = \frac{P}{R} \frac{\overline{C}_2}{T_j} , \quad \overline{n}_{2,j+1} = \frac{P}{R} \frac{\overline{C}_2}{T_{j+1}}$$
 (2.15.18)

$$\overline{C}_{2} = \frac{N_{2,j} + N_{2,j+1}}{V_{j} + V_{j+1}} = \frac{n_{2,j}V_{j} + n_{2,j+1}V_{j+1}}{V_{j} + V_{j+1}}$$
(2.15.19)

$$\overline{C}_1 + \overline{C}_2 = 1 \tag{2.15.20}$$

である。

# (2) He-Xe相互拡散モデルの陰解法化

境界面R (セグメントj-l  $\geq j$ の境界面)を通してセグメントjに拡散するガス1 (Xe)の流束  $J_{1,R}$ は、

$$J_{1,R} = F_{j-1,j} \left\{ \left( n_{1,j-1} - n_{1,j} \right) - \left( \overline{n}_{1,j-1} - \overline{n}_{1,j} \right) \right\}$$
(2.15.21)

境界面 S (セグメント $j \ge j+1$ の境界面)を通してセグメントj+1に拡散するガス1 (Xe)の流束 $J_{1,S}$ は、

$$J_{1,S} = F_{j+1,j} \left\{ \left( n_{1,j} - n_{1,j+1} \right) - \left( \overline{n}_{1,j} - \overline{n}_{1,j+1} \right) \right\}$$
(2.15.22)

である。すると、セグメントj内のキセノンガスの量の変化は

$$V_{j} \frac{\partial n_{1,j}}{\partial t} = J_{1,R} - J_{1,S}$$
(2.15.23)

となる。

(2.15.23)式を(2.15.21)および(2.15.22)式を用いて陰解法を用いて差分化すると次式を得る。ただし、タイムステップ変数として k を用いる。

$$\frac{n_{1,j}^{k+1} - n_{1,j}^{k}}{\Delta t} = \frac{1}{V_{j}^{\theta 1}} \left\{ F_{j-1,j}^{\theta 1} \left[ \left( n_{1,j-1}^{\theta 2} - n_{1,j}^{\theta 2} \right) - \left( \overline{n}_{1,j-1}^{\theta 1} - \overline{n}_{1,j}^{\theta 1} \right) \right] - F_{j-1,j}^{\theta 1} \left[ \left( n_{1,j}^{\theta 2} - n_{1,j+1}^{\theta 2} \right) - \left( \overline{n}_{1,j}^{\theta 1} - \overline{n}_{1,j+1}^{\theta 1} \right) \right] \right\}$$
(2.15.24)

ここで、

 $\theta_1$ = 温度、容積、圧力、平衡モル比に関する補間  $\theta_2$ = モル濃度に関する補間

である。 $\theta_1$ は軸方向収束ループ内での補間パラメータであり、 $\theta_2$ は相互拡散計算での補間パラメータである。 $\theta_1$ は軸方向収束ループ内では変化するが、相互拡散計算では変化しないので定数として扱う。

調整パラメータ THG1,THG2  $\theta_1$ 、 $\theta_2$ はそれぞれ THG1,THG2 で指定できる。Default=1.0

したがって、(2.15.24)式について

$$n_{1,j}^{\theta 2} = (1 - \theta_2) n_{1,j}^k + \theta_2 n_{1,j}^{k+1}$$
(2.15.25)

の関係を入れて整理すると、

$$\frac{n_{1,j}^{k+1} - n_{1,j}^{k}}{\Delta t} = \frac{\theta_{2} F_{j-1,j}^{\theta 1}}{V_{j}^{\theta 1}} n_{1,j-1}^{k+1} - \frac{\theta_{2} \left\{ F_{j,j+1}^{\theta 1} + F_{j-1,j}^{\theta 1} \right\}}{V_{j}^{\theta 1}} n_{1,j}^{k+1}} \\
+ \frac{\theta_{2} F_{j-1,j}^{\theta 1}}{V_{j}^{\theta 1}} n_{1,j+1}^{k+1} + \frac{1}{V_{j}^{\theta 1}} \left\{ F_{j-1,j}^{\theta 1} \left[ (1 - \theta_{2}) \left( n_{1,j-1}^{k} - n_{1,j}^{k} \right) - \left( \overline{n}_{1,j-1}^{\theta 1} - \overline{n}_{1,j+1}^{\theta 1} \right) \right] - F_{j,j+1}^{\theta 1} \left[ (1 - \theta_{2}) \left( n_{1,j}^{k} - n_{1,j+1}^{k} \right) - \left( \overline{n}_{1,j}^{\theta 1} - \overline{n}_{1,j+1}^{\theta 1} \right) \right] \right\}$$
(2.15.26)

となる。(2.15.26)式を整理して

$$A_{j}n_{1,j-1}^{k+1} + B_{j}n_{1,j}^{k+1} + C_{j} \cdot n_{1,j+1}^{k+1} = D_{j}$$
(2.15.27)

の形に書く。ここで、

$$A_{j} = -\frac{\theta_{2} F_{j-1,i}^{\theta_{1}}}{V_{j}^{\theta_{1}}} \Delta t$$
(2.15.28)

$$B_{j} = 1 + -\frac{\theta_{2} \left\{ F_{j-1,i}^{\theta_{1}} + F_{j,j+1}^{\theta_{1}} \right\}}{V_{j}^{\theta_{1}}} \Delta t$$
(2.15.29)

$$C_{j} = -\frac{\theta_{2} F_{j,j+1}^{\theta_{1}}}{V_{j}^{\theta_{1}}} \Delta t$$
(2.15.30)

$$D_{j} = \frac{1}{V_{j}^{\theta 1}} F_{j,j-1}^{\theta 1} (1-\theta_{2}) \Delta t \ n_{1,j-1}^{k} + \left\{ 1 - \frac{1}{V_{j}^{\theta 1}} \left( F_{j,j-1}^{\theta 1} + F_{j,j+1}^{\theta 1} \right) (1-\theta_{2}) \Delta t \right\} n_{1,j}^{k} + \frac{1}{V_{j}^{\theta 1}} F_{j,j+1}^{\theta 1} (1-\theta_{2}) \Delta t \ n_{1,j+1}^{k} + \frac{1}{V_{j}^{\theta 1}} \left\{ F_{j,j+1}^{\theta 1} \left( \overline{n}_{1,j}^{\theta 1} - \overline{n}_{1,j+1}^{\theta 1} \right) - F_{j,j-1}^{\theta 1} \left( \overline{n}_{1,j-1}^{\theta 1} - \overline{n}_{1,j}^{\theta 1} \right) \right\} \Delta t$$

$$(2.15.31)$$

である。

上下部セグメント(プレナムも含めて)について考える。

第1セグメントでは境界面Rはないため

$$V_{1} \frac{\partial n_{1,1}}{\partial t} = -J_{1,S}$$

$$= -F_{1,2} \Big[ \Big( n_{1,1} - n_{1,2} \Big) - \Big( \overline{n}_{1,1} - \overline{n}_{1,2} \Big) \Big]$$
(2.15.32)

である。したがって

$$\frac{n_{1,1}^{k+1} - n_{1,1}^{k}}{\Delta t} = -\frac{\theta_{2} F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} n_{1,1}^{k+1} + \frac{\theta_{2} F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} n_{1,2}^{k+1} - \frac{(1 - \theta_{2}) F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} n_{1,1}^{k} + \frac{(1 - \theta_{2}) F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} n_{1,2}^{k} + \frac{F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} (\overline{n}_{1,1}^{\theta_{1}} - \overline{n}_{1,2}^{\theta_{1}})$$
(2.15.33)

となる。この式を

$$B_{1} = 1 + \frac{\theta_{2} F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} \Delta t , C_{1} = -\frac{\theta_{2} F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} \Delta t$$

$$D_{1} = \left(1 - \frac{(1 - \theta_{2}) F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} \Delta t\right) n_{1,1}^{k} + \frac{(1 - \theta_{2}) F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} \Delta t n_{1,2}^{k} + \frac{F_{1,2}^{\theta_{1}}}{V_{1}^{\theta_{1}}} (\overline{n}_{1,1}^{\theta_{1}} - \overline{n}_{1,2}^{\theta_{1}}) \Delta t$$
(2.15.34)

とおいて整理すれば、

$$B_1 \cdot n_{1,1}^{k+1} + C \cdot n_{1,2}^{k+1} = D_1 \tag{2.15.35}$$

### と書ける。

同様に最上部の第 n セグメントでは境界面 S はないので、

$$V_{n} \frac{\partial n_{1,n}}{\partial t} = -J_{1,R}$$

$$= -F_{n-1,n} \Big[ \Big( n_{1,n-1} - n_{1,n} \Big) - \Big( \overline{n}_{1,n-1} - \overline{n}_{1,n} \Big) \Big]$$
(2.15.36)

である。したがって、

$$A_{n} = -\frac{\theta_{2} F_{n-1,n}^{\theta_{1}}}{V_{n}^{\theta_{1}}} \Delta t , B_{n} = 1 + \frac{\theta_{2} F_{n-1,n}^{\theta_{1}}}{V_{n}^{\theta_{1}}} \Delta t$$

$$D_{n} = \frac{(1-\theta_{2}) F_{n-1,n}^{\theta_{1}}}{V_{n}^{\theta_{1}}} \Delta t n_{1,n-1}^{k} + \left(1 - \frac{(1-\theta_{2}) F_{n-1,n}^{\theta_{1}}}{V_{n}^{\theta_{1}}} \Delta t\right) n_{1,n,n}^{k} - \frac{F_{n-1,n}^{\theta_{1}}}{V_{n}^{\theta_{1}}} (\overline{n}_{1,n-1}^{\theta_{1}} - \overline{n}_{1,n}^{\theta_{1}}) \Delta t$$
(2.15.37)

とおくと、

$$A_n \cdot n_{1,n-1}^{k+1} + B_n \cdot n_{1,n}^{k+1} = D_n$$
(2.15.38)

が成り立つ。

以上をまとめると、ガス1の拡散について次のような方程式を得る。

$$\begin{bmatrix} B_{1}C_{1} & & & \\ A_{2}B_{2}C_{2} & & & \\ A_{3}B_{3}C_{3} & & & \\ & \ddots & & \\ & A_{n-2}B_{n-2}C_{n-2} & & \\ & A_{n-1}B_{n-1}C_{n-1} & & \\ & A_{n}B_{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_{1,1} \\ n_{1,2}^{k+1} \\ n_{1,3}^{k+1} \\ \vdots \\ n_{n}^{k+1} \\ n_{1,n-1}^{k+1} \\ n_{1,n-1}^{k+1} \\ n_{1,n-1}^{k+1} \\ n_{1,n-1}^{k+1} \\ D_{2} \\ D_{3} \\ \vdots \\ \vdots \\ D_{3} \\ \vdots \\ D_{n} \\ D_{n-2} \\ D_{n-1} \\ D_{n} \end{bmatrix}$$

$$(2.15.39)$$

(2.15.39)式を解くことにより、各セグメントのガス濃度が求められる。

### (3) 相互拡散定数

ガスの相互拡散定数は、Presentの式を用いる<sup>(2.53)</sup>。すなわち、

$$D^{12} = \frac{3}{8} \left(\frac{\pi kT}{2m^*}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{n\pi d_{12}^2}$$
(2.15.40)

である。ここで

$$m^{*} = \frac{m_{1}m_{2}}{m_{1} + m_{2}} \quad (m: 1 \, \text{分子の重量})$$

$$d_{12} = \frac{1}{2} (d_{1} + d_{2}) \quad (d: \text{分子の直径})$$

$$n = n_{1} + n_{2} \quad (\text{分子密度})$$

$$k: \quad \text{ボルツマン定数}$$

$$T: \quad \text{温度} \quad (K)$$

である。

## (4) 圧力調整の計算

各タイムステップの終りにおいて、各セグメントにおける全ガスモル数(全種類の合計)を $N_j$ とすると、

$$N_{j} = \sum_{i} N_{ij}$$
 (*i*はガスの種類) (2.15.41)

$$N = \sum_{i} N_{j} \tag{2.15.42}$$

と書ける。

理想気体の法則より

$$P = N \cdot R \cdot \frac{1}{\sum_{j} \left(\frac{V}{T}\right)_{j}}$$
(2.15.43)

が成り立つことから、圧力調整後のセグメントjにおける全モル数を $N'_i$ とすると

$$N'_{j} = \frac{P}{R} \left(\frac{V}{T}\right)_{j}$$
(2.15.44)

を得る。

*N<sub>j</sub>*と*N<sub>j</sub>*,の相違に対しては、ペレットスタックの下部から順に隣接セグメント間の収支により 調整していく(図 2.15.3 参照)。 すなわち、

$$f_{ij}:$$
移動前のセグメント $j$ における $i$ の割合

とすると、移動後のセグメントjにおけるガスiのモル数は

$$N'_{ij} = f_{ij} \left\{ N_j - \sum_k N_{j \to k} \right\} + \sum_l f_{il} N_{l \to j}$$
(2.15.45)

である。



図2.15.3 圧力調整の計算(縦軸・モル数)

Eデルパラメータ IST 上記のギャップ内ガス流動・拡散モデルを使用する場合には IST=1 を指定する。IST の標準値は IST=0 であり、この場合は瞬時完全混合モデルである。

## 2.15.2 燃料棒内空間体積の求め方

FEMAXI コードでは、燃料棒内空隙体積を A) プレナム体積、B) ペレットー被覆管ギャップ体 積、C) ペレット中心孔体積、D) スタック内部の自由ガス体積の 4 つの部分に分ける。これは、 圧力計算をする場合、各体積毎に参照温度が違うためである。スタック内の自由ガス体積は、デ ィッシュ部体積、チャンファ体積、ペレット端面間ギャップ体積、およびクラック空隙空間から 成る。この A)~D)の部分のうち、全長力学計算では A)、B)、C)の部分が計算結果を反映した変化 をするが、D) スタック内の自由ガス体積の変化は、ディッシュ部体積、チャンファ体積、ペレ ット端面間ギャップ体積の変化については考慮されず、クラック空隙空間については name-list parameter IRELCV (default=0)のオプションにより異なる。ただし局所力学計算は、燃料棒内空間 の計算を行わず、全長力学計算の結果として決定された自由ガス体積空間と燃料棒内圧を境界条 件とした計算を行う。プロット出力 IDNO=4 (「プレナム体積」)では、以上の部分を含めた全 燃料棒内空隙体積を出力する。

### (1) 中心孔体積

中心孔体積は、ペレット初期内半径を $r_{pi}$ 、軸方向セグメントjの軸方向長を $l_z^j$ とすると、

$$V_h^j = \pi r_{pi}^2 l_Z^j \tag{2.15.46}$$

で与えられる。ここで1ペレット長を $l_p$ 、ペレット1個当たりのペレット端面間ギャップ体積を  $V_p$ 、クラック空隙空間体積を $V_{crack}$ とすると、

$$V_{p} = \pi r_{po}^{2} \Delta l / 2 \tag{2.15.47}$$

$$V_{crack} = 2\pi r_{po} u^{rel} l_p \tag{2.15.48}$$

ただし  $r_{po}: ペレット外半径$ 

 $\Delta l$ :ペレット端面間のすきま

u<sup>rel</sup>:ペレットの半径方向リロケーションによる変位

である。ただし、Δ*l* (ペレット端面間のすきま)は右図 2.15.4 のように 定義する。 Δ

さらにペレット1個当たりのディッシュ体積を $V_{dish}$ 、チャンファ部体 積を $V_{cham}$ とすれば、軸方向セグメントjにおけるスタック内の自由ガス 体積 $V_{int}^{j}$ は、

$$V_{\rm int}^{\,j} = \left( V_{dish} + V_{cham} + \pi r_{po}^2 \Delta l \,/\, 2 + 2\pi r_{po} u^{rel} \cdot l_p \right) \frac{l_Z^{\,j}}{l_p} \tag{2.15.49}$$



として与えられる。

### (2) プレナム体積とペレットー被覆管ギャップ体積

プレナム体積とギャップ体積については照射中での体積変化を考慮する。プレナム体積変化は、 スタック部分における軸方向セグメント長の変化を考慮して、次のようにして求める。 軸方向セグメント j でのペレットの体積平均熱膨張ひずみを $\mathcal{E}_{th}^{j}$ 、やきしまりひずみを $\mathcal{E}_{den}^{j}$ 、固体スウェリングひずみ $\mathcal{E}_{ss}^{j}$ をとすると、これらのひずみによる変化を考慮したときのセグメント長さ $\widetilde{l}_{Z,p}^{j}$ は、

$$\widetilde{l}_{Z,p}^{j} = \left(1 + \varepsilon_{th}^{j} + \varepsilon_{den}^{j} + \varepsilon_{ss}^{j}\right) l_{Z}^{j}$$
(2.15.50)

であたえられる。ただし、熱・力学モデルを連成した場合(IFEMOP>0)には、 $\tilde{l}_{z,p}^{j}$ は力学モデルの変形解から与えられる。

また、被覆管では熱ひずみを $\Delta \varepsilon_{c,th}^{j}$ 、照射成長によるひずみを $\Delta \varepsilon_{c,trr}^{j}$ とすると、これらのひずみによる変化を考慮した時のセグメント長さ $\tilde{l}_{z,c}^{j}$ は、

$$\widetilde{l}_{Z,C}^{\ j} = \left(1 + \varepsilon_{c,th}^{j} + \varepsilon_{c,trr}^{j}\right) l_{Z}^{\ j}$$

$$(2.15.51)$$

である。同様に、熱・力学モデルを連成した場合(IFEMOP>0)には、 $\tilde{l}_{z,c}^{j}$ は力学モデルの変形 解から与えられる。

また、プレナム長 $\tilde{l}_{Z,pl}$ に対しても、

$$\tilde{l}_{Z,pl} = \left(1 + \varepsilon_{c,th}^{pl} + \varepsilon_{c,irr}^{pl}\right) l_{Z,pl}$$
(2.15.52)

である。同様に、熱・力学モデルを連成した場合(IFEMOP>0)には、 $\tilde{l}_{Z,pl}$ は力学モデルの変形 解から与えられる。(詳細は、3.2節の燃料棒全長での力学的ふるまいの項を参照)

プレナムの体積変化  $\Delta V_{pl}$  は、

$$\Delta V_{pl} = \pi r_{cl}^2 \left( \sum_{j=1}^{NAXI} \left( \tilde{l}_{Z,c}^{\ j} - \tilde{l}_{Z,p}^{\ j} \right) + \tilde{l}_{Z,pl} - l_{Z,pl} \right)$$
(2.15.53)

となる。ここで NAXI は軸方向セグメント数、 $r_{ci}$  は被覆管内半径である。

したがって、プレナム体積は初期のプレナム体積を $V_{pl}$ とすると、

$$\widetilde{V}_{pl} = V_{pl} + \Delta V_{pl} \tag{2.15.54}$$

で与えられる。

一方、スタック部の軸方向セグメントjにおけるギャップ体積については、(2.6.46)式で求めた 燃料と被覆管のギャップ幅 $\delta$ を用いて、(ただし、 $\delta$ <0のときは $\delta$ =0とする)

$$\widetilde{V}_{gap,j} = 2\pi r_{ci} \cdot \delta \cdot \widetilde{l}_{Z,p}^{j}$$
(2.15.55)

として与える。

# (3) ディッシュ、チャンファー、ペレット端面間ギャップ体積

チャンファー空間の体積(図 2.15.5):

$$V_{chamfer} = \pi ab \left(\frac{Dp}{2} - \frac{a}{3}\right)$$
(2.15.56)

ディッシュ空間の体積(図 2.15.6):

$$V_{dish} = \frac{\pi d}{6} (d^2 + 3r^2)$$
(2.15.57)



図 2.15.5 チャンファー空間の体積

ペレット端面の傾きによるギャップ空間体積 (図 2.15.7):

$$V_{tilting} = \frac{1}{8} \left\{ \pi Dp \tan \theta \cdot (Dp^2 - Din^2) \right\}$$
(2.15.58)

ここで、Vtilting では  $tan \theta = 0.002$  とする。



図 2.15.6 ディッシュ空間の体積



図 2.15.7 ペレット端面の傾きに よる空間体積

#### (4) ペレット内クラック空隙空間

クラック空隙空間は、IRELCV=0 のときは体積変化を考慮しない。IRELCV=1 のときは、ペレット内のリロケーション歪変化に基づいてクラック空隙空間の増減を考慮する。

すなわち、

A= (リロケーション歪みによるギャップ体積の変化)

B= (リロケーションによって生じたペレット内クラック空隙空間)

として、リロケーション歪みの変化にもかかわらず A+B が一定値を保つようにするために 『ペレット内クラック空隙空間』の概念を導入した。しかし、IRELCV=0を使った場合、リロケ ーション歪みが変化すると A+B が一定値を保たないことになる。すなわち、内圧計算のために は、IRELCV=1 としなければならない。

IRELCV=1 としてリロケーション歪変化に基づいてクラック空隙空間の増減を考慮する場合、 被覆管がクリープダウンしてギャップが閉塞し、ペレットのリロケーションも押し戻されペレッ トに圧縮応力が発生すると、ペレット内空隙空間はゼロ値に近づいていく。これは、ペレットヤ ング率モデルと連動している。リロケーション体積については、ペレット剛性変化モデルが適用 される。詳細は 3.2.3 項に述べられる。

# 2.15.3 内部ガス圧力

燃料棒の内部ガスは理想気体としてふるまい、圧力は燃料棒内で一様であると仮定する。この とき、ガス圧力は次式で計算される。

$$P_{gas} = \frac{n_T \cdot R}{\frac{V_{pl}}{T_{pl}} + \sum_{j=1}^{M} \left(\frac{V_{gap}^{j}}{T_{gap}^{j}} + \frac{V_{h}^{j}}{T_{pi}^{j}} + \frac{V_{int}^{j}}{T_{av}^{j}}\right)}$$
(2.15.56)

ここで、

$$P_{gas}$$
: 燃料棒内ガス圧 (Pa)  
 $n_T$ : 全ガスモル数 (モル)  
 $R$ : ガス定数、8.314 Joule/K・mole  
 $V_{pl}$ : プレナム容積( $m^3$ )  
 $T_{pl}$ : プレナムガス温度( $K$ )  
 $T_w$ : 冷却水温度( $K$ )  
 $V_{gap}^j$ : 軸方向セグメント $j$ のギャップ容積( $m^3$ )  
 $V_h^j$ : 執方向セグメント $j$ の中心孔容積( $m^3$ )  
 $V_{int}^j$ : スタック内部の開気ガス容積( $m^3$ )

$$T_{gap}^{j}$$
:軸方向セグメント $j$ のギャップ温度 $(K) = 0.5(T_{ps}^{j} + T_{ci}^{j})$   
 $T_{pi}^{j}$ :軸方向セグメント $j$ の中心温度 $(K)$   
 $T_{av}^{j}$ :軸方向セグメント $j$ のペレット体積平均温度 $(K)$ 

である。なお、下部にもプレナムが存在する場合には、(2.15.56)式は下式で与えられる。

$$P_{gas} = \frac{n_T \cdot R}{\frac{V_{pl,L}}{T_{pl,L}} + \frac{V_{pl,U}}{T_{pl,U}} + \sum_{j=1}^{M} \left(\frac{V_{gap}^j}{T_{gap}^j} + \frac{V_h^j}{T_{pi}^j} + \frac{V_{int}^j}{T_{av}^j}\right)}$$
(2.15.57)

ここで、

$$V_{pl,L}$$
:下部プレナム容積( $m^3$ )  
 $T_{pl,L}$ :下部プレナムガス温度( $K$ )  
 $V_{pl,U}$ :上部プレナム容積( $m^3$ )  
 $T_{pl,U}$ :上部プレナムガス温度( $K$ )

である。

なお、燃料棒内のガス圧力の計算に用いる温度は、

- ・プレナム部ガス温度はプレナム部の対応位置での冷却材温度+DTPL (下記(8)参照)、
- ・ギャップガス温度はギャップ部温度((ペレット表面温度+被覆管表面温度)/2)、
- ・ペレット中心孔ガス温度はペレット中心温度、
- ・スタック内の自由ガス温度はペレット体積平均温度

をそれぞれ用いる。

# 2.15.4 プレナムのガス温度と被覆管温度

下部プレナムガス温度は[冷却材入口温度+**DTPL**]として、上部プレナムガス温度は[冷却 材出口温度+**DTPL**]として与えられる。ただし **DTPL** の値は入力で指定可能である。

ただし、力学計算上、上部プレナムがなくて下部プレナムのみあるような燃料棒体系は計算で きない。

また、上部プレナム部被覆管の温度は、計算された冷却材出口温度に等しくおかれ、下部プレ ナム部被覆管の温度は冷却材入口温度に等しくおかれる。これらは被覆管外表面温度を入力で指 定するか算出するかにはかかわらない。ここで、上部プレナム部の冷却材温度=出口温度は、上 部プレナム部の直下のセグメントにおける燃料棒伝熱計算によって決定される。

ただし上部プレナムガス温度を [冷却材入口温度+DTPL] としても扱えるオプション

(ITPLEN=1) が用意されている。このとき、上下部プレナム部被覆管温度は冷却材入口温度で 与える。下部プレナムが存在した場合は、(2.15.57)式において、 $T_{pl,L} = T_{pl,U} = [冷却材入口温度 + DTPL] として扱う。$ 

調整パラメータ DTPL プレナムガス温度  $T_{pl}$ は、冷却材温度(下部プレナム は入口温度、上部プレナムは出口温度) $T_{cool}$ を用いて、 $T_{pl} = T_{cool} + \text{DTPL}$  で与えら れる。DTPL の標準値は 25K である。 なお、プレナムガス温度は常に冷却材温度+DTPL となるので、照射後の Cold 状態 での冷却材温度条件でも DTPL(℃)加算された値で、プレナムガス圧力が計算され るので注意が必要である。

|オプションパラメータ ITPLEN | ITPLEN=1 とした場合には、上部プレナムガス温度 を冷却材入口温度+DTPL として扱う。標準値は、ITPLEN=0 である。

# 2.15.5 照射途中における内部ガス状態変更のオプション

FEMAXIコードでは、入力パラメータ ITIME(20), GASPRN(20), PLENM(20), GMIXN(4, 20)を指定することにより、照射途中でも、内部ガスの組成、圧力、プレナム体積を最大 20 回ま で変更することができる。これは、商用炉でベース照射された燃料棒を計装加工して再照射する 場合の解析、および、試験照射中に内圧を増加させて被覆管のクリープ変形を調べる実験などの 解析を可能にするためのオプションである。ただし計装加工する場合、室温でゼロ出力状態を想 定している。したがってこの状態は、入力ファイルに組み込んだ照射履歴点(ITIME で指定) に おいてゼロ線出力を指定する。またその場合の燃料棒温度は、同時に指定したその照射履歴点の 冷却材温度に等しくなる。たとえば冷却材温度を 300K とした場合は、DTPL>0 であっても、プレナム部を含めすべて燃料温度は 300K となる。したがって、この場合のガスの圧力と体積は 300K のものとして考慮する必要がある。

# 2.16 タイムステップの制御

### 2.16.1 自動制御

タイムステップ幅は、コード内で自動的に制御され、計算全体に対する制限 $\Delta t_1$ 、熱計算のタイムステップの細分化のための制限 $\Delta t_2$ 、力学計算のタイムステップの細分化のための制限 $\Delta t_3$ 

が与えられる。

#### (1) 計算全体に対する制限

 $\Delta t_1$ は、以下の4条件の値のうち、最小の値とする。

- ① 1タイムステップ内での線出力の変化を10W/cm以下にする値。
- ② 1タイムステップ内での燃焼度の増加を100MWd/tUO<sub>2</sub>以下にする値。
- ③ 1タイムステップ内でのクリープひずみ速度を、クリープひずみ増分が前タイムステ ップの弾性ひずみを越えないようにする値。
- ④ 前タイムステップのタイムステップ幅を1.5 倍とした値。
- ⑤ 冷却水の流量変化が前タイムステップ冷却水流量の10%以内とした値。

条件①は、出力変化が 10W/cm 以上の出力変動した場合、解を安定させるために、1タイムス テップ中の出力変化が 10W/cm、条件②は、燃焼度変化が 100MWd/tUO<sub>2</sub>に収まるようにサブルー チン PHIST で決定される。

条件③は、全要素の変形計算においてクリープ計算での発散を防ぐ制約である。すなわち、

$$\Delta t \le \frac{\overline{\sigma}}{E \cdot \dot{\overline{\varepsilon}}^c} \cdot \text{EFCOEF}$$
(2.16.1)

とする。

条件④は、出力が急変した場合、前ステップで用いた Δt<sub>1</sub>の 1.5 倍以下になるような制限である。 条件⑤は、冷却水流量が急変した場合、流量変化量が前ステップでの流量の 10%以内になるようにタイムステップ幅を制限したものである。

ただし、熱的解析において、 $\Delta t_1$ より小さなタイムステップ $\Delta t_2$ で計算されることがある。

また、燃料棒全長の力学解析および局所力学解析では、その内部だけで、被覆管とペレットの 接触状態の変化などにより、Δt<sub>1</sub>の細分化が行われる。3章 3.2 および 3.3 節を参照のこと。

#### (2) 熱計算のタイムステップの細分化のための制限

 $\Delta t_2$ は、 $\Delta t_1$ を細分化するタイムステップ幅で、100ms または $\Delta t_1$ を上限として、ガスの拡散流 動が各軸方向セグメントでの平衡に達するまでの時間と、セグメント間のガス最大移動量および 圧力調整条件で決定する時間幅のうちもっとも短いものとして決定する。

セグメント毎の平衡に達するまでの時間は、(2.16.23)式を参考にして、

$$\Delta t_{j}^{i} = \frac{\left(n_{1,j} - \overline{n}_{1,j}\right) V_{j}}{J_{1,R} - J_{1,S}}$$
(2.16.2)

である。ここで添字 i は軸方向セグメント番号である。

次に、セグメント間のガス最大移動量から決定される時間を考える。セグメント間の最大移動 モル数を $N_{max}$ とすれば、 $(J_{1,R})_i = (J_{1,S})_{i-1}$ であることから、 $(J_{1,R})_i$ を用いて記述すれば、

$$\Delta t_{j}^{2} = \frac{N_{\max}}{\left(J_{1,R}\right)_{j}}$$
(2.16.3)

である。

さらに圧力調整(ガスの流動)条件から決まる時間を考える。瞬時の圧力平衡の仮定より、ガ スがセグメント間を往来することによる計算上の数値的振動が生じることが考えられる。こうし た解の振動を防ぐために、各セグメントにおけるガス放出量に対する制限を与える必要がある。 セグメント毎のガス放出速度(mol/s)を*B*とすると、制限は、

$$\Delta t_j^3 = \frac{N_{\text{max}}}{B_j} \tag{2.16.4}$$

となる。これらの条件からΔt,は、

$$\Delta t_{21} = \min\left(\Delta t_1^1, \Delta t_2^1, \cdots, \Delta t_n^1\right) \cdot \eta_2 \tag{2.16.5}$$

$$\Delta t_{22} = \min\left(\Delta t_1^2, \Delta t_2^2, \cdots, \Delta t_n^2\right)$$
(2.16.6)

$$\Delta t_{23} = \min\left(\Delta t_1^3, \Delta t_2^3, \cdots, \Delta t_n^3\right)$$
(2.16.7)

を用いて、

$$\Delta t_2 = \min(\Delta t_{21}, \Delta t_{22}, \Delta t_{23})$$
(2.16.8)

で与えられる。ここで $\eta_2$ と、(2.16.3)、(2.16.4)式中の $N_{max}$ は、組み込みの制御パラメータである。

調整パラメータ DPXX, DPBU これらは $\Delta t_1$ に関係する。 DPXX は、1タイム ステップ内での線出力の変化幅であり、標準値は DPXX=10 (W/cm)。DPBU は、1タイ ムステップ内での燃焼度の増加幅であり、標準値は DPBU=100 (MWd/tUO<sub>2</sub>)。DPBU は、 従来 DPBU=500 を設定していたが、計算時間が異常に長くなる場合もあるため DPBU=100 に設定変更した。しかし多くの場合、計算時間短縮には、DPBU=500.0 と設 定すると有効である。DPXX は、計算時間が異常に長くかかる場合に設定を変更して再 計算するために有効であり、例えば DPXX=9.0 のように設定変更する。

調整パラメータ EFCOEF, AMLMX2, AMLX3, DTPR

(2.16.1)式のEFCOEFの標準値は 1.0。

(2.16.3)式 Nmax は AMLMX2 により指定できる。標準値 10<sup>-6</sup>(mole)。

(2.16.4)式 Nmax は AMLMX3 により指定できる。標準値 2×10<sup>6</sup>(mole)。

(2.16.5)式 η<sub>2</sub>はDTPR により指定できる。標準値は 0.01。

# 2.16.2 FP ガスモデルにおけるタイムステップ幅の決定

FP ガス放出モデルでは、2.16.1 項で与えられた $\Delta t_2$ を更に細分化する独自のタイムステップ幅 を用いて計算を行っている。タイムステップ幅の決定には、見かけの拡散係数D'と第2層での 節点間隔 $\Delta R_2$ を用いて、

$$\Delta t_3 = \frac{\Delta R_2^2}{D'} \times 0.05 \times \text{FMULT}$$
(2.16.9)

として与えている。

# 2.16.3 温度計算におけるタイムステップ幅の決定

非定常温度計算モデルでは、2.16.1 項で与えられた  $\Delta t_2$  を更に細分化する独自のタイムステップ幅を用いて計算を行っている。タイムステップ幅の決定には、熱拡散率  $K_i$  と径方向メッシュ幅  $\Delta r$ を用いて、

$$\Delta t_4 = \left\{ \frac{\left(\Delta r^2\right)}{K_i} \right\}_{\min} \cdot 10^6 \tag{2.16.10}$$

として与えられる。ここで、10<sup>6</sup>と非常に大きなファクターが掛かっているのは、 $\Delta r$ の非常に狭い酸化膜に対応するメッシュで $\Delta t_4$ が決定されるためであり、感度解析より経験的に定めた値である。

また、 $\Delta t_2$ に対して $\Delta t_4$ が非常に小さい値に設定される場合がある。 $\Delta t_4$ が $\Delta t_2$ の1/100以下の 場合には、非定常温度計算のタイムステップを進める場合に、 $\Delta t_2$ の区間を等間隔の $\Delta t_4$ で分割 するのではなく、 $\Delta t_4$ を初期値として、以降のタイムステップ幅は前ステップで用いた $\Delta t$ を2倍 した値としてタイムステップを進めることで、タイムステップ数の増加を抑えている。

一方、 $\Delta t_4$ を用いた非定常温度計算の結果、得られた温度計算値が異常な値となったり、温度 依存性のある物性値の繰り返し計算による決定において、繰り返し計算の回数が最大設定値の 20 回でも収束しない場合には、この計算結果を破棄して、 $\Delta t_4$ を 2/30 倍した値を新たに $\Delta t_4$ として 再計算する。この 2/30 倍は、感度解析より経験的に定めた値である。なお、このような処置を施 した結果、数値上の温度不安定は抑えられた。

# 参考文献 2

- (2.1) Uchida M., Otsubo N., Models of Multi-rod Code FRETA-B for Transient Fuel Behavior Analysis(Final Version), JAERI 1293(1984).
- (2.2) Ransom V.H., et al., RELAP5/MOD1 Code Manual Volume 1 : System Models and Numerical Methods, NUREG/CR-1826(EGG-2070), (1980).
- (2.3) Dittus F.W., Boelter L.M.K., Univ. Calif. Pubs. Eng.2, 443(1930).
- (2.4) Chen J., A Correlation for Boiling Heat Transfer to Saturated Fluids in Convective Flow, Process Design Developments, 5(1966).
- (2.5) Jens W.H., Lottes P.A., Analysis of Heat Transfer, Burnout, Pressure Drop and Density Data for High Pressure Water, ANL-4627(1951).
- (2.6) Bjornard T.A., Griffith P., PWR Blowdown Heat Transfer, ASME Symposium on the Thermal and Hydraulic Aspects of Nuclear Reactor Safety, Vol.1(1977).
- (2.7) Tong L.S., Weisman J., Thermal Analysis of Pressurized Water Reactors, American Nuclear Society (1970) 76-HT-9(1976).
- (2.8) Hsu Y.Y., Beckner W.D., A Correlation for the Onset of Transient CHF, cited in L.S. Tong, G.L.Bennett, NRC Water Reactor Safety Research Program, Nuclear Safety, 18, 1 January/February(1977).
- (2.9) Smith R.A., Griffith P., A Simple Model for Estimating Time to CHF in a PWR LOCA, Transactions of American Society of Mechanical Engineers,
- (2.10) Collier J.G., Convection Boiling and Condensation, London, McGraw-Hill Book Company, Inc.(1972).
- (2.11) SCDAP/RELAP5/MOD3.1 Code Manual, Vol.4: MATPRO-A, A Library of Materials Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis, NUREG/CR-6150 (1995).
- (2.12) Gazarolli F., Garde A.M. et al., Waterside Corrosion of Zircaloy Fuel Rods, EPRI-NP 2789 (1982).
- (2.13) MATPRO-09, A Handbook of Materials Properties for Use in the Analysis of Light Water Reactor Fuel Rod Behavior, USNRC TREE NUREG-1005 (1976).
- (2.14) Ohira K. and Itagaki N., Thermal Conductivity Measurements of High Burnup UO<sub>2</sub> Pellet and a Benchmark Calculation of Fuel Center Temperature", *Proc. ANS Topical Meeting on Light Water Reactor Fuel Performance*, pp.541-549, Portland, U.S.A., March (1997).
- (2.15) Wiesenack W. and Tverberg T., Thermal Performance of High Burnup Fuel In-pile
Temperature Data and Analysis-, Proc. 2000 Int. Topical Mtg. on LWR Fuel Performance, Park City, USA (2000).

- (2.16) Robertson J.A.L.,  $\int kd\theta$  in Fuel Irradiation, CRFD-835 (1959).
- (2.17) Ross A.M. and Stoute R.L., Heat Transfer Coefficient between UO2 and Zircaloy-2, CRFD-1075 (1962).
- (2.18) Wilson M.P. Jr., GA-1355 (1960).
- (2.19) 長谷川、三島、原子炉材料ハンドブック、p.466, 日刊工業新聞社 (1977).
- (2.20) Une K., Nogita K., Kashibe S., Toyonaga T. and Amaya M., Effect of Irradiation-Induced Microstructural Evolution on High Burnup Fuel Behavior, Proceedings to Int. Topical Meeting on LWR Fuel Performance, Portland, USA. pp.478-489 (1997).
- (2.21) 藤本望、中川繁昭、露崎典平、他、高温工学試験研究炉用制御動特性解析コード "ASURA"の検証解析、 JAERI-M 89-195, (1989).
- (2.22) The Japan Society of Mechanical Engineers, -JSME Data Book: Heat Transfer, 5th Edition-, (2009).
- (2.23) Speight M.V., A Calculation on the Migration of Fission Gas in Material Exhibiting Precipitation and Re-solution of Gas Atoms under Irradiation, Nucl. Sci. Eng. 37, p.180 (1969).
- (2.24) White R.J. and Tucker M.O., A New Fission Gas Release Model, J. Nucl. Mater., 118 p.1-38 (1983).
- (2.25) Ham F.S., J. Phys. Chem. Solids 6, p.335 (1958).
- (2.26) White R.J., Fission Gas Release, HWR-632 (2000).
- (2.27) Hall R.O.A and Mortimer M.J., Surface Energy Measurements on UO2 A Critical Review, J.Nucl.Mater.148, pp.237-256(1987).
- (2.28) Turnbull J.A., Friskney C.A., Findlay F.R., Johnson F.A. and Walter A.J., The Diffusion Coefficients of Gaseous and Volatile Species during the Irradiation of Uranium Dioxide,
   J. Nucl. Mater., 107, p.168-184 (1982).
- (2.29) Lösönen P., Modelling intragranular fission gas release in irradiation of sintered LWR UO2 fuel, J.Nucl.Mater. 304, pp.29-49 (2002).
- (2.30) Itoh K., Iwasaki R. and Iwano Y., Finite Element Model for Analysis of Fission Gas Release from UO<sub>2</sub> Fuel, J.Nucl.Sci.Technol., 22, p.129-138 (1985).
- (2.31) Ainscough J.B. and Oldfield B.W., Ware J.O., Isothermal Grain Growth Kinetics in Sintered UO<sub>2</sub> Pellets, J. Nucl. Mater.49, p.117-128 (1973/74).

- (2.32) Kogai T., Modelling of fission gas release and gaseous swelling of light water reactor fuels, J.Nucl.Mater. 244, p.131-140 (1997).
- (2.33) Matthews J.R. and Wood M.H., A simple Operational Gas Release and Swelling Model II.Grain boundary gas, J.Nucle.Mater.91, pp.241-256(1980).
- (2.34) Van Uffelen P., Parametric Study of a Fission Gas release Model for Light Water Reactor Fuel, Proc. 2000 Int. Topical Mtg. on LWR Fuel Performance, Park City, USA (2000).
- (2.35) White R.J., The Development of Grain Face Porosity in Irradiated Oxide Fuel, Seminar on Fission Gas Behavior in Water Reactor Fuels, Cadarache, France (2000), NEA/NSC/DOC(2000)20.
- (2.36) 電力中央研究所「バッテル高燃焼時諸効果研究計画、タスク3報告書」
   高燃焼時諸効果資料調査委員会報告 T90802 (1990 年 9 月).
- (2.37) Walker C.T., Kameyama T., Kitajima S. and Kinoshita M., Concerning the microstructure changes that occur at the surface of UO<sub>2</sub> pellets on irradiation to high burnup, J.Nucl.Mater., 188, pp.73-79 (1992).
- (2.38) Kitajima S. and Kinoshita M., Development of a Code and Models for High Burnup Fuel Performance Analysis, IAEA TCM on Water Reactor Fuel Element Modelling at High Burnup and its Experimental Support, Windermere, U.K. Sept.(1994).
- (2.39) Nogita K. and Une K., Irradiation-induced recrystallization in high burnup UO<sub>2</sub> fuel, J.Nucl.Mater. 226, pp.302-310 (1995).
- (2.40) Une K., Nogita K., Suzawa Y., Hayashi K., Ito K. and Etoh, Y., Effects of grain size and PCI restraint on the rim structure formation of UO<sub>2</sub> fuels, Proc. IAEA Technical Committee Meeting on Nuclear Fuel Behavior Modelling at High Burnup and its Experimental Support, Windermere, U.K. (2000).
- (2.41) Une K., Nogita K., Shiratori T. and Hayashi K., Rim structure formation of isothermally irradiated UO2 fuel disks, J.Nucl.Mater. 288, pp 20-28(2001).
- (2.42) Cunningham, M.E., Freshley M.D. and Lanning D.D., Development and Characteristics of the Rim Region in High Burnup UO<sub>2</sub> Fuel Pellets, J.Nucl.Mater., 188, p.19-27 (1992).
- (2.43) Lassmann K., Walker C.T., van de Laar J., and Lindestroem F., Modelling the high burnup UO2 structure in LWR fuel, J. Nucl.Mater. 226, pp. 1-8(1995).
- (2.44) Yan-Hyun Koo, Je-Yong Oh, Byung-Ho Lee, Dong-Seong Sohn, Three-dimensional simulation of threshold porosity for fission gas release in the rim region of LWR UO<sub>2</sub> fuel, JNM 321, pp. 249-255(2003).
- (2.45) Kinoshita M., Ultra High Burnup Characteristics of UO<sub>2</sub> Fuel, Proceedings to KNS/AESJ Joint Seminar, YongPyung, Korea (2002).

- (2.46) Billaux M.R., Sontheimer F., Arimescu V.I. and Landskron H., Fuel and Cladding Properties at High Burnup, Seminar on Fission Gas Behaviour in Water Reactor Fuels- Executive Summary, Cadarache, France, (2000), NEA/NSC/DOC(2000)20
- (2.47) Ikatsu N., Itagaki N., Ohira K. and Bekker K., Influence of rim effect on fuel center temperature, Proc. IAEA Meeting on High Burn-up Fuel Specially Oriented to Fuel Chemistry and Pellet-Clad Interaction, Sweden Sept. (1998).
- (2.48) Bakker K., Kwast H. and Cordfunke E.H.P., Determination of a Porosity Correction Factor for the Thermal Conductivity of Irradiated UO<sub>2</sub> Fuel by Means of the Finite Element Method, J.Nucl.Mater., 226, pp. 128-143 (1995).
- (2.49) Chubb W., Storhok V.W. and Keller D.L., Factors Affecting the Swelling of Nuclear Fuel at High Temperatures, Nucl. Technol. 18, p.231-255 (1973)
- (2.50) Kosaka Y., Thermal Conductivity Degradation Analysis of the Ultra High Burnup Experiment (IFA-562), HWR-341 (1993).
- (2.51) Schrire D., Kindlund A. and Ekberg P., Solid Swelling of LWR UO<sub>2</sub> Fuel, HPR-349/22, Enlarged HPG Meeting, Lillehammer (1998).
- (2.52) Hollowell T.E., The Development of an Improved UO<sub>2</sub> Fuel Swelling Model, and Comparison between Predicted Pellet Cladding Gaps and PIE Measured Gaps (Gap Meter Measurements), HPR-229, Enlarged Halden Programme Group Meeting on Fuel Performance Experiment and Evaluation, Hanko, vol.1, (1979).
- (2.53) Present R.D., Kinetic Theory of Gases, Mc-Graw Hill, N.Y. p.55 (1958).

# 3. 力学解析モデル

# 3.1 基本式と非線形力学の解法

最初に、FEMAXIコードでの有限要素法解析方法について説明する。弾性固体力学における解 析対象のふるまいを表現する支配方程式は線形である。これは次のような意味を持っている。

(a) 歪み-変位の関係式が線形であること

(b) 応力-歪みの関係式が線形であること

である。しかし、現実の対象の中には、線形性が成立しないものが多く、したがって、それらを 扱う場合は、数値計算の過程を非線形性を包含するまで拡張する必要がある。こうすることによ って、固体力学のすべての領域を対象として、塑性、クリープなどの現象、あるいは、他の複雑 な構成方程式(応力と歪みの関係を表現する式)を、単純な線形弾性関係に置き換えることがで きる。ここでは、この近似法について説明する。

## 3.1.1 基本式

FEMAXIコードでは、微少変形理論(増分モデル)に基づいて構成方程式を組立てているので、(a)の歪み-変位の関係式は線形となっている。そこで、非線形性が問題となるのは、(b)の応 カー歪みの関係式についてである。この問題を分析するために、応カー歪みの非線形関係を線形 に置き換える一般的な方法を考察する。

#### (1) 力学解析の基本仮定と定式化

物体の力学解析は一般に

- ①変位(displacement)の3つの成分u, v, w,
- ②ひずみ (strain)の 6 つの成分  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{yz}, \tau_{zx}, \tau_{yy}$
- ③応力(stress)の6 つの成分  $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}, \gamma_{xy}$

の合計 15 個の成分の組を求める問題に帰着される。

- このために必要な式と条件は
- 1) 境界条件
- 2) 3 方向(x,y,z or r, θ, z 方向の)力の平衡方程式 (equations of equilibrium)
- 3) 6 つのひずみ-変位関係式 (strain-displacement relation)
- 4) 6 つの応力ひずみ関係式 (constitutive equation 構成関係式)

であり、原理的にはこれらを全て満たすように数値計算すれば解が得られる。

以下に、円筒座標系におけるこれらの式を示す。

A グループ:3 方向の力の平衡方程式 (equations of equilibrium)

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} + \frac{\sigma_r - \sigma_{\theta}}{r} + \overline{R} = 0$$
$$\frac{\partial \tau_{rz}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + \frac{\tau_{rz}}{r} + \overline{Z} = 0$$
$$\frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial z} + \frac{2\tau_{r\theta}}{r} + \overline{\Theta} = 0$$
$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\sigma_r - \sigma_{\theta}}{r} = 0$$

- ここで  $\bar{R}, \bar{Z}, \bar{\Theta}$ は体積力(重力、慣性力、電磁力など)である。
- **B**グループ: **3 つのひずみ-変位関係式** (剪断歪みの 3 関係式を省略) (strain-displacement relation)

$$\varepsilon_r = \frac{\partial u_r}{\partial r}$$
$$\varepsilon_{\theta} = \frac{u_r}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_{\theta}}{\partial \theta}$$
$$\varepsilon_z = \frac{\partial u_z}{\partial z}$$

**C グループ**: **4 つの応力ひずみ関係式** (剪断成分の 3 関係式を省略) (constitutive equation 構成関係式)

$$\varepsilon_{r} = \frac{1}{E} \left[ \sigma_{r} - \nu (\sigma_{\theta} + \sigma_{z}) \right] + \alpha T + \varepsilon^{pl} + \varepsilon^{cr} + \varepsilon^{sw}$$
$$\varepsilon_{\theta} = \frac{1}{E} \left[ \sigma_{\theta} - \nu (\sigma_{r} + \sigma_{z}) \right] + \alpha T + \varepsilon^{pl} + \varepsilon^{cr} + \varepsilon^{sw}$$
$$\varepsilon_{z} = \frac{1}{E} \left[ \sigma_{z} - \nu (\sigma_{\theta} + \sigma_{r}) \right] + \alpha T + \varepsilon^{pl} + \varepsilon^{cr} + \varepsilon^{sw}$$
$$\varepsilon_{r} + \varepsilon_{\theta} + \varepsilon_{z} = 0$$

最後の式は、物体の体積保存性(不変性)を意味する。したがって、弾性、塑性、クリープ変 形で成り立つ。熱膨張、照射成長、スエリング、ホットプレスのような、体積の不可逆的、ある いはr, z, θ方向に同時に膨張(収縮)があるような現象では成り立たない。これらの現象については FEMAXI コードでは別途考慮している。

ここで、FEMAXIコードで数値計算をする場合の近似と仮定は以下のようなものである。

- 1) 小さな領域では材料の均質性や温度の均一性を仮定する。
- 2) 物体力を無視する(重力、慣性力、磁石の吸引など)。

3) 幾何学的対称性を考慮する。(燃料棒の場合、軸対称問題として扱う)

4) 平面応力として扱う場合と平面ひずみとして扱う場合とがある。

(2) 増分法

まず、代表的な【増分法】の概念を以下に説明する。これは、増分区間においては、(b)の応 カー歪みの関係式(応力増分-歪み増分の関係式)について線形性を仮定するものである。増分 法を採用するのは、一般に燃料棒の被覆管やペレットでは、タイムステップ毎に応力が変化し、 クリープ歪み等の応力に依存する歪みは増分法でないと決定できないためである。

例えば、応力-歪みの関係式が非線形の例としてクリープがある。クリープの一般式は、応力 レベルを歪みによって陽に表示することができないが、歪み(またはその増分)を応力によって 表すことができる。すなわち

$$\{\Delta\varepsilon\} = \frac{\partial f}{\partial t}(\{\sigma\}) \cdot \Delta t \tag{3.1.1}$$

の関係が成立し、f(x)が一般に非線形である(線形方程式ではない)ということである。ここで、(3.1.1)式を増分区間において、以下のように表示する。

$$\{\Delta\varepsilon\} = \alpha \cdot \Delta t \tag{3.1.2}$$

$$\exists \exists \forall \sigma_n \}$$

σ<sub>n</sub>:現増分区間での初期の応力(前ステップで得られた応力)

タイムステップ間では、応力*σ*が変化するので、 $\frac{\partial f}{\partial t}(\{\sigma\})$ は変化するが、タイムステップ増分 幅  $\Delta t$ が十分小さければ、応力の変化は小さいので、 $\frac{\partial f}{\partial t}(\{\sigma\}) = \frac{\partial f}{\partial t}(\{\sigma_n\})$ と近似でき、(3.1.2)式に より歪み増分が応力変化に無関係に決定することができる。こうすることにより、増分区間にお いて、応力増分–歪み増分の関係について線形性が仮定できる。

次に、増分法による有限要素法 (Finite Element Method; FEM)の解析手法について説明する。

#### (3) 増分法による FEM 解法の概略

最初に、増分区間において支配方程式に線形な関係が近似的に成り立つ場合の基本式の解法の 概略を FEM を適用した場合について示す。これは、線形性を仮定した場合の弾性固体力学での 基本的な方法である。

増分法では、クリープ歪みの場合を例にして説明したように、弾性歪み増分以外の全ての歪み 増分を既知歪みとして表示し、これらを初期歪み増分ベクトル $\{\Delta \varepsilon^0\}$ で表す。

また、外力を $\{F\}$ 、応力を $\{\sigma\}$ 、有限要素法におけるある要素における歪み $\{\varepsilon\}$ と節点の変位 $\{u\}$ を関係づけるマトリックスを[B]とおく。すなわち、

$$\{\varepsilon\} = \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{u\} \tag{3.1.3}$$

である。これは上記(1)項の「Bグループ:ひずみ-変位関係式」に相当する。

要素上の境界応力と静的に等価な節点力(外力)を $\{F\}$ とする。有限要素では力は節点にのみ働く。

FEM の定式化には、 $\{F\}$ を求めることが必要である。このために、任意の仮想的な節点変位を 与えて、この変位に対して力と応力が要素に成す仕事とを平衡させる(等価とおく)。このよう な仮想変位を $\{v\}$ とおく。節点に作用する外力 $\{F\}$ のなす(仮想)仕事 $W_F$ は、個々の成分と対応 する変位成分の積の和に等しい。

すなわち

$$W_F = \left\{\nu\right\}^T \left\{F\right\} \tag{3.1.4}$$

である。

同様に、応力のなす単位体積あたりの(仮想)内部仕事は

ł

$$W_{IN} = \{v\}^T \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^T \{\sigma\}$$
(3.1.5)

この二式を要素の全体積 V にわたって積分して得られる外部仕事と内部仕事とは等しいとする と(仮想仕事の原理)、次式が得られる。

$$\nu \}^{T} \{F\} = \int_{V} \{\nu\}^{T} [B]^{T} \{\sigma\} dV$$
  
=  $\{\nu\}^{T} \int_{V} [B]^{T} \{\sigma\} dV$  (3.1.6)

したがって、仮想仕事の原理を用いて、平衡方程式(上記(1)項の「**A グループ:3 方向の力の 平衡方程式**」に相当)として

$$\{F\} = \int_{V} [B]^{T} \{\sigma\} dV \qquad (3.1.7)$$

が得られる。ここで(3.1.7)式は任意の応力-歪み関係において成り立つ(応力ひずみ関係に無関

係に成立)ので、材料の弾性変形のみならず塑性、クリープ変形も FEM によって扱うことを可能にする。すなわち、原理的には、仮想仕事の原理は、平衡方程式と力学的境界条件式と等価である。言い換えれば、FEM では、外力が要素に与えた仕事と、要素内の歪みエネルギーの変化とは等しい。すなわち、外部仕事と内部仕事とは等しいという【仮想仕事の原理 (principle of virtual work)】を前提としている。

ただし、要素内部における体積力は、燃料コードでは、熱や組織変化などによる材料の体積膨 張・収縮に伴う歪みに関連した形で、式の展開の過程で考慮する。初期歪みや初期応力も同様で ある。

ここで、第 n+1 タイムステップ=時刻 tn+1 における平衡条件(平衡方程式)を考えると、

$$\{F_{n+1}\} = \int [B]^T \{\sigma_{n+1}\} dV$$
(3.1.8)

が成り立つ。ただし

$$\{F_{n+1}\}$$
:第 n+1 ステップの外力ベクトル、 $\{\sigma_{n+1}\}$ :第 n+1 ステップの応力ベクトル

である。

未知量と既知量を明確に区別するために $\{\sigma_{n+1}\}$ を、既知の応力 $\{\sigma_n\}$ と未知の応力増分 $\{\Delta\sigma_{n+1}\}$ に分けることにより、平衡方程式(平衡条件式)を

$$\{F_{n+1}\} = \int [B]^T \{\sigma_n\} dV + \int [B]^T \{\Delta\sigma_{n+1}\} dV$$
(3.1.9)

$$\int [B]^T \{\Delta \sigma_{n+1}\} dV = \{F_{n+1}\} - \int [B]^T \{\sigma_n\} dV \qquad (3.1.10)$$

と変形する。(3.1.10)式では右辺は既知量、左辺は未知量である。

ここで応力-ひずみの関係は(上記「Cグループ:応力ひずみ関係式;構成方程式」に相当)

$$\left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\} = \left[D\right] \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{e}\right\} \tag{3.1.11}$$

で表される。他の歪み成分が存在してもこの関係は常に成立する。また、すべての歪み成分を含んだ計算の結果として、たとえば塑性歪み増分 $\Delta \varepsilon^{plastic}$ が存在すれば、 $\Delta \sigma$ が減少し弾性歪み $\Delta \varepsilon^{e}$ も減少する。塑性歪みやクリープ歪みは $\Delta \sigma$ および $\sigma$ によって決まる量であり、 $\Delta \varepsilon^{e}$ とは直接には関係ない。ここで[D]は、ひずみ-応力マトリクス(剛性マトリックス)と呼ばれ、ヤング率とポアソン比から成り、要素の剛性(変位に対する抵抗性)を表す。

ここで、

$$\begin{aligned} \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} : 時刻 t_n から t_{n+1} までの応力増分ベクトル \\ \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^e \right\} : 時刻 t_n から t_{n+1} までの弾性ひずみ増分ベクトル \\ \begin{bmatrix} D_{n+\theta} \end{bmatrix} = (1-\theta) \begin{bmatrix} D_n \end{bmatrix} + \theta \begin{bmatrix} D_{n+1} \end{bmatrix} \quad \left( \theta = \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} D_n \end{bmatrix}$$
: 時刻  $t_n$ における応力ーひずみ(剛性)マトリクス

である。このDマトリックスの逆行列として[C]マトリックスを定義すれば、(3.1.11)式は次式となる。

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left[C_{n+\theta}\right] \left\{\Delta \sigma_{n+1}\right\}$$
(3.1.12)

(3.1.11)式を(3.1.10)式に代入すると

$$\begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} D \end{bmatrix} \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{e} \right\} dV = \left\{ F_{n+1} \right\} - \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \left\{ \sigma_{n} \right\} dV$$
(3.1.13)

となる。ここで、弾性歪み増分 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\right\}$ 、全歪み増分 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}\right\}$ 、及び既知量である初期歪み増分 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\right\}$ との間には、

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left\{\Delta \varepsilon_{n+1}\right\} - \left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\right\}$$
(3.1.14)

の関係が成り立つので、(3.1.14)式を(3.1.13)式に代入すると、

$$\int [B]^T [D] \{ \Delta \varepsilon_{n+1} - \Delta \varepsilon_{n+1}^0 \} dV = \{ F_{n+1} \} - \int [B]^T \{ \sigma_n \} dV$$
(3.1.15)

が得られる。ここで既知量である  $\int [B]^T [D] \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^0 \} dV$  を右辺に移行すると

$$\int [B]^T [D] \{\Delta \varepsilon_{n+1}\} dV = \{F_{n+1}\} + \int [B]^T [D] \{\Delta \varepsilon_{n+1}^0\} dV - \int [B]^T \{\sigma_n\} dV \qquad (3.1.16)$$

となる。(3.1.16)式に歪みと変位の(増分)関係式  $\{\Delta \varepsilon\} = [B] \cdot \{\Delta u\}$  を代入すれば、

$$\int [B]^{T} [D] [B] dV \{\Delta u_{n+1}\}$$

$$= \{F_{n+1}\} + \int [B]^{T} [D] \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\} dV - \int [B]^{T} \{\sigma_{n}\} dV$$

$$(3.1.17)$$

となり、未知量 $\{\Delta u_{n+1}\}$ を積分から繰り出すことができる。これが増分法での剛性方程式(変位 と外力の関係を表現する式)である。またこの式は

結局、(3.1.17)式を M 個の要素の和の形に離散化すると、

$$\sum_{i=1}^{M} [B_i]^T [D_i] [B_i] \Delta V_i \{ \Delta u_{n+1} \}$$

$$= \{ F_{n+1} \} + \sum_{i=1}^{M} [B_i]^T [D_i] \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^0 \} \Delta V_i - \sum_{i=1}^{M} [B_i]^T \{ \sigma_n^i \} \Delta V_i$$
(3.1.19)

$$(\Delta V_i : 要素 i の体積、M : 要素総数)$$

と表すことができる。(3.1.19)式は連立線形方程式であるので、マトリックス表示して解くことに より、未知量の変位増分ベクトル $\{\Delta u_{n+1}\}$ を求めることができる。

以上の計算方法は、増分区間において、支配方程式が線形と近似できる場合の方法である。し かしながらクリープを例にして説明したように、 $\frac{\partial f}{\partial t}(\{\sigma_n\}) = \frac{\partial f}{\partial t}(\{\sigma_n\})$ の仮定(線形近似)は、応 力変化が小さいとき、すなわち応力増分 $\Delta \sigma$ が十分小さいときにしか適用できない。このため、 クリープ問題の場合では、タイムステップ増分幅に対する制約がきびしくなる。この問題に対処 するために、次項以降で、FEMAXIコードでの非線形性歪みを含んだ、より一般的な構成方程式 の取り扱いについて説明する。

# 3.1.2 初期応力法・初期歪み法・剛性変化法 (非線形歪みの取り扱い)

#### (1) 剛性方程式

前節 3.1.1-(1)項で示したように、非線形問題は、増分区間について応力増分とひずみ増分の間 に線形性を仮定することで、変位法によって定式化された小さなひずみの線形弾性問題となり、 (3.1.16)式で示された剛性方程式が得られる。すなわち、一般的な表現をすれば、

$$[K]\{\Delta u\} - \{\Delta F\} = 0 \tag{3.1.20}$$

である。線形弾性問題では(3.1.20)式を解き、最終の解に到達するのが普通である。

上の定式化では、線形のひずみ-変位関係式、変位の連続性、力のつり合いを満足する条件の ほか、次の線形弾性方程式が満足することが仮定されている。

$$\{\Delta\sigma\} = [D](\{\Delta\varepsilon\} - \{\Delta\varepsilon^0\}) + \{\Delta\sigma^0\}$$
(3.1.21)

ここで、 $\Delta \varepsilon^{0}$ :初期ひずみ増分

 $\Delta \sigma^0$ :初期応力増分

一方、非線形で問題となる応力-歪みの関係式は一般的には、ある関数F(x)が非線形である として、

$$\{\Delta\varepsilon\} = F(\{\sigma\}) \tag{3.1.22}$$

の関係が成立する。

このため、(3.1.21)式に含まれるパラメータ[D], $\{\Delta \varepsilon^0\}$ , $\{\Delta \sigma^0\}$ の一つ、または、それ以上を調節 し、その結果(3.1.21)式と(3.1.22)式がそれぞれ、(3.1.20)式の解として同じ応力、ひずみが得られ たならば非線形問題の解が得られたことになる。ただし、それには反復計算が必要となる。

### (2) 反復計算

反復計算中で、上の(1)項に述べた三つのパラメータのうちどれを調整すればよいかは、次の二 つの条件

(a) 等価な線形弾性問題で用いる解法

(非線形問題を等価な線形弾性問題に置き換えて解く解法)

(b) 応力-ひずみ関係を定義する物理法則の性質

によって決まる。

反復計算が、[D]マトリックスを調整して行われるとき、その過程は剛性変化法であり、 $\{\Delta \varepsilon^0\}$ または $\{\Delta \sigma^0\}$ を調整するときは、初期ひずみ法、または初期応力法である。

**剛性変化法**は、応力とひずみの関係を特別な材料挙動(例えばクリープ挙動とか塑性挙動)に 対して、(3.1.19)式の形に書き表した剛性マトリックス[*D*]を、到達した応力またはひずみレベル の関数として与える。すなわち、

$$[D] = [D\{\sigma\}] = [D\{\varepsilon\}]$$
(3.1.23)

とみなせば、剛性変化過程を適用することができる。この場合、組み立てた剛性マトリックスに 対し、応力または歪みが変化すると剛性率 (stiffness) が変化するので、応力・歪みの変化が収束 するための反復計算を実施することによって剛性マトリックスが応力・歪みの変形解に影響を及 ぼすことになり、剛性マトリックスの変化が収束するまで反復を繰り返す必要がある。

すなわち、非線形問題に対する解が、ある反復計算過程(iterative process)によって得られる ならば、その過程において材料定数を調節(更新)して、更新されて最終段階で新しい材料定数 を持つ非線形の構成方程式が満足されるような変形解を得る方法が剛性変化法である。FEMAXI コードでの剛性変化法は、応力に関する反復計算によって材料定数を調節する方法を用いる。

これに対して、初期歪み法では、数値計算の各段階で得られる弾性歪み増分を、構成方程式 (3.1.19)式に対応する歪み増分と比較し、その差を残差不平衡力の計算に用いる。例えば、クリー プ問題では、クリープ歪み増分と弾性歪み増分を分離した形で現し、各段階ごとの初期歪み増分 の補正項を直接的に求めることが可能である。

また、**初期応力法**については、初期歪み法との違いを図 3.1.1 によって説明する。図 3.1.1 で は、最初の近似解で得られた応力と歪みの関係が、点1で示されている。図中の実線は対象の本 来のふるまいであり、経験式ないしは物性式などで規定されている。初期応力法では、図で示し た初期応力 $\Delta \sigma_1^0$ を導入して、応力を正しいレベルに修正する。これは、応力とともに歪みが急激 に増加する場合に、応力と歪みの関係を変化の小さい応力によって補正しているので有利である。

これに対して、初期歪み法では、 $\Delta \varepsilon_1^0$ で示される補正によって、歪みを調整する。この方法では、歪みとともに応力が急速に増加する締結性材料の場合、有利となる。FEMAXIで扱う燃料や被覆管のクリープや塑性では、初期歪み法と初期応力法を比較すれば、応力とともに歪みが急激に変化するので初期応力法が有利である。

しかし、初期歪み法や初期応力法と剛性変化法を比べると、剛性変化法を用いた方が応力とひ ずみの関係を剛性マトリックス作成時に取り入れることができるので、収束回数を削減できて有 利である。すなわち、初期歪み法や初期応力法では、求められた応力・歪みによって荷重ベクト



図 3.1.1 初期歪み法と初期応力法。 (a) 変形とともに硬化率が減少(b) 変形とともに硬化率が増す締結性の材料 (locking Material)

ルを更新して収束計算を行うのであるが、剛性変化法は予め剛性率の変化を予測する方法なので、 初期歪み法や初期応力法での2回の処理を剛性変化法では1回の処理でまかなうことに相当する。 そこで、FEMAXIでは、弾性マトリックス[D]を到達した応力レベルの関数として与える剛性 変化法(すなわち、 $[D] = [D\{\sigma\}]$ )を用いて基本式の定式化を行う。以下に FEMAXI の定式化の 概略を説明する。

# 3.1.3 FEMAXIコードでの基本式の解法 (非線形歪みの取り扱い)

前節 3.1.2 (2)項で述べたように、FEMAXI コードでの非線形歪みの取り扱いは、剛性変化法を 用いて応力によって収束を計る方法を用いる。また、このとき 3.1.1 節 (2)項で説明した増分法に よる定式化を基本とする。これは、例えば $\Delta \varepsilon_{n+1}$ に含まれるクリープ歪み増分を例に取ると、 (3.1.15)式に示したようにクリープ式は応力と歪み増分の関係式で与えられており、増分法が適し ているためである。

### (1) 歪み成分の分類と扱い

次に、FEMAXIコードで扱う歪みについて検討する。FEMAXIで扱う歪みには、応力一歪みの 関係式で与えられている歪みと応力には無関係な歪みがある。応力一歪みの関係式で与えられて いる歪みとは、歪みが変化すれば、応力も変化し、応力が変化すれば歪みが変化する成分であり、 応力に無関係な歪みとは、歪みを発生することで応力が変化するが、応力が変化しても歪み変化 が起こらない成分である。

まず FEMAXI で扱う歪みについて示す。

$$\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1} \right\} = \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{e} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{th} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{rel} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{sw} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{sw} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{rel} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{rel} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{rel} \right\}$$

$$(3.1.24)$$

ここで、

である。

このうち応力一歪みの関係式で与えられている歪み増分は、 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{HP}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\}, \{\Delta \varepsilon_{$ 

このうち弾性歪み増分については $\{\Delta \varepsilon^e\} = f(\{\sigma\}) = \alpha \Delta \sigma$ となって線形である。

一方、応力に依存しない歪み増分ベクトルは $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{th}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{rel}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{den}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{sw}\}$ である。

そこで、時間増分  $\Delta t_{n+1} \left(= t_{n+1} - t_n\right)$ における弾性歪み増分と応力増分の間の関係式を、 [C] が温度に依存する(時間に依存する)ことを考慮して以下のように書く。

$$\left\{\Delta\varepsilon^{e}\right\} = \begin{bmatrix}C\end{bmatrix}\left\{\Delta\sigma\right\}$$
(3.1.25)

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left[C_{n+\theta}\right]\left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\}$$
(3.1.26)

ここで,

である。

また、(3.1.26)式より、応力増分を求めるためには、弾性歪み増分を求める必要がある。弾性歪 み増分は次のように表される。

$$\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{e} \right\} = \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{th} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{rel} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{den} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{sw} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{hP} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{e} \right\}$$

$$(3.1.27)$$

ここで、

$$\{\Delta \varepsilon_{n+1}\}$$
 : 全歪み増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{th}\}$  : 熱歪み増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{rel}\}$  : ペレットリロケーション歪み増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\}$  : ペレットクラック歪み増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{den}\}$  : ペレットやきしまり歪み増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{sw}\}$  : ペレットスウェリング歪み増分ベクトル

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{HP}\right\}$$
 : ペレットホットプレス歪み増分ベクトル  
 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{P}\right\}$  : 塑性歪み増分ベクトル  
 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c}\right\}$  : クリープ歪み増分ベクトル

である。また、応力に依存しない歪み増分ベクトルについては初期歪み増分ベクトルとして次の ようにまとめる。

$$\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\} = \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{th}\} + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{rel}\} + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{den}\} + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{sw}\}$$
(3.1.28)
$$\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\} : 初期歪み増分ベクトル$$

さらに、ペレットのホットプレス歪み増分ベクトルを、3.2.7 項で詳述するように、ペレットの塑性およびクリープ歪み増分ベクトルに繰り込んで扱うことが可能なので、(3.1.28)式は次のように書くことができる。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{0}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{crk}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{PH}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{cH}\right\}$$
(3.1.29)

ここで、

$$\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{PH} \right\}$$
 : ホットプレス歪みを含めた塑性歪み増分ベクトル  
 $\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{cH} \right\}$  : ホットプレス歪みを含めたクリープ歪み増分ベクトル

である。ここで、注意したいのは、 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{PH}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{cH}\}\$ はともに $\{\Delta \varepsilon\} = f(\{\sigma\})$ で与えられ、関数fは非線形であることである。

一方、全歪みは節点変位と次のように関係付けられる。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}\right\} = \left[B\right]\left\{\Delta u_{n+1}\right\} \tag{3.1.30}$$

ここで、  $\{\Delta u_{n+1}\}$ は節点変位増分ベクトルである。

(3.1.26)式及び(3.1.30)式を(3.1.29)式に代入すると、

$$\begin{bmatrix} C_{n+\theta} \end{bmatrix} \{ \Delta \sigma_{n+1} \} - \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{ \Delta u_{n+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^0 \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{PH} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{cH} \} = 0 \quad (3.1.31)$$

## となる。

(3.1.31)式において、非線形歪み増分である  $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{PH}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{cH}\}$ の取り扱いについて説明する。

ここでそれぞれの非線形歪み増分に対して

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{crk}\right\} = f_1\left\{\sigma\right\}, \quad \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{PH}\right\} = f_2\left\{\sigma\right\}, \quad \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{cH}\right\} = f_3\left\{\sigma\right\}$$
(3.1.32)

と与えられたとする。このとき、 $f_1\{\sigma\}, f_2\{\sigma\}, f_3\{\sigma\}$ は物性値、経験式、あるいは引張り試

験等で得られる既知関数であり、応力と歪みの関係は既知である。

## (2) 応力の反復決定法

ここで、(3.1.32)式を解いて、 $\sigma$ を決定する方法を考える。これは、正しい応力値の $\sigma$ を求めることができないと、 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{eH}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{cH}\}$ の各歪み増分量が求められないためである。

このための数値解法として、剛性変化法を適用する。この非線形方程式を解くための反復計算には、Newton-Raphson法(NR法)を適用する。

ここで、まず NR 法の一般的な概念を説明する。この方法は、単一の変数 x に関する次の形の 一般的な非線形方程式

$$\psi(x) = 0 \tag{3.1.33}$$

を解く。NR 法では、正しい解に十分近い $x_i$ が得られたとして、なお、 $\psi(x) \neq 0$ の場合には、つぎのようにして改良された試験解 $x_{i+1}$ を求める。

すなわち、

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_{i+1}$$

ただし、
$$\Delta x_{i+1} = -\frac{\psi(x_i)}{\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_i}$$
である。

このように変化する勾配を用いる反復計算法を図示すると、図 3.1.2 のようになる。



図 3.1.2 変化する勾配を用いる Newton-Raphson 法の反復法

(3.1.30)式にNR法を適用する場合には、xは $x = \sigma$ であり、 $\psi(x)$ はそれぞれ

$$\psi_1(\sigma) = f_1(\sigma) - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk} \right\} = 0$$
(3.1.34)

$$\psi_2(\sigma) = f_2(\sigma) - \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{PH}\} = 0$$
 (3.1.35)

$$\psi_{3}(\sigma) = f_{3}(\sigma) - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{cH} \right\} = 0$$
(3.1.36)

であり、

$$d\psi_1/d\sigma = f_1(\sigma) \tag{3.1.37}$$

$$d\psi_2 / d\sigma = f_2(\sigma) \tag{3.1.38}$$

$$d\psi_3 / d\sigma = f_3(\sigma) \tag{3.1.39}$$

である。ここですぐ気づくように、(3.1.34)式~(3.1.36)式の3式には、応力の他にも未知数  $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{PH}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{eH}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{eH}\}, \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{eH}\}\}$ を含み、未知数の数が式の数をうわまわるので、この3式を連立させ て解くことは不可能である。すなわち、 $\psi(\sigma) = 0$ になる条件を求めることができない。これは、 (3.1.31)式が、NR 法を適用できる最終条件になっていないためである。このため定式化をもう少 し進めることが必要である。

以下の議論では、非線形解析で用いられる反復計算に NR 法を適用することを前提にして説明する。NR 法による反復計算のカウントを i で表示する。いま、NR 法による反復計算の第 i 回目が終了し (第 i 回目の値は既知量となっている)、第 i+1 回目の反復を行っているとき、 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^0\}$ 及び $\{\sigma_n\}$ 以外の歪み、変位、応力等は反復計算によって変わるので、NR 法を適用する目的の式である(3.1.31)式を反復回数添え字 i 及び i+1 を付して表記すると下式のようになる。

$$\begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \} - \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \}$$

$$+ \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk,i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{PH,i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{cH,i+1} \} + \begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} (\{ \sigma_{n+1}^{i} \} - \{ \sigma_{n} \}) = 0$$

$$z \subset \mathcal{O}, \qquad (a - 1) > (a -$$

$$\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} = \left\{ \sigma_{n+1}^{i+1} \right\} - \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\}$$

である。

また、このとき平衡条件(3.1.10)式(外力と内部応力の釣り合いの式)を次のように書く。

$$\int_{V} \left[ B \right]^{T} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} dV + \int_{V} \left[ B \right]^{T} \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} dV = \left\{ F_{n+1} \right\}$$
(3.1.41)

(3.1.40)、(3.1.41)式において、未知量は反復回数 i+1 回目の値であるので、 $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ 、 $\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk,i+1} \right\}$ 、 $\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{cH,i+1} \right\}$ 、 $\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{cH,i+1} \right\}$ 及び $\left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\}$ である。ここで、NR 法の $\psi(\sigma) = 0$  にすべき条件式である (3.1.34), (3.1.35) 及び (3.1.36)式を以下のように記述する。

$$\psi_1(\sigma) = f_1(\sigma) - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk,i+1} \right\} = 0$$
(3.1.42)

$$\psi_{2}(\sigma) = f_{2}(\sigma) - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{PH,i+1} \right\} = 0$$
(3.1.43)

$$\psi_{3}(\sigma) = f_{3}(\sigma) - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{cH,i+1} \right\} = 0$$
(3.1.44)

こうすることによって、(3.1.40)式~(3.1.44)式の 5 つの式が得られたので、未知量 $\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\}$ 、 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk,i+1}\}$ 、 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{PH,i+1}\}$ 、 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{cH,i+1}\}$ 及び $\{\Delta u_{n+1}^{i+1}\}$ を求めることができる。すなわち、NR 法による収束 過程を完結させるためには、(3.1.41)式で示した平衡条件式を付加することが必要である。

なお、FEMAXIコードでの剛性変化法による弾性マトリックスの修正方法については 3.2 節以降でそれぞれの材料挙動モデルごとに、特性に合わせた定式化のアルゴリズムを説明する。また、変形計算全体の取り扱いのアルゴリズムを図 3.1.3 に示す。なお、図 3.1.3 に示したアルゴリズム において、NR 法による収束計算が完了した後に行う接触境界条件の変更及び降伏、除荷判定条件については後節で改めて説明する。

 モデルパラメータ LMAX
 Newton-Raphson法による反復計算の回数はLMAX で与えられる。(標準値は20)ただし、反復回数3回以上において、全歪み修正量(前回の反復との変化幅)の最大値が0.01%以下の場合には収束したものとみなして反復計算を終了する。



### 図 3.1.3 FEMAXI コードでの変形計算の順序とアルゴリズム

# 3.2 燃料棒全長での力学的ふるまい [全長力学解析]

最初に全体のフローを示し、各ステップについて説明する。



図 3.2.1 全長力学計算のフロー

**解説**: [全長力学解析(I)]においては、サブルーチン FEMROD において燃料棒全長の詳細な 変形解析が行われる。一方、3.5 節に述べる[局所力学解析(II)]においては、半ペレット長部分 の局所的な変形解析(PCMI 解析)が別のルーチンにおいて行われる。解析(I)と解析(II)の実行 は、入力指定パラメータ IFEMRD にしたがって行われる。

IFEMRD=0: 局所解析と全長解析、 IFEMRD =1: 全長解析のみ

......

# 3.2.1 全長力学解析 (I) のモデルとリング要素

# (1) 体系

図 3.2.2 に示すように、燃料棒全長は軸方向セグメントに分割され、さらに各セグメントは半 径方向のリング要素に分割されて1次元軸対称(1.5次元)の体系となる。応力・ひずみ解析は、 この体系において図 3.2.5 に示す四角形4自由度要素を用いた有限要素法により実施する。



図 3.2.2 形状モデル

# (2) リング要素

図 3.2.3 は MESH=1 の場合の1 セグメントにおけるリング要素を示す。これは図 2.3.1 と同じものである。



図 3.2.3 リング要素体系(1セグメント相当)

この体系を、わかりやすく説明するためにペレットスタックの半径方向リング要素数を10、被 覆管のリング要素数を4とした場合のFEM要素系を図3.2.4に示す。ここには、3.2.2項で述べ るディッシュ・チャンファー空間のためのダミー要素が加えられている。被覆管メッシュの内側 2要素(14,15)は金属相であり、外側の1要素(16)は酸化膜層(ZrO2)である。被覆管外面の酸化 膜要素は、酸化膜の厚み増加(2章2.2節参照)にしたがってリメッシュされ、その厚みを増加 させる。(被覆管最内面のごく薄い酸化膜要素は厚みの変化はない。力学解析・熱解析において 無視できる)



図 3.2.4 有限要素法リング(1 セグメント相当)



図 3.2.5 四角形 4 節点自由度(r<sub>i</sub>, r<sub>i+1</sub>, Z<sub>i,L</sub>, Z<sub>i,U</sub>)モデル

#### (3) 要素の自由度

図 3.2.4、図 3.2.5 で示すように、各節点は半径方向あるいは軸方向に 1 自由度のみを持つ。 ペレットスタックの軸方向自由度  $z_1^L \sim z_{10}^L$ 、 $z_1^U \sim z_{10}^U$ 及び被覆管の軸方向自由度  $z_{11}^L \sim z_{14}^L$ 、 $z_{11}^U \sim z_{14}^U$ はそれぞれ各節点の変位が一様であると仮定して、代表して 1 つの節点自由度で扱うこととし(一般化平面歪み条件)、

$$z_{1}^{L} = z_{2}^{L} = \dots = z_{10}^{L} \quad (= z_{p}^{L})$$

$$z_{1}^{U} = z_{2}^{U} = \dots = z_{10}^{U} \quad (= z_{p}^{U})$$

$$z_{11}^{L} = z_{12}^{L} = z_{13}^{L} = z_{14}^{L} \quad (= z_{c}^{L})$$

$$z_{11}^{U} = z_{12}^{U} = z_{13}^{U} = z_{14}^{U} \quad (= z_{c}^{U})$$
(3.2.1)

とおく。すなわち、各セグメントの下部端はペレットスタック及び被覆管ともに同一軸方向高さの平面を維持し、上端は、軸方向への変位自由度はあるが、ペレットスタック上端と被覆管上端 は常に同一軸方向高さの平面を保つと近似する。すなわち有限要素法の特性により、r<sub>i</sub>、 r<sub>i+1</sub>は半 径方向自由度のみ、 Z<sub>i,L、</sub> Z<sub>i,U</sub> は軸方向自由度のみである。(ただし、この扱いは燃料棒全長力 学解析にのみ適用される。)

また一般に FEM では、各要素の節点と境界において、変位と歪みは連続であるが、応力は不 連続である。ただし変位と歪みの微分係数は連続とは限らない。

# (4) ペレット(スタック)径方向リング要素分割数

既に第2章の表 2.3.1 でも説明したが、重要なのでここで再記する。表 2.3.1 に示すように、 name-list parameter MESH を指定することにより、ペレットのリング要素数を指定できる。

Parameter 値	1次元熱解析	1次元力学解析	2 次元局所力学解析
MESH=0	等間隔 10 リング要素	等間隔 10 リング要素	等間隔5リング要素
MESH=1	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素	等体積9リング要素
MESH=2	等体積 72 リング要素	等体積 18 リング要素	等体積9リング要素
MESH=3	等体積 36 リング要素	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素
MESH=4	等体積 72 リング要素	等体積 36 リング要素	等体積 18 リング要素

表 2.3.1 熱解析と力学解析におけるペレット径方向リング要素分割数

Default は MESH=3 である。等体積リング要素では、図 3.2.3 に示すようにペレットの外側に行 くにつれてリングの厚みが減少する。ISHAPE=1 を選択した場合には、MESH>0 における要素数 は2倍となり、より細かな計算が可能となる。なお、RANNS において IREST>0 として FEMAXI の計算結果を初期条件として用いる場合は、MESH の値は FEMAXI で指定した値が自動的に引き 継がれる。(3.7章参照)

#### (5) 被覆管径方向リング要素分割数

被覆管のリング要素は、上記 MESH の指定にかかわらず、1 次元熱解析と1 次元力学解析では 共通の要素を用いる。ただし、内面酸化膜リング要素は将来的なモデル拡張に備えたものであり、 その厚みは 0.1 µm で固定である。

すなわち、1次元熱解析と1次元力学解析では

①Zr ライナーなしの場合:

内表面酸化膜1リング要素+金属要素8リング要素+外表面酸化膜2リング要素 ②Zr ライナー有の場合:

内表面酸化膜1リング要素+Zrライナー2リング要素+金属要素8リング要素+外表面酸化膜 2リング要素

また後述する2次元局所力学解析では、

③Zr ライナーなしの場合: 金属要素 4 リング要素+外表面酸化膜 1 リング要素

④Zr ライナー有の場合:

Zr ライナー1 リング要素+金属要素 4 リング要素+外表面酸化膜 1 リング要素 である。

ただし、3.7 章に説明する RANNS コードとの接続において、RANNS においては ⑤Zr ライナーなしの場合: 金属要素 4 リング要素

⑥Zr ライナー有の場合: Zr ライナー1 リング要素+金属要素 4 リング要素

となる。

ただし、ISHAPE=1の場合は、2次元局所力学計算では金属相は上記の2倍のリング要素数となる。

#### (6) 被覆管酸化膜

ここで、タイムステップ間の酸化による被覆管金属の体積増加分は、酸化膜に軸方向の歪み増 分として力学計算に加えられる。

この際、酸化膜の体積増分率

#### X = [Piling-Bedworth Ratio] - 1.0

のうち、半径方向への増分を Px(%)、軸方向への増分を 100-Px (%)として与える。

Px は入力パラメータ PX とし、標準値は 80.0 とする。

一方、金属相では酸化した金属相の厚みに対応して厚み減少のリメッシュがされる。

金属相と酸化膜の力学的性質(ヤング率、熱膨張率、クリープ速度、照射成長率など)は当然 異なるので、この差によって被覆管内部には主に軸方向に応力が発生し、被覆管全体の力学的ふ るまいに影響を与える。本モデルでは、この応力を計算に含んで解析する。ただし、ZrO2のク リープ速度及び照射成長率に関する測定データは得られていないので、便宜上、酸化膜のクリー プは無視し、照射成長はジルカロイの照射成長率にファクター(入力パラメータ、標準値は1.0) を掛けた値を用いる。

# 3.2.2 有限要素マトリックスの決定

次に、基本式で用いる種々のマトリックスを求める。

## (1) ひずみ-変位マトリックス[B]の求めかた

径方向変位を u、軸方向変位を v とすると、図 3.2.3 で示した要素内の任意の点(r, z)における変 位(u, v)は、 $r_i$ 、 $r_{i+1}$ 、 $z_i^M$ 、 $z_i^U$ 、 $z_i^L$ をそれぞれ入力で指定される初期値(固定値)としてのリン グ要素の半径方向節点座標および軸方向節点座標として、

$$u = \frac{r_{i+1} - r_i}{r_{i+1} - r_i} u_i + \frac{r - r_i}{r_{i+1} - r_i} u_{i+1}$$
(3.2.2)  

$$v = \frac{z - z_i^L}{z_i^M - z_i^L} \left( v_i^M - v_i^L \right)$$

$$v = \frac{z - z_i^M}{z_i^U - z_i^M} \left( v_i^U - v_i^M \right)$$
(3.2.3)

で与えられる。

要素内のひずみ成分は、軸対称形状の場合、次のようになる。

$$\{\varepsilon\} = \begin{cases} \varepsilon_r \\ \varepsilon_{\theta} \\ \varepsilon_z \end{cases} = \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial r} \\ \frac{u}{r} \\ \frac{\partial v}{\partial z} \end{cases} \equiv \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{u\}$$
(3.2.4)

(3.2.2)~(3.2.3)式を用いれば、

$$\frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{1}{r_{i+1} - r_i} u_i + \frac{1}{r_{i+1} - r_i} u_{i+1}$$

$$\frac{u}{r} = \frac{r_{i+1} - r}{r(r_{i+1} - r_i)} u_i + \frac{r - r_i}{r(r_{i+1} - r_i)} u_{i+1}$$
(3.2.5)

である。ここで r を要素中央の径方向座標 $\frac{r_i + r_{i+1}}{2}$ とおくと、

## JAEA-Data/Code 2010-035

$$\frac{u}{r} = \frac{r_{i+1} - \frac{r_i + r_{i+1}}{2}}{\frac{r_i + r_{i+1}}{2}} u_i + \frac{\frac{r_i + r_{i+1}}{2} - r_i}{\frac{r_i + r_{i+1}}{2}} u_{i+1} \\
= \frac{1}{r_i + r_{i+1}} u_i + \frac{1}{r_i + r_{i+1}} u_{i+1} \\
\frac{\partial v}{\partial z} = \frac{v_i^M - v_i^L}{z_i^M - z_i^L} \quad \text{$$\pm$trit}, \quad \frac{\partial v}{\partial z} = \frac{v_i^U - v_i^M}{z_i^U - z_i^M} \tag{3.2.7}$$

となる。(3.2.5)~(3.2.7)式を(3.2.4)式に代入すれば、

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{r,i} \\ \varepsilon_{\sigma,i} \\ \varepsilon_{z,i} \end{array} \right\} &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{r_{i+1} - r_i} & \frac{1}{r_{i+1} - r_i} & 0 & 0 \\ \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{z_i^M - z_i^L} & \frac{1}{z_i^M - z_i^L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i^M \\ v_i^M \end{bmatrix} \\
\\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{r,i} \\ \varepsilon_{\sigma,i} \\ \varepsilon_{z,i} \end{array} \right\} &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{r_{i+1} - r_i} & \frac{1}{r_{i+1} - r_i} & 0 & 0 \\ \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{z_i^U - z_i^M} & \frac{1}{z_i^U - z_i^M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_{i+1} \\ v_i^M \\ v_i^M \\ v_i^U \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3.2.8}$$

を得る。 したがって、 [B] マトリックス(形状関数)の成分として

$$[B] = \begin{bmatrix} -\frac{1}{r_{i+1} - r_i} & \frac{1}{r_{i+1} - r_i} & 0 & 0\\ \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{z_i^M - z_i^L} & \frac{1}{z_i^M - z_i^L} \end{bmatrix}$$

$$\pm \hbar i t, \qquad [B] = \begin{bmatrix} -\frac{1}{r_{i+1} - r_i} & \frac{1}{r_{i+1} - r_i} & 0 & 0\\ \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & \frac{1}{r_{i+1} + r_i} & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{z_i^U - z_i^M} & \frac{1}{z_i^U - z_i^M} \end{bmatrix}$$
(3.2.9)

を得る。(3.2.8)、(3.2.9)式は、全長解析のマトリックス解法のすべて、つまり、<u>弾性および非線型</u> 変形の両方で用いる。

また、各要素の体積 Vi は、

$$V_{i} = \pi \left( r_{i+1}^{2} - r_{i}^{2} \right) \left( z_{i}^{M} - z_{i}^{L} \right)$$
  
または、  
$$V_{i} = \pi \left( r_{i+1}^{2} - r_{i}^{2} \right) \left( z_{i}^{U} - z_{i}^{M} \right)$$
(3.2.10)

である。

## (2) ペレットスタック要素モデルの説明

円柱形状のペレット(スタック、中心孔がある場合もある)においては、半径方向の温度勾配 のため熱応力が生じ、ペレット内に大きな圧縮応力が発生したり、被覆管に対するペレット端部 の食い込み変形(リッジング)が生じる(3.5章参照)。しかし現実の燃料では、ディッシュ(チ ャンファー)の空間によってこうした熱膨張による変形は大きく緩和されている。しかし、ディ ッシュやチャンファーを無視した単純な円柱スタックモデルでは、FEMAXIコードのようにスタ ックを形成するペレット上端部が軸方向に一様に変位する一般化平面歪みの境界条件を与える ことにより(3.2.1 (3)項参照)、計算上、中心部では軸方向に実際の燃料より強い熱応力(圧縮 力)がかかり、ペレット(スタック)表面部では逆に強い引張り力がそれぞれ発生する。単純円 柱形状に生じるこのようなモデル特性に起因する熱応力の発生を一般化平面歪みの境界条件を 維持したまま避けるために、パラメータ IDSELM=1を指定することにより円柱ペレットスタック 要素の上部にディッシュ(チャンファー)要素を入力で指定できる。

すなわち、1セグメントのペレットスタック内の各領域を3つの要素から構成する。これを図 3.2.6、図3.2.7で説明する。図3.2.6は1セグメントのペレットスタックを表現する。ただしリン グ要素数は、わかりやすくするために半径方向等間隔10個とする。また、1セグメント分のペ レットスタックは数個~数十個のペレットから構成されるが、ここでは、図の塗りつぶした部分 がペレット固体要素で、塗りつぶしていない部分がこのセグメントを形成するすべてのペレット のディッシュ、チャンファー、およびペレット端面間のスキマ空間に対応する空間要素を示す。



すなわち、図 3.2.6 はディッシュやチャンファーの形状効果を全長力学モデルの円柱スタック に反映させたものである。この空間要素には図に示したように、極めて弱いバネ剛性(stiffness) を与え、ペレットの固体熱膨張やスエリングのバッファーとする。

図 3.2.7 は図 3.2.6 からディッシュ・チャンファーのない部分=7 番目のリングを抜き出したも のであり、図における上側(塗りつぶしていない部分)が隙間要素、下側の要素(斜線)がペレ ット固体要素である。この要素分割比は、上側要素がセグメント長の BUFSP %、下側の要素がセ グメント長の(100 - BUFSP) %の軸方向長さとして、それぞれ初期値として入力され一定の厚みを 持つ。すなわち、軸方向セグメントを BUFSP : (100 - BUFSP)に分割している。この隙間要素は図 3.2.6 では、ディッシュ、チャンファー空間の上側の一様厚み *l*<sub>z</sub>の空間要素として示され、セグメ ントのスタックの軸方向長さの BUFSP %として、その入力値と入力したセグメント長さにより初 期値として与えられる。すなわち、全長力学モデルにおけるペレットの形状マトリックスは初期 座標を基準とし、形状マトリックス内の隙間要素の軸方向厚みは*l*<sub>z</sub>に固定される。

ここで、1セグメント分のペレットスタックに対して、半ペレット長とディッシュ(チャンフ

ァー) 深さの比率にしたがって、ディッシュ(チャンファー)の軸方向空間要素長さを設定する。

チャンファー部の軸方向長さについても同様である。図 3.2.6 の凹みおよび隙間は、この形状 特性を考慮した空間を示す。これらは「弱いバネ剛性を持つバッファー空間」であり、この存在 により、計算上も実際に近い熱応力と歪みの計算が可能となる。

ここで、ペレット固体部の上端座標 $z_i^M$ の軸方向変位はリング要素ごとに計算されるが、隣接 する固体リング要素間に働く軸方向の剪断力はこの1次元モデルでは考慮されない。またセグメ ント上端面の変位は、半径方向に一様な座標変化 $\Delta z_i^U = \overline{v}^U$ として $z_1^U = z_2^U = \cdots = z_i^U = \cdots (= z_p^U)$ の一般化平面歪み条件((3.2.1)式参照)にしたがう。すなわち全体マトリックス計算において、 ペレット固体の各リング要素ごとの軸方向変位は( $v_i^M - v_i^L$ )(ただし、 $v_i^L$ は下部セグメントの $\overline{v}^U$ であるので、あるセグメントの全てのリング要素で同じ値である)として決定され((1)項参照)、 さらに $\Delta z_i^U = \overline{v}^U$ は各リング要素ごとの $(v_i^M - v_i^L)$ の値から凹みおよび隙間の軸方向剛性(バネ定 数)を介して得られたバネ力を径方向全リング要素について加えた総和の力によって決定される。 また、 $\overline{v}^U$ には、バネ力の他に被覆管との摩擦・固着などの PCMI に起因する軸力の効果が含ま れる。すなわち、 $\overline{v}^U$ はこれらの全ての力の相互作用をマトリックス上に組み込んで決定される。

調整パラメータ BUFSP	BUFSPの標準値は1.0(%)である。一様な空隙要素厚みとし			
てスタック長の BUFSP %と仮定する。				
ーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーー				

#### (3) ペレットスタックを構成する要素の性質の仮定

次に、この要素体系モデルにおける計算方法を具体的に説明する。図 3.2.6 において、まず、 熱膨張やスエリングによりペレット固体要素が膨張していく場合、この要素はディッシュ要素 (凹み)の空間体積が埋まるまでは軸方向にはほぼ自由に膨張(収縮)することができ、引張り も圧縮もペレット本来の値によって計算が可能である。次に、図 3.2.6 のディッシュ要素の空間 が埋まると、それ以上の軸方向膨張に対しては、隙間要素が埋まっていくが、このとき、隙間要 素の剛性はペレット本来の値に向かって回復していくので、固体要素は軸方向に自由に膨張(収 縮)することができなくなる。チャンファー要素についても同様な取り扱いを行う。 ただし、出力降下するときペレットが収縮してディッシュ・チャンファー要素の空間が回復することはある。このとき、ペレット間の隙間体積の回復に依存してバネの剛性は再び低下する。

#### (4) 軸方向剛性(バネ定数)の変化

ディッシュ(チャンファー)、隙間要素での剛性変化(増大あるいは減少)モデルは、ディッシュ+隙間要素、チャンファー+隙間要素、隙間要素のみのいずれの場合についても1つの軸方 向バネ要素でモデル化する。軸方向バネ要素の剛性変化はバネ定数の変化により以下のように扱う。(ただしペレットのクラックが埋まることによる要素の剛性回復はこれとは別の現象として、 3.2.3 節でそのモデルを詳述する。)

隙間要素がペレット固体に 100%置き換わったと想定した場合の隙間要素のバネ定数 k\_ を以下のように与える。

$$\overline{k}_z = \overline{E}_z \frac{S}{\overline{l}_z} \tag{3.2.11}$$

ここで、 $\overline{E}_z$ はペレットヤング率、Sはディッシュ(チャンファー)要素の中心軸に垂直な初 期断面積(ディッシュ、チャンファーがないペレットの場合はペレットの断面積)、 $\overline{l}_z$ は前項(2) で説明した隙間要素の軸方向に一様な厚みであり、 $\overline{l}_z$ は一定値であるので、 $\overline{k}_z$  は $\overline{E}_z$ の温度依存 性の影響を受けるだけであり、 $\overline{E}_z$ が不変ならば $\overline{k}_z$ は一定値を取る。

次に、計算で使用するディッシュ要素と隙間要素(チャンファー要素と隙間要素)を通したバネ定数 *k<sub>zd</sub>* については、ペレットの膨張(収縮)によってディッシュ(チャンファー)空間が変化(減少・増加)することによる剛性変化(回復)を反映する必要がある。

ここで、現時点でのある径方向リング要素 i のディッシュ(チャンファー)の軸方向深さ(長 さ)の値を、隙間要素の上面位置を基準にとって、 $l_{zd,i}$ とし、下向き深さを正の符号とする。 ①ディッシュ(チャンファー)空間が残っている間( $\overline{l_z} < l_{zd,i}$ の場合)のバネ定数は、

$$k_{zd} = \bar{k}_z \cdot FAC, \quad FAC = 10^{-5}$$
 (3.2.12)

とする。すなわち、ディッシュ(チャンファー)+隙間要素を通してのバネ定数 $k_{zd}$ は極めて小さい値となる。(ディッシュの場合、初期深さよりディッシュがさらに凹む可能性も状況によってはあり得る。)

②ディッシュ(チャンファー)空間が 100%埋まった後にそれ以上の膨張が進むとき  $(l_{zd,i} \leq \overline{l_z})$ は、隙間要素の厚みが失われていく過程となり、ディッシュ(チャンファー)要素+隙間要素のバネ定数 $k_{zx}$ は、隙間要素に入り込んでいく膨張量 $\Delta l = \overline{l_z} - l_{zd,i}$ が徐々に $\overline{l_z}$ に近づくので、以下

の式にしたがって $\overline{k}_{i}$ に近づいていく。

$$k_{zs} = \overline{k}_{z} \cdot \frac{\Delta l}{\overline{l}_{z}}$$
(3.2.13)

③なお、ディッシュ(チャンファー)が無いペレットのリング要素の場合、及び、図 3.2.6, 3.2.7 でディッシュとチャンファーの間のリング要素の場合は、ペレットの膨張は直接に隙間要素に入 り込んでいくので、(3.2.13)式と同様な式:

$$k_{zs} = \overline{k}_{z} \cdot \frac{\Delta l'_{z}}{\overline{l}_{z}} \quad (\geq k_{zd} = \overline{k}_{z} \cdot FAC) \tag{3.2.14}$$

によってバネ定数の変化を表現する。ここで $\Delta l'_z$  ( $\leq \overline{l}_z$ ) はこれらのリング要素の軸方向膨張量である。収縮の場合は $k_{zs} = k_{zd} = \overline{k}_z \cdot FAC$ となる。

# (5) 応力--- 歪みマトリックス(剛性マトリックス) [D] の求め方

ペレットの各リング要素の応力-弾性ひずみ関係式は、

$$\{\sigma_{n+1}\} = [D] \{\varepsilon_{n+1}^e\}$$
(3.2.15)

で表される。[*D*]は、3.1節でも述べたように、ひずみ-応力マトリックス(剛性マトリックス) と呼ばれ、要素の剛性を表す。このマトリックスの逆行列として[*C*]マトリックスを定義すれば この関係式は、

$$\left\{\varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left[C_{n+1}\right]\left\{\sigma_{n+1}\right\}$$
(3.2.16)

と書け、[C]マトリックスは、

$$[C] = \frac{1}{E} \begin{bmatrix} 1 & -\nu & -\nu \\ -\nu & 1 & -\nu \\ -\nu & -\nu & 1 \end{bmatrix}$$
(3.2.17)

で与えられる。ここで E はヤング率(温度依存性あり)、 v はポアソン比である。

# 3.2.3 ペレットクラック

#### (1) 剛性回復モデル

クラックが発生したペレットのふるまいに関する力学的モデルの概念について図 3.2.8<sup>(1.4), (1.10)</sup> に模式的に示して説明する。ただし FEMAXI では explicit にクラックを扱わない。ペレット(ス タック)はあくまで連続体円柱形状を維持すると仮定して計算する。

ここでは、方向 i (軸方向、周方向あるいは径方向)が引張状態のとき、その方向に垂直な面 にクラックが生じ、i 方向ヤング率は小さな値(物性値の約 1/100)になると仮定する。

また、圧縮状態のときには、リロケーションによるひずみに依存して弾性が回復されると仮定

する。すなわち、初期状態(燃焼度=0、出力=0、このとき $\varepsilon_i - \varepsilon_i^o = 0$ )において、ペレットの ヤング率 $E_i$ は小さな値 $E_c$ である。



図 3.2.8 クラックが発生したペレットの剛性モデル

出力上昇に伴うペレットふるまいの変化は、以下のようにモデル化される。

 被覆管と非接触のとき、ペレットは割れているため熱応力による熱膨張への拘束が少なく、 ペレットは固有の熱膨張率にほぼ従って熱変形し、ギャップを狭める。

② 被覆管との接触が生じると、ペレット内に被覆管の拘束力によって圧縮ひずみが増加する。 このとき、リロケーションによってペレットクラック面に生じていたすきまが圧縮されるにつれて、ペレットの剛性が大きくなる。この過程がヤング率を変化することによって近似される。

すなわちここでは、割れてリロケーションしたペレットと被覆管との間の援慢な力学的相互作用 が次第に強まっていくプロセスがモデル化されている。

③ 次に、リロケーションによる隙間を埋め尽くすまでペレット断片が被覆管により圧縮されたとき、ペレットは弾性Ê(本来の物性値としての弾性係数EとしたときÊ=E×EFACで与えられる; EFACは name-list parameter)まで回復する。ここではペレットと被覆管の強い相互作用をモデル化している。

## (2) リロケーションと応力歪みの関係

以上のモデルに基づいてリロケーションに関するペレットの応力と歪みの関係を説明する。 ここで、各主応力方向の見かけのヤング率*E*<sub>i</sub>を次のように表す。

$$E_{i} = \begin{cases} E_{c} , \quad 0 \leq \varepsilon_{i}^{e} \\ -\frac{\varepsilon_{i}^{e}}{\varepsilon_{i}^{rel}} (E - E_{c}) + E_{c} , \quad -\varepsilon_{i}^{rel} < \varepsilon_{i}^{e} < 0 \\ E , \quad \varepsilon_{i}^{e} \leq -\varepsilon_{i}^{rel} \end{cases}$$
(3.2.18)

ここで、 i 方向の弾性ひずみ $\varepsilon_i^e$ と i 方向のリロケーションひずみ $\varepsilon_i^r$ の和のひずみ $\varepsilon_i$ を導入する。すなわち、

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^e + \varepsilon_i^r \tag{3.2.19}$$

である。

(3.2.19)式において、 $\varepsilon_i^e = 0$ のとき $\varepsilon_i^r = \varepsilon_i^{rel}$ であり、 $\varepsilon_i^e = -\varepsilon_i^{rel}$ のとき $\varepsilon_i^r = 0$ である。すなわち、応力 0 ( $\varepsilon_i^e = 0$ ) のときのリロケーションひずみは $\varepsilon_i^{rel}$ であり、 $\varepsilon_i^e = -\varepsilon_i^{rel}$ のときにペレットは完全な剛性を回復してリロケーションひずみは0となる。

したがって、弾性ひずみが $-\varepsilon_i^{rel} < \varepsilon_i^e < 0$ の範囲では、 $-\varepsilon_i^{rel} < \varepsilon_i < \varepsilon_i^{rel}$ の範囲で変化する。 図 3.2.9 において、区間 $-\varepsilon_i^{rel} < \varepsilon_i < \varepsilon_i^{rel}$ では、(3.2.18)式より、みかけのヤング率の変化が 1 次関数であり、みかけのヤング率は $d\sigma/d\varepsilon$ で与えられることから、これを積分して得られる応 力-ひずみの関係は、2 次関数となる。

したがって、 $-\varepsilon_i^{rel} < \varepsilon_i < \varepsilon_i^{rel}$ 区間の応力変化を歪みの関数として

$$\sigma_i = a\varepsilon_i^2 + b\varepsilon_i + c \tag{3.2.20}$$

とおく。これを微分して、

$$E_i = \frac{d\sigma_i}{d\varepsilon_i} = 2a\varepsilon_i + b \tag{3.2.21}$$

である。



図 3.2.9 割れたペレットにおけるリロケーション歪みと応力の扱い方

ここで、係数*a*, *b*, *c*を求める。境界条件は、 $\varepsilon_i = \varepsilon_i^{rel}$ のとき $\sigma_i = 0$ 、 $\varepsilon_i = \varepsilon_i^{rel}$ のとき $E_i = E_c$ 、  $\varepsilon_i = -\varepsilon_i^{rel}$ のとき $E_i = E$ であるので、(3.2.20)式より、

$$a\varepsilon_i^{rel^2} + b\varepsilon_i^{rel} + c = 0 \tag{3.2.22}$$

(3.2.21)式より、

$$2a\varepsilon_i^{rel} + b = E_c \tag{3.2.23}$$

$$-2a\varepsilon_i^{rel} + b = E \tag{3.2.24}$$

である。(3.2.22)~(3.2.24)式を解くと

$$a = -\frac{E - E_c}{4\varepsilon_i^{rel}}, \quad b = \frac{E + E_c}{2}, \quad c = -\frac{E + 3E_c}{4}\varepsilon_i^{rel}$$
 (3.2.25)

を得る。したがって、(3.2.20)式は、

$$\sigma_{i} = -\frac{E - E_{c}}{4\varepsilon_{i}^{rel}}\varepsilon_{i}^{2} + \frac{E + E_{c}}{2}\varepsilon_{i} - \frac{E + 3E_{c}}{4}\varepsilon_{i}^{rel}$$
(3.2.26)

となる。

図 3.2.9 において(3.2.22)式のカーブと Y 軸との交点の値は、 $\sigma_i = -\frac{E+3E_c}{4}\varepsilon_i^{rel}$ であり、  $\varepsilon_i = -\varepsilon_i^{rel}$ のとき、すなわちヤング率を完全に回復する時の応力は $\sigma_i = -(E+E_c)\varepsilon_i^{rel}$ である。

#### (3) クラックモデルの特徴

前項(1)(2)で説明したように、本モデルの特徴は、応力-ひずみの関係を応力と弾性ひずみの関係式ではなく、応力と弾性ひずみ+リロケーションひずみとの関係式を導入することによりクラックによるペレットの剛性変化を含めた応力とひずみ関係式を導いた点である。

ただしここで、燃焼に伴って変化する要素、たとえばクリープの影響をどう考えたらいいので あろうか。結論からいえば、クリープひずみの寄与を応力-ひずみの関係式に導入させるモデル を定式化することは困難である。つまり、クリープが、基本となる応力-ひずみの関係式に影響 を与えることは、クリープ挙動、塑性挙動が応力-ひずみの基本的な関係式の上に成り立って定 式化されている点と矛盾すると考えられるからである。したがって、応力-ひずみの関係式にさ らに他のひずみ成分を導入して複雑なモデル化はすべきでない。

そこで、応力と弾性ひずみの関係式を燃焼に伴って変化させる方策として、他のひずみを介入 させない方法で、クラックの特性変化をモデル化することを以下に検討する。

# 3.2.4 燃焼に伴うクラックの変化

将来的なモデル拡張のため考察として、クラックの特性の変化の2通りの方法を述べる。すな わち、基準とするリロケーション量を変化させる方法と、応力-ひずみ関係の剛性変化方法変化 させる方法である。

#### (1) リロケーション量を変化させる方法

リロケーション量を変化させる方法は、図 3.2.9 に示すように、x 軸の交点となる E<sup>rel</sup>を燃焼 とともに移動させることが有効であると考えられる。この移動は、タイムステップ毎に緩やかに 移動させるのが良い。すなわち、初期リロケーションで与えたひずみの一部をスエリングひずみ に吸収させていく方法である。ペレットの照射に伴う膨れをリロケーションひずみ+スエリング ひずみで評価する。すなわち、FEMAXI では燃焼とともに発生する新たなリロケーションひずみ をスエリングひずみに吸収させてトータルで評価する考えを用いているが、燃焼とともに失うリ ロケーションひずみもスエリングひずみに吸収させてモデル化する。燃焼とともに失うリロケー ションひずみが固体スエリングに依存するとすれば燃焼度依存となる。したがって、リロケーシ ョンひずみ変化のモデル化は、燃焼初期における照射とともに発生するリロケーションひずみに ついても考慮すると、図 3.2.10 に示すように基準となるリロケーションひずみ(図 3.2.10 の応力 ひずみ



図 3.2.10 割れたペレットにおけるリロケーション歪みと応力の扱い方 曲線の x 軸(ε)との交点の値)を燃焼度の関数として定義することができ、図 3.2.11 に示すよう に応力-ひずみ曲線が燃焼度依存となる。なお、リロケーションひずみ特性はスエリングひずみと 合算して調整することになる。


図 3.2.11 基準となるリロケーション歪みの燃焼度依存曲線

### (2) ペレットの剛性変化過程を修正する方法

次に、ペレットの剛性変化過程を修正する方法とは、燃焼の進行とともに図 3.2.12 に示すよう に応力-ひずみ曲線を変化させる方法である。すなわち、基準となる初期リロケーションひずみは そのままとして、応力-ひずみ曲線の曲率を変化させることで、応力-ひずみ関係を変化させる。 この変化過程も燃焼度依存にするのが良い。

定式化は以下にように行う。(3.2.18)式を変更して、各方向のヤング率 Eiを次式のように表す。

$$E_{i} = \begin{cases} E_{c} , \quad 0 \leq \varepsilon_{i}^{e} \\ \left( -\frac{\varepsilon_{i}^{e}}{\varepsilon_{i}^{rel}} \right)^{\alpha} \left( E - E_{c} \right) + E_{c} , \quad -\varepsilon_{i}^{rel} < \varepsilon_{i}^{e} < 0 \end{cases}$$
(3.2.27)  
$$E , \quad \varepsilon_{i}^{e} \leq -\varepsilon_{i}^{rel}$$

ここで、

である。

(3.2.27)式中のαは以下のように与える。

$$\alpha = 1 + \beta \cdot Bu \tag{3.2.28}$$

ここで、

### Bu : 燃焼度(GWd/t)

β : 調整パラメータ(例えばβ=0.02)

である。例えばβ=0.02 では、50GWd/t で図 3.2.8 に示すペレットの剛性モデルは 2 次関数で変化 することになる。 ただし、モデルの取り扱いとしては、(1)のリロケーション量を変化させる方 法の方が簡便である。

[調整パラメータ ECRAC3] クラック時のヤング率は ECRAC3 で指定する。標準値は $2 \times 10^9 N / m^2$ で UO<sub>2</sub>のヤング率の約 1/100 である

モデルパラメータIYNG (力学計算のみ)IYNG の標準値は1である。このとき、図3.2.7 に示すペレットの剛性変化モデルにおいて、 $-\varepsilon^{rel}$ から0の間が直線で結ばれる。IYNG=0の場合、 $-\varepsilon^{rel}$ から0の間が下にの二次関数で結ばれる。

調整パラメータ FACR, FACZ  $E_i = E \ge c = \varepsilon_i^{rel}$ の場合であるが、 パラメータ FACR FACZ を用いて径および周方向については $\varepsilon_i - \varepsilon_i^0 = -\varepsilon_i^{rel} \cdot FACR$ 、 軸方向については $\varepsilon_i - \varepsilon_i^0 = -\varepsilon_i^{rel} \cdot FACZ$ の様に調整することができる。 FACR、FACZの標準値は1である。

□ 調整パラメータ EFAC ペレットは本来の物性値としてのヤング率をEとしたとき、E×EFACまで剛性を回復することができる。EFACは燃料棒全長力学解析のみの調整パラメータである。標準値は0.1. なお、3.5節に示す局所での力学解析ではEFAC=1に固定されており調整パラメータではない。

# 3.2.5 マトリックスにおけるクラック表現方法

FEMAXIの力学モデルでは、前述したようにペレットはあくまで円柱状の連続体を仮定するので、クラックはペレットリング要素の剛性低下として近似的に表現する。すなわち、割れたペレット片に対して直接に有限要素分割することはしない。ペレットクラックは(3.2.16)式中の[*C*]マトリックスの要素を(3.2.17)式から次のように変更することによって、 $\{\Delta\sigma\}$ の変化に比例してクラック歪み増分 $\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{crk}\}$ が与えられる。ここで、ペレットの弾性ひずみー応力マトリックス[ $\widetilde{C}$ ]は次のように表す。

$$\begin{bmatrix} \widetilde{C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_r} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E_z} & -\frac{\nu}{E} \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E_{\theta}} \end{bmatrix}$$
(3.2.29)

ここで、
$$E_r$$
: 径方向のみかけのヤング率(Pa)  
 $E_z$ : 軸方向のみかけのヤング率(Pa)  
 $E_{\theta}$ : 周方向のみかけのヤング率(Pa)  
 $E$ : ペレットヤング率(本来の物性値)(Pa)  
 $\nu$ : ポアソン比 (-)

である。

各方向のみかけのヤング率 $E_i$  ( $E_r$ 、 $E_z$ 、 $E_{\theta}$ ) は次のように定義する。

$$E_{i} = \begin{cases} E_{c} , & 0 \leq \varepsilon_{i} - \varepsilon_{i}^{0} \\ -\frac{\varepsilon_{i} - \varepsilon_{i}^{0}}{\varepsilon_{i}^{rel}} \left(\tilde{E} - E_{c}\right) + E_{c} , & -\varepsilon_{i}^{rel} < \varepsilon_{i} - \varepsilon_{i}^{0} < 0 \\ \tilde{E} , & \varepsilon_{i} - \varepsilon_{i}^{0} \leq -\varepsilon_{i}^{rel} \end{cases}$$
(3.2.30)

ここで、

$$\varepsilon_{i}$$
 : i 方向ひずみ  
 $\varepsilon_{i}^{0}$  : i 方向初期ひずみ  
 $\varepsilon_{i}^{rel}$  : i 方向の初期リロケーションひずみ量(入力データ)  
 $E_{c}$  : クラックしたペレットの引張状態での実効的なヤング率  
 $\tilde{E}$  : E (ペレットヤング率の物性値)×EFAC

である。(3.2.16)式より、

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left[C_{n+\theta}\right] \left\{\Delta \sigma_{n+1}\right\}$$
(3.2.31)

また、弾性歪み増分とクラック歪み増分との和を

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e} + \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk,i+1}\right\} = \left[\widetilde{C}_{n+\theta}\right] \left\{\Delta \sigma_{n+1}^{i+1}\right\}$$
(3.2.32)

とおく。クラック歪み増分ベクトルは、(3.2.31)、(3.2.32)式より、

$$\begin{split} \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk,i+1} \right\} &= \left\{ \begin{bmatrix} \tilde{C}_{n+\theta} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_{n+\theta} \end{bmatrix} \right\} \left\{ \Delta \sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \\ &= \left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{E_r} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E_z} & -\frac{\nu}{E} \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E_{\sigma}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{\tilde{E}} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} \end{bmatrix} \right\} \left\{ \Delta \sigma_{z,n+1}^{i+1} \right\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{E_r} - \frac{1}{\tilde{E}} \end{pmatrix} \Delta \sigma_{z,n+1}^{i} \\ \left( \frac{1}{E_z} - \frac{1}{\tilde{E}} \right) \Delta \sigma_{\theta,n+1}^{j} \right\} + \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{E_z} - \frac{1}{\tilde{E}} \end{pmatrix} d \sigma_{d,n+1}^{i+1} \\ \left( \frac{1}{E_z} - \frac{1}{\tilde{E}} \right) d \sigma_{\theta,n+1}^{j+1} \\ \left( \frac{1}{E_{\theta}} - \frac{1}{\tilde{E}} \right) d \sigma_{\theta,n+1}^{j+1} \\ \end{array} \right\} \end{split}$$
(3.2.33)

となる。これによって(3.1.40)式中の未知量であるクラック歪み増分  $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk,i+1}\right\}$ が未知量の  $\Delta \sigma_{r,n+1}^{i+1}$ ,  $\Delta \sigma_{d,n+1}^{i+1}$ によって表現されたので、未知変数が1個消去された。ここで、(3.2.33) 式は、クラック歪み増分の求め方を示した式であり、全体マトリックスには(3.2.32)式によって組 み込まれている。すなわち、(3.2.32)式で示したように弾性歪み増分+クラック歪み増分と応力増 分の関係で定式化されている。

こうした消去の結果としての(3.2.33)式を(3.1.40)式に代入すると

$$\begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \} - \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \} \\ + \{ \begin{bmatrix} \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \} (\{ \sigma_{n+1}^{i} \} + \{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \} - \{ \sigma_{n} \}) \\ + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i+1} \} + \begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} (\{ \sigma_{n+1}^{i} \} - \{ \sigma_{n} \}) = 0 \end{bmatrix}$$

より、結局

$$\begin{bmatrix} \widetilde{C}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \} - \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i+1} \} + \begin{bmatrix} \widetilde{C}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \{ \{ \sigma_{n+1}^{i} \} - \{ \sigma_{n} \} \} = 0 \quad (3.2.34)$$
と変換することができる。

調整パラメータ FRELOC, EPSRLZ (力学計算のみ) リロケーションひずみ  $\varepsilon^{rel}$  は、径方向には hot stand-by における半径ギャップ幅を RELOC 倍した長さをペレット半径で割ったものであり、軸方向には EPSRLZ で入力で直接与えることができる。なお、FRELOC の標準値 いた 0.35、EPSRLZ の標準値は 0.003 である。

# 3.2.6 FEMAXIにおける相当応力、相当歪みの定義式

ここで、以下の非線形力学解析の記述を理解する上で重要な、相当応力・相当歪みの定義式を示す。

(1) 相当応力

異方性材料の相当応力の一般式はZR方向のせん断応力のみを考慮した場合、

$$\overline{\sigma} = \left[ \frac{3}{2(F+G+H)} \left\{ H(\sigma_r - \sigma_z)^2 + F(\sigma_z - \sigma_\theta)^2 + G(\sigma_\theta - \sigma_r)^2 + 6\tau_{zr}^2 \right\} + 3\alpha(\sigma_r + \sigma_\theta + \sigma_z)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$
(3.2.35)

であり、 はホットプレスパラメータであるが、ホットプレス項については**3.2.7**項で説明する。 (3.2.35)式において、等方性を仮定すると F = G = H = 1.0であるので

全長力学解析(IFEMRD=1)では

$$\overline{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ (\sigma_r - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_\theta)^2 + (\sigma_\theta - \sigma_r)^2 \right\} + 3\alpha (\sigma_r + \sigma_\theta + \sigma_z)^2}$$
(3.2.36)

局所力学解析(IFEMRD=0)では

$$\overline{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{2} \left\{ \left( \sigma_r - \sigma_z \right)^2 + \left( \sigma_z - \sigma_\theta \right)^2 + \left( \sigma_\theta - \sigma_r \right)^2 + 6\tau_{zr}^2 \right\} + 3\alpha \left( \sigma_r + \sigma_\theta + \sigma_z \right)^2} \quad (3.2.37)$$

となる。

### (2) 相当弾性歪み(等方性を仮定)

全長力学解析(IFEMRD=1)では  

$$\varepsilon_{e} = \frac{2}{3} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \left( \varepsilon_{r} - \varepsilon_{\theta} \right)^{2} + \left( \varepsilon_{\theta} - \varepsilon_{z} \right)^{2} + \left( \varepsilon_{z} - \varepsilon_{r} \right)^{2} \right] \right\}^{0.5}$$
(3.2.38)

局所力学解析(IFEMRD=0)では  

$$\varepsilon_{e} = \frac{2}{3} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \left( \varepsilon_{r} - \varepsilon_{\theta} \right)^{2} + \left( \varepsilon_{\theta} - \varepsilon_{z} \right)^{2} + \left( \varepsilon_{z} - \varepsilon_{r} \right)^{2} \right] + \frac{3}{4} \gamma_{rz}^{2} \right\}^{0.5}$$
(3.2.39)

(3) 相当塑性歪み増分 (クリープ歪みも同じ表式)

全長力学解析 (IFEMRD=1)では

$$d\overline{\varepsilon}^{pl} = \sqrt{\frac{2}{3} \left[ \left( d\varepsilon_r^{pl} \right)^2 + \left( d\varepsilon_{\theta}^{pl} \right)^2 + \left( d\varepsilon_z^{pl} \right)^2 \right]}$$
(3.2.40)

局所力学解析 (IFEMRD=0)では  

$$d\overline{\varepsilon}^{pl} = \sqrt{\frac{2}{3} \left[ (d\varepsilon_r^{pl})^2 + (d\varepsilon_\theta^{pl})^2 + (d\varepsilon_z^{pl})^2 + \frac{1}{2} ((d\gamma_r^{pl})^2 + (d\gamma_z^{pl})^2) \right]}$$
(3.2.41)

また、全相当塑性歪みは、最初のタイムステップから n-th タイムステップまでの増分の総和として

$$\overline{\varepsilon}^{pl} = \sum_{i=1}^{n} d\overline{\varepsilon}_{i}^{pl}$$
(3.2.42)

である。

 異方性パラメータ **H0(4), F0(4), G0(4)** ペレット、被覆管(SUS)、純 Zr、ZrO2 の異方 性係数 H, F, G はそれぞれ H0(1), F0(1), G0(1)、H0(2), F0(2), G0(2)、H0(3), F0(3), G0(3)、H0(4), F0(4), G0(4)で指定する。標準値はいずれも 1.0 である。

# 3.2.7 ペレットのホットプレス

### (1) 現象と式

静水圧による体積収縮、すなわちホットプレスは、静水圧応力によってペレット内部の空隙が 押しつぶされ、密度が増加する現象である。ペレットの相当応力及び降伏関数の流れ則を次式に 示す<sup>(3.1)</sup>。ただし、次式においては、せん断成分はホットプレスには効かないので無視した。また、 以下の説明は全長力学解析及び局所力学解析の両方に適用される。(3.2.35)式で全長力学解析 (IFEMRD=1)では、

$$h = \left[\frac{3}{2(F+G+H)} \left\{ H\left(\sigma_{r}-\sigma_{z}\right)^{2} + F\left(\sigma_{z}-\sigma_{\theta}\right)^{2} + G\left(\sigma_{\theta}-\sigma_{r}\right)^{2} \right\} + 3\alpha \left(\sigma_{r}+\sigma_{z}+\sigma_{\theta}\right)^{2} \right]^{\frac{1}{2}} \equiv \overline{\sigma}$$
(3.2.43)

ここで、

h:降伏関数 (von Mises 関数)、

 $ar{\sigma}$ :相当応力

H, F, G : 異方性係数(ただし、ペレットでは等方性を仮定して H=F=G=1 とする)

である。

(3.2.43)式は、ホットプレスを考慮しない場合の相当応力の表式に対して

$$3\alpha \left(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta\right)^2 = 27\alpha \left(\frac{\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta}{3}\right)^2$$

の項が付加されている。ただし

$$\sigma_{ST} = \frac{\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta}{3}$$

は静水圧応力である。

(3.2.43)式は、一般の金属では =0 であり、かつ偏差応力 $<math display="block">\{\sigma'\} = \begin{cases} \sigma_r - \sigma_{ST} \\ \sigma_z - \sigma_{ST} \\ \sigma_\theta - \sigma_{ST} \end{cases} = \begin{cases} \frac{2\sigma_r - \sigma_z - \sigma_\theta}{3} \\ \frac{2\sigma_z - \sigma_\theta - \sigma_r}{3} \\ \frac{2\sigma_\theta - \sigma_r - \sigma_z}{3} \\ \frac{2\sigma_\theta - \sigma_r - \sigma_z}{3} \end{cases} = 0$ 

が成り立つ場合は、相当応力 $\sigma=0$ であり、塑性変形は生じない。しかし、ペレットのようなポア を持つ固体の場合、たとえば焼結後に残留した気泡が存在する場合には、偏差応力がたとえ0の 条件でも $\sigma_{sr}(<0)$  (=圧縮静水圧)によって気泡が押しつぶされて、ペレットが収縮し、体積変 化する(永久歪みが生じる)。この収縮速度は、クリープひずみ変化速度、塑性ひずみ変化速度 に比例すると仮定することができる。また、収縮速度は静水圧応力 $\sigma_{sr}(<0)$ に比例すると考えら れるので、(3.2.43)式のように等価応力の表式中(平方根中)に $27\alpha \left(\frac{\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta}{3}\right)^2$ 項が付加さ れる<sup>(3.1)</sup>。ここで、 はホットプレス調整パラメータである。

ここで、塑性の流れ則の形を考えると、第nタイムステップ中の繰り返し計算において塑性歪 み増分は

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{P}\right\} = \Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{P} \left\{\frac{\partial\overline{\sigma}}{\partial\sigma}\right\}_{n+\theta}$$
(3.2.45)

(3.2.44)

となる。

ペレット材質の等方性(H = F = G = 1, N = 3)を仮定すると、(3.2.43)式より

$$\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \sigma_r} = \frac{3}{2\bar{\sigma}} \left\{ \frac{2\sigma_r - \sigma_z - \sigma_\theta}{3} + 2\alpha \left(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta\right) \right\}$$
(3.2.46)

が成り立つ。したがって、

$$\left\{ \frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta} = \frac{1}{\overline{\sigma}_{n+\theta}} \begin{bmatrix} 1+3\alpha & -0.5+3\alpha & -0.5+3\alpha \\ 1+3\alpha & -0.5+3\alpha \\ Sym. & 1+3\alpha \end{bmatrix} \{\sigma_{n+\theta}\}$$
(3.2.47)

である。(3.2.47)式を(3.2.45)式に代入し、整理すると、

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+\theta}^{P}\right\} = \frac{(1+3\alpha)\Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{P}}{\overline{\sigma}_{n+\theta}} \begin{bmatrix} 1 & -v^{P} & -v^{P} \\ & 1 & -v^{P} \\ & & 1 \\ & & & 1 \\ & & Sym. \end{bmatrix} \{\sigma_{n+\theta}\}$$
(3.2.48)

となる。ここで、

$$v^{P} = \frac{0.5 - 3\alpha}{1 + 3\alpha}$$
(3.2.49)

である。この式は後述の二次元局所力学解析でも同じ形である。

以上により塑性変形の過程におけるホットプレスによる体積ひずみ増分 $\Delta \varepsilon_{h,n+1}^{P}$ は、

$$\Delta \varepsilon_{h,n+1}^{P} = \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,r} + \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,z} + \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,\theta}$$

$$= \frac{(1+3\alpha)\Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P}}{\overline{\sigma}} (1-2v^{P}) (\sigma_{r} + \sigma_{z} + \sigma_{\theta})$$

$$= \frac{9\alpha \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P}}{\overline{\sigma}} (\sigma_{r} + \sigma_{z} + \sigma_{\theta})$$
(3.2.50)

である。こうして、塑性変形の過程におけるホットプレスによる体積ひずみ増分が定式化された。 クリープが進行している過程におけるホットプレスによる体積ひずみ増分  $\Delta \varepsilon_{h,n+1}^{c}$  にも、 (3.2.50)式が適用されるので、同様にして、

$$\Delta \varepsilon_{h,n+1}^{c} = \frac{9\alpha \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{c}}{\overline{\sigma}} \left( \sigma_{r} + \sigma_{z} + \sigma_{\theta} \right)$$
(3.2.51)

となる。したがって、塑性およびクリープ変形に伴うペレットの体積変化(=ホットプレス歪み)  $\Delta \varepsilon_{h,n+1}$ は全体をまとめて次のように表される。

$$\Delta \varepsilon_{h,n+1} = \Delta \varepsilon_{h,n+1}^{P} + \Delta \varepsilon_{h,n+1}^{c}$$
$$= \frac{9\alpha}{\overline{\sigma}} \left( \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P} + \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{c} \right) \left( \sigma_{r} + \sigma_{z} + \sigma_{\theta} \right)$$
(3.2.52)

したがって、塑性及びクリープ歪みの定式化で、相当応力を(3.2.43)式で定式化すれば、塑性及び クリープ歪み増分中にホットプレス歪み増分が含んだ歪み増分として求めることができる。 また塑性及びクリープ歪みの求め方は次項に説明する。

### (2) パラメータ

ここで、ホットプレスの計算を制御する name-list parameters を説明する。

① BETAX

BETAX は、ペレットの理論密度比とホットプレスパラメータ を関係づける係数である。また、オプションパラメータ IHOT 及び IHPOP の設定によって の取り扱いは異なる。 の設定 方法は以下のとおりである。

1) IHOT=0 の場合、α = BETAX に固定される。(全長力学解析部に適用される。)

3) IHOT=1 (あるいは IHPOP=1) の場合、第 n+1 タイムステップにおける をポロシティ の関数として以下のように定義する。

この場合、ホットプレスや焼きしまりが進んでポロシティが減少すれば は0に 近して行く が、負値にはならない。

② IHOT 全長力学解析においてパラメータ を調整するオプション。標準値=0
 ③ IHPOP 局所力学解析部においてパラメータ を調整するオプション。標準値=0

④ FDENH ホットプレスが完了する理論密度比D (-)
 IHOT=1 または IHPOP=1 の場合に適用される。標準値=1.0

### 3.2.8 増分法の補足説明

「弾性歪み増分」という場合、塑性歪みやクリープ歪みも含む「増分法における線形近似可能 な非線形歪み+線形歪み」という意味だろうか? たとえば (3.2.8), (3.2.9), (3.2.17)式のような もっ ら弾性変形の計算に用いるマトリックスが示され、その後に塑性やクリープもこの式で計 算をやります、と言外に説明しているように受け取られるかもしれない。しかし塑性やクリープ には(3.2.5), (3.2.17)式のようなポアソン比を用いた式は成り立たない。したがって以下では塑性や クリープの歪み増分を弾性変形と区別して、どう扱うかを説明していく。

ここでは、まず弾性歪み増分の算出方法について説明を補足する。

# (1) 増分法の剛性方程式

増分法での剛性方程式とは、3.1節でも説明したように

$$\int [B]^{T} [D] [B] dV \{\Delta u\} = \{\Delta F\}$$

$$+ \int [B]^{T} [D] \{\{\Delta \varepsilon^{TH}\} + \{\Delta \varepsilon^{rel}\} + \{\Delta \varepsilon^{swl}\} + \{\Delta \varepsilon^{den}\} + \{\Delta \varepsilon^{crk}\} + \{\Delta \varepsilon^{c}\} + \{\Delta \varepsilon^{p}\} + \{\Delta \varepsilon^{HOT}\}\} dV$$

$$(3.2.54)$$

である。(3.2.54)式は、  

$$\int [B]^{T} [D] \{\Delta\varepsilon\} dV = \{\Delta F\}$$

$$+ \int [B]^{T} [D] \{\{\Delta\varepsilon^{TH}\} + \{\Delta\varepsilon^{rel}\} + \{\Delta\varepsilon^{swl}\} + \{\Delta\varepsilon^{den}\} + \{\Delta\varepsilon^{crk}\} + \{\Delta\varepsilon^{c}\} + \{\Delta\varepsilon^{p}\} + \{\Delta\varepsilon^{HOT}\}\} dV$$
(3.2.55)

と変形することができる。ここで、右辺の歪みはそれぞれ、

$$\{\Delta \varepsilon^{TH}\}$$
:熱歪み増分、  
 $\{\Delta \varepsilon^{rel}\}$ :リロケーション歪み増分、  
 $\{\Delta \varepsilon^{swl}\}$ :スエリング歪み増分、  
 $\{\Delta \varepsilon^{den}\}$ :やきしまり歪み増分、  
 $\{\Delta \varepsilon^{crk}\}$ :クラック熱歪み増分、  
 $\{\Delta \varepsilon^{c}\}$ :クリープ歪み増分、  
 $\{\Delta \varepsilon^{p}\}$ :塑性歪み増分、

$$\left\{\Delta \varepsilon^{HOT}
ight\}$$
:ホットプレス歪み増分

である。

左辺の歪みは全歪み増分で、

$$\{\Delta\varepsilon\} = \{\Delta\varepsilon^{e}\} + \{\Delta\varepsilon^{TH}\} + \{\Delta\varepsilon^{rel}\} + \{\Delta\varepsilon^{swl}\} + \{\Delta\varepsilon^{den}\} + \{\Delta\varepsilon^{crk}\} + \{\Delta\varepsilon^{c}\} + \{\Delta\varepsilon^{p}\} + \{\Delta\varepsilon^{HOT}\}$$

$$(3.2.56)$$

である。(3.2.55)式に(3.2.56)式を代入すると、

$$\int [B]^{T} [D] \left\{ \Delta \varepsilon^{e} \right\} dV = \left\{ \Delta F \right\}$$
(3.2.57)

の関係式が得られる。また、(3.2.57)式では、平衡方程式より  $\{\Delta F\} = \int [B]^T \{\Delta \sigma\} dV$  (3.2.58)

の関係式が成り立つので、

$$\int [B]^{T} [D] \{\Delta \varepsilon^{e}\} dV = \int [B]^{T} \{\Delta \sigma\} dV \qquad (3.2.59)$$

が得られ、
$$\{\Delta\sigma\} = [D]\{\Delta\varepsilon^e\}$$
、すなわち(3.1.11)式が得られる。ここで
$$\int [B]^T [D]\{\Delta\varepsilon^e\} dV = \{\Delta F\}$$
(3.2.57)

において $\{\Delta F\}=0$ であれば、 $\{\Delta \varepsilon^e\}=0$ になる。

実際の適用では、弾性歪み増分以外の歪み増分に歪み差が生じていない場合には、

$$\left\{\Delta F\right\} = 0 \tag{3.2.60}$$

であるので

$$\left\{\Delta\varepsilon^e\right\} = 0\tag{3.2.61}$$

となるが、弾性歪み増分以外の歪み増分に歪み差が生じている場合は、歪み差によって要素間で は

$$\{\Delta F\} \neq 0$$

の荷重が発生して、弾性歪み増分が発生する。この $\{\Delta F\}$ の値が決まらないため、(3.2.54)式の剛 性マトリックスを解く必要が生じる。ここで

$$\{\Delta\sigma\} = [D]\{\Delta\varepsilon^e\}$$
(3.2.62)

の関係式では、他の歪み増分を考慮するか否かに係わらず応力を決定する歪みを弾性歪みと呼んでいる。

### (2) 初期歪み増分

初期歪み法では、タイムステップの始めに $\{\Delta \varepsilon^{TH}\}, \{\Delta \varepsilon^{swl}\}, \{\Delta \varepsilon^{den}\}, \{\Delta \varepsilon^{crk}\}, \{\Delta \varepsilon^{c}\}, \{\Delta \varepsilon^{e}\}, \{\Delta \varepsilon^{p}\}, \{\Delta \varepsilon^{HOT}\}$ を与えて(3.2.55)式を解くもので、これらの歪み増分を初期歪み増分と呼んでいる。しかし、上記の歪みのうち、タイムステップの始めで定義できる歪み増分(温度や燃焼度のみの関数としての歪み変化)は、

$$\left\{\Delta\varepsilon^{TH}\right\}, \left\{\Delta\varepsilon^{rel}\right\}, \left\{\Delta\varepsilon^{swl}\right\}, \left\{\Delta\varepsilon^{den}\right\}$$
(3.2.63)

の4つの歪み増分だけである。そこで、タイムステップの始めに定義できる歪み増分が初期歪み 増分なので、初期歪み増分 $\{\Delta \varepsilon^0\}$ は、

$$\left\{\Delta\varepsilon^{0}\right\} = \left\{\Delta\varepsilon^{TH}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon^{rel}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon^{swl}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon^{den}\right\}$$
(3.2.64)

と置く。タイムステップの始めに未知な歪み増分(応力に依存する歪み増分)

$$\left\{\Delta\varepsilon^{crk}\right\}, \left\{\Delta\varepsilon^{c}\right\}, \left\{\Delta\varepsilon^{p}\right\}, \left\{\Delta\varepsilon^{HOT}\right\}$$
(3.2.65)

については、その算出に数値計算上の工夫がいるので、本文中ではその取り扱い方法についての 解法を順次説明している。(3.2.64)式を(3.2.56)式に代入すると次式が出てくる。

ここで、
$$\{\Delta \varepsilon^{HOT}\}$$
については、 $\{\Delta \varepsilon^{c}\}, \{\Delta \varepsilon^{p}\}$ の中に含めている。

すなわち、弾性ひずみ増分ベクトルは次のように表す。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{0}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{crk}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{p}\right\}$$
(3.2.66)

ここで、

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}\right\}$$
: 全ひずみ増分ベクトル  
 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\right\}$ : 初期ひずみ増分ベクトル  
 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\right\}$ : ペレットクラック歪み増分  
 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c}\right\}$ : クリープひずみ増分ベクトル  
 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{p}\right\}$ : 塑性ひずみ増分ベクトル

である。熱膨張、やきしまり、スウェリングおよびリロケーションによるひずみは一括して初期 ひずみとして取り扱われる。

次の3.3節では、こうした非線形歪みの計算法が説明される。

# 3.3 非線形歪みの計算方法

# 3.3.1 クリープ

### (1) クリープ式と関連した応力の式

ペレット、被覆管および酸化膜のクリープ式は、一般的な形として次のように書ける。

$$\dot{\overline{\varepsilon}}^c = f\left(\overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^H, T, \phi, \dot{F}\right)$$
(3.3.1)

ここで、

である。

また、クリープ硬化パラメータ
$$\bar{\epsilon}^{H}$$
の変化率は、一般的な形として次のように書ける。  
 $\dot{\bar{\epsilon}}^{H} = g(\bar{\sigma}, \bar{\epsilon}^{H}, T, \phi, \dot{F})$  (3.3.2)

(3.3.1)式は通常は単軸応力下におけるクリープ式であるが、これを多軸応力状態に一般化すれば、 クリープ速度ベクトル $\{\dot{\epsilon}^c\}$ は、応力ベクトル、クリープ硬化パラメータのベクトル関数として表 される。このベクトル関数を $\{\beta\}$ とおけば、 $\{\dot{\epsilon}^c\}$ は、

$$\left\{\dot{\varepsilon}^{c}\right\} = \left\{\beta\left(\left\{\sigma\right\}, \overline{\varepsilon}^{H}\right)\right\}$$
(3.3.3)

と書ける。ただし、T, ¢およびFは既知パラメータとして扱われるので省略した。

いま、時刻  $t_n$ の計算を終了し、次の時間増分幅を $\Delta t_{n+1}$ として時刻 $\Delta t_{n+1}$ 中の変化の計算を行っているとき、クリープ歪み増分ベクトルは、次のように書ける。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c}\right\} = \Delta t_{n+1}\left\{\dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c}\right\} = \Delta t_{n+1}\left\{\beta\left\{\sigma_{n+\theta}\right\}, \overline{\varepsilon}_{n+\theta}^{H}\right\}$$
(3.3.4)

ここで、

である。

例えば θ=0 とすると、上式は増分の始点の状態量(既知量)で定まるクリープ速度を用いる方法(初期歪み法)となる。この場合、計算手順は単純となるが数値的不安定になりやすく、高ク リープ速度下において時間増分幅を極めて小さくとらねばならないことが知られている。

一方、θ≠0 とすると、未知量を含む表式となり手順が複雑化するが、θ が1 に近づくにつれて 数値解の安定性が向上する。(θ≠0 とする方法は陰解法と呼ばれる)。

本コードでは数値解の安定性を重んじて、θ=1(完全陰解法)としている。

いま、時刻  $t_n$ から  $t_{n+1}$ の計算において、Newton-Raphson 法による反復の第i回目を終了し第i+1回目の反復を行っているとき((3.1.34)~(3.1.36)式参照)、クリープ速度ベクトルは次のように書くことができる。

ここで、クリープ式は、流れ則(flow-rule)を用いて、各主方向成分の関数形が同形であることに より、(3.3.3)式を用いて、

$$\left\{\dot{\varepsilon}^{c}\right\} = \dot{\overline{\varepsilon}}^{c} \left\{\frac{d\overline{\sigma}}{d\sigma}\right\} = \frac{3f}{2\overline{\sigma}} \left\{\sigma'\right\}$$
(3.3.5)

と書くことができる。ただし、相当応力 $\sigma$ は(3.2.43)式において定義される。

【注】クリープ歪み成分 (増分にも) には Prandtle-Reuss の flow-rule が成り立つ。 ここで、クリープ歪み増分は、 $\left\{ \dot{\varepsilon}^{c} \Delta t \right\} = \left\{ \dot{\varepsilon}^{c} \right\} \Delta t$  であるので、クリープ歪み速度 についても、flow-rule の適用が可能である。次項(2)補足説明参照。

ここでホットプレス歪みは、塑性歪み及びクリープ歪みに比例すると仮定したので、塑性およびクリープに含めて取り扱って定式化した方が都合がよい。よって、相当応力を(3.2.43)式で与えることにより、ペレットホットプレスを含めたクリープ歪増分が求められる。 また、このとき  $\{\sigma'\}$ は同様に考えた場合のペレットホットプレスを含めた偏差応力ベクトルであり、

$$\left\{\sigma'\right\} = \begin{cases} \frac{2\sigma_r - \sigma_z - \sigma_\theta}{3} + 2\alpha \left(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta\right) \\ \frac{2\sigma_z - \sigma_\theta - \sigma_r}{3} + 2\alpha \left(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta\right) \\ \frac{2\sigma_\theta - \sigma_r - \sigma_z}{3} + 2\alpha \left(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta\right) \end{cases}$$
(3.3.6)

で与えられ、各主応力成分の平均値からの偏差を表す。(3.2.44)式と比較されたい。

### (2) クリープ歪みの計算方法

ここで(3.3.5)式に続いて式を展開する前に、FEMAXI コードの計算におけるクリープ歪み・塑 性歪みと弾性歪みの関係について補足説明する。

#### 1) 主応力方向とクリープ歪み増分

クリープ歪みおよび塑性歪みの各主応力方向の歪み増分は、Prandtle-Reuss の flow-rule に従っ て偏差応力の大きさに比例して決定される。相当クリープ歪み速度は、応力、温度、クリープ歪 み硬化等によってその 対量が決められる。すなわち、平均応力との差において、引張り応力に なっている方向には正のクリープ歪みが生じ、圧縮の応力になっている方向には負のクリープ歪 みが生じる。このとき同時に、引張り応力になっている方向は正の弾性歪みが生じており、圧縮 応力になっている方向には負の弾性歪みが生じているので、弾性歪みの符号はその主応力方向と ー している。弾性歪みは<u>他の歪み成分との差</u>を埋める方向に発生し、全歪み差(隣接する要素 間の変位差に基づく要素間の全歪みの差)が少なくなるように発生する。ここで、<u>他の歪み成分</u> <u>の差</u>とは、有限要素法(FEM)における隣り合う要素間での弾性歪み以外の歪み成分の差を指す。

#### 2) 歪み成分の差

変位(全歪みに対応)は材料の剛性によって規定される。すなわち、系を構成するすべての要素間の<u>全歪み差</u>は各要素の持つ剛性によって規定される。ただし、剛性に直接依存する成分は弾 性歪みであり、ここで「全歪み差が規定される」というのは、全歪み差に弾性歪みが含まれている からである。FEMAXIのFEM 応力解析では変位増分を求めており、したがって全歪み増分を求 めている。この全歪み増分中の弾性歪み増分が要素の剛性によって規定される。これによって、 隣接する要素間で、隣の要素に比べ弾性歪み以外の歪み成分が大きい要素では、負の弾性歪み(圧 縮歪み)成分が発生し、弾性歪み以外の歪み成分が小さい要素では、正の弾性歪み成分が発生す ることになる。なお、弾性歪みは、<u>要素境界に働く外力、および隣接する要素間の弾性歪み以外</u> の歪み成分の大小関係で決まる。ここで、「境界に働く外力」とは、例えば被覆管では内外面での 荷重(内外圧、接触圧)である。すなわち、この荷重が、ある要素の節点に外力として作用する と応力が発生し、弾性歪みが発生する。 また、「隣接する要素間の弾性歪み以外の歪み成分の大小関係」とは、要素間の相互の比較にお ける大小関係を指す。例えば、内側の要素で熱歪み(弾性歪み以外の歪み成分)が大で、外側の 要素で熱歪みが小のとき、内側では熱膨張しようとするが、外側の熱膨張が小さいため、内側に は負の応力(負の弾性歪み)が発生し、外側には正の応力(正の弾性歪み)が発生する。

#### 3) クリープによる応力緩和と歪み差

クリープ歪みが発生した場合、弾性歪みと同じ方向にクリープ歪みが発生するように、すなわ ち弾性歪みとクリープ歪みの符号が一 するように flow-rule で決められる結果、応力緩和されて 弾性歪みは低減されるが、弾性歪み及び塑性歪み以外の歪み成分(=初期歪み)の、隣接要素間 の歪み差は変化しない。

例えば被覆管において、歪みを弾性歪み、クリープ歪み、塑性歪み、初期歪み(熱膨張、照射 成長)の4種に分けて考えると、クリープが発生すると弾性歪みは緩和され、応力(外力及び熱 膨張に起因する)も緩和される。これは被覆管を構成する有限要素間の歪み差が減少することを 意味する。一方塑性歪みは、一般には一旦生じた後は応力が緩和しても、応力の方向が逆転しな い限り減少することはなく、また塑性歪みを減少させるほどの応力の逆転は燃料棒では通常生じ ない。一方1タイムステップ中の計算では、塑性歪み増分が生じるか否かは、弾性歪み増分とと もにクリープ歪み増分と応力との関連で決定される。また「それ以外の歪み」は応力に無関係に、 温度や燃焼度などにより決定される。

したがって1タイムステップ中の計算では、クリープ歪みは弾性歪みを低減し応力を緩和し、 塑性歪み増分を低減する場合があり、一方、初期歪みを低減することはない。例えば PCMI で発 生した応力によって発生した弾性歪み増加に対しても、被覆管の径方向へのクリープによって PCMI 応力(及び熱応力)が緩和し、この結果、弾性歪みの低減が生じる。しかし、前のタイム ステップまでに既に生じている塑性歪みや、熱膨張歪みは減少しない。

#### 4) クリープ計算の方法

計算上重要なことは、どの程度クリープ変形が発生するかということであり、相当クリープ歪 み速度を正当に評価することが重要である。

相当クリープ歪み速度は、応力に対して高い感度を持つので、これを正当に評価するために未知の応力変化を評価する算法上の十分な工夫をしている。すなわち、本 3.3.1 節と次節「3.3.2 塑

性」では、未知の応力変化の数値解法を中心に説明する。また、クリープ歪み硬化という概念に ついても、応力と同様に相当クリープ歪み速度を制約する要因の一つであるので、クリープ歪み 硬化による相当クリープ歪み速度の変化を評価するための計算上の工夫について説明する。ただ し、クリープ式が歪み硬化の項を含んでいなくても、FEMAXIでの扱いに問題はない。

クリープ計算の本質は、発生した新たなクリープ歪みと弾性歪み(及び降伏後では塑性歪み) との間で、応力変化で発生した歪みの分かち合いの計算を行うことである。この新たなクリープ 歪みは、歪み硬化にのみ依存するのではなく、応力変化に依存することは言うまでもない。

-----

さてここで数値計算の説明に戻る。(3.3.5)式より、第 n ステップの第(i+1)イタレーションにおいて

$$\left\{ \dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1} \right\} = \left\{ \beta \left( \left\{ \sigma_{n+\theta}^{i} \right\} + \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}, \quad \overline{\varepsilon}_{n+\theta}^{H,i} + \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1} \right) \right\}$$

$$= \frac{3f \left( \overline{\sigma} \left( \left\{ \sigma_{n+\theta}^{i} \right\} + \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \right), \quad \overline{\varepsilon}_{n+\theta}^{H,i} + \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1} \right) }{2\overline{\sigma} \left( \left\{ \sigma_{n+\theta}^{i} \right\} + \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \right) }$$

$$\times \left\{ \sigma' \left( \left\{ \sigma_{n+\theta}^{i} \right\} + \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \right) \right\}$$

$$(3.3.7)$$

が成り立つ。

クリープ歪み速度は、応力、温度、核分裂密度、高速中性子束、クリープ歪み硬化等によって 変化するが、このうち、温度、核分裂密度、高速中性子束等は既知として定式化すると、クリー プ歪み速度は

$$\left\{\dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1}\right\} = \left\{\beta\left(\left\{\sigma_{n+\theta}^{i}\right\} + \theta\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}, \overline{\varepsilon}_{n+\theta}^{H,i} + \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}\right)\right\}$$
(3.3.8)

と表記できる。ここで、未知量は $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ と $d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$ である。クリープ歪み速度が flow rule に従うので、

$$\left\{ \dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1} \right\} = \frac{3f\left(\overline{\sigma}\left(\left\{\sigma_{n+\theta}^{i}\right\} + \theta\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}\right), \ \overline{\varepsilon}_{n+\theta}^{H,i} + \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}\right)}{2\overline{\sigma}\left(\left\{\sigma_{n+\theta}^{i}\right\} + \theta\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}\right)} \times \left\{\sigma'\left(\left\{\sigma_{n+\theta}^{i}\right\} + \theta\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}\right)\right\} = \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i+1}} f_{n+\theta}^{i+1} \left\{\sigma_{n+\theta}^{\prime i+1}\right\}$$

(3.3.9)

(3.3.9)式は、未知量 $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ および $d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$ について1次のテイラー展開を取ることによって次のように近似される。すなわち、

$$\frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i+1}} f_{n+\theta}^{i+1} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i+1} \right\} = \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} f_{n+\theta}^{i} \left\{ \overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^{H} \right\} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left\{ \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \right\} f_{n+\theta}^{i} \left\{ \overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^{H} \right\} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{i+1} \right\} \\
+ \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} f_{n+\theta}^{i} \left\{ \overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^{H} \right\} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \\
+ \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( f_{n+\theta}^{i} \left\{ \overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^{H} \right\} \right) \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \\
+ \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \left( \frac{\partial f \left( \overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^{H} \right)}{\partial \overline{\varepsilon}^{H}} \right)_{n+\theta}^{i} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$$
(3.3.10)

となるので、

$$\begin{split} \left\{ \dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1} \right\} &= \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} f_{n+\theta}^{i} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} - \frac{3}{2\left(\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}\right)^{2}} f_{n+\theta}^{i} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \left( \frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial \sigma} \right)_{n+\theta}^{i} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \\ &+ \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} f_{n+\theta}^{i} \left[ \frac{\partial \sigma^{\prime}}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} + \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \left( \frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial \overline{\sigma}} \right)_{n+\theta}^{i} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \\ &+ \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \left( \frac{\partial f}{\partial \overline{\varepsilon}^{H}} \right)_{n+\theta}^{i} \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1} \end{split}$$

となり、これを整理すると、

$$\left\{ \dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1} \right\} = \left\{ \dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i} \right\} + \frac{3}{2\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \left( \left( \frac{\partial f}{\partial \bar{\sigma}} \right)_{n+\theta}^{i} - \frac{f_{n+\theta}^{i}}{\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \right) \left[ \sigma' \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} + \frac{3f_{n+\theta}^{i}}{2\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \left[ \frac{\partial \sigma'}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} + \frac{3}{2\bar{\sigma}_{n+\theta}^{\prime i}} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \left( \frac{\partial f}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}} \right)_{n+\theta}^{i} \theta d\bar{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$$
(3.3.11)

となる。上式を、 $\left\{\frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial \sigma}\right\} = \frac{3}{2\overline{\sigma}}\left\{\sigma'\right\}$ なる関係を用いて書き直すと、

$$\left\{ \dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1} \right\} = \left\{ \dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i} \right\}$$

$$+ \frac{9}{4 \left( \overline{\sigma}_{n+\theta}^{i} \right)^{2}} \left( \left( \frac{\partial f}{\partial \overline{\sigma}} \right)_{n+\theta}^{i} - \frac{f_{n+\theta}^{i}}{\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \right) \left[ \sigma_{i}^{\prime} \sigma_{j}^{\prime} \right]_{n+\theta}^{i} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$$

$$+ \frac{3 f_{n+\theta}^{i}}{2 \overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \left[ \frac{\partial \sigma^{\prime}}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \theta \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} + \frac{3}{2 \overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \left\{ \sigma_{n+\theta}^{\prime i} \right\} \left( \frac{\partial f}{\partial \overline{\varepsilon}^{H}} \right)_{n+\theta}^{i} \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$$

$$(3.3.12)$$

である。(3.3.12)式が1次のテイラー展開を行って得られた結果であり、ここまでの式の展開はク リープ式の形の 何に関わらず成り立つ一般的な計算過程である。

この後の式の展開では、相当クリープ歪み速度の変化を評価するためのもう一つの要素である、 クリープ歪み硬化に関連した計算法を説明する。クリープ歪み硬化は、通常1次クリープ(熱ク リープ)領域において観察され、応力がクリープ歪みの強い増加関数となるが、ここでは、クリ ープ式を「歪み硬化」の有無の観点から以下のように(A)(B)(C)に分類して計算法を説明する。

#### (A) 1次クリープ式のように、応力がクリープ歪みの増加関数となる場合。

ここでは、1 次クリープ(熱クリープ)でクリープ歪みの増加に伴う硬化が生じるとする。この1 次クリープ成分を(3.3.8)式を参照して $g(\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i+1}, \bar{\varepsilon}_{n+\theta}^{H,i+1})$ と書くと、これに対応する硬化クリープ歪み増分は(3.3.8)式より、次のように表される。

$$\Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1} = \Delta t_{n+1} g\left(\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i+1}, \overline{\varepsilon}_{n+\theta}^{H,i+1}\right)$$
  
=  $\Delta t_{n+1} g\left(\overline{\sigma}\left(\left\{\sigma_{n+\theta}^{i}\right\} + \theta\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}\right), \overline{\varepsilon}_{n+\theta}^{H,i} + \theta d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}\right)$  (3.3.13)

上式は、1次のテイラー展開をとって、次のように近似される。

$$\Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1} = \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i} + d \overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$$

$$= \Delta t_{n+1} g_{n+\theta}^{i} + \theta \Delta t_{n+1} \left( \frac{\partial g}{\partial \overline{\sigma}} \right)_{n+\theta}^{i} \left[ \frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \left\{ d \sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$$

$$+ \theta \Delta t_{n+1} \left( \frac{\partial g}{\partial \varepsilon^{H}} \right)_{n+\theta}^{i} d \overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$$
(3.3.14)

(3.3.14)式から、 $d\overline{\epsilon}_{n+1}^{H,i+1}$ は次のように表される。

$$d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1} = \frac{\left(\Delta t_{n+1}g_{n+\theta}^{i} - \Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i}\right) + \theta\Delta t_{n+1}\left(\frac{\partial g}{\partial\overline{\sigma}}\right)_{n+\theta}^{i} \left\lfloor\frac{\partial\overline{\sigma}}{\partial\sigma}\right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}}{1 - \theta\Delta t_{n+1}\left(\frac{\partial g}{\partial\overline{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i}}$$
(3.3.15)

これで、未知量  $d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$  についての定式化ができたので、(3.3.12)式の右辺の未知量  $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ 、  $d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$ のうち、未知量  $d\overline{\varepsilon}_{n+1}^{H,i+1}$  について消去することができる。

(3.3.15)式を(3.3.12)式に代入し整理すると、

$$\left\{\dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1}\right\} = \left\{\dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i}\right\} + F_1\theta \left[\sigma_i'\sigma_j'\right]_{n+\theta}^i \left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\} + F_2\theta \left[\frac{\partial\sigma'}{\partial\sigma}\right]_{n+1}^i \left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\} + F_3\theta \left\{\sigma_{n+1}'^i\right\}$$
(3.3.16)

ここで、

$$F_{1} = \frac{9}{4\left(\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}\right)^{2}} \left( \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{\sigma}}\right)_{n+\theta}^{i} - \frac{f_{n+\theta}^{i}}{\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}} + \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i} \theta \Delta t_{n+1} \left(\frac{\partial g}{\partial \bar{\sigma}}\right)_{n+\theta}^{i}}{1 - \theta \Delta t_{n+1} \left(\frac{\partial g}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i}} \right)$$

$$F_{2} = \frac{3f_{n+\theta}^{i}}{2\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}}$$

$$F_{3} = \frac{3}{2\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i} \left(\Delta t_{n+1}g_{n+\theta}^{i} - \Delta \bar{\varepsilon}_{n+1}^{H,i}\right)}{1 - \theta \Delta t_{n+1} \left(\frac{\partial g}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i}}$$

$$(3.3.17)$$

である。

#### (B) 2次クリープ式のように、一定応力下ではクリープ速度が 減していく場合。

すなわち材料に正のクリープ歪み速度を維持するためには、応力を単調増加させなければなら ない場合。2次クリープ(定常クリープ)領域では、時間硬化が無く、時間が経過して歪みが増 加しても歪み硬化は生じない。ここで、「時間硬化」とは、「時間の経過とともに、一定のクリー プ歪み速度を維持するために必要な応力が増大していく」という意味である。この時間硬化を歪 み硬化に置き換えてクリープ式を表現している。

しかし、クリープ速度式の定式化に応じて、例えば MATPRO-09 のジルカロイのクリープ速度 式のように、1 次クリープ+2 次クリープの時間硬化型のクリープ速度式を適用している場合は、 全領域が歪み硬化の対象になる。したがって、クリープ歪みを、

$$\varepsilon_c = f_1(\sigma, T) \cdot t + f_2(\sigma, T) \cdot t^n \quad (n < 1)$$
(3.3.18)

で与えた場合、応力、温度が一定でも、時間とともにクリープ歪みが変化する領域に対して、歪み硬化を考慮してで定式化する。すなわち、(3.3.18)式の場合は、 $\dot{\epsilon}_s = f_1(\sigma, T)$ は定常クリープ速

度であるので歪み硬化には寄与しないので、硬化歪みは、

$$\varepsilon_H = f_2(\sigma, T) \cdot t^n \tag{3.3.19}$$

となり、したがって、(3.3.19)式を微分して

$$\dot{\varepsilon}_{H} = n f_{2}(\sigma, T) \cdot t^{n-1} \tag{3.3.20}$$

である。(3.3.19)(3.3.20)式よりtを消去して、

$$\dot{\varepsilon}_{H} = g(\sigma, \varepsilon_{H}) = n [f_{2}(\sigma, T)]^{\frac{1}{n}} (\varepsilon_{H})^{\frac{n-1}{n}}$$
(3.3.21)

が得られ、(3.3.21)式が $g(\sigma, \varepsilon_H)$ の定義式になる。したがって、(3.3.19)式で、 $\dot{\varepsilon}_s = f_1(\sigma, T) = 0$ の場合は、全領域が歪み硬化の対象になる。

### (C)クリープ式にtのべき乗項を含まない場合

定常クリープ式(時間硬化しない)であるので、歪み硬化しない。この場合は、FEMAXIコードは以下のように扱う。クリープ歪み速度は(3.3.16)式で与えられるが、歪み硬化しない場合は、  $\frac{\partial f}{\partial \epsilon^{H}} = 0$ 、g=0 なので、

$$F_{1} = \frac{9}{4\left(\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}\right)^{2}} \left( \left(\frac{\partial f}{\partial \overline{\sigma}}\right)_{n+\theta}^{i} - \frac{f_{n+\theta}^{i}}{\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \right), \quad F_{2} = \frac{3f_{n+\theta}^{i}}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}}, \quad F_{3} = 0$$
(3.3.22)

となる。

次に、(3.3.16)式の右辺の未知量は $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ のみであるので、既知量の部分と未知量の部分とを 分けて、未知量のクリープ歪み増分を(3.3.23)式によって記述する。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c,i+1}\right\} = \Delta t_{n+1}\left\{\dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1}\right\} = \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c,i}\right\} + \left[C_{n+\theta}^{c,i}\right]\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}$$
(3.3.23)

ただし、

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c,i}\right\} = \frac{3}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} f_{n+\theta}^{i} \Delta t_{n+1} \left\{\sigma_{n+\theta}^{\prime i}\right\} + F_{3}\theta\Delta t_{n+1} \left\{\sigma_{n+1}^{\prime i}\right\}$$
$$\left[C_{n+\theta}^{c,i}\right] = \theta\Delta t_{n+1} \left(F_{1}\left[\sigma_{i}^{\prime}\sigma_{j}^{\prime}\right]_{n+\theta}^{i} + F_{2}\left[\frac{\partial\sigma^{\prime}}{\partial\sigma_{n+\theta}}\right]\right)$$
(3.3.24)

である。

なお、(3.3.23)式の定式化のうちには、(3.2.48)式で示したように、ペレットの場合はホットプレ

ス歪みが含まれている。

次に、(3.1.31)式から変換された(3.2.34)式

$$\begin{bmatrix} \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \} - \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,i+1} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i+1} \} + \begin{bmatrix} \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} (\{ \sigma_{n+1}^{i} \} - \{ \sigma_{n} \}) = 0 \quad (3.2.34)$$

$$\mathcal{O} \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i+1} \}$$
を消去するために(3.3.23)式を代入し整理すると次式が得られる。

すなわち、

$$\left( \left[ \widetilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] + \left[ C_{n+\theta}^{c,i} \right] \right) \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} - \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,i+1} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} + \left[ \widetilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} \right) = 0 \quad (3.3.25)$$

$$\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} = \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left( \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} - \left[ C_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} \right)$$

$$- \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P,i+1} \right\} \right)$$

$$(3.3.26)$$

ただし、

$$\left[\hat{D}_{n+1}^{i}\right] = \left(\left[\widetilde{C}_{n+1}^{i}\right] + \left[C_{n+1}^{c,i}\right]\right)^{-1}$$

であり、 は見かけの剛性を意味する。この式は未知量 $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ に係る部分をまとめたものである。ここで $\left[ \tilde{C}_{n+1}^{i} 
ight]$ は弾性、 $\left[ C_{n+1}^{c,i} 
ight]$ はクリープに対応する。

ここで、(3.3.26)式では $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i+1}\}$ は消去された式になっており、ニュートン法の繰り返しを行っているのは、1 次のテイラー展開を採って近似したためである。すなわち、応力変動分およびクリープ歪み硬化の変動分についてクリープ速度式に対して1次のテイラー展開を採ることで、応力およびクリープ歪み硬化の変化に伴うクリープ歪み速度の変動分を予測するための定式化を行い、精度の良いクリープ速度を予測している。

ここで Pugh の方法<sup>(3.2)</sup> による被覆管応力反転によるクリープの反転を説明する。応力の方向 が反転すれば、一次クリープが再度生じる。これに対し、Pugh はこの現象をシミュレートする簡 単な方法を提案した。その方法の概略を説明する。

1) クリープ歪みが進行することによるクリープ硬化を $\bar{\epsilon}^{H}$ で表現する。すなわち、

$$\left\{\dot{\varepsilon}_{c}\right\} = \left\{\frac{\partial\overline{\sigma}}{\partial\sigma}\right\} f\left(\overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^{H}, T\right).$$
(3.3.27)

2) 応力が反転するとき、  $\overline{\varepsilon}^{H} > \hat{\varepsilon}$  であり、したがって

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_H, \ \bar{\varepsilon}^H = 0 \tag{3.3.28}$$

とおく。

3) 再度応力が反転したり、時間経過後に反転した場合は

 $\overline{\varepsilon}^{H} \geq \hat{\varepsilon}$  Obeth  $\hat{\varepsilon} = \overline{\varepsilon}^{H} = 0$ ,  $\overline{\varepsilon}^{H} = 0$  bace the equation  $\varepsilon^{H} = 0$  contractions of  $\varepsilon^{H$ 

 $\overline{\varepsilon}^{H} < \hat{\varepsilon} \quad \mathcal{O} \ge \hat{\varepsilon}^{H} = \hat{\varepsilon} - \overline{\varepsilon}^{H} \quad \ge \hat{\varepsilon} < .$ 

図 3.3.1 はこれらの関係を示す。



図 3.3.1 応力の反転によるクリープ歪みの反転

ここで、応力の反転は以下のようにして判定する。クリープ式は

$$\left\{\dot{\varepsilon}_{c}\right\} = \left\{\frac{\partial\overline{\sigma}}{\partial\sigma}\right\} f\left(\overline{\sigma}, \overline{\varepsilon}^{H}, T\right), f \ge 0, \qquad (3.3.29)$$

であるので、前タイムステップと現タイムステップの間で $\{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{c}\}$ の符号が反転するかいなかにかかわらず、現タイムステップの状態が判断に用いられる。多軸応力状態では、 $\{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{c}\}$ 成分のスカラー積を用いて符号反転の判断が行われる。

ジルカロイのクリープ式には、以下の調整パラメータを用いることができる。

パラメータ名	内容	標準値
CRFAC	応力除去材に対してはクリープ歪み速度を CRFAC 倍する。	1.3
IPUGH, IPUGH2	PUGH=0: <i>Pugh</i> の 逆転を考慮しない。 PUGH=1: <i>Pugh</i> の 逆転を考慮する。	1

# 3.3.2 塑性

ペレットおよび被覆管の降伏条件は、共通して次のように表される。

$$h(\{\sigma\}) = K(\overline{\varepsilon}^{P}, T)$$
(3.3.30)

ここで、

 $\bar{\varepsilon}^{P}$ : 相当塑性歪み T: 温度

- K: 降伏曲面の大きさ
- h: 降伏関数(相当応力式)

である。

【注】降伏関数をhとするとき,h=Kを満たす曲面を降伏曲面 (yield surface) と呼び,降伏 とはこの曲面上の応力状態を指す。降伏関数あるいは降伏曲面は、降伏状態の進行に伴っ て膨張あるいは移動する。降伏曲面の大きさとは、降伏曲面が変化するので、これを意識 した表現である。

ただし、酸化膜は被覆管の降伏条件に影響を与えないと仮定する。すなわち、酸化膜の強度は無 視する。降伏関数hは、被覆管の異方性とペレットの圧縮性(ホットプレス)を考慮した(3.2.43) を再記する(ただし、剪断成分は扱っていない)。

$$h = \left[\frac{3}{2(F+G+H)} \left\{ H(\sigma_r - \sigma_z)^2 + F(\sigma_z - \sigma_\theta)^2 + G(\sigma_\theta - \sigma_r)^2 \right\} + 3\alpha (\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \equiv \overline{\sigma}$$
(3.2.43)

ここで、

H, F, G : 異方性係数(ただし、ペレットでは等方性を仮定して H=F=G=1 とする)

: ペレットホットプレスパラメータ(ただし被覆管では =0 とする) である。これによって、塑性に依存するホットプレス歪み増分が塑性歪み増分に含めることがで きる。

時刻 tnから tn+1 までの塑性歪み増分ベクトルは、流れ則を用いて次のように表される。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{P}\right\} = \Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{P} \left\{\frac{\partial h}{\partial\sigma}\right\}_{n+\theta}$$
(3.3.31)

降伏状態における塑性歪みの定式化において、タイムステップ後にどれだけ相当塑性歪みが発 生するかは未知であり、また除荷するか否かも未知であるため、タイムステップ後の応力、相当 塑性歪みについて予測しながらタイムステップを進める必要がある。この予測方法として、未知 量である応力、相当塑性歪みについて1次のテイラー展開を取ることにより現時点からの応力の 変化、相当塑性歪みの変化についての予測を行いながら塑性歪みの定式化する手法を用いる。こ のため、予測精度を向上させるためには繰り返し計算が有効である。以下の定式化では、この繰 り返し計算中にどのような定式化を行って塑性歪みを算出するかについて説明する。

いま、第i回目の反復を終了して第i+1回目の反復のとき、

$$h\left(\left\{\sigma_{n}\right\}+\left\{\Delta\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}\right)=K\left(\overline{\varepsilon}_{n}^{P}+\Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1},T_{n}+\Delta T_{n+1}\right)$$
(3.3.32)

ここでは、左辺の h は(3.2.43)式で表される相当応力であり、変化する項は応力であるので、  $h(\{\sigma_n\}+\{\Delta\sigma_{n+1}^{i+1}\})$ と記述し、一方、右辺の K では、変化するタームは相当塑性歪み、温度等で あるので、 $K(\bar{\epsilon}_n^P + \Delta \bar{\epsilon}_{n+1}^{P,i+1}, T_n + \Delta T_{n+1})$ と記述する。ここで、 $\Delta T_{n+1}$ は既知として、未知量である  $\{\Delta\sigma_{n+1}^{i+1}\} \ge \Delta \bar{\epsilon}_{n+1}^{P,i+1} \hat{\epsilon}(3.3.32)$ 式が成立するように決定するための手法について述べる。このため以 下で、 $\Delta \bar{\epsilon}_{n+1}^{P,i+1} \hat{\epsilon}\{\Delta\sigma_{n+1}^{i+1}\}$ で記述する。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{P,i+1}\right\} = \Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1} \left\{\frac{\partial h}{\partial\sigma}\right\}_{n+\theta}^{i}$$
(3.3.33)

 $\left\{\Delta\sigma_{n+1}^{i+1}\right\},\Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1}$ および $\Delta T_{n+1}$ について(3.3.32)式の 1 次のテイラー展開をとると次の近似式が得られる。

$$h\{\sigma_n\} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^i \left\{ \Delta \sigma_{n+1}^{i+1} \right\} = K\left(\overline{\varepsilon}_n^P T_n\right) + \left(\frac{\partial K}{\partial \overline{\varepsilon}^P}\right)_{n+\theta}^i \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1} + \left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1}$$
(3.3.34)

次の関係、

$$\left\{\Delta\sigma_{n+1}^{i+1}\right\} = \left\{\Delta\sigma_{n+1}^{i}\right\} + \left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\} - \left\{\sigma_{n}\right\}$$
(3.3.35)

を(3.3.34)式に代入し整理すると、

$$\Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1} = \frac{1}{H_{n+\theta}^{\prime i}} \left( \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} + h\left( \left\{ \sigma_{n} \right\} \right) - K\left(\overline{\varepsilon}_{n}^{P}, T_{n} \right) - \left( \frac{\partial K}{\partial T} \right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} \right)$$
(3.3.36)

(3.3.36)式が $\Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1}$ を $\left\{\Delta \sigma_{n+1}^{i+1}\right\}$ (未知量を $\left\{\Delta \sigma_{n+1}^{i+1}\right\}$ の代わりに $\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}$ )で記述したものである。

ここで、

$$H_{n+\theta}^{\prime i} = \left(\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \bar{\varepsilon}_{P}}\right)_{n+\theta}^{i}$$
(3.3.37)

である。

次に、(3.3.36)式の右辺には、未知量 $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ が含まれているので、(3.3.26)式と連立させて未知 量 $\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\}$ を消去する。(3.3.36)式に(3.3.26)式を代入すると、

$$H_{n+1}^{\prime i} \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1} + \left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1} - h(\{\sigma_n\}) + K(\overline{\varepsilon}_n^P, T_n)$$

$$= \left\lfloor \frac{\partial \sigma}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left(\{\sigma_{n+1}^i\} - \{\sigma_n\}\right)$$

$$+ \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left[\hat{D}_{n+\theta}^i \left\{ \left[B\right] \{\Delta u_{n+1}^{i+1}\} - \left[\widetilde{C}_{n+\theta}^i\right] \{\{\sigma_{n+1}^i\} - \{\sigma_n\}\}\right) - \{\Delta \varepsilon_{n+1}^0\} - \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i}\} - \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1} \left[\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right]_{n+\theta}^{i} \right)$$

$$(3.3.38)$$

$$\begin{split} & \pm \exists \mathcal{E} \Delta \overline{\mathcal{E}}_{n+1}^{P,i+1} \ \mathcal{E} \supset \mathcal{V} \subset \ddagger \mathcal{E} \not \otimes \mathcal{E} \not \& \\ & \Delta \overline{\mathcal{E}}_{n+1}^{P,i+1} = \frac{\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left[ D_{n+\theta}^{i} \right] \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} - \left[ \widetilde{\mathcal{C}}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - \left\{ \Delta \mathcal{E}_{n+1}^{0} \right\} - \left\{ \Delta \mathcal{E}_{n+1}^{c,i} \right\} \right\} \\ & H_{n+\theta}^{\prime i} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left[ D_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ & + \frac{\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - \left\{ \left\{ \frac{\partial K}{\partial T} \right\}_{n+\theta} \right\} \Delta T_{n+1} + h\left\{ \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - K\left( \overline{\mathcal{E}}_{n}^{P}, T_{n} \right) \\ & + \frac{H_{n+\theta}^{\prime i} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ D_{n+\theta}^{i} \right\} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i}}{H_{n+\theta}^{\prime i} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ D_{n+\theta}^{i} \right\} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i}} \end{split}$$
(3.3.39)

ここでは $\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\}$ が消去された。(3.3.39)式は、相当塑性歪み増分を算出する式であり、最終的には、(3.3.26)式から、未知量 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{P,i+1}\}$ を消去したいので、(3.3.39)式を(3.3.33)式に代入すると次式が得られる。

$$\begin{split} \left\{ \Delta \varepsilon^{P,i+1} \right\} &= \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P,i+1} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+1}^{i} \\ &= \left( \frac{\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} - \left[ \widetilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right) \\ &= \left( \frac{\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \frac{\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - \left\{ \frac{\partial K}{\partial T} \right\}_{n+\theta} \Delta T_{n+1} + h\left\{ \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - K\left( \overline{\varepsilon}_{n}^{P}, T_{n} \right) \\ &+ \frac{\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \right\} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right) \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta}^{i} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right)_{n+\theta}^{i} \\ &+ \left( \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right)_{n+\theta}$$

上式を、(3.3.26)式に代入して $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{P,i+1}
ight\}$ を消去すると次式が得られる。

$$\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} = \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} - \left[ \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+\theta}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n}^{i} \right\} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right)$$

$$- \frac{\left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right]_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \right] }{H_{n+\theta}^{i+1} + \left[ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \right] }$$

$$\times \left( \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} - \left[ \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n}^{i} \right\} \right) - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right)$$

$$- \frac{\left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \left[ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n}^{i} \right\} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right) }{H_{n+\theta}^{i+1} + \left[ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \left[ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n}^{i} \right\} \right] - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right]$$

$$- \frac{\left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \left[ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n}^{i} \right\} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right] }{H_{n+\theta}^{i+1} + \left[ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right]_{n+\theta}^{i} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i} \right]$$

これを整理すると次のようになる。

$$\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} = \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{p,i} \right] \left\{ \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} - \left[ \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right\} + \left\{ S_{n+\theta}^{i} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_{1} \right\} - \left\{ Z_{2} \right\}$$

$$(3.3.42)$$

これによって、(3.3.42)式は塑性に関して繰り返しの添え字の i+1 の記述がなくなったので、前段の i の値(既知)を使って、(3.3.26)式の関係を満足する関係式が導かれた。この定式化では、1 次のテイラー展開で近似しているので、繰り返し計算が必要になる。 ここで、

$$\begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} - \frac{\begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial \sigma} \end{bmatrix}_{n+\theta}^{i} \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial \sigma} \end{bmatrix}_{n+\theta}^{i} \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix}}{H_{n+\theta}^{\prime i} + \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial \sigma} \end{bmatrix}_{n+\theta}^{i} \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{i}}$$
(3.3.43)

$$\left\{S_{n+\theta}^{i}\right\} = \frac{\left[\hat{D}_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\}_{n+\theta}^{i}\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_{n+\theta}}{H_{n+\theta}^{\prime i} + \left\lfloor\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\rfloor_{n+\theta}^{i}\left[\hat{D}_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\}_{n+\theta}^{i}}$$
(3.3.44)

$$\{Z_{1}\} = \frac{\left[\hat{D}_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\}_{n+\theta}^{i}\left[\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right]_{n+\theta}^{i}\left(\left\{\sigma_{n+1}^{i}\right\}-\left\{\sigma_{n}\right\}\right)}{H_{n+\theta}^{\prime i}+\left[\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right]_{n+\theta}^{i}\left[\hat{D}_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\}_{n+\theta}^{i}}$$
(3.3.45)

$$\{Z_{21}\} = \frac{\left[\hat{D}_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\}_{n+\theta}^{i}\left[\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right]_{n+\theta}^{i}\left(h\left\{\{\sigma_{n}\}\right\}-K\left(\overline{\varepsilon}_{n}^{P},T_{n}\right)\right)}{H_{n+\theta}^{\prime\,i}+\left\lfloor\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\rfloor_{n+\theta}^{i}\left[\hat{D}_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\}_{n+\theta}^{i}}$$
(3.3.46)

である。

以上の操作によって(3.3.26)式中の未知量 $\left\{\Delta \mathcal{E}_{n+1}^{p,i+1}\right\}$ が消去された。したがって、(3.3.42)式が ペレットのクラック、ペレットと被覆管のクリープ及び塑性に対する未知量をすべて消去した結 果得られた構成方程式である。

# 【補足説明】

クリープや塑性の扱いについて、被覆管を例にして補足説明する。ただし内容を単純明確にす るために、応力の変動に伴う繰り返しについては省略し、式の展開についても簡略化した。

被覆管では、歪み成分は、弾性歪み、熱歪み、クリープ歪み、塑性歪み、軸方向照射成長歪み である。FEMAXIコードの取り扱いでは、タイムステップ毎の計算を進めているので、増分形で 表示すると、

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}\right\} = \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{e}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{th}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{P}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{irr}\right\}$$
(3.3.47)

$$\{\Delta \varepsilon_{n+1}\} : 全歪み増分ベクトル \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\} : 弾性歪み増分ベクトル \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{th}\} : 弾性歪み増分ベクトル \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{th}\} : 塑性歪み増分ベクトル \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\} : 型性歪み増分ベクトル \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c}\} : クリープ歪み増分ベクトル \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{tr}\} : 軸方向照射成長歪み増分ベクトル$$

である。

ここで、熱計算によって熱歪み増分と軸方向照射成長歪み増分は既知量として扱うので、力学 解析における未知量は、弾性歪み増分、クリープ歪み増分、塑性歪み増分である。

FEMAXIコードでは、未知量を応力増分 $\{\Delta \sigma_{n+1}\}$ のみとして、構成方程式を変換する手法を用いる。そこでは、弾性歪み増分、クリープ歪み増分、塑性歪み増分と応力増分との関係式を導いて、構成方程式から、弾性歪み増分、クリープ歪み増分、塑性歪み増分を消去して応力増分で表示するように定式化する。すなわち、これらの歪み増分を、

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{X}\right\} = \left[C_{n+\theta}^{X}\right] \left\{\Delta \sigma_{n+1}\right\}$$
(3.3.48)

の形で表記することである。(3.3.48)式は、応力増分に対して、弾性歪み増分、クリープ歪み増分、 塑性歪み増分との関係式であり、応力変化(外力変化)によって変化する歪みを、弾性歪み増分 とクリープ歪み増分と塑性歪み増分とで分かち合う関係を示したことに他ならない。

(3.3.47)式に(3.3.48)式の関係式を代入すると、

$$\begin{split} \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}\right\} = \begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{e} \end{bmatrix} \left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{th}\right\} + \begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{P} \end{bmatrix} \left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\} + \begin{bmatrix} C_{n+\theta}^{c} \end{bmatrix} \left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{trr}\right\} (3.3.49) \\ & \forall z \in \mathbb{C} \\ & \forall z \in$$

$$[B]\{\Delta u_{n+1}\} = \left(\left[C_{n+\theta}^{e}\right] + \left[C_{n+\theta}^{P}\right] + \left[C_{n+\theta}^{c}\right]\right)\{\Delta\sigma_{n+1}\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{th}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{irr}\right\}$$
(3.3.50)

となって、

$$\left[\tilde{C}_{n+\theta}\right] = \left[C_{n+\theta}^{e}\right] + \left[C_{n+\theta}^{P}\right] + \left[C_{n+\theta}^{c}\right]$$
(3.3.51)

とおき、

$$\left[\tilde{D}_{n+\theta}\right] = \left[\tilde{C}_{n+\theta}\right]^{-1} \tag{3.3.52}$$

とおく。すると(3.3.50)式は、

$$\begin{bmatrix} \tilde{D}_{n+\theta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \{ \Delta u_{n+1} \} = \{ \Delta \sigma_{n+1} \} + \begin{bmatrix} \tilde{D}_{n+\theta} \end{bmatrix} \left( \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{th} \} + \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{trr} \} \right)$$
(3.3.53)

となる。ここで、

$$\left\{\Delta F_{n+1}\right\} = \int \left[B\right]^T \left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\} dV \tag{3.3.54}$$

なので、(3.3.53)式を(3.3.54)式に代入すると、

$$\left\{\Delta F_{n+1}\right\} = \int \left[B\right]^T \left(\left[\tilde{D}_{n+\theta}\right]\left[B\right]\left\{\Delta u_{n+1}\right\} - \left[\tilde{D}_{n+\theta}\right]\left(\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{th}\right\} + \left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{trr}\right\}\right)\right) dV$$
(3.3.55)

が得られ、

$$\int \left[B\right]^{T} \left[\tilde{D}_{n+\theta}\right] \left[B\right] dV \left\{\Delta u_{n+1}\right\} = \left\{\Delta F_{n+1}\right\} + \int \left[B\right]^{T} \left[\tilde{D}_{n+\theta}\right] \left(\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{th}\right\} + \left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{trr}\right\}\right) dV \quad (3.3.56)$$

となって、これを解けば、変位増分を得ることができる。このためには、(3.3.56)式を各歪み増分 について具体的に表記して $\left[\tilde{D}_{n+ heta}
ight]$ = $\left[\tilde{C}_{n+ heta}
ight]^{-1}$ や $\left\{\Delta F_{n+1}
ight\}$ を求めることが必要である。

弾性歪み増分については、(3.3.49)式は、

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left[C_{n+\theta}\right] \left\{\Delta \sigma_{n+1}\right\}$$
(3.3.57)  
で与えられる。すなわち、(3.3.50)式の $\left[C_{n+\theta}^{e}\right]$ は $\left[C_{n+\theta}\right]$ である。

-231-

クリープ歪み増分については、クリープ歪み速度は応力増分の関数ではなくて、応力の関数な ので、クリープ歪み増分も応力の関数である。そこで、クリープ歪み増分については、

$$\begin{split} \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c} \right\} &= \left\{ f(T_{n+1}, \sigma_{n+1}, \varepsilon_{n+1}^{H}) \right\} \Delta t \\ &= \left\{ f(T_{n+1}, \sigma_{n}, \varepsilon_{n}^{H}) \right\} \Delta t + \left( \left\{ f(T_{n+1}, \sigma_{n+1}, \varepsilon_{n+1}^{H}) \right\} \Delta t - \left\{ f(T_{n+1}, \sigma_{n}, \varepsilon_{n}^{H}) \right\} \Delta t \right) \\ &= \left\{ f(T_{n+1}, \sigma_{n}, \varepsilon_{n}^{H}) \right\} \Delta t + \left( \left\{ \frac{df}{d\sigma}(T_{n+1}, \sigma_{n}, \varepsilon_{n}^{H}) \right\} + \left\{ \frac{df}{d\varepsilon^{H}}(T_{n+1}, \sigma_{n}, \varepsilon_{n}^{H}) \cdot \frac{d\varepsilon^{H}}{d\sigma} \right\} \right) \Delta t \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} \\ &= \left\{ f(T_{n+1}, \sigma_{n}, \varepsilon_{n}^{H}) \right\} \Delta t + \left[ C^{c} \right] \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} \end{split}$$

$$(3.3.58)$$

ここで、 $f(T,\sigma,\varepsilon^{H})$ : クリープ歪み速度、T:温度、 $\sigma$ : 応力、 $\varepsilon^{H}$ : クリープ硬化歪みである。 (3.3.58)式の右辺第1項はタイムステップの始めの $\sigma$ 、 $\varepsilon^{H}$ を使うので、応力に依存しない歪み 成分で、熱歪み増分等と同様に既知の歪み増分項である。右辺第2項が応力の変化に伴うクリー プ歪み増分項である。クリープ歪み硬化は、温度や応力と同様にクリープ速度を変化させる要因 であり、クリープ歪み硬化の変化は応力に伴い変化する。すなわち、(3.3.56)式は、クリープ歪み 増分の場合は、既知の成分と未知の成分に分けて表記でき、

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c}\right\} = \left[C_{n+\theta}^{c}\right]\left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\} + \left\{\Delta\varepsilon_{0,n+1}^{c}\right\}$$
(3.3.59)

である。すなわち、(3.3.49)式の $\left[C_{n+\theta}^{c}
ight]$ は(3.3.59)式で与えられ、(3.3.55)式は、

$$\int \left[B\right]^{T} \left[\tilde{D}_{n+\theta}\right] \left[B\right] dV \left\{\Delta u_{n+1}\right\} = \left\{\Delta F_{n+1}\right\} + \int \left[B\right]^{T} \left[\tilde{D}_{n+\theta}\right] \left(\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{\ ih}\right\} + \left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{\ irr}\right\} + \left\{\Delta \varepsilon_{0,n+1}^{\ c}\right\}\right) dV$$

$$(3.3.60)$$

と拡張される。

塑性歪み増分については、塑性歪み増分は降伏曲面の大きさに支配されるので、クリープ歪み 増分とは定式化が異なる。塑性歪みは、

$$h(\{\sigma\}) = K(\overline{\varepsilon}^{P}, T)$$
(3.3.61)

 ē<sup>P</sup>: 相当塑性ひずみ

 T: 温度

 K: 降伏曲面の大きさ

 h: 降伏関数

の関係を満たすことが要請される。

ここで、降伏関数 $h(\{\sigma_n\})$ とは相当応力の式であり、降伏曲面の大きさ $K(\overline{\epsilon}^P, T)$ とは、材料 よって決まる降伏応力で、 $\sigma_y = K(\overline{\epsilon}^P, T)$ となる応力である。例えばジルカロイの降伏応力は、 温度や塑性歪み、高速中性子フルエンス等で定式化でき、実験的に測定できるものである。

(3.3.61)式を満足するには、前ステップで、 $h(\{\sigma_n\}) = K(\overline{\varepsilon}_n^P, T_n)$ が成り立っている状態で、タイムステップ後に $h(\{\sigma_{n+1}\}) = K(\overline{\varepsilon}_{n+1}^P, T_{n+1})$ が成り立つことである。したがって、塑性歪み増分 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^P\}$ の算出は、

$$h\left(\left\{\sigma_{n}\right\}+\left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\}\right)=K\left(\overline{\varepsilon}_{n}^{P}+\Delta\overline{\varepsilon}_{n+1}^{P},T_{n}+\Delta T_{n+1}\right)$$
(3.3.62)

とおいて、

$$h\{\sigma_{n}\} + \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta} \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} = K\left(\overline{\varepsilon}_{n}^{P}, T_{n}\right) + \left(\frac{\partial K}{\partial \overline{\varepsilon}^{P}}\right)_{n+\theta} \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P} + \left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1} \qquad (3.3.63)$$
$$h\left(\{\sigma_{n}\}\right) = K\left(\overline{\varepsilon}_{n}^{P}, T_{n}\right) \downarrow \emptyset , \quad (3.3.63) \not{\exists} \mathcal{O} \pm \ddot{\Im} \not{\exists} 2 \not{\exists} \dot{\Im} ,$$
$$\left\| \frac{\partial h}{\partial \varepsilon} \right\|_{2} \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} = \left(\frac{\partial K}{\sigma^{P}}\right) - \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P} + \left(\frac{\partial K}{\sigma^{P}}\right) - \Delta T_{n+1} \qquad (3.3.64)$$

$$\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta} \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} = \left( \frac{\partial K}{\partial \overline{\varepsilon}^P} \right)_{n+\theta} \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^P + \left( \frac{\partial K}{\partial T} \right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1}$$
(3.3.64)

である。ここで、 $H'_{n+\theta} = \left(\frac{\partial K}{\partial \overline{\varepsilon}_{P}}\right)_{n+\theta}$ とおき、 $\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{P}\right\} = \Delta \overline{\varepsilon}_{n+1}^{P} \left\{\frac{\partial h}{\partial \sigma}\right\}_{n+\theta}$ の関係式を用いると、(3.3.64)

式は、

$$\left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta} \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} = H'_{n+\theta} \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P} \right\} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}^{-1} + \left( \frac{\partial K}{\partial T} \right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1} \qquad (3.3.65)$$

となる。(3.3.64)式を(3.3.39)式の形で表記すると、

$$\left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{P} \right\} = \frac{1}{H_{n+\theta}'} \left\{ \left\lfloor \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\rfloor_{n+\theta} \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta} - \left( \frac{\partial K}{\partial T} \right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta} \right\}$$

$$= \frac{\left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}}{H_{n+\theta}'} \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} - \frac{\left( \frac{\partial K}{\partial T} \right)_{n+\theta} \Delta T_{n+1}}{H_{n+\theta}'} \left\{ \frac{\partial h}{\partial \sigma} \right\}_{n+\theta}$$

$$= \left[ C_{n+\theta}^{P} \right] \left\{ \Delta \sigma_{n+1} \right\} - \left\{ \Delta \varepsilon_{0,n+1}^{P} \right\}$$

$$(3.3.66)$$

である。  
すなわち、(3.3.51)式の
$$\left[C_{n+ heta}^P
ight]$$
は(3.3.66)式で与えられ、(3.3.60)式は、

$$\int [B]^{T} [\tilde{D}_{n+\theta}] [B] dV \{\Delta u_{n+1}\}$$

$$= \{\Delta F_{n+1}\} + \int [B]^{T} [\tilde{D}_{n+\theta}] (\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{\ th}\} + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{\ trr}\} + \{\Delta \varepsilon_{0,n+1}^{\ c}\} + \{\Delta \varepsilon_{0,n+1}^{\ P}\}) dV$$

$$(3.3.67)$$

と拡張される。すなわち、最後の $\left\{\Delta \varepsilon_{0,n+1}^{P}\right\}$ 項として塑性歪み項が入った。

実際の FEMAXI コードでの塑性に関しての式の展開は、D マトリックスを変換する方法を用いているが、基本的には、(3.3.67)式とほぼ等価の内容であり、このとき前ステップでの $h(\{\sigma_n\}) = K(\overline{\varepsilon}_n^P, T_n)$ の残差処理も同時に行っている。

 $h(\{\sigma_n\}) = K(\overline{\varepsilon}_n^P, T_n)$ の残差処理とは、(3.3.64)式で示したようにテーラー展開すると、得られた結果は、 $h(\{\sigma_{n+1}\}) \approx K(\overline{\varepsilon}_{n+1}^P, T_{n+1})$ となってしまう。そこで、次ステップでは、(3.3.64)式ではなく、(3.3.63)式をそのまま使って定式化する。すなわち、 $K(\overline{\varepsilon}_n^P, T_n) - h(\{\sigma_n\})$ 分の補正を考慮して、

$$\left\{\Delta\varepsilon_{0,n+1}^{P}\right\} = \frac{\left(\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_{n+\theta}\Delta T_{n+1} + K\left(\overline{\varepsilon}_{n}^{P}, T_{n}\right) - h\left\{\sigma_{n}\right\}\right)}{H_{n+\theta}'} \left\{\frac{\partial h}{\partial\sigma}\right\}_{n+\theta}$$
(3.3.68)

としている。

# 3.3.3 剛性方程式の導出

ペレットクラック、クリープおよび塑性の歪みをすべて、未知量である $d\sigma_{n+1}^{i+1} \ge \Delta u_{n+1}^{i+1}$ および定数項のみで表記した構成方程式(3.3.42)式を再記する。応力に依存しない歪み成分は初期歪み量として(3.1.28)式に示した。

$$\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \} = \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \right] \left( [B] \{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \} - \left[ \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left( \{ \sigma_{n+1}^{i} \} - \{ \sigma_{n} \} \right) - \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \} - \{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \} \right)$$

$$+ \{ S_{n+\theta}^{i} \} \Delta T_{n+1} - \{ Z_{1} \} - \{ Z_{2} \}$$

$$(3.3.69)$$

(3.3.69)式を平衡条件式(3.1.41)式に代入し整理すると次の形の剛性方程式が求まる。

$$\left[K_{n+\theta}^{i}\right]\!\left\{\Delta u_{n+1}^{i+1}\right\} = \left\{\Delta \hat{F}_{n+1}^{i}\right\}$$
(3.3.70)

(3.3.70)式で示した剛性方程式を各要素に適用するために、各項を次式のようにリング要素体積で積分して決定する。

$$\begin{bmatrix} K_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} = 2\pi \iint [B]^{T} [\hat{D}_{n+\theta}^{P,i}] [B] \quad rdrdz \qquad (3.3.71)$$

$$\{\Delta \hat{F}_{n+1}^{i}\} = 2\pi \iint [B]^{T} [\hat{D}_{n+\theta}^{P,i}] \{ [\tilde{C}_{n+\theta}^{i}] (\{\sigma_{n+1}^{i}\} - \{\sigma_{n}\}) + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\} + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i}\} \} \quad rdrdz \qquad (3.3.72)$$

$$+ \{\Delta \delta_{n+1}^{0}\} + \{\Delta \delta_{n+\theta}^{c,i}\} \Delta T_{n+1} - \{Z_{1}\} - \{Z_{2}\} ) \quad rdrdz \qquad (3.3.72)$$

$$+ \{F_{n+1}\} - 2\pi \iint [B]^{T} \{\sigma_{n+1}^{i}\} \quad rdrdz$$

ただし、要素の剛性方程式の右辺を $\left\{\Delta \hat{F}_{n+1}^{i}\right\}$ と表記したのは、(3.3.70)式で示した剛性方程式から求められる解は変位増分 $\left\{\Delta u_{n+1}^{i+1}\right\}$ であるので、右辺は荷重増分ベクトルとなるからである。ただし、 記号は収束計算中の仮の値 ( $\Delta F_{n+1}$ ) であることを意味する。

# 3.4 全体マトリックスの定式化と外力

# 3.4.1 剛性方程式と全体マトリックス

各要素の剛性方程式(3.3.71)、(3.3.72)式を以下に再記する。

$$\left[K_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\Delta u_{n+1}^{i+1}\right\} = \left\{\Delta \hat{F}_{n+1}^{i}\right\}$$
(3.3.71)

$$\begin{split} \left\{ \Delta \hat{F}_{n+1}^{i} \right\} &= 2\pi \iint [B]^{T} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \right] \left\{ \left[ \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} \right\} \\ &+ \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right\} r dr dz \\ &- 2\pi \iint [B]^{T} \left\{ \left\{ S_{n+\theta}^{i} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_{1} \right\} - \left\{ Z_{2} \right\} \right\} r dr dz \\ &+ \left\{ F_{n+1} \right\} - 2\pi \iint [B]^{T} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} r dr dz \end{split}$$
(3.3.72)

これらの方程式は Newton-Raphson 法の繰り返しが終了した状態では、繰り返しの添字 i を省略して、

$$\left[K_{n+\theta}\right]\left\{\Delta u_{n+1}\right\} = \left\{\Delta F_{n+1}\right\}$$
(3.4.1)

と書ける。さらに以降の議論のために(3.4.1)式を次式のように表すこととする。

$$[B_{ee}]\{\Delta u_{n+1}\} = \{F_{n+1}\} + \{B_{et,n+1}\}$$
(3.4.2)

ここで、

$$\begin{bmatrix} B_{ee} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{n+\theta} \end{bmatrix}$$
  
 
$$\left\{ B_{et,n+1} \right\} = \left\{ \Delta F_{n+1} \right\} - \left\{ F_{n+1} \right\}$$

である。

以上で要素マトリックスが作成できたので、次に全体マトリックスの作成方法を説明する。

# (1) 全体マトリックスの作成方法

本来は図 3.2.3 に示す系で解析を行うのであるが、マトリックスの成分表示が複雑であるので、 わかりやすくするため図 3.4.1 に示すペレット 3 層、被覆管 2 層に単純化した例によって説明す る。



図 3.4.1 解析モデルの一例

図 3.4.1 において、u は径方向変位、v は軸方向変位である。すると、このセグメントの全体マトリックスを表記すると、

$B_{11}^{1}$	$B_{12}^{1}$	0	0	0	0	0	$B_{13}^{1}$	0	$B_{14}^{1}$	0	$\left(\Delta u_{1}\right)$
$B_{21}^{1}$	$B_{22}^1 + B_{11}^2$	$B_{12}^2$	0	0	0	0	$B_{23}^1 + B_{13}^2$	0	$B_{24}^1 + B_{14}^2$	0	$\Delta u_2$
0	$B_{21}^2$	$B_{22}^2 + B_{11}^3$	$B_{12}^{3}$	0	0	0	$B_{23}^2 + B_{13}^2$	0	$B_{24}^2 + B_{14}^3$	0	$\Delta u_3$
0	0	$B_{21}^{3}$	$B_{22}^{3}$	0	0	0	$B_{23}^{3}$	0	$B_{24}^{3}$	0	$\Delta u_4$
0	0	0	0	$B_{11}^{4}$	$B_{12}^{4}$	0	0	$B_{13}^{4}$	0	$B_{14}^{4}$	$\Delta u_5$
0	0	0	0	$B_{21}^{4}$	$B_{22}^4 + B_{11}^5$	$B_{12}^{5}$	0	$B_{23}^4 + B_{13}^5$	0	$B_{24}^4 + B_{14}^5$	$\Delta u_6$
0	0	0	0	0	$B_{21}^{5}$	$B_{22}^{5}$	0	$B_{23}^{5}$	0	$B_{24}^{5}$	$\Delta u_7$
$B_{31}^{1}$	$B_{32}^1 + B_{31}^2$	$B_{33}^2 + B_{32}^3$	$B_{33}^{3}$	0	0	0	$B_{33}^1 + B_{33}^2 + B_{33}^3$	0	$B_{34}^1 + B_{34}^2 + B_{34}^3$	0	$\Delta v_1^L$
0	0	0	0	$B_{31}^{4}$	$B_{32}^4 + B_{31}^5$	$B_{32}^{5}$	0	$B_{33}^4 + B_{33}^5$	0	$B_{34}^4 + B_{34}^5$	$\Delta v_2^L$
$B_{41}^{1}$	$B_{42}^1 + B_{41}^2$	$B_{42}^2 + B_{41}^3$	$B_{42}^{3}$	0	0	0	$B_{43}^1 + B_{43}^2 + B_{43}^3$	0	$B_{44}^1 + B_{44}^2 + B_{44}^3$	0	$\Delta v_1^U$
0	0	0	0	$B_{41}^{4}$	$B_{42}^4 + B_{41}^5$	$B_{42}^{5}$	0	$B_{43}^4 + B_{43}^5$	0	$B_{44}^4 + B_{44}^5$	$\left[\Delta v_{2}^{U}\right]$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ F_{pca} \\ 0 \\ -F_{pcb} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B_{et,1}^{1} \\ B_{et,2}^{2} + B_{et,1}^{3} \\ B_{et,2}^{3} + B_{et,1}^{3} \\ B_{et,1}^{4} + B_{et,1}^{5} \\ B_{et,2}^{5} + B_{et,3}^{3} \\ B_{et,3}^{5} + B_{et,3}^{2} \\ B_{et,3}^{4} + B_{et,3}^{2} + B_{et,3}^{3} \\ B_{et,4}^{4} + B_{et,4}^{5} + B_{et,4}^{3} \\ B_{et,4}^{4} + B_{et,4}^{5} + B_{et,4}^{3} \end{bmatrix}$$
(3.4.3)

と書ける。 (3.4.3)式は、外力ベクトル $\{F_{n+1}\}$ については、後述の図 3.4.2 中の $F_{pca}$  (内部ガス圧) と $F_{pcb}$  (冷却材圧力)のみが考慮されている。

(3.4.3)式を書き換えて、

Γ	$B_{33}^1 + B_{33}^2 + B_{33}^3$	0	$B_{31}^{1}$	$B_{32}^1 + B_{31}^2$	$B_{32}^2 + B_{31}^3$	$B_{32}^{3}$	(	0	0	0	$B_{34}^1 + B_{34}^2 + B_{34}^3$	0	
	0	$B_{33}^4 + B_{33}^5$	0	0	0	0	В	$B_{31}^4$	$B_{32}^4 + B_{31}^5$	$B_{32}^{5}$	0	$B_{34}^4 + B_{34}^5$	
	$B_{13}^{l}$	0									$B_{14}^{1}$	0	
	$B_{23}^1 + B_{13}^2$	0									$B_{24}^1 + B_{14}^2$	0	
	$B_{23}^2 + B_{13}^3$	0									$B_{24}^2 + B_{14}^3$	0	
	$B_{13}^{3}$	0				$B_{7\times7}$					$B_{24}^2$	0	×
	0	$B_{13}^4$									0	$B_{14}^{4}$	
	0	$B_{23}^4 + B_{13}^5$									0	$B_{24}^4 + B_{14}^5$	
	0	$B_{23}^{5}$									0	$B_{24}^{5}$	
	$B_{43}^1 + B_{43}^2 + B_{43}^3$	0	$B_{41}^{1}$	$B_{42}^1 + B_{41}^2$	$B_{42}^2 + B_{41}^3$	$B_{42}^{3}$	(	0	0	0	$B_{44}^1 + B_{44}^2 + B_{44}^3$		
L	0	$B_{43}^4 + B_{43}^5$	0	0	0	0	B	$P_{41}^4$	$B_{42}^4 + B_{41}^5$	$B_{42}^{5}$	0	$B_{44}^4 + B_{44}^5$	
				$\begin{bmatrix} \Delta \\ \Delta $	$ \begin{array}{c} v_{1}^{L} \\ v_{2}^{L} \\ u_{1} \\ u_{2} \\ u_{3} \\ u_{4} \\ u_{5} \\ u_{6} \\ u_{7} \\ v_{1}^{U} \\ v_{2}^{U} \end{array} \right\} = \begin{cases}$	$ \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 7_{pca} \\ 0 \\ F_{pcb} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} $	+ {	$B^{1}_{et,}$	$B_{et,3}^{2} + B_{et,3}^{2} + B_{et,3}^{2} + B_{et,3}^{3} + B_{et,1}^{3} + B_{et,1}^{3} + B_{et,1}^{2} + B_{et,1}^{3} + B_{et,2}^{3} + B_{et,1}^{3} + B_{et,2}^{3} + B_{et,1}^{3} + B_{et,2}^{3} + B_{et,1}^{5} + B_{et,2}^{5} + B_{et,1}^{5} + B_{et,4}^{5} + B_{e$	$\overline{B}_{et,3}^{3}$	>	(	3.4.4)

とおく。次に、(3.4.4)式で与えられたセグメントの剛性マトリックスから、燃料棒全長の全体剛 性マトリックス定式化について示す

### (2) 燃料棒全長の全体剛性マトリックス定式化

セグメントの剛性マトリックスから全体剛性マトリックスを作成する場合には、軸方向に共有 する節点自由度を重ね合わせて作成する。すなわち、軸方向jとj+1の境界ではペレットおよび、 被覆管の軸方向自由度について、

とおく。

例えば軸方向セグメント数を3とした例で示すと、


(3.4.6)式を、以後の議論の 雑さを避けるために、(3.4.1)式及び(3.4.2)式のように書き直して $\begin{bmatrix} B_{ee} \end{bmatrix} \{ \Delta u \} = \{ \Delta F \}$  (3.4.7)

と表記しておく。 なお、(3.4.6)式は、上下の境界条件について設定していないので、次節に上下 プレナムの境界条件の設定方法について示す

## 3.4.2 上下プレナム境界条件

上下プレナム部の存在は、力学的解析の境界条件の一つである。FEMAXI-7 では、プレナム部 は通常のバネ要素と考える。この条件の全体マトリックスへの反映について、以下に説明する。

## (1) ペレット及び被覆管に作用する外力及び接触力

ペレット及び被覆管に作用する力を図 3.4.2 のように扱う。



図 3.4.2 燃料・被覆管に作用する力

ここで、

 F2
 : ペレット/被覆管接触力

 F3
 : 軸力

 Fpca
 : プレナムガス圧力

 Fpcb
 : 冷却材圧力

である。

ペレットの割れによって、ペレット内部にもプレナムガス圧でガスが入り込んでいるため、プ レナムガス圧力によるペレットの変形の効果は無視できるものとした。

#### (2) プレナムスプリング要素の構成方程式

プレナムスプリング要素の構成方程式は、プレナムバネの熱膨張を考慮して、プレナムバネ定数をkとしたとき、

$$k \left( u_{n+1}^{U} - u_{n+1}^{L} \right) = F_{n+1}^{U} + k \cdot \alpha (T_{pl} - T_{room}) l_{z,pl}$$

$$k \left( u_{n+1}^{L} - u_{n+1}^{U} \right) = F_{n+1}^{L} - k \cdot \alpha (T_{pl} - T_{room}) l_{z,pl}$$

$$(3.4.8)$$

である。ここで、

$$k: プレナムバネ定数$$
  
 $u_{n+1}^U: プレナムバネ上部節点の軸方向変位$   
 $u_{n+1}^L: プレナムバネ下部節点の軸方向変位$   
 $F_{n+1}^U: プレナムバネ下部節点の軸方向荷重$   
 $F_{n+1}^L: プレナムバネ下部節点の軸方向荷重$   
 $\alpha: プレナムバネの熱膨張率$   
 $T_{pl}: プレナム温度$   
 $T_{room}: プレナム初期温度$   
 $l_{z,pl}: プレナム長$ 

である。次に、(3.4.8)式を増分形で表示する。このとき上部プレナムの場合、プレナムバネ下部 節点の軸方向荷重は、繰り返し計算中に変化するので、 $F_{n+1}^{L,i+1}$ のように添え字 i+1 を付けて表示 すると、(3.4.8)式の増分形は、

$$k(\Delta u_{n+1}^{U,i+1} - \Delta u_{n+1}^{L,i+1}) = F_{n+1}^{U,i+1} + k \cdot \alpha \Delta T_{pl} \cdot l_{z,pl} - k(u_n^U - u_n^L))$$

$$k(\Delta u_{n+1}^{L,i+1} - \Delta u_{n+1}^{U,i+1}) = F_{n+1}^{L,i+1} - k \cdot \alpha \Delta T_{pl} \cdot l_{z,pl} - k(u_n^L - u_n^U))$$
(3.4.9)

である。(3.4.9)式は、直接(3.4.7)式に組み込むことができる。すなわち、

$$\begin{bmatrix} k & -k \\ -k & k \end{bmatrix} \begin{cases} \Delta u_{n+1}^{L,i+1} \\ \Delta u_{n+1}^{U,i+1} \end{cases} = \begin{cases} F_{n+1}^{L,i+1} - k \cdot \alpha \Delta T_{pl} \cdot l_{z,pl} - k \begin{pmatrix} u_n^L - u_n^U \end{pmatrix} \\ F_{n+1}^{U,i+1} + k \cdot \alpha \Delta T_{pl} \cdot l_{z,pl} - k \begin{pmatrix} u_n^U - u_n^L \end{pmatrix} \end{cases}$$
(3.4.10)

である。

なお、プレナムスプリング要素が参照する温度は、下部プレナム部は、冷却材入口温度+DTPL であり、上部プレナム部は、冷却材出口温度+DTPLである。(2.15.4 項参照)

調整パラメータ XKSU, XKSL, ALSU, ALSL

プレナムバネ定数 (N/m)は、上部プレナム部は XKSU、下部プレナム部は XKSL で 与える。標準値は、XKSU=1.5×10<sup>3</sup>(N/m)、XKSL=1.0×10<sup>7</sup>(N/m)である。プレナムバネ 熱膨張率は、上部プレナム部は ALSU、下部プレナム部は ALSL で与える。標準値は、 ALSU=1.5×10<sup>-5</sup>(1/K)、ALSL=1.5×10<sup>-5</sup>(1/K)である。

#### (3) プレナム部被覆管の構成方程式

プレナム部被覆管ではペレットスタック部の被覆管と等価な定式化を行う。したがって、プレ ナム部被覆管の各要素の剛性方程式は(3.3.71)、(3.3.72)式と同様に、(3.4.11)、(3.4.12)で与えられる。

$$\left[K_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\Delta u_{n+1}^{i+1}\right\} = \left\{\Delta \hat{F}_{n+1}^{i}\right\}$$
(3.4.11)

$$\begin{split} \left\{ \Delta \hat{F}_{n+1}^{i} \right\} &= 2\pi \iint [B]^{T} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \right] \left\{ \left[ \tilde{C}_{n+\theta}^{i} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} \right\} \\ &+ \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right\} r dr dz \\ &- 2\pi \iint [B]^{T} \left\{ \left\{ S_{n+\theta}^{i} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_{1} \right\} - \left\{ Z_{2} \right\} \right\} r dr dz \\ &+ \left\{ F_{n+1} \right\} - 2\pi \iint [B]^{T} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} r dr dz \end{split}$$
(3.4.12)

なお、プレナム部被覆管が参照する温度は、下部プレナム部は、冷却材入口温度であり、上部 プレナム部は、冷却材出口温度である。ITPLEN=1 とした場合には、プレナムの上下に関わらず 冷却材入口温度をプレナム部被覆管温度として扱う。(2.15.4 項参照)

また、プレナム部被覆管のクリープ歪み、照射成長歪みの算出に用いる高速中性子束は、下部 プレナム部は、セグメント1(最下部燃料有効部ゼグメント)の高速中性子束の FPLFAC(2)倍と して与えられ、上部プレナム部は、セグメント NAXI(最上部燃料有効部ゼグメント)の高速中 性子束の FPLFAC(1)倍として与えられる。 計算パラメータ XLSZU, XLSZL 上下部のプレナム長は、上部プレナム部は XLSZU、下部プレナム部は XLSZL で与える。なお、XLSZU、XLSZL を指定しない場 合は、上部プレナム部容積 PLENUM(2)及び下部プレナム部容積 PLENUM(1)を $\pi r_{ci}^2$ ( $r_{ci}$ :被覆管内半径)で除した値をプレナム長として与える。なお、下部プレナムを 考慮するか否かは XLSZL によらず PLENUM(1)を正値 (>0)を指定するか 0 を指定す るかによって決定される。また、XLSZU 及び XLSZL の単位は cm である。

調整パラメータ FPLFAC プレナム部高速中性子束は、下部プレナム部は、 セグメント1(最下部燃料有効部ゼグメント)の高速中性子束の FPLFAC(2)倍として 与えられ、上部プレナム部は、セグメント NAXI(最上部燃料有効部ゼグメント)の 高速中性子束の FPLFAC(1)倍として与えられる。標準値は、FPLFAC(1)=0.5、 FPLFAC(2)=0.5 である。

## (4) 上下プレナム境界条件

上部プレナムの上端の境界条件となる外力は、

$$F_{n+1} = \pi r_{ci}^2 P_{gas, n+1} - \pi r_{co}^2 P_{water, n+1}$$
(3.4.13)

で与えられる。ここで、

である。



図 3.4.3 上部プレナム境界条件

下部プレナムの下端の境界条件は変位拘束条件で与えられ、軸方向変位増分 $\Delta v = 0$ で与える。 このようにして、全体剛性マトリックス及び全体荷重ベクトルが作成された。この全体剛性方 程式に接触境界条件を付加して変位増分 $\Delta u_{n+1}^{i+1}$ を求める。



図 3.4.4 下部プレナム境界条件

また、プレナム部については、当然のことであるが、プレナムスプリング用の要素と被覆管との接触は取り扱わないものとする。

(3.4.13)式及び(3.4.11)、(3.4.12)式で得られた上下部プレナムスプリング要素での荷重を全体マト リックスに組み込むと、全体マトリックスは以下のように与えられる。



(3.4.14)

(3.4.14)式において、 $B_{ee}^{b}$ が下部プレナム部、 $B_{ee}^{l}$ が燃料有効部の各軸方向セグメント、 $B_{ee}^{up}$ が上部 プレナム部に対応する。この(3.4.14)式が、非接触状態における全体マトリックス(対称マトリッ クス)である。

## 3.4.3 ペレット・被覆管接触モデル

ここでは、ペレットと被覆管が接触した場合の接触力の求め方、すなわち接触モデルを説明する。FEMAXIコードでは接触状態として固着とすべりの2種類のモードを考慮している。接触モデルの目的は、PCMIを計算するための重要な要素である接触力 F を求めることである。

FEMAXI-6 においては、燃料棒全長を対象とした力学計算モデルにおいて、接触時の計算の安定化を図るために以下に述べるような改良を施した。

以下、ペレットと被覆管の接触は、同一のセグメントjに属するペレットと被覆管のそれぞれの有限要素において、ペレットの外表面及び被覆管の内表面の向かい合った節点 Pnj-Cnj(=節 点対)について扱う。ここで $1 \le j \le 40$ である。

#### (1) 接触・非接触の決定法

① タイムステップ n(開始時刻 t)における t→t+Δt までの計算を行い、その結果(時刻 t+Δt の 状態)に対して、接触/非接触状態の判定を、Pni-Cniのうち最上部にある点から順に下方 に向かって実行し、すべての節点対に関して非接触⇔接触の変更の有無をチェックする。も し変更があれば、変更が最初に生じた節点対 Pn1-Cn1 について、以下の条件により決定され る状態変更の時点 t'を求める。

·非接触	$\rightarrow$	接	触への変化:	ギャップ幅がゼロとなる時点
			(節点 Pn1 および	Cn1 の径方向座標値は等しい)
·接触	$\rightarrow$	非接	妾触への変化:	接触圧がゼロとなる時点

次に、時間を り、すべての時間依存の計算結果を時間に対して線形補間を行ってt'の値へ修 正する。さらにt'において節点対 Pn1-Cn1 の接触状態を変更し、t'から $t + \Delta t$  までの再計算を タイムステップ幅 $\Delta t$ を細分化して、力学解析についてのみ行う。

② ①の結果に対し、節点対 Pni-Cni および Pn1-Cnl に対して、 $t' \rightarrow t + \Delta t$  への変化に関して 再び①と同様な判定・再計算が実行される。

③ ②のプロセスが終了した段階で、すべての節点対に関して非接触⇔接触の変更の有無を再度 チェックする。もし変更があれば、変更が最初に生じた節点対 Pn2-Cn2 について、①と同様に して状態変化の時点t''を求め、時間を り、すべての時間依存の計算結果を時間に対して線形補 間を行ってt''の値へ修正する。さらにt''において接触状態を変更し、t''から $t+\Delta t$ までの再計算 を力学解析についてのみ行う。

なお、接触しているセグメントの固着/すべり状態の決定法については(2)項に示す。

#### (2) ペレット被覆管接触時での取り扱い

接触ー非接触の判定は、接触している軸方向セグメントの「固着」、「すべり」モードが全て 決定した条件下で行う。

なお、ペレットと被覆管にボンディング状態が発生している場合(IBOND=1 の場合)には、すべり/固着判定は行わず、固着-非接触状態の変化のみを仮定する。したがって以下の「固着」、「すべり」判定処理は省略される。また、ボンディング状態においては、非接触状態でも軸方向 拘束による軸力が考慮される。この場合の境界条件の設定方法については(5)項に示す。

新たなタイムステップの最初では、ペレットと被覆管が接触していた軸方向セグメントについては、固着状態を仮定する。固着状態を仮定した軸方向セグメント での接触力、摩擦力の関係が、

$$\left|F_{z,j}\right| > \mu \left|F_{r,j}\right|$$

の場合には、接触モードを「固着→すべり」に変更する。このとき $F_{z,j}$ の向きによってすべり方 向を決定する。次に、「すべり」と判定された軸方向セグメントについては、接触境界条件を「す べり」に変更して、全ての接触している軸方向セグメントの「固着」、「すべり」状態の「仮定」 と「結果」が一 するまで、この操作を繰り返す。「固着」、「すべり」状態の「仮定」と「結 果」が一 すれば、「固着」、「すべり」の接触状態判定は完了である。

なお、軸方向セグメント数が9の場合の各セグメントの軸力を表 3.4.1 に示す。セグメント数 が10セグメント以上の場合の取り扱い方法は、表 3.4.1 に示した9セグメントの場合と同様で ある。

	衣 3.4.1 軸刀向ビググンドと軸刀の関係				
軸方向セグ	接触	すべり条件で	固着条件で得	各セグメントの軸力	
メント番号	状態	得られた荷重	られた 荷重		
プレナム部	_	0	0	$F_u$	
9	非接触	0	0	$F_u$	
8	非接触	0	0	$F_u$	
7	すべり	$\mu F_7$	0	$F_u + \mu F_\gamma$	
6	すべり	$\mu F_6$	0	$F_u + \mu F_7 + \mu F_6$	
5	固着	0	$f_5$	$F_u + \mu F_7 + \mu F_6 + f_5$	
4	固着	0	$f_4$	$F_{u} + \mu F_{7} + \mu F_{6} + f_{5} + f_{4}$	
3	固着	0	$f_3$	$F_u + \mu F_7 + \mu F_6 + f_5 + f_4 + f_3$	
2	非接触	0	0	$F_u + \mu F_7 + \mu F_6 + f_5 + f_4 + f_3$	
1	非接触	0	0	$F_u + \mu F_7 + \mu F_6 + f_5 + f_4 + f_3$	

表 3.4.1 軸方向セグメントと軸力の関係

ただし表 3.4.1 中で、 $F_u$ はプレナムスプリングがペレット上端を押す力、  $F_6$ ,  $F_7$ は径方向接触力、 $f_3, f_4, f_5$ は固着条件での軸方向接触力である。

#### (3) 接触して固着した場合の計算

固着状態(と仮定されている)の場合、接触点のペレット外表面の変位増分と被覆管内表面の 変位増分が等しいとする境界条件を与える。すなわち、全体マトリックスには次の条件の設定を 行う。

$$\Delta u_{11,j} = \Delta u_{12,j} \tag{3.4.15}$$

$$\Delta v_{P,j}^U = \Delta v_{C,j}^U \tag{3.4.16}$$

ここで、

$$\Delta u_{11,j}$$
: セグメントjのペレット外表面径方向変位増分  
 $\Delta u_{12,j}$ : セグメントjの被覆管内表面径方向変位増分  
 $\Delta v_{P,j}^{U}$ : セグメントjのペレット上端境界面軸方向変位増分  
 $\Delta v_{C,j}^{U}$ : セグメントjの被覆管上端境界面軸方向変位増分

である。 セグメントjが固着状態の場合の全体マトリックスを(3.4.17)式で示す。

境界条件を設定する前の行列 K を L×L とし、 $\Delta u_{11,j} = \Delta u_{12,j}$ 、 $\Delta v_{P,j}^U = \Delta v_{C,j}^U$ に対応する行につ いては、マトリックス上の $\Delta u_{11,j}$ と $\Delta u_{12,j}$ 及び $\Delta v_{P,j}^U$ と $\Delta v_{C,j}^U$ を共通自由度とする。 $\Delta u_{11,j}$ と $\Delta u_{12,j}$ は共通自由度なので、 $\Delta u_{11,j} = \Delta u_{12,j}$ となる。同様に $\Delta v_{P,j}^U = \Delta v_{C,j}^U$ となる。

#### (4) 接触して、すべり状態にある場合の計算

ペレット被覆管が接触し、すべり状態にあると判定された場合は、①軸方向接触力を径方向接 触力に摩擦係数を掛けることにより直接決定する境界条件、および、②(3.4.18)式のように接触点 のペレット外表面径方向変位増分と被覆管内表面径方向変位増分が等しいとする径方向の境界 条件を設定する。

すなわち、セグメント *j* がすべり状態の接触をした場合、すべり状態と仮定した軸方向セグメントにおいて、マトリックスには次の条件を設定する。

半径方向変位増分:
$$\Delta u_{11,j} = \Delta u_{12,j}$$
 (3.4.18)

PCMI 接触摩擦によって発生した軸力: 
$$F_{3,i} = \mu F_{2,i}$$
 (3.4.19)

ここで、

μ : 摩擦係数

である。

セグメントjがすべりの場合のセグメントjでのマトリックスを(3.4.20)式で示す。



(3.4.20)式において $\Delta u_{11,j}$ 、 $\Delta u_{12,j}$ 、 $\Delta v_{P,j}^U$ 、 $\Delta v_{C,j}^U$ 、 $F_{2,j}$ に対応する行をそれぞれ $l_1$ 、 $l_2$ 、 $l_3$ 、  $l_4$ 、 $l_5$ とおくと、(3.4.20)式には以下に示す境界条件が設定されたことになる。

$$l_1 \tilde{\tau} : \sum_{l=1}^{L} K_{l_1,l} \Delta u_{11,j} + F_{2,j} = \Delta F_{l_1}$$
(3.4.21)

$$l_{2}\vec{\tau}: \sum_{l=1}^{L} K_{l_{2},l} \Delta u_{12,j} - F_{2,j} = \Delta F_{l_{2}}$$
(3.4.22)

$$l_{3} \overleftarrow{\tau} : \sum_{l=1}^{L} K_{l_{3},l} \Delta v_{P,j}^{U} + \mu F_{2,j} = \Delta F_{l_{3}}$$
(3.4.23)

$$l_4 \overleftarrow{\Box} : \sum_{l=1}^{L} K_{l_4, l} \Delta v_{C, j}^U - \mu F_{2, j} = \Delta F_{l_3}$$
(3.4.24)

$$l_5 \hat{\tau}: \ \Delta u_{11,j} - \Delta u_{12,j} = 0 \tag{3.4.25}$$

である。(3.4.21)式はセグメント**j**の径方向接触力 $-F_{2,j}$ をペレット表面に加えたものであり、 (3.4.22)式はセグメント**j**の径方向接触力 $F_{2,j}$ を被覆管内面に加えたものである。(3.4.23)式はセグ メント**j**のペレット上端面に $-\mu F_{2,j}$ の力を加えたものであり、(3.4.24)式はセグメント**j**の被覆 管上端断面に $\mu F_{2,j}$ の力を加えたものである。(3.4.25)式は(3.4.15)式で示した条件で $F_{2,j}$ の接触力の発生条件を定めている。

なお、(3.4.20)式を解くためには、上部からの軸力が必要である。最上部セグメントでは軸力は 冷却材圧力およびプレナムスプリング力として既知である。

最下部セグメントの底での境界条件は、下部プレナムの有無によって異なる。下部プレナム無 しの場合は、ペレット、被覆管とも最下部セグメントの底での軸方向変位は0に固定する。 下部プレナム有りの場合は、被覆管の最下部のセグメントの底での軸方向変位は0に固定するが、 ペレットの最下部のセグメントの底では、スプリング力を考慮して、

$$F_z = k_l \cdot v \tag{3.4.26}$$

の軸力がペレットスタックの底面に加わる。 ここで、

v:ペレットの最下部のセグメントの底の軸方向変位

 $F_z$ :下部プレナムスプリング力

 $k_l$ :下部プレナムバネ定数

である。

このため、軸方向上方のセグメントから順次(3.4.20)式を計算し、表 3.4.1 に従って軸力を与え て、次の下部セグメントにおける(3.4.20)式を解いていく。なお、(3.4.20)式において求めたい力は、 すべり条件で得られた摩擦力 *μF*<sub>2,j</sub>である。この力はセグメントに発生する軸力となる力であって、 物理的概念としては、セグメント内部で個々のペレットとそれに接触する部分の被覆管の接触面 の摩擦により局所的に発生する軸方向の力の総和である。

そのことを説明するために、µF2,が発生する物理的状況を以下に考察する。

#### (5) PCMI 接触面における軸力発生の論理

1 次元全長 FEM 解析における geometry 自体は、ストレート円柱のペレットスタックとストレート円管の被覆管とが接触して半径方向の接触力が生じ、同時に二者の軸方向熱膨張の差によって接触力 *F*<sub>2,i</sub>に比例した摩擦力が生じ、軸力が生じるような構造となっている。

#### マクロな摩擦表現 I

ただし、二者のストレート円柱・管の軸方向熱膨張の差によって生じたセグメントスケールでの軸方向相互摩擦力は、その接触面が円筒面と想定して考えた、通常の接触摩擦係数を $\mu_{axial}$ として式(3.4.19)のようにセグメントスケールでの $F_{3,j} = \mu_{axial}F_{2,j}$ の形で表現すると、実際の PCMI で生じているはずの摩擦力に比べて非常に小さくなるはずである。なぜなら以下に説明するように、個々のペレットスケールではリッジング変形が生じていて、ペレットのリッジ部が被覆管に局所的に食い込んでいるような形状となっているからである。

また $F_{3,j} = \mu_{axial}F_{2,j}$ のような摩擦表現で PCMI 力学計算を行った場合のもう一つの問題は、ストレート円柱・管の軸方向熱膨張の差が、この差によって生じる静止摩擦力を超えた(限界を上回った)場合、この限界以上の摩擦力(動摩擦力=すべり状態での摩擦力)は、表現できなくなることである。言い換えれば、 $F_{3,j} = \mu_{axial}F_{2,j}$ の関係を単純に使うと、いわば「静止摩擦力」のみを評価することになり、「すべり」モードが扱えなくなり、「ギャップ開き or 固着」のみの解析になってしまう。

以上の考察より、全長力学解析で、あるセグメントにおける軸方向摩擦力を得るためには、ペ レットと被覆管の間の平均的に算出された半径方向接触力に通常の接触摩擦係数 *μ*を掛けても 意味のある(すべり状態を含めた実際の状況を表現する)軸方向摩擦力は得られない。

②マクロな摩擦表現 II

ペレットスタックと被覆管の間の摩擦力の発生には、ペレットリッジング変形とこれに対応し た被覆管の変形を考慮する必要がある。図 3.4.5 に示すように、リッジの部分は凹 がかみ合っ ていて、局所的にペレットスタックと被覆管のそれぞれ独立した軸方向変位への機械的抵抗力が 大きくなる。特に出力上昇の際には、PCMI としての被覆管の反力(ペレットリッジに対する変 形抵抗とリッジを抑えようとするモーメント)が生じ、軸方向の変位に対するペレットスタック と被覆管の相互に働く抵抗は複雑な力学挙動を含むものとなる。

一次元モデルでは、こうした抵抗をすべて含めたマクロな軸方向摩擦力として扱うので、その ための表現を工夫する必要がある。



図 3.4.5 リッジ部でのかみ合いによる抵抗の発生

以上の考察に基づき、全長モデルでは、セグメント長を1、被覆管(金属部)内半径をr<sub>i</sub>、外半

径を $r_o$ としたとき、軸方向の摩擦力 $\mu F_{2,i}$ を

$$\mu F_{2,i} = \mu \sigma_{2,i} \cdot 2\pi r_i l \tag{3.4.27}$$

 σ<sub>2,j</sub>:セグメントにおいて算出された径方向接触圧力(物理的 意味としてはリッジ部での接触力とそれ以外の部分の接 触力を平均したものになる)

とするのではなく、

$$\mu F_{2,j} = \mu \sigma_{2,j} \cdot \pi \left( r_o^2 - r_i^2 \right)$$
(3.4.28)

として与える。

すなわち、ここで想定している物理的状態は、軸力発生 としての摩擦力はセグメントにおけ るペレットー被覆管の接触部の面積2πr<sub>i</sub>lに単純に比例するものではなく、ペレットリッジ部と 被覆管の接触部が特に強く軸力 (摩擦力)に寄与する状態である。被覆管断面積を採用したのは、 被覆管の機械的強度 (stiffness) がペレットリッジングに対する反力と相関し、かつリッジ部かみ 合いによる軸方向変位への抵抗力に寄与する主要な要因と考えられるからである。言い換えれば、 軸力は接触面積ではなく被覆管の機械的強度=断面積の関数であると考える。

ここで留意すべきは「摩擦力はセグメント長に比例して増加する」と考えるのが物理的には自 然であることである。したがって、摩擦力はセグメント長*1*に比例する形になるべきである。

しかし同時に、すべり、固着のモード変化を意識して、ユーザーが軸方向セグメント長*l*を設 定しないことにも留意すべきである。すなわち、解析条件として*l*を長く設定すると、摩擦力は*l* に比例して増加するが、このため、*l*の長いセグメントでは、「すべり」状態では大きな軸力が 発生する。この場合、「固着」・「すべり」判定が粗いものになってしまい、結果としてほとん ど「すべり」モードが現れず、「固着」モードが支配的になると予想される。

そうであるならば、局所的にみて*l*への依存性を無くした方が「固着」・「すべり」判定がより現実的に近い形で表現できるのではないかと考える。

したがって、まず単位面積当たりの調整された接触応力は

$$\sigma_{3,i} = AMU2 \cdot \sigma_{2,i} \tag{3.4.29}$$

と表されると仮定し、下部セグメントへ加わる軸力F<sub>3</sub>,は、

$$F_{3,j} = \sigma_{3,j} \cdot \pi \left( r_o^2 - r_i^2 \right)$$
(3.4.30)

となる。すると接触力 $F_{2i}$ は接触圧力に接触面積を掛けて、

$$F_{2,i} = \sigma_{2,i} \cdot 2\pi r_i l \tag{3.4.31}$$

より、

$$\frac{F_{3,j}}{\pi \left(r_o^2 - r_i^2\right)} = \text{AMU2} \cdot \frac{F_{2,j}}{2\pi r_i l}$$
(3.4.32)

これを  $F_{3,j} = \mu \cdot F_{2,j}$  と書くと、

$$\mu = \frac{\pi \left(r_o^2 - r_i^2\right)}{2\pi r_i l} \cdot \text{AMU2}$$
(3.4.33)

となる。

計算上は、摩擦力による軸力発生は、軸方向セグメント毎に得られた摩擦力  $\mu F_{2,j}$ を全体マト リックスに組み込むことにより与えられる。

μは入力パラメータ AMU2(標準値は 0.4)によって調整することができる。

#### (6) ボンディング状態で非接触の場合の計算

## - IBOND=1として、ボンディングによる固着状態を仮定した場合 -

IBOND=1の場合は、ボンディング状態が生じて BD=1 となった後、接触点のペレット(スタック)上端変位増分と被覆管上端変位増分を強制的に常に等しいとする境界条件を与える。これは、 燃料温度が低下して収縮によって力学計算上はギャップが開き、非接触と判断された場合でも適 用される。すなわち、全体マトリックスには次の条件の設定を行う。

$$\Delta v_{P,j}^{U} = \Delta v_{C,j}^{U}$$
 (3.4.34)  
ここで、  $\Delta v_{P,j}^{U}$  : セグメントjのペレット上端境界面軸方向変位増分  
 $\Delta v_{C,j}^{U}$  : セグメントjの被覆管上端境界面軸方向変位増分

である。 セグメント j がボンディング状態の場合の全体マトリックスを(3.4.35)式で示す。

$$B_{ee}$$

$$B$$

固着状態の場合と同様に、 $\Delta v_{P,j}^{U} \ge \Delta v_{C,j}^{U}$ を共通自由度とする。したがって、 $\Delta v_{P,j}^{U} = \Delta v_{C,j}^{U} \ge \Delta x_{C,j}^{U}$ る。

## 3.5 局所での力学的ふるまい [力学解析 (II)]



図 3.5.1 局所力学解析のフローチャート

## 3.5.1 要素体系

## (1) 解析対象 geometry

局所力学解析では、軸対称 FEM を燃料棒の1軸方向セグメントの半ペレット長相当部に適用 して二次元解析する。この部分を着目セグメントと呼ぶ。要素分割例を図 3.5.2 に簡略化して示す。 図 3.5.2 は、半ペレット長の部分がリング要素に分けられ、円筒座標系で解析されることを示す。



本モデルでは、四角形8節点アイソパラメトリックリング要素を用い、要素内の変位は節点変 位の2次関数で近似する。この解析対象部分=着目セグメントの半ペレット長における要素およ び節点の一例を図3.5.3に詳細に示す。



図 3.5.3 半ペレット長における要素と節点

図 3.5.3 では、半径方向の要素分割に関しては下表の MESH=0 の場合を例示している。ここでは ペレットは半径方向5リング要素に分けられ、半ペレット長は軸方向に上から、たとえば1:1:1 の比率で3要素に分割されている。また被覆管金属部は4層の要素、外面酸化膜は1層の要素と して扱われ、被覆管外面の酸化膜成長、及び酸化膜成長による被覆管金属相の肉厚減少は、全長 力学解析の結果により各タイムステップで Update される。また、被覆管内面に Zr ライナー層の 存在を指定した場合、内側の要素がライナー層として扱われる。

3.2.1(4)項で述べたように、半径方向のペレットリング要素数は入力パラメータ MESH によっ て変えることが可能である。以下の表 3.5.1 に、MESH を指定することによる局所 2D 解析の要素 数の制御を示す。Default は MESH=3 である。

Parameter 值	ペレット要素数
MESH=0	等間隔5リング要素
MESH=1	等体積9リング要素
MESH=2	等体積9リング要素
MESH=3	等体積 18 リング要素
MESH=4	等体積 18 リング要素

表 3.5.1 半径方向のペレットリング要素数

ここで name-list parameter ISHAPE=1 を選択した場合には、MESH>0 における半径方向要素数は2倍となり、より細かな計算が可能となる。

被覆管のリング要素は、上記 MESH の指定にかかわらず、

- ① Zr ライナーなしの場合: 金属要素 4 リング要素+外表面酸化膜 1 リング要素
- ② Zr ライナー有の場合:

Zr ライナー1 リング要素+金属要素 4 リング要素+外表面酸化膜 1 リング要素 である。(2D モデルの場合は、内面酸化膜要素はない)

ただし、ISHAPE=1の場合は、上記の2倍のリング要素数となる。

なお、RANNS において IREST>0 として FEMAXI の計算結果を初期条件として用いる場合は、 MESH の値は FEMAXI で指定した値が自動的に引き継がれる。ただし、RANNS の 2 次元局所解 析要素においては、外表面酸化膜要素は、高速過渡における酸化膜の機械的 stiffness を無視して、 考慮しない。このため、RANNS の 2 次元局所解析においては

- ③ Zr ライナーなしの場合: 金属要素 4 リング要素
- ④ Zr ライナー有の場合: Zr ライナー1 リング要素+金属要素 4 リング要素
  - となる。

図 3.5.4 に、MESH=3 or 4 の場合の半ペレット長の局所 2 次元 FEM 解析における要素と節点 およびペレットのリッジング変形の様子を模式的に示す。解析はペレットおよび被覆管の上下対 象条件を利用してあくまで半ペレットに適用され、その中にリッジ部(R)、胴部(B)、その間部(M) が位置する。



図 3.5.4 半ペレット長の局所二次元 FEM 解析における要素とペレットとの対応

#### JAEA-Data/Code 2010-035

また、1次元熱・力学解析と2次元力学解析の温度の対応関係として、ペレット要素間には図 3.5.5 に、被覆管要素間には図 3.5.6 に示す対応関係があるが、これは1次元要素系で温度を求め た後に、その2要素の平均温度を2次元力学解析の1要素の温度として適用することを意味する。



図 3.5.5 力学解析におけるペレットリング要素の対応関係

ただし、被覆管の金属相厚み及び外面酸化膜厚みは、1 次元熱解析で求めた値を 2 次元力学解 析で用いる。力学解析自体は、1 次元解析と 2 次元解析の間には(酸化膜の成長以外には)直接 の関係はなく、両者は独立に応力歪み解析を行う。



図3.5.6 被覆管の力学解析におけるリング要素の対応関係 (X印はガウス点)

#### (2) 軸方向分割と接点対

半ペレット長領域の軸方向要素分割数および分割比率は入力パラメータ K1 および AZ1 で指定

可能である。(Default: K1=3, AZ1=5\*1.0; いずれの変数も最大値は 5) 図 3.5.3 は、K1=3, AZ1=1.0, 1.0, 1.0 とした場合である。たとえば K1=4、AZ1=1.0, 1.0, 1.5, 2.0 とすれば、軸方向に 4 要素、その長さの比率が 1:1:1.5:2 に分割される。

ギャップを挟んで向かい合っているペレットと被覆管の節点は、3.5.5 項で述べる節点対を形成している。なお、本節で用いる要素内での歪み成分を以下のように定義する。

$$\left\{\varepsilon\right\} = \begin{cases}\varepsilon_{r}\\\varepsilon_{z}\\\varepsilon_{\theta}\\\gamma_{rz}\end{cases} = \begin{cases}\frac{du}{dr}\\\frac{dv}{dz}\\\frac{dv}{dz}\\\frac{u}{r}\\\frac{u}{r}\\\frac{dv}{dz}\end{cases}$$
(3.5.1)

ここで、 $\varepsilon_r$ 、 $\varepsilon_z$ 、 $\varepsilon_{\theta}$ および $\gamma_{rz}$ は、それぞれ径方向、軸方向、周方向、および剪断(r, z)方向歪 みである。全長力学解析では剪断方向の成分については考慮していないが、本節ではペレットの 曲げ変形による被覆管のリッジ部での応力評価を行うことが目的のひとつであるために、剪断項 を含めて解析する。

## 3.5.2 基本式

二次元モデルにおける FEM 解析方法は基本的に 3.1-3.4 節に述べた一次元力学解析の方法と同じであるが、繰り返しの部分が現れることをいとわず、以下に述べる。

時刻 t<sub>n+1</sub>における平衡条件は、仮想仕事の原理から次のように書くことができる。

$$\int [B]^{T} \{\sigma_{n+1}\} dV - \{F_{n+1}\} = 0$$
(3.5.2)

ここで、

$$[B]^T$$
 : ひずみー変位マトリクス $[B]$ の転置マトリクス $\{\sigma_{n+1}\}$ : 時刻  $t_{n+1}$ における応力ベクトル

である。ひずみ-変位マトリクス[B]は変形前の 法で定められると仮定する。なお、[B]マトリクスについては、後述の(3.5.24), (3.5.25)式で与えられる。

<u>増分形式の</u>構成方程式(応力-ひずみ関係式)は次式で表される。他の歪み成分が存在しても この関係は常に成立する。

$$\left\{\Delta\sigma_{n+1}\right\} = \left[D_{n+\theta}\right] \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{e}\right\}$$
(3.5.3)

ここで、

$$\{\Delta\sigma_{n+1}\} :時刻 t_n から t_{n+1} までの応力増分ベクトル \{\Delta\varepsilon_{n+1}^e\} :時刻 t_n から t_{n+1} までの弾性ひずみ増分ベクトル [D_{n+\theta}] = (1-\theta)[D_n] + \theta[D_{n+1}] \qquad \left(\theta = \frac{1}{2}\right) [D_n] : 時刻 t_n における応力-ひずみ (剛性) マトリクス$$

である。

このDマトリクスの逆行列として[C]マトリクスを定義すれば、(3.5.3)式は次式となる。

$$\left\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left[C_{n+\theta}\right] \left\{\Delta \sigma_{n+1}\right\}$$
(3.5.4)

(3.5.4)式中の[C]マトリクスは、以下のように与えられる。

$$[C] = \frac{1}{E} \begin{bmatrix} 1 & -\nu & -\nu & 0 \\ -\nu & 1 & -\nu & 0 \\ -\nu & -\nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) \end{bmatrix}$$
(3.5.5)

ここで、Eはヤング率、レはポアソン比である。

弾性ひずみ増分ベクトルは次のように表す。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{e}\right\} = \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{0}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{crk}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c}\right\} - \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{p}\right\}$$
(3.5.6)

ここで、

$$\{\Delta \varepsilon_{n+1}\}$$
: 全ひずみ増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\}$ : 初期ひずみ増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\}$ : ペレットクラック歪み増分  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c}\}$ : ホットプレス歪み増分を含めたクリープひずみ増分ベクトル  
 $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{p}\}$ : ホットプレス歪み増分を含めた塑性ひずみ増分ベクトル

である。熱膨張、やきしまり、スエリングおよびリロケーションによるひずみは一括して初期ひ ずみとして取り扱われる。 ひずみ-変位関係式は次式で与えられる。

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}\right\} = \left[B\right]\left(\left\{u_{n+1}\right\} - \left\{u_{n}\right\}\right)$$
(3.5.7)

ここで、

 $\{u_n\}$ :時刻  $t_{n+1}$ における節点変位ベクトル

である。

(3.5.3)~(3.5.7)式から次式が得られる。

 $\begin{bmatrix} C_{n+\theta} \end{bmatrix} \left( \left\{ \sigma_{n+1} \right\} - \left\{ \sigma_n \right\} \right) - \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \left( \left\{ u_{n+1} \right\} - \left\{ u_n \right\} \right) + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^0 \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^c \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^c \right\} = 0 \quad (3.5.8)$   $\Xi \equiv \overline{C},$ 

$$\begin{bmatrix} C_{n+\theta} \end{bmatrix} = (1-\theta) \begin{bmatrix} C_n \end{bmatrix} + \theta \begin{bmatrix} C_{n+1} \end{bmatrix} \qquad \left( \theta = \frac{1}{2} \right)$$
$$\begin{bmatrix} C_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_n \end{bmatrix}^{-1}$$

である。

(3.5.2)および(3.5.8)式が未知量 $\{\sigma_{n+1}\}$ および $\{u_{n+1}\}$ を求めるための基本式である。

(3.5.8)式は、  $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{crk}\}$ 、  $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c}\}$ および  $\{\Delta \varepsilon_{n+1}^{p}\}$ が未知量  $\{\sigma_{n+1}\}$ などの関数であるため Newton-Raphson 法による反復手順を用いて解く。これは全長解析と同様の反復法であり、ペレットクラック、クリープおよび塑性の扱いは**3**. **2**節の全長の力学解析と同様である。

第 n+1 ステージ(タイムステップ)の計算において、第 i 回目の反復を終了し、第 i+1 回目の反復 を行っているとき、(3.5.8)式は次のように書ける。

$$\left[ C_{n+\theta} \right] \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} + \left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} - \left[ B \right] \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{crk} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{p} \right\} = 0$$
 (3.5.9)

$$\left\{ d\sigma_{n+1}^{i+1} \right\} = \left\{ \sigma_{n+1}^{i+1} \right\} - \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\}$$
(3.5.10)

$$\left\{\Delta u_{n+1}^{i+1}\right\} = \left\{u_{n+1}^{i+1}\right\} - \left\{u_{n}\right\}$$
(3.5.11)

である。

また、このとき(3.5.2)式の平衡条件は(3.5.10)式を(3.5.2)式に代入して次のようになる。

$$\int [B]^{T} \{\sigma_{n+1}^{i}\} dV + \int [B]^{T} \{d\sigma_{n+1}^{i+1}\} dV = \{F_{n+1}\}$$
(3.5.12)

## 3.5.3 剛性方程式

剛性方程式の定式化方法は、着目セグメントに対する局所力学解析においても全長力学解析に おいても同様であるので、全長力学解析で得られた(3.3.42)式を平衡条件式(3.5.12)式に代入し、第 *i*+1回目の反復時における平衡条件を得る。

[注] (3.5.12)式に代入する(3.3.42)式中における(3.3.43)~(3.3.46)式の導出にあたっては、剪 断成分を考慮しているので、(3.2.39)式で示した降伏関数 h (=相当応力 $\overline{\sigma}$ )は次のように修正 されて本来の形で与えられる。3.2.6 項参照。 h =  $\begin{bmatrix} 3 & (u(z-z)^2 + E(z-z)^2 + C(z-z)^2 + 2Nz^2) + 2v(z+z+z)^2 \frac{1}{2} \end{bmatrix}$ 

$$h = \overline{\sigma} = \left[\frac{3}{2(F+G+H)}\left\{H\left(\sigma_r - \sigma_z\right)^2 + F\left(\sigma_z - \sigma_\theta\right)^2 + G\left(\sigma_\theta - \sigma_r\right)^2 + 2N\tau_{rz}^2\right\} + 3\alpha\left(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta\right)^2\right]^2$$

すなわち、

$$\begin{split} \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} dV + \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \left\{ \Delta u_{n+1}^{i+1} \right\} dV \\ &- \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widetilde{C}_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} \left( \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right) dV \\ &- \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \end{bmatrix} \left( \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \right) dV \\ &+ \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \left( \left\{ S_{n+\theta}^{i} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_{1} \right\} - \left\{ Z_{2} \right\} \right) dV = \left\{ F_{n+1} \right\} \end{split}$$
(3.5.13)

ここで

$$\begin{bmatrix} \widetilde{C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_r} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{1}{E} & 0\\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E_z} & -\frac{\nu}{E} & 0\\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E_{\theta}} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{4(1+\nu)}{E_r+E_z} \end{bmatrix}$$
(3.5.14)

である。

(3.5.13)式を整理して次のように書く。

$$\left[K_{n+\theta}^{i}\right]\left\{\Delta u_{n+1}^{i+1}\right\} = \left\{\Delta \hat{F}_{n+1}^{i}\right\}$$
(3.5.15)

この式が要素の剛性方程式である。

ここで、

$$\begin{bmatrix} K_{n+\theta}^i \end{bmatrix} = \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} dV$$
(3.5.16)

$$\begin{split} \left\{ \Delta \widehat{F}_{n+1}^{i} \right\} &= \left\{ F_{n+1} \right\} - \int \left[ B \right]^{T} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} dV \\ &+ \int \left[ B \right]^{T} \left[ \widehat{D}_{n+\theta}^{P,i} \right] \left\{ \widetilde{C}_{n+\theta}^{i} \right\} \left\{ \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} dV \\ &- \int \left[ B \right]^{T} \left\{ \left\{ S_{n+\theta}^{i} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_{1} \right\} - \left\{ Z_{2} \right\} \right\} dV \end{split}$$
(3.5.17)

であり、それぞれ剛性マトリクス、荷重ベクトルである。

変形の軸対称性を仮定し、(3.5.16)式および(3.5.17)式についてそれぞれ円周方向 座標の積分を 実行すれば、

$$\begin{bmatrix} K_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} = 2\pi \iiint [B]^{T} [\hat{D}_{n+\theta}^{P,i}] [B] r dr dz \qquad (3.5.18)$$

$$\{\Delta \hat{F}_{n+1}^{i}\} = \begin{bmatrix} \{F_{n+1}\} - 2\pi \iiint [B]^{T} \{\sigma_{n+1}^{i}\} r dr dz \end{bmatrix}$$

$$+ 2\pi \iint [B]^{T} [\hat{D}_{n+\theta}^{P,i}] \{ [\tilde{C}_{n+\theta}^{i}] (\{\sigma_{n+1}^{i}\} - \{\sigma_{n}\}) + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{0}\} + \{\Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i}\} \} r dr dz \qquad (3.5.19)$$

$$- 2\pi \iint [B]^{T} (\{S_{n+\theta}^{i}\} \Delta T_{n+1} - \{Z_{1}\} - \{Z_{2}\}) r dr dz$$

となる。

(3.5.19)式の右辺において、第1項は非平衡残差、第2項は応力および初期ひずみなどによるみかけの荷重項であり、第3項は降伏応力変化の補正項である。

次に、1つの要素に対する剛性方程式を具体的に示す。

要素内の任意の点の半径方向、軸方向の変位  $\{u,v\}$ 、および 8 個の節点における変位  $\{u',v',u^2,v^2...,u^8,v^8\}$ は

$$\begin{cases}
 u \\
 v
 \end{pmatrix} = [N] \begin{cases}
 u^{1} \\
 v^{1} \\
 u^{2} \\
 v^{2} \\
 \vdots \\
 u^{8} \\
 v^{8}
 \end{cases}$$
(3.5.20)

によって関係づけられる。ここで、[N]は形状関数と呼ばれ

$$\begin{bmatrix} N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N_1 I, N_2 I, N_3 I, \dots, N_8 I \end{bmatrix}$$
  
= 
$$\begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & \dots & N_8 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & \dots & 0 & N_8 \end{bmatrix}$$
(3.5.21)

の形を持つマトリクスである。ここで I は単位行列  $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$  である。

すなわち、

$$u = N_1 u_1 + N_2 u_2 + N_3 u_3 + \dots + N_8 u_8,$$
  
$$v = N_1 v_1 + N_2 v_2 + N_3 v_3 + \dots + N_8 v_8$$

である。

後述の図 3.5.7 に示す、各要素における局所座標を用いれば 
$$N_i$$
 は次のように表される。  

$$N_1 = (1 - \xi)(1 - \eta)(-\xi - \eta - 1)/4$$

$$N_2 = (1 + \xi)(1 - \eta)(+\xi - \eta - 1)/4$$

$$N_3 = (1 + \xi)(1 + \eta)(+\xi + \eta - 1)/4$$

$$N_4 = (1 - \xi)(1 + \eta)(-\xi + \eta - 1)/4$$

$$N_5 = (1 + \xi)(1 - \xi)(1 - \eta)/2$$

$$N_6 = (1 + \xi)(1 - \eta)(1 - \eta)/2$$

$$N_7 = (1 + \xi)(1 - \xi)(1 + \eta)(1 - \eta)/2$$

$$N_8 = (1 - \xi)(1 + \eta)(1 - \eta)/2$$
(3.5.22)

要素内のひずみは、軸対称問題では、次のように与えられる。(全長力学解析 と異なり、剪断 成分を含んでいる)

$$\{\varepsilon\} = \begin{cases} \varepsilon_r \\ \varepsilon_z \\ \varepsilon_{\theta} \\ \varepsilon_{rz} \end{cases} = \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial r} \\ \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{u}{r} \\ \frac{\partial u}{\partial z + \frac{\partial v}{\partial r}} \end{cases} = \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \begin{cases} u \\ v \end{cases}$$
(3.5.23)

したがって、[B]マトリクスは次のようになる。

$$\begin{bmatrix} B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \mathbf{B}_3, \cdots, \mathbf{B}_8 \end{bmatrix}$$
(3.5.24)

ここではサブマトリクス B<sub>i</sub>は、

$$\mathbf{B}_{i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_{i}}{\partial r} & 0\\ 0 & \frac{\partial N_{i}}{\partial z}\\ \frac{N_{i}}{\partial z} & \frac{\partial N_{i}}{\partial r} \end{pmatrix}$$
(3.5.25)

で表される。

ところで、(3.5.22)式において、 $N_i$ は局所座標で定義されている。そこで(3.5.23)、(3.2.24)式の[B] マトリクスを具体的に書き下すために以下のように座標変換を行う。

局所座標と円柱座標r,zの関係は次式で与えられる。

$$\begin{bmatrix}
\frac{\partial N_{i}}{\partial \xi} \\
\frac{\partial N_{i}}{\partial \eta}
\end{bmatrix} = 
\begin{bmatrix}
\frac{\partial r}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\
\frac{\partial r}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta}
\end{bmatrix} 
\begin{bmatrix}
\frac{\partial N_{i}}{\partial r} \\
\frac{\partial N_{i}}{\partial z}
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
\mathbf{J}
\end{bmatrix} 
\begin{bmatrix}
\frac{\partial N_{i}}{\partial r} \\
\frac{\partial N_{i}}{\partial z}
\end{bmatrix}$$
(3.5.26)

あるいは、

$$\begin{cases}
\frac{\partial N_i}{\partial r} \\
\frac{\partial N_i}{\partial z}
\end{cases} = \left[\mathbf{J}\right]^{-1} \begin{cases}
\frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\
\frac{\partial N_i}{\partial \eta}
\end{cases}$$
(3.5.27)

ここで、[**J**]はヤコビアンマトリクスである。要素内の位置(**r**, **z**)を節点座標( $r_i$ ,  $z_i$ ,  $i=1\sim 8$ )を用いて表すと、

$$r = \sum_{i=1}^{8} N_i r_i$$
$$z = \sum_{i=1}^{8} N_i z_i$$

と表される。この関係を用いれば、ヤコビアン[J]は次のように書ける。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} r_i & \sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} z_i \\ \sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \eta} r_i & \sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \eta} z_i \end{pmatrix}$$
(3.5.28)

したがって $[J]^{-1}$ は、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J} \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{\det[\mathbf{J}]} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \eta} z_i & -\sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} z_i \\ -\sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \eta} r_i & \sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} r_i \end{pmatrix}$$
(3.5.29)

ここで、

$$\det[\mathbf{J}] = \left(\sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} r_i\right) \left(\sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \eta} z_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \eta} r_i\right) \left(\sum_{i=1}^{8} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} z_i\right)$$
(3.5.30)

である。

以上の関係を用いて、(3.5.25)式に示した成分を局所座標に変換すると、

$$\frac{\partial N_{i}}{\partial r} = \frac{1}{\det[\mathbf{J}]} \left( \left( \sum_{j=1}^{8} \frac{\partial N_{j}}{\partial \eta} z_{j} \right) \frac{\partial N_{i}}{\partial \xi} - \left( \sum_{j=1}^{8} \frac{\partial N_{j}}{\partial \xi} z_{j} \right) \frac{\partial N_{i}}{\partial \eta} \right) \\
\frac{\partial N_{i}}{\partial z} = \frac{1}{\det[\mathbf{J}]} \left( \left( \sum_{j=1}^{8} \frac{\partial N_{j}}{\partial \xi} r_{j} \right) \frac{\partial N_{i}}{\partial \eta} - \left( \sum_{j=1}^{8} \frac{\partial N_{j}}{\partial \eta} r_{j} \right) \frac{\partial N_{i}}{\partial \xi} \right) \\
\frac{N_{i}}{r} = \frac{N_{i}}{\sum_{j=1}^{8} N_{i} r_{i}}$$
(3.5.31)

を得る。

drdz は次式により変換される。

$$drdz = \det[J]d\xi d\eta \tag{3.5.32}$$

以上の変換式を用いれば、(3.5.18)式および(3.5.19)式は局所座標で次のように表される。

$$\begin{bmatrix} K_{n+\theta}^{i} \end{bmatrix} = 2\pi \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} \left( \sum_{j=1}^{8} N_{j} r_{j} \right) \det \begin{bmatrix} \mathbf{J} \end{bmatrix} d\xi d\eta$$
(3.5.33)

$$\left\{ \Delta \hat{F}_{n+1}^{i} \right\} = \left\{ F_{n+1} \right\} - 2\pi \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} \left[ B \right]^{T} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} \left\{ \sum_{j=1}^{8} N_{j} r_{j} \right\} \det[\mathbf{J}] d\xi d\eta$$

$$- 2\pi \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} \left[ B \right]^{T} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{P,i} \right] \left\{ \overline{C}_{n+\theta}^{i} \right\} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c,i} \right\} \left\{ \sum_{j=1}^{8} N_{j} r_{j} \right\} \det[\mathbf{J}] d\xi d\eta$$

$$- 2\pi \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} \left[ B \right]^{T} \left\{ \left\{ S_{n+\theta}^{i} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_{1} \right\} - \left\{ Z_{2} \right\} \left( \sum_{j=1}^{8} N_{j} r_{j} \right) \det[\mathbf{J}] d\xi d\eta$$

$$(3.5.34)$$

コード中では、この積分はガウスの求積法を用いて次式のように近似して計算する。

$$\int_{1}^{1} \int_{-1}^{1} f(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} H_{i} H_{j} f(\xi_{i}, \eta_{j})$$
(3.5.35)

である。四角形 8 節点要素では、積分点数は n = m = 2 とすれば十分であることが知られている。 このとき  $H_i = H_j = 1$  であるので、本コードには次の近似公式が適用される。

$$\int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} f(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} f(\xi_i, \eta_j)$$
(3.5.36)

ここで、

$$n: \xi 方向積分点数、 m: \eta 方向積分点数 $\xi_i: \xi 方向積分点座標、 \eta_j: \eta 方向積分点座標$   
 $H_i, H_j: 重み係数$$$



図 3.5.7 四角形 8 節点要素の積分点

積分点は4点であり、それぞれの座標は図3.5.7に示す通り、(a, a)、(a, a)、(-a, a)、(-a, -a)であり、a=0.5773502691である\*。

(\*注:ガウスの2点近似の積分公式 =  $\int_{-1}^{1} f(x) dx \cong (f(a) + f(-a))$ )

4 個の積分点についてそれぞれ応力ベクトル、ひずみベクトル、補正項などを計算すれば、 (3.5.33)および(3.5.34)式中の積分項が求められる。

(3.5.15)式からここまでの説明は、一個の要素についての説明である。全体マトリクスの構成要素としての境界条件や PCMI 接触条件の扱い方や剛性マトリクスの形は全長力学とまったく同様なので説明を省く。

## 3.5.4 境界条件

#### (1) 局所力学解析の境界条件 -1-

局所力学解析における有限要素モデルは、図 3.5.4 に例示したように、1/2 ペレット長を対象としている。PCMI 状態との関連において、境界条件を説明する。

図 3.5.8 はこの体系における境界面を定義したものである。この体系はペレット側に 4 つ((1) ~(4))、被覆管側に 4 つ((5)~(8))計 8 つの境界をもつ。これらの境界では、変形の対称性、冷却 水圧力、ガス圧力や接触モードなどに対応した境界条件が与えられる。



また、境界条件におけるペレットの被覆管の自由度の設定を図 3.5.9 に示す。この図を出発点 として、ペレットと被覆管の接触状態に依存した境界条件が以下のように設定される。



図 3.5.9 局所力学解析における境界条件

## ①ペレットと被覆管が接触しない状態

図 3.5.10 の A に示すように、

A) 着目セグメント中のペレットの上端面(の一部)は、上部ペレットの下端面(の一部) と接触する。

- B)着目セグメントのペレットの中心は、z方向の1次元の変位自由度のみを与えられる。ペレットの中央高さ面(半ペレットの仮想的な底面=対称面)は半径方向の1次元の変位自由度のみを与えられる。ただし中心軸は固定である。
- C)着目セグメントの被覆管の上端面は半径方向1次元の変位自由度を与えられると同時に、 被覆管の軸力と相互作用しつつ、かつ平面を保ちつつ、z方向に変位することが可能である。 被覆管の中央高さ面(半ペレットに対応する仮想的な底面=上下対称面)は、半径方向1次 元の変位自由度のみを与えられる。



図 3.5.10 境界条件; A: ペレットと被覆管の接触がない場合。 B: ペレットと被覆管の接触がある場合。

## ②ペレットと被覆管が接触した状態

図 3.5.10 の B に示すように、

- A) 着目セグメント中のペレットの上端面(の一部)は、上部ペレットの下端面(の一部) と接触する。
- B)着目セグメントのペレットの中心は、z方向の1次元の変位自由度のみを与えられる。ペレットの中央高さ面(半ペレットの仮想的な底面=上下対称面)は半径方向の1次元の変位自由度のみを与えられる。ただし中心軸は固定である。
- C)着目セグメントの被覆管の上端面は半径方向1次元の変位自由度を与えられると同時に、 被覆管の軸力と相互作用しつつ、かつ平面を保ちつつ、z方向に変位することが可能であ る。ただし同時に、ペレット中心の高さと同じ高さを常に保持しなければならない。

被覆管の中央高さ面(半ペレットに対応する仮想的な底面=上下対称面)は、半径方向1次元

の変位自由度のみを与えられる。

#### (2) 境界における荷重ベクトルと変位

(3.5.2)式における荷重ベクトルは図 3.5.8 に示した 8 つの境界上にある節点に作用する荷重の総和として次のように表される。

$$\left\{ F_{n+1} \right\} = \left\{ F_{n+1}^{(1)} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(2)} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(3)} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(4)} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(5)} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(6)} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(7)} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(8)} \right\}$$
(3.5.37)

ここで $\{F_{n+1}^{(i)}\}$ 、は境界(i)の節点に作用する荷重ベクトルである。

図 3.5.8 における境界(1)および(5)においては、変形の面対称性を仮定し、これら境界上の節点 は軸方向に変位しない、すなわち、

$$\Delta v^{(1)} \bigg\} = 0 \tag{3.5.38}$$

$$\Delta \nu^{(5)} \bigg\} = 0 \tag{3.5.39}$$

とする。ここで、 $\{\Delta v^{(1)}\}$ 、 $\{\Delta v^{(5)}\}$ はそれぞれ境界(1)および(2)の節点の軸方向変位増分ベクトルである。(3.5.38)式の拘束条件により境界(1)に発生する拘束力が $\{F_{n+1}^{(1)}\}$ であり、(3.5.39)式の条件により境界(5)に生じる拘束力が $\{F_{n+1}^{(5)}\}$ である。

燃料棒の中心軸である境界(2)においては計算モデルにおいて変形の軸対称性が仮定されるの で、中実ペレットの場合は、境界上の節点は径方向には変位しない、すなわち、

$$\left\{\Delta u^{(2)}\right\} = 0\tag{3.5.40}$$

とする。ここで、 $\left\{\Delta u^{(2)}\right\}$ は境界(2)上の節点の径方向変位増分ベクトルである。

(3.5.40)式の条件により境界(2)に発生する拘束力が $\left\{F_{n+1}^{(2)}\right\}$ である。ただし、中空ペレットの場合には中空壁の半径方向変位が拘束されないので、 $\left\{F_{n+1}^{(2)}\right\} = 0$ である。

境界(7)には冷却水圧力による表面力が作用する。 $\left\{F_{n+1}^{(7)}\right\}$ は、この作用による等価節点荷重ベクトルである。

境界(3)には境界(6)との相互作用(PCMI)による接触力の作用がある。また境界(3)には燃料棒 内ギャップとプレナム空間のガス圧の作用もあるが、ペレット内部の割れのすきまに存在するガ ス圧と打ち消し合うので、これは考えない。 $\left\{F_{n+1}^{(3)}\right\}$ は被覆管(境界(6))との相互作用による接触 カベクトルである。

境界(6)には PCMI による接触力と燃料棒内ガス圧の作用を考える。 $\{F_{n+1}^{(6)}\}$ は接触力ベクトルとガス圧による等価節点荷重ベクトルの和として表される。

境界(8)では、上側にある被覆管との変形の対称性を仮定して、境界上にある節点 をまとめて 同じ軸方向自由度として扱う。すなわち、

$$\left\{\Delta v^{(8)}\right\} = \Delta \overline{v}^{(8)} \tag{3.5.41}$$

ここで、Δν<sup>(8)</sup>は境界(8)上の節点の軸方向変位増分である。境界(8)には上式の条件により発生す る拘束力の他に、燃料棒上方の PCMI に起因する軸方向引張荷重、内部ガス圧や冷却水圧力によ る軸方向荷重の作用が考慮される。境界(8)に作用させる燃料棒上方の PCMI に起因する軸方向荷 重は経験的に定められるものとする。これの取扱いについては「ロッキング」として 3.5.6 項で述 べる。

境界(4)では、この経験的に定められる軸方向荷重を圧縮側に作用させる。この軸方向荷重下に おける面対称を仮定したペレット/ペレット接触問題を解くことにより求められる接触力分布 が、境界に作用する荷重である。

以上に述べたように、8 つの境界に作用する荷重の種類には、変位の拘束による反力、冷却水 圧力による等価節点力、内部ガス圧による等価節点力、ペレット/被覆管接触力、軸方向引張荷 重、およびこれに釣合うペレット/ペレット接触力がある。荷重の種類を明らかにするために、 それぞれ、R、W、G、PC、AX、および PP の添字を付して、(3.5.36)式を次のように書く。

$$\left\{ F_{n+1} \right\} = \left\{ F_{n+1}^{(1),R} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(2),R} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(3),PC} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(4),PP} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(5),R} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(6),PC} \right\}$$

$$+ \left\{ F_{n+1}^{(6),G} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(7),W} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(8),R} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(8),AX} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(8),W} \right\} + \left\{ F_{n+1}^{(8),G} \right\}$$

$$(3.5.42)$$

これを力の扱い方により3種に分けて、

$$\left\{F_{n+1}\right\} = \left\{F_{n+1}'\right\} + \left\{F_{n+1}''\right\} + \left\{F_{n+1}'''\right\}$$
(3.5.43)

と書く。

ここで、

$$\left\{F_{n+1}'\right\} = \left\{F_{n+1}^{(6),G}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(7),W}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(8),W}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(8),G}\right\}$$
(3.5.44)

$$\left\{F_{n+1}^{\prime\prime}\right\} = \left\{F_{n+1}^{(1),R}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(2),R}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(5),R}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(8),R}\right\}$$
(3.5.45)

$$\left\{F_{n+1}^{\prime\prime\prime}\right\} = \left\{F_{n+1}^{(3),PC}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(4),PP}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(6),PC}\right\} + \left\{F_{n+1}^{(8),AX}\right\}$$
(3.5.46)

である。

 $\left\{F'_{n+1}\right\}$ は時刻  $t_{n+1}$ における値が既知として取扱われ、 $\left\{F''_{n+1}\right\}$ は既知の境界条件(指定変位)に

よる拘束力である。 $\{F_{n+1}^{\prime\prime\prime}\}$ は未知量に依存する境界条件によって定まるものであり、これを求めるには、ペレット/被覆管およびペレット/ペレット間の相互作用を解く必要がある。

# (3) (3.5.46)式における { F'''\_n } の求め方

Newton-Raphson 法の繰り返しが終了した状態では(3.5.15), (3.5.16)および(3.5.17)式から繰り 返しの添字 *i* を省略して、次のように表す。ただし、 は繰り返し計算内部の暫定値であること を示す。

$$\left[K_{n+\theta}\right]\left\{\Delta u_{n+1}\right\} = \left\{\Delta \hat{F}_{n+1}\right\}$$
(3.5.47)

$$\begin{bmatrix} K_{n+\theta} \end{bmatrix} = \int \begin{bmatrix} B \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \hat{D}_{n+\theta}^P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \end{bmatrix} dV$$
(3.5.48)

$$\begin{split} \left\{ \Delta \hat{F}_{n+1} \right\} &= \left\{ F_{n+1} \right\} - \int \left[ B \right]^{T} \left\{ \sigma_{n+1} \right\} dV \\ &+ \int \left[ B \right]^{T} \left[ \hat{D}_{n+\theta}^{P} \right] \left\{ \widetilde{C}_{n+\theta} \right\} \left\{ \sigma_{n+1}^{i} \right\} - \left\{ \sigma_{n} \right\} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{0} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^{c} \right\} dV \\ &- \int \left[ B \right]^{T} \left\{ \left\{ S_{n+\theta} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_{1} \right\} - \left\{ Z_{2} \right\} \right\} dV \end{split}$$
(3.5.49)

ここで、(3.5.49)式の右辺に(3.5.43)式を代入すると荷重項は次のように書ける。  

$$\left\{ \Delta \hat{F}_{n+1} \right\} = \left\{ F'_{n+1} \right\} + \left\{ F''_{n+1} \right\} - \int [B]^T \left\{ \sigma_{n+1} \right\} dV \\
+ \int [B]^T [\hat{D}_{n+\theta}^P] \left\{ [\tilde{C}_{n+\theta}] (\left\{ \sigma_{n+1}^i \right\} - \left\{ \sigma_n \right\}) + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^0 \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon_{n+1}^c \right\} \right\} dV \\
- \int [B]^T \left( \left\{ S_{n+\theta} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_1 \right\} - \left\{ Z_2 \right\} \right) dV \\
= \left\{ \Delta \hat{F}'_{n+1} \right\} + \left\{ F'''_{n+1} \right\}$$
(3.5.50)

ただし、

$$\left\{ \Delta \hat{F}'_{n+1} \right\} = \left\{ F'_{n+1} \right\} + \left\{ F''_{n+1} \right\} - \int \left[ B \right]^T \left\{ \sigma_{n+1} \right\} dV - \int \left[ B \right]^T \left[ \hat{D}^P_{n+\theta} \right] \left\{ \left[ \widetilde{C}_{n+\theta} \right] \left( \left\{ \sigma^i_{n+1} \right\} - \left\{ \sigma_n \right\} \right) + \left\{ \Delta \varepsilon^0_{n+1} \right\} + \left\{ \Delta \varepsilon^c_{n+1} \right\} \right\} dV$$

$$- \int \left[ B \right]^T \left( \left\{ S_{n+\theta} \right\} \Delta T_{n+1} - \left\{ Z_1 \right\} - \left\{ Z_2 \right\} \right) dV$$

$$(3.5.51)$$

である。また、 $\left\{\Delta \hat{F}'_{n+1}
ight\}$ は、非接触状態の節点荷重増分ベクトルである。

(3.5.47)式に(3.5.50)式を代入すると、

$$\left[K_{n+\theta}\right] \left\{ \Delta u_{n+1} \right\} = \left\{ \Delta \hat{F}'_{n+1} \right\} + \left\{ F''_{n+1} \right\}$$
(3.5.52)

となる。(3.5.52)式の右辺の $\left\{\Delta \hat{F}'_{n+1}
ight\}$ は、接触荷重が発生していないときの荷重ベクトルであり、

 $\{F_{n+1}^{\prime\prime\prime}\}$ は接触荷重ベクトルである。(3.5.52)式は、接触荷重とそれ以外の荷重ベクトルの表記を分離して表示し、剛性方程式上の荷重ベクトルの取り扱いの明確化を図ったものである。

## 3.5.5 ペレット・被覆管機械的相互作用と接触問題

本コードの局所解析では、ペレットー被覆管の接触し合う2つの面を7~11個の節点対(Contact node couple)で表現し、力学的接触問題を取扱う。図3.5.11に、軸方向の要素数が3個の場合の接 点対の様子を示す。接触状態としては、非接触、固着およびすべりの3種を考える。全長解析で 扱った「ボンディング状態」は扱わないが、固着状態で代表させることが可能である。ペレット と被覆管はそれぞれ熱膨張率が異なり、図3.5.9 で示した境界条件のように、非接触状態でも接 触状態(PCMI)状態でも、図3.5.4 に示した「半径方向で(ギャップを挟んで)向かい合った要素 の境界の軸方向高さ」はペレットと被覆管とではわずかに差が生じている。しかし、FEM では PCMI のように力を及ぼし合う場合は必ず要素の節点を通じて力が伝達されるので、このわずか な差を無視して、力が伝達される要素節点を対にして、PCMI を計算する。これは一種の近似計 算である。



図 3.5.11 ペレットー被覆管節点対

接触状態の変化を考慮した力学計算の順序を以下に示す。

- ・ 接触し合う可能性のある各々の節点対について、(最初は前タイムステップの結果に基づいて)接触状態(接触ないしは非接触)を仮定する。
- ② 仮定された(接触・非接触の)状態に対応する境界条件を使って剛性方程式を解く。
- ③ その解として求められた各々の節点変位、接触力から、各節点対の状態に関して①の仮 定が正しいか否かを判断する。仮定した状態と計算された解が矛盾する節点対が1つでも

あれば①に戻り、その節点対について接触・非接触の状態仮定を修正して②→③に進む。

④ このようにして、仮定と計算結果に矛盾がなくなるまで①→③のプロセスを繰り返す。
 ここで、タイムステップの途中で非接触・接触(固着またはすべり)の状態変化が生じた
 場合には、タイムステップの開始時と終了時のそれぞれの計算結果を内挿してその状態変化の時刻を求め、その時刻以後について①に戻り、計算を継続する。

この過程の計算方法を次に示す。

(1) ペレットと被覆管の間に接触を生じていない場合

(3.5.42)式において、 $\left\{F_{n+1}^{(3),PC}\right\}$ および $\left\{F_{n+1}^{(6),PC}\right\}$ は0である。このとき後述するように $\left\{F_{n+1}^{(4),PP}\right\}$ および $\left\{F_{n+1}^{(8),AX}\right\}$ も0とするので、 $\left\{F_{n+1}^{'''}\right\}$ =0である。したがって、(3.5.52)式より、

$$\left[K_{n+\theta}\right]\left\{\Delta u_{n+1}\right\} = \left\{\Delta \hat{F}'_{n+1}\right\}$$
(3.5.53)

となる。

## (2)1組の節点対がすべり状態にあり、他のすべての組が非接触状態であるとき

この場合、 $\left\{F_{n+1}^{(3),PC}\right\}$ および $\left\{F_{n+1}^{(6),PC}\right\}$ は次のように書ける。

$$\left\{ F_{n+1}^{(3),PC} \right\} = \begin{cases} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ U_{n+1} \\ V_{n+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{cases}$$

$$\left\{ F_{n+1}^{(6),PC} \right\} = \begin{cases} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -U_{n+1} \\ -V_{n+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{cases}$$

$$(3.5.54)$$

$$(3.5.55)$$

ここで、

$$V_{n+1} = \pm \mu U_{n+1}$$
 (3.5.56)  
 $V_{n+1}$ :時刻  $t_{n+1}$ における半径方向接触力  
 $U_{n+1}$ :時刻  $t_{n+1}$ における軸方向接触力  
 $\mu$ :ペレット/被覆管摩擦係数

したがって、(3.5.53)式は次のようになる。

ただし、  $\Delta u_{p,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ におけるすべり状態節点対のペレット側節点半径方向変位増分  $\Delta v_{p,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ におけるすべり状態節点対のペレット側節点軸方向変位増分  $\Delta u_{c,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ におけるすべり状態節点対の被覆管側節点半径方向変位増分  $\Delta v_{c,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ におけるすべり状態節点対の被覆管側節点軸方向変位増分

である。上式で接触節点自由度 i, j, k, l 行の一次方程式は、

$$K_{n+\theta}^{(i)} \{ \Delta u_{n+1} \} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{(1)} + U_{n+1}$$
(3.5.58)

$$K_{n+\theta}^{(j)} \{ \Delta u_{n+1} \} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{\prime(j)} \pm \mu U_{n+1}$$
(3.5.59)

$$K_{n+\theta}^{(k)} \{ \Delta u_{n+1} \} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{\prime(k)} - U_{n+1}$$
(3.5.60)

$$K_{n+\theta}^{(l)} \{ \Delta u_{n+1} \} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{\prime(l)} \pm \mu U_{n+1}$$
(3.5.61)

また、m行の一次方程式は

$$-\Delta u_{p,n+1} + \Delta u_{c,n+1} = 0 \tag{3.5.62}$$

である。

#### (3)1組の節点対が固着状態にあり、他のすべての組が非接触状態であるとき

0 0 ÷ ÷ 0 0 -1 0 i  $\Delta u_{n n+1}$  $K_{n+\theta}$ -1 0 j  $\Delta v_{p,n+1}$  $\Delta \hat{F}'_{n+1}$ k 1 0  $\Delta u_{c,n+1}$ (3.5.63)l 0  $\Delta v_{c,n+1}$ 1 0 0 : : 0 0  $U_{n+1}$ 0 0  $m 0 \cdots 0 -1$ 0  $1 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots \quad 0$ 0  $n \setminus 0 \cdots 0$ 0 0 1  $0 \cdots 0 0$ 0  $V_{n+1}$ 0  $^{-1}$ 

この場合の剛性方程式を例示すると次のようになる。

ただし、 $\Delta u_{p,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ における固着状態節点対のペレット側半径方向変位増分  $\Delta v_{p,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ における固着状態節点対のペレット側軸方向変位増分  $\Delta u_{c,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ における固着状態節点対の被覆管側半径方向変位増分  $\Delta v_{c,n+1}$ : 時刻  $t_{n+1}$ における固着状態節点対の被覆管側軸方向変位増分

である。上式で接触節点自由度 i, j, k, l 行の一次方程式(剛性方程式)は次のようになる。

$$K_{n+\theta}^{(i)} \left\{ \Delta u_{n+1} \right\} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{(1)} + U_{n+1}$$
(3.5.64)

$$K_{n+\theta}^{(j)} \left\{ \Delta u_{n+1} \right\} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{\prime(j)} + V_{n+1}$$
(3.5.65)

$$K_{n+\theta}^{(k)} \left\{ \Delta u_{n+1} \right\} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{\prime(k)} - U_{n+1}$$
(3.5.66)

$$K_{n+\theta}^{(l)} \{ \Delta u_{n+1} \} = \Delta \hat{F}_{n+1}^{\prime(l)} - V_{n+1}$$
(3.5.67)

また、m、n行の一次方程式は

$$-\Delta u_{p,n+1} + \Delta u_{c,n+1} = 0 \tag{3.5.68}$$

$$-\Delta v_{p,n+1} + \Delta v_{c,n+1} = 0 \tag{3.5.69}$$

である。
#### (4) 接触状態判定およびその後の処理

#### 1) 前タイムステップで非接触状態であった場合

変位の重なりがないかをチェックする。すなわち、

$$g_{n+1} = g_n - \Delta u_{p,n+1} + \Delta u_{c,n+1} \tag{3.5.70}$$

ここで、

 $g_{n+1}$ : 時刻におけるギャップ幅

上式において、 $g_{n+1} > 0$ のときは収束、 $g_{n+1} \le 0$ のときは次式により状態変化時刻 $t_{n+\alpha}$ まで時刻を戻す。すなわち、

$$t_{n+\alpha} = \frac{t_{n+1} - t_n}{g_n - g_{n+1}} g_n + t_n \tag{3.5.71}$$

次に、時刻 $t_{n+a}$ から $t_{n+1}$ までの計算は、状態を「固着」に改めて再度行う。

#### 2) 前タイムステップで固着していた場合

接触力ベクトルで状態変化を判定する。すなわち、

$$U_{p,n+1} < 0 \quad \text{interms } |V_{p,n+1}| < \mu |U_{p,n+1}|$$
(3.5.72)

を満足するときは接触状態は収束、

$$U_{p,n+1} < 0 \quad \text{int} \quad |V_{p,n+1}| \ge \mu |U_{p,n+1}|$$
 (3.5.73)

のときは、仮定を「すべり」に改めて再計算する。また、

$$U_{p,n+1} \ge 0 \tag{3.5.74}$$

のときは、固着から非接触への変化であり、次式により状態変化時刻 t<sub>n+a</sub> まで時刻を戻し、

$$t_{n+\alpha} = \frac{t_{n+1} - t_n}{U_{p,n} - U_{p,n+1}} U_{p,n} + t_n$$
(3.5.75)

時刻 $t_{n+\alpha}$ から $t_{n+1}$ までは状態を「非接触」に改めて再計算を行う。

#### 3) 前タイムステップですべり状態であった場合

接触力ベクトルで状態変化を判定する。すなわち、

$$U_{p,n+1} < 0 \quad \text{int} \quad |V_{p,n+1}| \ge \mu |U_{p,n+1}|$$
 (3.5.76)

$$-275-$$

を満足するときは接触状態は収束とする。ただし、

$$U_{p,n+1} < 0 \quad \forall \gamma > |V_{p,n+1}| < \mu |U_{p,n+1}|$$
(3.5.77)

のときは状態を「固着」に改める。

また、次の条件を満たすときにも仮定していた状態を「すべり」から「固着」に改める。

$$U_{p,n+1} < 0 \quad \text{int} \quad \left| v_{p,n+1}^* \right| \le \left| v_{c,n+1}^* \right|$$
(3.5.78)

ここで、

$$v_{p,n+1}^{*}$$
:接触開始以後のペレット側節点軸方向変位 $v_{c,n+1}^{*}$ :接触開始以後の被覆管側節点軸方向変位

一方、次の条件を満たすときは、

$$U_{p,n+1} \ge 0 \tag{3.5.79}$$

「すべり」から「非接触」への変化であり、(3.5.75)式により状態変化時刻 $t_{n+\alpha}$ まで時刻を戻して 変数の値を $t_{n+\alpha}$ に内挿し、時刻 $t_{n+\alpha}$ から $t_{n+1}$ までは状態を「非接触」に改めて再計算を行う。

#### (5) 複数の接触節点対を持つ系を取扱う場合

図 3.5.11 に示すような複数の接触節点対を持つ系を取扱う場合、各々の節点対に関して独立に 接触状態の収束を図ろうとすると、全体の系に関して収束を得るまでに数多くの繰り返しが必要 となることが経験された。そこで、次のような付加条件を与えて、通常の場合3回以内の反復で 全体の系に関する収束を得られるようにした。

- 1) 接触状態にある節点対については、まず全て「固着」と仮定して解いてみる。
- 2) この中で、 $|V_{p,n+1}| \ge \mu |U_{p,n+1}|$ の条件を満足する節点があった場合、この節点対およびこれ より上方の位置にある節点対について、仮定を「すべり」と改める。
- この時、収束を くするためにすべりの向きを える。すなわち、摩擦力はペレット表面 で全て下向き、被覆管内面で全て上向きとする。ただし、「すべり」と判断された節点対 の「固着」仮定時の接触力の軸方向成分が全て逆向きの場合はすべりの向きを逆転させる。

#### 3.5.6 軸方向荷重 — 上部ペレットとの軸方向相互作用—

着目セグメントは通常複数のペレットを含むが、本2次元解析モデルでは、それらのペレット がどれも同一の力学ふるまい(たとえば PCMI)をすると仮定する。したがってこれは、半ペレ ット長の変形を計算する場合、計算対象のペレット(target pellet; TP)に対する上下のペレットは、 TP とまったく同様な境界条件の下にまったく同様に変形することを意味する。

ここで、TP において被覆管の間のギャップ幅が指定値以下になった場合、TP およびその上部 のペレットと被覆管が固着し、TP の軸方向変位に制限を与える、すなわちロッキングが生じると 仮定する。

ロッキング状態をモデル化するために、TP上端面に分布する有限要素節点のうちで最大の軸方 向座標値を持つ節点iの変位増分と、被覆管の境界面(図 3.5.8 における境界(8))の変位増分とを 等しく設定することにより、ペレットと被覆管に軸方向荷重を発生させる。これをロッキング条 件と呼ぶ。

TP 上端面とその上部ペレット下端面との、相互の接触状態の判定およびその後の処理手順は次の通りである。

TP 端面上の他の節点 *j* の軸方向座標が節点 *i* の軸方向座標を越えた場合、節点 *j* の軸方向変位 増分も節点 *i* と同様に、境界(8)の軸方向変位増分に等しくする。すなわち、ロッキング条件を設 定する。この場合、次式により状態変化時刻 *t<sub>n+a</sub>* まで時刻を戻す。

$$t_{n+\alpha} = \frac{\overline{Z}_{i,n} - Z_{j,n}}{Z_{j,n+1} - Z_{j,n} - (\overline{Z}_{i,n+1} - \overline{Z}_{i,n})} (t_{n+1} - t_n) + t_n$$
(3.5.80)

ここで

 $\overline{Z}_{i,n}$ ,  $\overline{Z}_{n+1}$ :時刻 $t_n$ および $t_{n+1}$ におけるロッキング状態の節点 i の軸方向座標  $Z_{j,n}$ ,  $Z_{j,n+1}$ :時刻 $t_n$ および $t_{n+1}$ における節点 j の軸方向座標

である。

時刻 *t*<sub>n+α</sub> から *t*<sub>n+1</sub> までは、節点 *j* の軸方向自由度を節点 i の軸方向自由度と共通の自由度として、 被覆管上端面(境界(8))の軸方向自由度と共通の自由度で扱い、改めて計算する。

この方法により一般にはロッキング状態は、図 3.5.8 において境界(4)上で軸方向荷重を支える TP ペレット節点 (これらはまとめて軸方向自由度 1 として扱われる)と境界(8)上での被覆管 節点 (同様に軸方向自由度 1)の軸方向変位増分を等しくする(共通の自由度として扱う)境 界条件を設定することにより実現する。

ところで、ペレット端面が接触状態にある節点の時刻  $t_{n+1}$  における軸方向接触力は(3.5.2)式に より求められる。すなわち、

$$\{F_{n+1}\} = \int [B]^T \{\sigma_{n+1}\} dV$$
 (3.5.2)

$$-277-$$

において、境界(4)に作用する荷重は軸方向接触力 $\left\{F_{n+1}^{(4),PP}
ight\}$ のみであるから、

$$\left\{F_{n+1}^{(4),PP}\right\} = \left\{F_{n+1}\right\} = \int \left[B\right]^T \left\{\sigma_{n+1}\right\} dV$$
 (3.5.81)

である。

上式で求められるある節点の軸方向接触力を $V_{n+1}$ と書く。 $V_{n+1} < 0$ (圧縮力)であれば、この 節点におけるロッキング状態が持続される。 $V_{n+1} \ge 0$ (ゼロ値あるいは引張り力)の場合には、 ロッキング状態が解除されたと判定して、次式により時刻を $t_{n+\alpha}$ まで戻して解除時刻を求める。

$$t_{n+\alpha} = \frac{V_n}{V_n - V_{n+1}} (t_{n+1} - t_n) + t_n$$
(3.5.82)

時刻 $t_{n+a}$ から $t_{n+1}$ までは、この節点の軸方向自由度を共通自由度より除外して計算する。

なお、TPの端面上の全ての点での V が正になるとロッキング状態は解除される。

ロッキング条件が解除された後再度ロッキングが生じる場合、すなわち2回目以降のロッキン グ条件の設定は、前回のロッキング条件が解除されたときの軸方向座標値に、TP 端面上のいずれ かの節点の軸方向座標値が再び至った場合に、その節点に対して行われる。

なお、ロッキング条件設定時に被覆管上端面(8)にかかる荷重 $\{F^{(8)}\}$ は

$$\{F^{(8)}\} = \{F^{(8),R}\} + \{F^{(8),AX}\} + \{F^{(8),W}\} + \{F^{(8),G}\}$$
(3.5.83)  

$$\{F^{(8)}\} : 境界(8)にかかる軸方向荷重$$
  

$$\{F^{(8),R}\} : 境界(8)で軸方向1自由度としたことによる節点力$$
  

$$\{F^{(8),AX}\} : 境界(8)でのロッキング条件による軸方向引張荷重$$
  

$$\{F^{(8),W}\} : 冷却水圧力による軸方向荷重$$
  

$$\{F^{(8),G}\} : プレナムガス圧による軸方向荷重$$

である。

#### 調整パラメータ GAPLK

接触を経験していない接触節点対のロッキング状態を与える片側ギャップ幅を GAPLK により調整する。標準値は 3µm である。

# 3.6 クリープおよび応力-歪みに関する機械的性質モデル

ここでは力学解析における被覆管のクリープ、塑性、およびペレットクラックの仮定とモデル を説明する。

### 3.6.1 クリープ

#### (1) ペレット

ペレットのクリープひずみ速度式は、入力 name-list parameter IPCRP で複数のモデルから選択可 能である。ただし、IPCR=1,2 については、クリープひずみ速度で用いる温度の上限値を Name-list Input Parameter TCS(指定温度)で与えることができる。したがって、上限温度 TCS 以上の領域 ではペレット温度は TCS に等しくおかれる。標準値は 1273.15K。詳細は第4章を参照。

#### (2) ジルコニウム合金被覆管

FEMAXI コードで数値計算する場合のクリープ関数  $f = \hat{\varepsilon}^c$ は、時間を陽に含まない。したがって、文献に記載されているクリープ式を用いる場合は、変形して $\hat{\varepsilon}^c$ の表式より時間 tを消去して用いる。クリープ歪み速度式は、入力オプションで複数のモデルから選択が可能である。詳細は第4章を参照。

#### (3) SUS 合金被覆管クリープモデル

SUS 被覆管のクリープデータから、クリープ歪みの中性子束および時間依存性を近似的に抽出 してクリープ式を構成した。この場合、ジルコニウム系被覆管のクリープ式とは若干異なる扱い をするので、それを以下に説明する。

#### ① SUS304 クリープ式<sup>(3.3)</sup>

FEMAXIにおける SUS304の照射クリープ式は(3.6.1)式で与えられる。

(3.6.1)式の照射クリープ式は、Black burn 型のクリープ式である。Black burn 型のクリープ式は、

ー次クリープひずみ
$$\varepsilon^{p} = f(\sigma, T) (1 - \exp(-r(\sigma, T) t))$$
と二次クリープひずみ $\varepsilon^{s} = \dot{\varepsilon}_{s}^{c} t$ の和で  
与えられ、一般的に(3.6.2)式で記述される。

$$\varepsilon^{c} = f(\sigma, T) \left( 1 - \exp(-r(\sigma, T)t) \right) + \dot{\varepsilon}_{s}^{c} t$$
(3.6.2)

この式を歪硬化則で表示するには下のような工夫がいる。(3.6.2)式を微分して、

$$\dot{\varepsilon}^{c} = f(\sigma, T) \cdot r(\sigma, T) \exp(-r(\sigma, T)t) + \dot{\varepsilon}^{c}_{s}$$
(3.6.3)

を得る。式(3.6.2)と(3.6.3)からtの消去は式としてできない。そこで、「クリープ硬化は一次クリー プ量のみで定まる。」と仮定すると、

$$\varepsilon^{H} = f(\sigma, T) \left( 1 - \exp(-r(\sigma, T)t) \right)$$
(3.6.4)

とおいて、これを(3.6.3)式に代入すると、

$$\dot{\varepsilon}^{c} = r(\sigma, T) \left( f(\sigma, T) - \varepsilon^{H} \right) + \dot{\varepsilon}_{s}^{c}$$

$$\dot{\varepsilon}^{H} = r(\sigma, T) \left( f(\sigma, T) - \varepsilon^{H} \right)$$

$$(3.6.5)$$

を得る。 ち、クリープ歪 $\varepsilon^{c}$ と硬化歪 $\varepsilon^{H}$ に関する連立微分方程式となる。

これが Black burn 型のクリープ式の一般的な解法である。この方法を(3.6.1)式について適用する と、(3.6.3)式と(3.6.1)式を比較して、

$$f(\sigma, T) = C_1 \overline{E} \varphi \overline{\sigma} \tag{3.6.6}$$

$$r(\sigma, T) = \overline{E}\varphi/C_2 \tag{3.6.7}$$

$$\dot{\varepsilon}_s^c = C_3 \overline{E} \varphi \overline{\sigma} \tag{3.6.8}$$

となる。

したがって、 $\dot{\overline{\varepsilon}}^{c}$ (=*FFUNC*)は、(3.6.5)式より、

$$\dot{\overline{\varepsilon}}^{c} = \overline{E}\varphi / C_2 \left( C_1 \overline{E}\varphi \overline{\sigma} - \varepsilon^H \right) + C_3 \overline{E}\varphi \overline{\sigma}$$
(3.6.9)

$$\frac{\partial \bar{\varepsilon}^{c}}{\partial \bar{\sigma}} (=FS) \text{ it, } (3.6.9) \text{ :ts} \bar{\sigma}^{c} \tilde{\sigma} \text{ :th} \oplus \text{ :ts} (3.6.9) \text{ :ts} \bar{\sigma}^{c} \tilde{\sigma}^{c} \text{ :ts} (3.6.10)$$

$$\frac{\partial \bar{\varepsilon}^{c}}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}} (=FH) \text{ :ts, } (3.6.9) \text{ :ts} \tilde{\varepsilon}^{H} \tilde{\sigma} \text{ :ts} (5.6.10)$$

$$\frac{\partial \bar{\varepsilon}^{c}}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}} (=FH) \text{ :ts, } (3.6.9) \text{ :ts} \tilde{\varepsilon}^{c} \text{ :ts} (5.6.10)$$

$$\frac{\partial \bar{\varepsilon}^{c}}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}} = -\bar{E}\varphi/C_{2}$$
(3.6.11)

である。

また、 $\dot{\overline{\varepsilon}}^{H}$ (=*GFUNC*)は、(3.6.5)式より、

$$\dot{\overline{\varepsilon}}^{H} = \overline{E}\varphi / C_2 \left( C_1 \overline{E}\varphi \overline{\sigma} - \varepsilon^H \right)$$
(3.6.12)

$$\begin{split} \partial \bar{\varepsilon}^{H} / \partial \bar{\sigma} (=GS) \, \mathrm{k}, & (3.6.12) \mathrm{式} \varepsilon \, \overline{\sigma} \, \overline{c} \, \mathrm{微} \, \mathrm{\beta} \, \mathrm{L} \, \mathrm{\zeta}, \\ \partial \bar{\varepsilon}^{H} / \partial \bar{\sigma} &= \overline{E} \varphi / C_2 \cdot C_1 \overline{E} \varphi \\ \partial \bar{\varepsilon}^{H} / \partial \bar{\varepsilon}^{-H} (=GH) \, \mathrm{k}, & (3.6.12) \mathrm{式} \varepsilon \, \varepsilon^{-H} \, \overline{c} \, \mathrm{\&} \, \mathrm{\Im} \, \mathrm{L} \, \mathrm{\zeta}, \\ \partial \bar{\varepsilon}^{H} / \partial \bar{\varepsilon}^{-H} &= -\overline{E} \varphi / C_2 \end{split}$$
(3.6.14)

となる。

(3.6.9)式~(3.6.14)式より、

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}^{c} &(= FFUNC), \qquad \partial \dot{\overline{\varepsilon}}^{c} /_{\partial \sigma} (= FS), \\ \partial \dot{\overline{\varepsilon}}^{c} /_{\partial \overline{\varepsilon}^{H}} (= FH), \qquad \dot{\overline{\varepsilon}}^{H} (= GFUNC), \\ \partial \dot{\overline{\varepsilon}}^{H} /_{\partial \overline{\sigma}} (= GS), \qquad \partial \dot{\overline{\varepsilon}}^{H} /_{\partial \overline{\varepsilon}^{H}} (= GH) \end{aligned}$$

が得られたので、次式より、クリープひずみ増分を得ることができる。すなわち、クリープひず み増分は、

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c,i+1}\right\} = \Delta t_{n+1}\left\{\dot{\varepsilon}_{n+\theta}^{c,i+1}\right\} = \left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c,i}\right\} + \left[C_{n+\theta}^{c,i}\right]\left\{d\sigma_{n+1}^{i+1}\right\}$$
(3.6.15)

ここで、

$$\left\{\Delta\varepsilon_{n+1}^{c,i}\right\} = \frac{3}{2\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}} f_{n+\theta}^{i} \Delta t_{n+1} \left\{\sigma_{n+\theta}^{\prime i}\right\} + F_{3} \theta \Delta t_{n+1} \left\{\sigma_{n+1}^{\prime i}\right\}$$
(3.6.16)

$$\left[C_{n+\theta}^{c,i}\right] = \theta \Delta t_{n+1} \left(F_1 \left[\sigma_i' \sigma_j\right]_{n+\theta}^i + F_2 \left[\frac{\partial \sigma'}{\partial \sigma}_{n+\theta}^i\right]\right)$$
(3.6.17)

また F<sub>1</sub>, F<sub>2</sub>, F<sub>3</sub>は、

$$F_{1} = \frac{9}{4\left(\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}\right)^{2}} \left( \left(\frac{\partial f}{\partial \overline{\sigma}}\right)_{n+\theta}^{i} - \frac{f_{n+\theta}^{i}}{\overline{\sigma}_{n+\theta}^{i}} + \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial \overline{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i} \theta \Delta t_{n+1} \left(\frac{\partial g}{\partial \overline{\sigma}}\right)_{n+\theta}^{i}}{1 - \theta \Delta t_{n+1} \left(\frac{\partial g}{\partial \overline{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i}} \right)$$
(3.6.18)

$$F_2 = \frac{3f_{n+\theta}^i}{2\overline{\sigma}_{n+\theta}^i} \tag{3.6.19}$$

$$F_{3} = \frac{3}{2\bar{\sigma}_{n+\theta}^{i}} \frac{\left(\frac{\partial}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i} \left(\Delta t_{n+1}g_{n+\theta}^{i} - \Delta \bar{\varepsilon}_{n+1}^{H,i}\right)}{1 - \theta \Delta t_{n+1} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{\varepsilon}^{H}}\right)_{n+\theta}^{i}}$$
(3.6.20)

である。(3.6.15)式~(3.6.20)式において、

$$f(=FFUNC), \quad \frac{\partial f}{\partial \overline{\sigma}}(=FS), \\ \frac{\partial f}{\partial \overline{\varepsilon}^{H}}(=FH), \quad g(=GFUNC), \end{cases}$$

-281-

$$\frac{\partial g}{\partial \overline{\sigma}} (= GS), \quad \frac{\partial g}{\partial \overline{\varepsilon}^{H}} (= GH)$$

であるので、 $\left\{\Delta \mathcal{E}_{n+1}^{c,i}
ight\}$ および $\left[C_{n+ heta}^{c,i}
ight]$ を求めることができる。

(SUS304 式のコーディング例)

SUBROUTINE CCPEQ7 (FFUNC ,F1 ,F2 ,F3 ,GFUNC ,GS ,GH ,EPSH ,DEPSH ,TEMP ,FAI ,FAIT ,SIGE ,CRFAC ,THETC ,DTIME (FFUNC ,F1 1 2 3 ,IFLG ) ,NST C-----С MATETRIAL : SUS304 С SIGE=STRESS(N/m2) C----IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z) COMMON/TCCR/ TCCS DATA EBAR/1.0/ ,C1/1.7D-23/ ,C2/5.5D15/ ,C3/2.7D-26/ С IF(TEMP.GT.TCCS) TEMP = TCCS С SIGPSI = SIGE\*1.450389D-4FFUNC=(EBAR\*FAI/C2\*(C1\*EBAR\*FAI\*SIGPSI-EPSH) 1 +C3\*EBAR\*FAI\*SIGPSI) \*CRFAC IF(IFLG.EQ.3) RETURN С = (EBAR\*FAI/C2\*C1\*EBAR\*FAI+C3\*EBAR\*FAI)\*1.450389D-4\*CRFAC FS = -EBAR\*FAI/C2\*CRFAC FH GFUNC = EBAR\*FAI/C2\*(C1\*EBAR\*FAI\*SIGPSI-EPSH)\*CRFAC GS = EBAR\*FAI/C2\*C1\*EBAR\*FAI\*1.450389D-4\*CRFAC = -EBAR\*FAI/C2\*CRFAC GH IF(IFLG.EQ.2) RETURN С F1=9./(4.\*SIGE\*\*2) 1 \*(FS-FFUNC/SIGE+FH\*THETC\*DTIME\*GS/(1.-THETC\*DTIME\*GH)) F2=1.5\*FFUNC/SIGE F3=1.5\*FH/SIGE\*(GFUNC\*DTIME-DEPSH)/(1.-THETC\*DTIME\*GH) С RETURN END

# 【コーディング上の注意事項】

- ① (3.6.16)および(3.6.18)~(3.6.20)式で示すように、各式は相当応力( $\bar{\sigma}$ )で割っているので、 $\bar{\sigma} = 0$ の場合は、0割が発生する。そこで、 $\bar{\sigma} \neq 0$ の指定がいる。 $\bar{\sigma} > 0$ であるので、コーディング例では、 $\bar{\sigma} < 1$ (MPa)の場合は、 $\bar{\sigma} = 1$ (MPa)とした。
- ② (3.6.9)式及び(3.6.12)式の定式化において、 $\dot{\epsilon}^c$ 、 $\dot{\epsilon}^H$ の単位は 1/s である。FEMAXI では、 $\dot{\epsilon}^c$ 、  $\dot{\epsilon}^H$ の単位は 1/hr で与えることになっているので、3600 倍 (d(hr)/d(s)) する必要がある。 $\partial \dot{\epsilon}^c / \partial \sigma$ 、

$$\partial \overline{\varepsilon}^{c} / \partial \overline{\varepsilon}^{H}, \quad \partial \overline{\varepsilon}^{H} / \partial \sigma, \quad \partial \overline{\varepsilon}^{H} / \partial \overline{\varepsilon}^{H}$$
 についても同様である。

③ (3.6.11)式及び(3.6.13)式の定式化において、 $\partial \bar{\varepsilon}^{c} / \partial \sigma$ 、 $\partial \bar{\varepsilon}^{H} / \partial \sigma$ の単位は 1/(s・MPa)である。 FEMAXIでは、 $\bar{\varepsilon}^{c}$ 、 $\bar{\varepsilon}^{H}$ の単位は 1/(hr・Pa)として与えることになっているので、 3.6×10<sup>-3</sup>  $\left(=3.6\times10^{3} \left(\frac{d(hr)}{d(s)}\right)\times10^{-6} \left(\frac{d(Pa)}{d(MPa)}\right)\right)$ 倍する必要がある。

### 3.6.2 被覆管の応力歪み関係式のモデル

(1) FEMAXI-III モデル<sup>(1.2)</sup>

基本のオプションである(ICPLAS=1: Default)を説明する。

 $\sigma = K\varepsilon^n$ 

 $\sigma$ :真応力 (kg/mm<sup>2</sup>)、 $\varepsilon$ :真ひずみ、 n:歪硬化指数

ここで

$$K_{0.2\%} = \sigma_y + 33.44 (1 - \exp(-B\Phi))^{\frac{1}{2}} (kg / mm^2)$$
(3.6.21)  

$$B = 2.92 \times 10^{-21} \exp(-1.6 \times 10^{-14} \phi)$$
  

$$\Phi : 高速中性子 fluence (n/cm^2) E > 1 MeV$$
  

$$\phi : 高速中性子 \pi (n/cm^2 \cdot s) E > 1 MeV$$
  

$$\sigma_y = \begin{subarray}{l} \sigma_y = \begin{subarray}{l} \phi(kg/mm^2) \\ = 21.60 - 0.0213 \cdot T (再燒結材) \\ = 31.32 - 0.0213 \cdot T (応力除去材) \\ n = 0.0504 + 0.0001435 \cdot T \\ T : 温度 (\begin{subarray}{l} T \\ T : 温度 (\begin{subarray}{l} \infty \\ 0 \end{bmatrix} 220 \le T \le 450 \begin{subarray}{l} \infty \\ 0 \end{bmatrix}$$

1

(2) MATPRO-11 モデル<sup>(3.4)</sup> ICPLAS=2 は MATPRO-11 の original model、ICPLAS=3 は MATPRO-11 の modified model を指定する。ただし、ICPLAS=3 における修正点は、高燃焼度にお ける降伏応力レベル(図 3.6.1)を現実のデータに基づいて低下させた(図 3.6.2)ことである。 MATPRO-11 の original model は低燃焼度領域のデータによって経験式を構成しているので、高燃 焼度領域になると被覆管の降伏応力が不自然なほど著しく高い値を予測する。これを回避する修



正をしたオプションが ICPLAS=3 である。詳細はそれぞれ、第4章を参照のこと。

図 3.6.1 ジルカロイの応力歪み曲線における MATPRO-11 モデルと、FEMAXI モデルの比較



図 3.6.2 修正 MATPRO モデル。降伏応力レベルを実測データに基づいて 修正したもの。

#### 3.6.3 太田モデル<sup>(3.5)</sup>

これは照射済みの被覆管の最近の単軸引張データを用いて、応力歪み曲線及び関連するパラメ ータ値を導出したモデルである。式の基本的な形は MATPRO-11 model と同一であるが、高燃焼 度の被覆管の実験データを用いたこと、弾性域から塑性域へスムーズに移行する部分が追加され ていることが特徴である。

本モデルでは、応力と歪みが比例する弾性 変形の範囲と、指数則 $\sigma = K\varepsilon^n$ が成り立つと する塑性変形の範囲の間に、弾性変形と塑性 変形が同時に起こる「中間領域」を考えてい る。

このとき、弾性域と中間領域の連結点、な らびに中間領域と塑性域の連結点を右図の ように $(\varepsilon_1, \sigma_1)$ 、 $(\varepsilon_2, \sigma_2)$ と表すことにする。 ここで、図の縦軸は真応力、横軸は真歪みで ある。



図 3.6.3 弾性変形、中間領域及び塑性変形の 連結点ならびに MATPRO モデルの降伏点

#### (1) 応力と歪みの関係式

弾性域;  

$$\sigma = E\varepsilon$$
 (3.6.22)  
 $E : ヤング率$   
中間領域;  
 $\sigma = ax^3 + bx^2 + Ex + \sigma_1$  (3.6.23)  
ただし、 $x = \varepsilon - \varepsilon_1$   
係数*a*, *b* については後述  
塑性域;  
 $\sigma = K\varepsilon^n \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{10^{-3}}\right)^m$  (3.6.24)  
 $K : 強度係数$   
 $n : 歪み硬化指数$   
 $\dot{\varepsilon} : 真歪み速度. もし $\dot{\varepsilon} < 10^{-5}/s$  ならば $\dot{\varepsilon} = 10^{-5}/s$ .  
 $m : 盃み速度感度係数$   
以下では、 $K \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{10^{-3}}\right)^m$  をまとめて  $K'$ と表記する。$ 

MATPRO-11 のモデルでは (3.6.23)式の部分がない。本モデルでは(3.6.22)式と(3.6.24)式の交点

 $(\varepsilon_{v},\sigma_{v})$  、ただし

$$\varepsilon_{y} = \left(\frac{K'}{E}\right)^{\frac{1}{1-n}}, \quad \sigma_{y} = E\varepsilon_{y}$$
 (3.6.25)

に対して、 $\varepsilon \leq \varepsilon_v$ のときは(3.6.22)式を、 $\varepsilon > \varepsilon_v$ のときは(3.6.24)式を用いる。

中間領域を導入した本モデルでは中間領域の範囲を定義する必要があり、軸方向引張り試験を 整理して $\varepsilon_y - \varepsilon_1$ 、 $\varepsilon_2 - \varepsilon_y$ の代表的な値を求め、それぞれ 0.2%、0.3%という結果を得た。 ただし、 $\varepsilon_y$ が 0.2%より小さい場合に $\varepsilon_1$ が負の値になることを避けるため、本モデルでは以下を 採用する。また、 $\varepsilon_y - \varepsilon_1$ が小さいときに  $\varepsilon_2 - \varepsilon_y \ge \varepsilon_y - \varepsilon_1$ の大きさがバランスするよう $\varepsilon_2$ にも 制限を設ける。

$$\varepsilon_{1} = \max(\varepsilon_{y} - 0.002, \varepsilon_{y} \times 0.5)$$

$$\varepsilon_{2} = \min(\varepsilon_{y} + 0.003, \varepsilon_{y} \times 1.75)$$

$$(3.6.26)$$

中間領域に関しては、 $\varepsilon = \varepsilon_1$ 及び $\varepsilon = \varepsilon_2$ において "応力 $\sigma$ " と " $\varepsilon$ に対する1 階微分  $\frac{d\sigma}{d\varepsilon}$ " が連続となるスプライン関数として、以下のようにして三次式を求める。

まず、 $\sigma = ax^3 + bx^2 + cx + d$  (ここで $x = \varepsilon - \varepsilon_1$ ) として、 $\varepsilon = \varepsilon_1$  (x = 0)で $\sigma \ge \frac{d\sigma}{d\varepsilon}$ が連続という条件より、

$$\sigma = d = \sigma_1 \tag{3.6.27}$$

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = c = E \tag{3.6.28}$$

ここで、 $\sigma_1 = E\varepsilon_1$ である。

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = 3a\delta^2 + 2b\delta + E$$

$$= nK' \cdot \varepsilon_2^{n-1}$$
(3.6.30)

ここで、 $\sigma_2 = K' \varepsilon_2^n$ である。

(3.6.29)と(3.6.30)式を連立して*a*と*b*について解くことにより、(3.6.23)式の係数は以下のとおり求まる。

いま、

$$\sigma_{2} - \sigma_{1} = K'\varepsilon_{2}^{n} - E\varepsilon_{1} = y$$

$$nK'\varepsilon_{2}^{n-1} = F$$

$$(3.6.31)$$

$$-286-$$

と表すことにすると、(3.6.29)と(3.6.30)式より、以下のように a とb が決定される。

$$a = \left\{-2y + (E+F) \cdot \delta\right\} / \delta^{3}$$
  

$$b = \left\{3y - (2E+F)\delta\right\} / \delta^{2}$$
(3.6.32)

以上より、真歪み $\varepsilon$ が与えられたとき、 $\varepsilon \leq \varepsilon_1$ 、 $\varepsilon_1 < \varepsilon \leq \varepsilon_2$ 、 $\varepsilon_2 < \varepsilon$ に応じて (3.6.22)~(3.6.24) 式を適用することにより真応力 $\sigma$ が求まる。

逆に、真応力 $\sigma$ が与えられ、真歪み $\varepsilon$ を求める場合には、 $\sigma \leq \sigma_1$ 、 $\sigma_1 < \sigma \leq \sigma_2$ 、 $\sigma_2 < \sigma$ に応じて (3.6.22)~(3.6.24)式を適用することとなるが、応力 $\sigma$ が中間領域 $\sigma_1 < \sigma \leq \sigma_2$ に相当する場合には、(3.6.23)式を数値解法で解いて $\varepsilon$ を求める必要がある。

#### (2) 強度係数 K

### ① 応力除去材被覆管(PWR)の*K* (MPa)

温度 T 及び高速中性子フルエンス Φ (>1.0MeV) に依存するとして以下のとおり与える。

$$T \leq 900 \text{ K} \quad (626.85^{\circ}\text{C}) \\ K = L_1 - L_2(T - 273.15) \\ + \{L_3 - L_4(T - 273.15)\} \cdot \{1 - \exp(-1.751 \times 10^{-25} \Phi)\} \\ L_1 = 1745, \ L_2 = 2.517, \ L_3 = 526, \ L_4 = 0.748 \\ K : \text{MPa}, \quad \text{T: Kelvin}, \quad \Phi : \text{neutrons/m}^2 \ (>1\text{MeV}) \end{cases}$$
(3.6.33)

900 < T < 1000 K (626.85 ~ 726.85 °C)  

$$K = A_{1} + T \{A_{2} + T(A_{3} + TA_{4}\} + [B_{1} + T\{B_{2} + T(B_{3} + TB_{4})\}] \times \{1 - \exp(-1.751 \cdot 10^{-25} \Phi)\}^{0.5}$$
(3.6.34)  

$$A_{1} = 3.041233371 \times 10^{4}, \qquad B_{1} = 3.3282432 \times 10^{2}$$

$$A_{2} = -8.285933869 \times 10^{1}, \qquad B_{2} = 2.98027653$$

$$A_{3} = 7.490958541 \times 10^{-2}, \qquad B_{3} = -6.81286681 \times 10^{-3}$$

$$A_{4} = -2.242589096 \times 10^{-5}, \qquad B_{4} = 3.51229783 \times 10^{-6}$$

1000 K 
$$\leq$$
 T (726.85°C~) K = H<sub>1</sub> exp(H<sub>2</sub> + H<sub>3</sub> / T)  $\cdot \left[1 + H_4 \left\{1 - \exp(-1.751 \cdot 10^{-25} \Phi)\right\}\right]^{0.5}$   
H<sub>1</sub> = 1  $\cdot 10^{-6}$ , H<sub>2</sub> = 8.775, H<sub>3</sub> = 8663, H<sub>4</sub> = 0.341566 (3.6.35)

【注1】MATPRO-11では、強度係数Kは未照射材、冷間加工ゼロに対する値としてモデル化され

ている。照射と冷間加工の影響は*DK*という係数で考慮されており、両者の合計*K*+*DK*が (3.6.24)式中の*K*に相当する。これに対して、本モデルの強度係数*K*は照射と冷間加工の影響を含 んだものである。特に、冷間加工の影響に関して、フルエンスがゼロのときには応力除去材被覆 管の製造時の条件(8~10%の加工量)に対応した*K*値を与える。さらに、フルエンスが増加する と、照射による硬化とともに冷間加工の影響が失われる効果が、フルエンス依存項に含められて いる。

ここで、モデル化においては

・1000K 以上の *K* 値は MATPRO の高温域(900K 以上)と同一とした。ただし(3.6.33)式との連続 性を考え、900K におけるフルエンス依存と同じ割合で、照射とともに *K* 値が増大するとした。 ・900~1000 K は、両端の温度で、*K* 値とその温度微分  $\frac{dK}{dT}$  が連続となるよう係数を決定した。こ れは MATPRO-11 の 730~900K をつないでいる方法と同じである。

#### ② 再結晶材被覆管(BWR)の K

温度 T 及び高速中性子フルエンス Ф (>1.0MeV)に依存するとして以下のとおり与える。

- T≤700 K (426.85°C)  $K = L_1 - L_2(t - 273.15) + \{L_3 - L_4(T - 273.15)\} \times \{1 - \exp(-9.699 \cdot 10^{-26} \Phi)\}^{0.5}$ (3.6.36)
- 700 < T \le 800 K (426.85 \sim 526.85 \circ)  $K = A_1 + T \left\{ A_2 + T(A_3 + TA_4) \right\} + \left[ A_5 + T \left\{ A_6 - T(A_3 + TA_4) \right\} \right] \times \left\{ 1 - \exp(-9.699 \cdot 10^{-26} \Phi) \right\}^{0.5}$ (3.6.37)

$A_{01} =$	$3.656432405 \times 10^4$ ,	$A_{02} =$	$-1.361626514 \times 10^{2}$
$A_{03} =$	$1.695545314 \times 10^{-1}$ ,	$A_{04} =$	$-7.055897451 \times 10^{-5}$
$A_{05} =$	$-3.338799880 \times 10^{4}$ ,	$A_{06} =$	$1.330276514 \times 10^{2}$

800 < T < 950 K (526.85~676.85°C)

未照射燃料に対して、

$$K_{non-irradiated} = H_1 \exp(H_2 + H_3 / T)$$

$$H_1 = 1 \cdot 10^{-6}, \ H_2 = 4.772, \ H_3 = 9740$$
(3.6.38)

高速中性子フルエンス φt の照射を受けた燃料に対しては、

$$K = K_{non-irradiated} + \left[B + T\left\{B_2 + T(B_3 + TB_4\right\} - K_{non-irradiated}\right] \times \left\{1 - \exp(-9.699 \cdot 10^{-26} \Phi)\right\}^{0.5}$$
(3.6.39)

$$B_{01} = -3.617377246 \times 10^4$$
,  $B_{02} = 1.361156965 \times 10^2$   
 $B_{03} = -1.636731582 \times 10^{-1}$ ,  $B_{04} = 6.386789409 \times 10^{-5}$ 

950K≤T (676.85°C~)

$$K = H_1 \exp(H_2 + H_3 / T) \times \left[ 1 + H_4 \left\{ 1 - \exp(-9.699 \cdot 10^{-26} \Phi) \right\} \right]^{0.5}$$
(3.6.40)  
$$H_1 = 1 \cdot 10^{-6}, \ H_2 = 4.772, \ H_3 = 9740, \ H_4 = 52.67783$$

【注 2】*K* 値の温度依存性に関し、低温では「温度の 1 次式」、最も高い温度範囲で「exp(Q/T)に比例する(Q:定数、T:温度)」とし、その間を温度の 3 次式でつないでいる。これは前 の SR 材と同じである。ただし、未照射の場合、RX 材は SR 材に比べ*K* 値が小さく、1 次式から外挿す ると 400~500℃で *K*=0 となる。このため、SR 材の式と比べて低めの温度で exp(Q/T)につないで いる。上で、未照射材では(3.6.37)式のところが 3 次式による ぎ目。一方、照射による増分の項 は(3.6.39)式のところが ぎ目である。

高温で K 値が exp(Q/T)に比例するとしている部分については、1 次式から外挿がつながるよう に Q を調整した。

#### (3) 歪み硬化指数 n

温度 T のみに依存するとして以下の式で計算する。照射による変化はないとしている。

 $T \le 673.15 \text{ K}$  (400°C)

$$n = C_1 - C_2(T - 273.15) \tag{3.6.41}$$

673.15<T<1000 K (400~726.85°C)

$$n = C_3 + T(C_4 + C_5 T) \tag{3.6.42}$$

 $C_1 = 0.213$ ,  $C_2 = 1.808 \times 10^{-4}$ ,  $C_3 = 3.4708518 \times 10^{-2}$ ,  $C_4 = 4.9565251 \times 10^{-4}$ ,  $C_5 = -5.0245302 \times 10^{-7}$ 

 $1000 \text{ K} \leq \text{T}$  (726.85°C~)

$$n = C_6 = 0.027908 \tag{3.6.43}$$

【注3】

・1000K 以上の n 値は MATPRO の高温域(850K 以上)と同一とした。

・中間の温度範囲 673.15~1000 K は、両端の温度で n 値が連続、かつ 673.15K で温度微分 dn/dT が 連続となるよう係数を決定した。この幅が狭いと、温度の変化に対する n 値の変化が急 となっ て降伏応力 vs. 温度のグラフに不自然な凹 が生じるため、n 値が一定となる温度を MATPRO よ り高温側にシフトしている。

#### (4) 歪み速度感度係数 m

MATPROから変更なし。温度Tのみに依存するとして以下の式で計算する。照射による変化はないとする。

$$T \le 730 \text{ K} \quad (456.85^{\circ}\text{C}) \qquad m = 0.02 \tag{3.6.44}$$

730<T<900 K (456.85 $\sim$ 626.85 $^{\circ}$ C)

$$m = A_5 + T \left\{ A_6 + T \left( A_7 + A_8 T \right) \right\}$$
(3.6.45)

900 K  $\leq T$  (626.85°C~)

$$m = A_9 + A_{10}T m = -6.47 \times 10^{-2} + 2.203 \times 10^{-4}T$$
(3.6.46)

$$A_5 =$$
 $2.063172161 \times 10^1$ 
 $A_6 =$ 
 $-7.704552983 \times 10^{-2}$ 
 $A_7 =$ 
 $9.504843067 \times 10^{-5}$ 
 $A_8 =$ 
 $-3.860960716 \times 10^{-8}$ 
 $A_9 =$ 
 $-0.67 \times 10^{-2}$ 
 $A_{10} =$ 
 $-2.203 \times 10^{-4}$ 

Name-list Input Parameter ICPLAS 被覆	<b></b> 覺管応力歪み(塑性)式のオプション。	,
ICPLAS=1: FEMAXI-III モデル(Default),	=2: MATPRO-11 モデル,	
=3: 修正 MATPRO-11 モデル,	=4: 太田モデル, =41:SUS304	

# 3.7 事故時燃料解析コード RANNS との接続

FEMAXIコードは、Re-start 機能を用いることにより、計算結果を外部ファイル\*.ft11 に書き出 すことができる。この\*.ft11 には FEMAXI での計算結果のほとんどの物理量が含まれており、事 故時燃料ふるまい解析コード RANNS<sup>(3.6)-(3.8)</sup>はそれを読み込んで、計算する燃料の初期条件とする ことができる。もちろん RANNS は\*.ft11 無しで、独自に初期条件を設定して計算を行うことも可 能である。詳細は RANNS のモデル説明書およびマニュアル(JAEA-Data/Code 2011-XXX として発 刊予定)を参照されたい。

# 3.8 疲労解析機能

#### 3.8.1 疲労解析概要

運転時に過渡的な出力変動が繰り返し生じると、被覆管にはサイクル状の応力・歪みが発生し、 材料の疲労の観点からの検討が必要になる。

材料の個別の疲労試験では、基本的に正 波状の交番応力を加えて破壊に至るまでの回数を求 める。  $\sigma_{max}$  を最大応力、  $\sigma_{min}$  を最小応力とするとき、  $\sigma_{R} = \sigma_{max} - \sigma_{min}$  を応力振幅、  $\sigma_{m} = 0.5(\sigma_{max} + \sigma_{min})$ を平均応力という。応力振幅を変えて多数の実験を行うことにより、応力 振幅と振動回数の関係を示す疲労曲線 (S-N 曲線)が得られる。振幅が大きいほど破損までの振 動回数は少ない。すなわち、被覆管の寿命は短い。疲労破壊では、まず材料表面にクラックが発 生し、クラックは応力サイクルとともに内部に進展し、最後に破断に至る。

#### 3.8.2 ジルカロイ疲労曲線

O'Donnell および Langer は、未照射および照射ジルカロイの試験によって疲労曲線を得た<sup>(3.9)</sup>。 試験は、室温(未照射材のみ)および 316℃ において、軸方向荷重および曲げ荷重について行われた。 材料は、通常材のほか、溶接材も含まれている。集合組織の効果についても考慮されており、圧

方向に平行および、直角方向について試験されている。照射の効果は高ひずみ側で現れている だけである。他のパラメータの効果はほとんど認められなかった。また、安全審査で用いている 疲労曲線(UO<sub>2</sub>、MOX 共通)を図 3.8.1 に示す。O'Donnell および Langer の疲労曲線より安全側に 設定されている。



図 3.8.1 ジルカロイ疲労曲線

### 3.8.3 疲労評価

FEMAXI-7 は、被覆管に繰り返し応力負荷を与える疲労計算が可能である。FEMAXI-7 による 疲労評価解析の例を以下に示す。解析対象となる燃料棒の線出力履歴例を図 3.8.2 に示す。図 3.8.2 に示す各履歴点( 形のシンボル)において疲労評価を行う。その手順を、あくまで一つの例と して以下に示す。



まず各履歴点まで、出力履歴に沿った通常運転の計算をおこなう。

次に、履歴点において、

(1) 各履歴点における計算

①履歴点出力→ ②0%出力,温態→ ③0%,冷態 →④0%温態 →⑤100%出力 →⑥過渡出力 の計算を実施する。実施するケース数は疲労評価対象とする全履歴点である。

疲労評価における被覆管応力は、起動・停止時においては③と④の応力により評価し、負荷追 従時は④と⑤の応力により評価し、異常な過渡時は④と⑥の応力により評価する。

#### (2) 過渡条件と線出力

①の線出力を P としたとき、⑤の 100%出力は P にオーバーシュート出力を加えて算出する。 また表 3.8.3 に⑥の過渡時での線出力の算出方法を示す。

-292-

#### (3) 疲労係数の算出方法

表 3.8.3 に異常な過渡変化における原子炉トリップを例に疲労係数の算出方法を説明する。 ここでは、

④の0%温態時の被覆管内面応力算出値  $(\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z) = (-8.1, -72.4, -29.4)$  (MPa)、 被覆管外面応力算出値  $(\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z) = (-14.0, -85.1, -48.6)$  (MPa)

であり、

⑥の異常な過渡時の被覆管内面応力算出値  $(\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z) = (-54.9, 273.4, 185.7)$  (MPa)、 被覆管外面応力算出値  $(\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z) = (-27.9, 288.6, 252.3)$  (MPa)

である。

これらの $\sigma_r$ , $\sigma_{\theta}$ , $\sigma_z$ を用いて偏差応力 $\sigma_r - \sigma_{\theta}$ , $\sigma_{\theta} - \sigma_z$ , $\sigma_z - \sigma_r$ を作成する。表 3.8.4-B における 0%(温態)の内面の応力 64.3(MPa)は-8.1-(-72.4)より得られた値であり、1 行目の値はすべて同 様である。2 行目の値は、異常な過渡時についても同様に求めた値である。次に 3 行目の S<sub>max</sub> は 1 行目と 2 行目の大きい方の値であり、4 行目の S<sub>min</sub> は 1 行目と 2 行目の小さい方の値である。

5 行目の  $S_m$ は、 $S_m = \frac{1}{2}(S_{max} - S_{min})$ で得られる値である。6 行目の N は、 容されるくりかえ し回数であり、記載された値は 5 行目の応力振幅 S ( $S_m$ )を用いて図 3 より求めて得られたくり かえし回数 (N)の値である。

表 3.8.3 (図 3.8.2)の例では、サイクル当りの異常な過渡変化における原子炉トリップを 40 回 としたので、7 行目の疲労係数の値は 40/N×100(%)として得られた値である。すなわち、同じ 応力振幅が 40 回発生したときの疲労係数である。このようにして、被覆管内外面の偏差応力

 $(\sigma_r - \sigma_{\theta}, \sigma_{\theta} - \sigma_z, \sigma_z - \sigma_r)$ の各成分についてサイクル毎の疲労係数を算出する。サイクル毎の 疲労係数は、各サイクルで数(または数十)箇所解析して求まった疲労係数のうち最大のものを そのサイクルの累積疲労係数とする。

図 3.8.2 の例では4 サイクル運転であるので、それぞれのサイクルで得られた累積疲労係数の総和が求めるべき累積疲労係数である。表 3.8.4 に累積疲労係数の算出例を示す。

	$\sigma_r$		$\sigma_r = \sigma_ heta$		$\sigma_{_z}$	
	内面	外面	内面	外面	内面	外面
0%	-8.1	-14	-72.4	-85.1	-29.4	-48.6
過渡	-54.9	-27.9	273.4	288.6	185.7	252.3

表 3.8.3 疲労評価例 ( $\sigma$ : MPa)

	累積疲労係数(%)							
	負荷追従		過渡 起動・		停止	合計		
	(内面)	(外面)	(内面)	(外面)	(内面)	(外面)	(内面)	(外面)
	$\sigma_r - \sigma_{\theta}$							
第1サイクル最大値	1.26	2.19	2.02	2.37	0	0	3.29	4.56
第2サイクル最大値	2.12	2.17	3.85	3.46	0	0	5.98	5.62
第3サイクル最大値	3.01	2.79	3.24	2.66	0	0	6.25	5.44
第4サイクル最大値	2.89	2.63	4.67	3.97	0	0	7.56	6.6
	9.28	9.78	13.78	12.46	0	0	23.08	22.22

表 3.8.4 累積疲労係数算出例

上記の場合の累積疲労係数は23.08%である。

# 3.8.4 繰り返し出力過渡解析機能

FEMAXI-7 は、ある特定の照射条件及び燃料仕様条件において、燃料の各照射サイクル開始時 と終了直前時を含む、各サイクル期間中の燃焼度 Bn (GWd/tHM)ごとの複数個(100 点以上)の解析 点に対して繰り返し出力過渡解析を以下のように行う機能を持つ。(オプション FATIG=0:off, =1:on)。Bn は燃焼度間隔であるが、default=2.0 の入力制御パラメータである。

#### (1) 解析例

例として、過渡解析点まで定格運転時の運転履歴にしたがい燃料状態を計算し、その後、次の ステップで0%出力から定格運転の120%出力まで上昇させる解析(局所力学モデルおよび全長力 学モデル)を行う。

①解析出力→② 0%出力温態→③ 0%出力冷態→④ 0%出力温態→⑤ 100%出力→⑥ EXPW(%)
 過出力。ここから、以下の表 3.8.5 にある物理量(被覆管の応力歪みなど)の①から⑥stage までの値を求め、別のファイル(\*\*\*.xls)に燃焼度の関数としてテーブル化して出力する。EXPW は
 過出力レベルであり、default=120.0の入力制御パラメータである。

燃料中心温度 ・燃料中心温度 ・ペレット半径方向温度分布		・ペレット半径方向温度分布
燃料棒内圧	• FGR	・プレナム圧力=内圧
	・ペレットー被覆管接触	触压 · 被覆管相当応力(内外面)
被覆管応力	• 被覆管半径方向応力	(内外面) ・被覆管周方向応力 (内外面)
	・被覆管軸方向応力(P	内外面)
	・被覆管直径変化量	・被覆管半径方向歪(内外面)
被覆官金	・被覆管周方向歪(内タ	外面) · 被覆管軸方向歪(内外面)

表 3.8.5

歪みエネルギー	最大剪断歪みエネルギー
被覆管相当歪み	全長解析: $\varepsilon_e = \frac{2}{3} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \left( \varepsilon_r - \varepsilon_{\theta} \right)^2 + \left( \varepsilon_{\theta} - \varepsilon_z \right)^2 + \left( \varepsilon_z - \varepsilon_r \right)^2 \right] \right\}^{0.5}$
(内外面)	局所解析: $\varepsilon_e = \frac{2}{3} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \left( \varepsilon_r - \varepsilon_{\theta} \right)^2 + \left( \varepsilon_{\theta} - \varepsilon_z \right)^2 + \left( \varepsilon_z - \varepsilon_r \right)^2 \right] + \frac{3}{4} \gamma_{rz}^2 \right\}^{0.5}$

なお、以上の疲労・過渡解析機能の実行方法とファイル内容は入出力マニュアル編で説明する。

# 3.9 Skyline 法

FEM による構造解析は、最終的に(3.4.18)式等あるいは(3.5.47)式に示されるような連立一次方程 式を解く問題に帰着する。接触力の釣り合い条件式を除くと、その連立方程式の次元数は節点自 由度であり、その部分のマトリクスは対称である。(3.4.18)式や(3.4.47)式に示すように、「接触」の 境界条件が付加された場合にのみ、非対称成分が現れる。本コードでは、連立方程式の解法に Skyline 法を採用した。この方法は Gauss の消去法の演算手順を改良して、作業領域及び演算回数 の削減を図ったものである。

解くべき方程式は一般に次のように書ける。

$$\begin{cases} a_{11}^{(0)} x_1 + a_{12}^{(0)} x_2 + \dots + a_{1n}^{(0)} x_n = b_1^{(0)} & (1) \\ a_{21}^{(0)} x_1 + a_{22}^{(0)} x_2 + \dots + a_{2n}^{(0)} x_n = b_2^{(0)} & (2) \\ a_{31}^{(0)} x_1 + a_{32}^{(0)} x_2 + \dots + a_{3n}^{(0)} x_n = b_3^{(0)} & (3) \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}^{(0)} x_1 + a_{n2}^{(0)} x_2 + \dots + a_{nn}^{(0)} x_n = b_n^{(0)} & (n) \end{cases}$$
(3.9.1)

各係数 $a_{ij}$ および既知荷重増分ベクトル $b_i$ の右上の添え字は消去の過程を明確にするために付した。

消去の第1段は、方程式(2),(3),.....(n)のx<sub>1</sub>を含む項、すなわち

$$a_{21}^{(0)}x_1, a_{31}^{(0)}x_1, \dots, a_{n1}^{(0)}x_n$$
 (3.9.2)

を0にすることである。まず、 $a_{21}^{(0)}x_1$ を消去するために $a_{21}^{(0)}/a_{11}^{(0)}$ を乗じて(2)からこれを引けば、

$$\left(a_{22}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{12}^{(0)}\right)x_2 + \dots + \left(a_{2n}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{1n}^{(0)}\right)x_n = \left(b_2^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}b_1^{(0)}\right)$$
(3.9.3)

となる。

次に $a_{31}^{(0)}x_1$ 消去するために(1)式に $a_{31}^{(0)}/a_{11}^{(0)}$ を乗じて(3)から引く。これを繰り返し、 $a_{n1}^{(0)}x_1$ まで すべてを消去すれば結局方程式は次の形になる。

$$\begin{cases} a_{11}^{(0)} x_1 + a_{12}^{(0)} x_2 + \dots + a_{1n}^{(0)} x_n = b_1^{(0)} \qquad (1)' \\ a_{22}^{(1)} x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)} x_n = b_2^{(1)} \qquad (2)' \\ a_{32}^{(1)} x_2 + \dots + a_{3n}^{(1)} x_n = b_3^{(1)} \qquad (3)' \\ \dots \\ a_{n2}^{(1)} x_2 + \dots + a_{nn}^{(1)} x_n = b_n^{(1)} \qquad (n)' \end{cases}$$

$$(3.9.4)$$

ここで

$$\begin{cases} a_{22}^{(1)} = a_{22}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}a_{12}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, \ a_{32}^{(1)} = a_{32}^{(0)} - \frac{a_{31}^{(0)}a_{12}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, \dots \\ b_{2}^{(1)} = b_{2}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}b_{1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, \ b_{3}^{(1)} = b_{3}^{(0)} - \frac{a_{31}^{(0)}b_{1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, \dots \end{cases}$$

である。

次に消去の第2段では(3)', (4)', ……, (n)'のxを含む項 $a_{32}^{(1)}x_2$ , ……, $a_{n2}^{(1)}x_2$ を0にする。このための手順は第1行の(1)'を除いて(2)';…… (n)'を新たに与えられた方程式のように考えれば第1段の消去と全く同様である。

順次に消去を進めると、最終的には左辺が右上三角形をしたつぎの連立方程式に帰着される。

$$\begin{cases} a_{11}^{(0)}x_{1} + a_{12}^{(0)}x_{2} + \dots + a_{1,n-1}^{(0)}x_{n-1} + a_{1n}^{(0)}x_{n} = b_{n}^{(0)} \\ a_{22}^{(1)}x_{2} + \dots + a_{2,n-1}^{(1)}x_{n-1} + a_{2n}^{(1)}x_{n} = b_{2}^{(1)} \\ \dots \\ a_{nn}^{(n-2)}x_{n} + a_{nn}^{(n-2)}x_{n} = b_{n}^{(n-2)} \\ a_{nn}^{(n-1)}x_{n} = b_{n}^{(n-1)} \end{cases}$$
(3.9.5)

ここで各係数は一般的に次のように書ける。

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \bigg\} \stackrel{i = k+1, \dots, N}{j = k, \dots, N}$$
(3.9.6)

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} b_k^{(k-1)}, \quad i = k+1, \dots N$$
(3.9.7)

(3.9.5)式を解くことは容易である。すなわち最後の式からただちに

-296-

$$x_n - \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \tag{3.9.8}$$

が求められる。これを最後から2番目の式に代入して*x<sub>n-1</sub>が求められる。一般に次*式

$$x_{k} = \frac{b_{k}^{(k-1)} - a_{k,k+1}^{(k-1)} x_{k+1} - a_{k,k+2}^{(k-1)} x_{k+2} \cdots}{a_{kk}^{(k-1)}}$$
(3.9.9)

によって順次それまでに得られた解を代入していくことにより x<sub>1</sub>までのすべての値が求められる。 以上をガウスの消去法という。この方法では消去のたびごとに係数の書きかえが必要であるが,

以下の手順(Crout reduction )を用いれば、(3.9.5)式の $a_{ij}^{(k)}$ およひ $b_i^{(k)}$ をこれら初期値 $a_{ij}^{(0)}$ および $b_i^{(0)}$ から直接導くことができる。

いま(3.9.6)および(3.9.7)式は、(3.9.5)式から明らかな*k* = *i*-1の関係を用いて次のように表わされる。

$$a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij}^{(i-2)} - \frac{a_{i,i-1}^{(i-2)}a_{i-1,j}^{(i-2)}}{a_{i-1,i-1}^{(i-2)}}$$

$$b_{i}^{(i-1)} = b_{i}^{(i-2)} - \frac{a_{i,i-1}^{(i-2)}}{a_{i-1,i-1}^{(i-2)}} b_{i-1}^{(i-2)}$$

例えば

$$a_{2j}^{(1)} = a_{2j}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}a_{1j}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$$
$$a_{3j}^{(2)} = a_{3j}^{(1)} - \frac{a_{32}^{(1)}a_{2j}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} = a_{3j}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}a_{1j}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} - \frac{a_{32}^{(1)}a_{2j}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$$
$$= a_{3j}^{(0)} - \sum_{k=1}^{2} \frac{a_{ik}^{(k-1)}a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$$

と書けるので一般的に、

$$a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij}^{(0)} - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$$
(3.9.10)

同様に、

$$b_i^{(i-1)} = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} b_k^{(k-1)}$$
(3.9.11)

となる。これらに $i, j = 2, 3 \cdots n$ を順次代入していくことにより $a_{nn}^{(n-1)}, b_n^{(n-1)}$ までの全ての値が 求められる。

本コードで解くべき連立方程式の係数マトリクスは部分的に非対称の成分を含んでいる。対称 マトリクス部については次式で $a_{ij}^{(i-1)}$ および $b_i^{(i-1)}$ を求める。

$$a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij}^{(0)} - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \begin{cases} j = 2, \dots, m \\ i = 2, \dots, j \end{cases}$$
(3.9.12)

$$b_i^{(i-1)} = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} b_k^{(k-1)} \bigg\} \quad i = 2, \dots \dots m$$
(3.9.13)

ここで、*m*=対称マトリクス部の自由度数 非対称部については次式を用いる。

$$a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij}^{(0)} - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \begin{cases} i > m \ \widetilde{\bigcirc} & j = 2, \dots, n \\ j > m \ \widetilde{\bigcirc} & i = 2, \dots, n \end{cases}$$
(3.9.14)

$$b_i^{(i-1)} = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} b_k^{(k-1)} \bigg\} i = m, \dots n$$
(3.9.15)

ここで、 n=マトリクス全自由度数

本手順においても(3.9.5))式の処理には(3.9.8)および(3.9.9)式と同様の後退代入が行われる。

いま係数マトリクスが模式的に図 3.9.1 のようであるとする。図において実線で固まれる領域の 係数を1次元配列に記憶することを考える。



⊠ 3.9.1 Schematic Coefficient Matrix

第j列において始めて非 成分が現われる行番号を $L_j$ とすると、行j列の係数 $a_{ij}$ は1次元配列

 $\mathcal{O}$ 

$$i - j + \sum_{k=1}^{j} (k + L_k + 1)$$
 (3.9.16)

番目の位置に記憶される。

なぜならk列において記憶されるべき係数の数は $k+L_k+1$ であり、 $a_{jj}$ の記憶先は  $\sum_{k=1}^{j} (k+L_k+1)$ と書けるからである。

このような記憶方式およびこれに伴う連立方程式解法は Skyline 法と呼ばれる。以下にこの記憶 方式を用いたときの解法を示す。

いま(3.9.12)および(3.9.13)式で表わされる手順(Grout Reduction) を*j*列に適用することを考える。  $L_j, L_i$ をそれぞれ*i*列,*j*列で始めて非 係数が現われる行番号と書くと、 $a_{ij}$ は $a_{ik}$ 又は $a_{ki}$ が0な らば修正されないので、これらの式の総和Σはk = 1から始める必要はなく、 $L_j \ge L_i$ の大きな方 からとればよい。また、 $r < L_j$ のとき $a_{rj} = 0$ なので、*j*列の最初の非 係数は修正されないまま 残っている。したがって $i = L_j + 1$ からの評価を行えばよい。この手順(modified Crout reduction)は 次のように表わされる。

$$a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij}^{(0)} - \sum_{k=k_0}^{i-1} \hat{a}_{ki}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}$$

$$(3.9.17)$$

$$\hat{a}_{ki}^{(k-1)} = \frac{a_{ki}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$$

$$j = 2, \dots \dots m$$

$$i = L_j + 1, \dots \dots j - 1$$

$$k_0 = \max(L_i, L_j)$$

および

$$a_{jj}^{(i-1)} = a_{jj}^{(0)} - \sum_{k=L_j}^{j-1} \hat{a}_{kj}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)} \bigg\} j = 2, \dots m$$
(3.9.18)

また、

$$b_{i}^{(i-1)} = b_{i}^{(0)} - \sum_{k=k_{0}}^{j-1} \hat{a}_{ki}^{(k-1)} b_{k}^{(k-1)} \begin{cases} i = L_{b} + 1, \dots, m \\ k_{0} = \max(L_{i}, L_{b}) \end{cases}$$
(3.9.19)

$$L_b = ベクトル\{b\}$$
の最初の非 成分行番号

ここで

$$b_i^{(i-1)} = \frac{b_i^{(0)}}{a_{ii}^{(i-1)}} \bigg\} i = L_b, \dots m$$
(3.9.20)

と置いて記憶する。

後退代入の手順は次のようになる。

$$x_k = b_k^{(k-1)}$$
  $k = 1, \dots, m$  (3.9.21)

$$x_{k} = x_{k} - \hat{a}_{ki}^{(k-1)} x_{i}^{k} \begin{cases} i = m, m - 1 \cdots 2 \\ k = L_{i}, L_{i} + 1 \cdots i - 1 \end{cases}$$
(3.9.22)

ここで、(3.9.17)式が適用されるごとに、上式の $a_{ki}^{(k-1)}$ は $\hat{a}_{ki}^{(k-1)} = a_{ki}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}$ に置換され記憶される。

次に上記の $a_{ij}^{(i-1)}, b_i^{(i-1)}$ の計算において手順繰返し回数の上限を消去される方程式の数にセットすることを考える。この手順(partial reduction)は次のように表わされる。

対称マトリクス部について係数マトリクスは、

$$a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij}^{(0)} - \sum_{k=k_0}^{i-1} \hat{a}_{ki}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}$$
(3.9.23)

ここで、

および

$$a_{jj}^{(i-1)} = a_{jj}^{(0)} - \sum_{k=L_j}^{j-1} \hat{a}_{kj}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)} \bigg\} j = 2, \dots, p$$
(3.9.25)

ここで

$$\hat{a}_{ki}^{(k-1)} = \frac{a_{ki}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \begin{cases} i = 2, \dots, m \\ k = L_j, \dots, \min(p, j) \end{cases}$$
(3.9.26)

j = 2からj = pに対して、(3.9.26)式は(3.9.25)式と同時に評価される。j = p + 1からj = mまでは(3.9.26)式の評価は(3.9.25)式の処理の後に行う。

一方、既知ベクトルは

$$b_i^{(i-1)} = b_i^{(0)} - \sum_{k=k_0}^{i-1} \hat{a}_{ki}^{(k-1)} b_k^{(k-1)}$$
(3.9.27)

ここで、  

$$i = L_b + 1, \dots, p$$
  
 $k_0 = \max(L_i, L_b)$ 

ただし、

$$b_{i}^{(i-1)} = \frac{b_{i}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}} \bigg\} i = L_{b}, \dots p$$
(3.9.28)

と置いておく。

マトリクス非対称部については、

$$a_{ij}^{(i-1)} = a_{ij}^{(0)} - \sum_{k=k_0}^{i-1} \hat{a}_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}$$
(3.9.29)

ここで、

$$\hat{a}_{ki}^{(k-1)} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$$

$$j = m + 1, \dots n \text{ is first if }$$

$$i = L_j + 1, \dots \min(p_n, j)$$

$$i = m + 1, \dots n \text{ is first }$$

$$j = L_i + 1, \dots \min(p_n, j)$$
(3.9.30)

および

$$a_{jj}^{(i-1)} = a_{jj}^{(0)} - \sum_{k=L_j}^{j-1} \hat{a}_{jk}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)} \bigg\} j = p+1, \dots, p_n$$
(3.9.31)

ここで

$$\hat{a}_{ki}^{(k-1)} = \frac{a_{jk}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \begin{cases} j = m+1, \dots, n \\ k = L_j, \dots, \min(p_n, j) \end{cases}$$
(3.9.32)

 $p_n$  = 対称部および非対称部で消去される方程式の全数

また既知ベクトルは、

$$b_i^{(i-1)} = b_i^{(0)} - \sum_{k=k_0}^{i-1} \hat{a}_{ki}^{(k-1)} b_k^{(k-1)} \bigg\} i = p+1, \dots, p_n$$
(3.9.33)

ただし、 
$$b_i^{(i-1)} = \frac{b_i^{(0)}}{a_{ii}^{(i-1)}} \bigg\} i = p+1, \dots, p_n$$
 (3.9.34)

と置いておく。

以上の手順における交代代入は次式で行われる。

$$x_k = b_k^{(k-1)}$$
  $k = 1, \dots, p_n$  (3.9.37)

$$x_{k} = x_{k} - \hat{a}_{ki}^{(k-1)} x_{i} \left\{ \begin{array}{c} i = n, n-1 \cdots 2 \\ k = L_{i} \cdots \min(p_{n}, i-1) \end{array} \right.$$
(3.9.38)

(3.9.23)式から(3.9.38)式までに示される手順が本コードにおける連立方程式のSkyline解法である。

-301-

参考文献 3

- (3.1) Rashid Y.R., Tang H.R. and Johansson E.B., Mathematical Treatment of Hot Pressing of Reactor Fuel, Nucl.Eng.Des.29, p.1-6 (1974).
- (3.2) Pugh, Current Recommended Constitution Equations for Inelastic Analysis of FFTF Components, ORNL-TM-3602 (1972).
- (3.3) 第4章4節 SUS304 ステンレス被覆管物性値 参照
- (3.4) Hagrman D.L. and Reyman G.A., MATPRO-Version11, A Handbook of Materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel rod behavior, NUREG/CR-0497, TREE-1280, Rev.3 (1979).
- (3.5) Ohta A., Development of irradiated cladding stress-strain model for LWR fuel analysis code, Fuel Safety Research Meeting, Tokai, April 20-21, (2006).
- (3.6) Suzuki M., Saitou H. and Fuketa T., Analysis on split failure of cladding of high burnup BWR rods in reactivity- initiated accident conditions by RANNS code, Nucl.Eng.Design 236, pp.128-139 (2006).
- (3.7) Suzuki M., Saitou H. and Fuketa T., Analysis on Pellet-Clad Mechanical Interaction Process of High Burnup PWR Fuel Rods by RANNS Code in Reactivity-Initiated Accident Conditions, Nuclear Technology, vol.155, p.282-292 (2006).
- (3.8) Suzuki M., Saitou H., Fuketa T., RANNS Code Analysis on the Local Mechanical Conditions of Cladding of Cladding of High Burnup Fuel Rods under PCMI in RIA Simulated Experiments in NSRR, J. Nucl. Sci. Technol., 43[9], 1097 (2006).
- (3.9) O'Donnell W.J., Langer B.F., Fatigue design basis for Zircaloy components, Nucl.Sci. and Eng., 20, 1-12 (1964).

# 4. 物性値モデル

FEMAXI-7で使用可能な物性値、経験式について、ペレット、被覆管、その他に分類して以下の表に示す。表中、「使用条件」の に記されたものは、Name-list Parameterであり、値を入力において指定することにより物性値の指定が可能となる。ただし「常時」と記載されたものは、Name-list parameterによる選択 が無く、常に同一の物性値や経験式が用いられることを意味する。

# 4.1 UO2ペレット物性値

(1) 熱伝導率

UO <sub>2</sub> 熱伝導率(1) MATPRO-11	使用条件	ref.
0~1,650℃に対して $K = \left\{ \frac{1 - \beta(1 - D)}{1 - 0.05\beta} \right\} \cdot \left\{ \frac{40.4}{464 + T} + 1.216 \times 10^{-4} \exp(1.867 \times 10^{-3}T) \right\}$ 1,650~2,840℃に対して $K = \left\{ \frac{1 - \beta(1 - D)}{1 - 0.05\beta} \right\} \cdot \left\{ 0.0191 + 1.216 \times 10^{-4} \exp(1.867 \times 10^{-3}T) \right\}$ $K : UO_2 \overset{\sim}{\lor} \overset{\vee}{\lor} \overset{\vee}{\lor} \overset{\wedge}{\lor} \mathcal{O} \overset{\otimes}{\boxtimes} \overset{\otimes}{\boxtimes} \overset{\otimes}{\boxtimes} (W/\text{cm} \cdot K)$ $\beta : \qquad $	IPTHCN=1	3.4
UO <sub>2</sub> 熱伝導率 (2)       Washington $K = F \cdot \{(0.040 + 2.57 \times 10^{-4} \cdot T_K)^{-1} + 72.6 \times 10^{-12} \cdot T_K^{-3}\}$ $(W / mK)$ $F = 1.0 - 2.5 \cdot P$ P: porosity=1.0 - (UO2 density/Theoretical density) $T_K$ : 温度 (K)	IPTHCN=2	4.1
UO <sub>2</sub> 熱伝導率 (3) Hirai $K = K_{95\%TD} \cdot (1 - \beta p) / (1 - 0.05 \cdot \beta)$ (W / mK) $K_{95\%TD} = (2.35 \times 10^{-2} + 2.55 \times 10^{-4} \cdot T_K)^{-1} + 3.57 \times 10^{-12} \cdot T_K^{-3}$ $\beta = 2.58 - 0.58 \times 10^{-3} T$ → Ref.(2.13) P: porosity, $T_K$ : 温度 (K)	IPTHCN=3	4.2
UO2 熱伝導率(4)       Wiesenack (Halden) $K = F / \{0.1148 + 0.0035 \cdot B + (2.475 \times 10^{-4} - 8 \times 10^{-7} \cdot B)T\}$ $+ F \cdot 0.0132 \exp(0.00188 \cdot T)$ $W / mK$ $F = (1 - \beta p) / (1 - 0.05 \cdot \beta)$ $\beta = 2.58 - 0.58 \times 10^{-3} T$ $\rightarrow$ Ref.(2.13) $P$ : porosity , $B$ : 燃焼度 (MWd/kgUO2) 、 $T$ : 温度 (°C)	IPTHCN=4	4.3

UO <sub>2</sub> 熱伝導率 (5) Modified Hirai		
$K = K_{95\%TD} \cdot (1 - \beta p) / (1 - 0.05 \cdot \beta) \qquad (W / mK)$		
$K_{95\%TD} = \left\{ (2.35 \times 10^{-2} + 4.7 \times 10^{-3} \cdot B) + (2.55 \times 10^{-4} - 8.0 \times 10^{-7} \cdot B)T_K \right\}^{-1}$		
$+3.57 \times 10^{-12} \cdot T_{K}^{3}$	IDTHCM-5	12
$\beta = 2.58 - 0.58 \times 10^{-3} T \longrightarrow \text{Ref.}(2.13)$	II IIICIN-5	4.2
<i>P</i> : porosity, $T_K$ : 温度(K), $B$ : 燃焼度(MWd/kg-U)		
(本式は、Hirai <sup>(4.2)</sup> の式に Halden <sup>(4.3)</sup> モデルと同様な燃焼度依存性を		
付加した暫定モデルである。)		
UO <sub>2</sub> 熱伝導率(6) Forsberg		
$K = F \left\{ 0.047 + 1.73 \times 10^{-3} \cdot B + (2.5 \times 10^{-4} - 5.41 \times 10^{-8} \cdot B)T_K \right\}^{-1}$		
(W / mK)	IPTHCN=6	4.4
$F = 1.0 - \beta \cdot p$ , $\beta = 2.58 - 0.58 \times 10^{-3} T$ $\rightarrow$ Ref.(2.13)		
<i>P</i> : porosity, $T_K$ : 温度(K), <i>B</i> : 燃焼度(MWd/kg-U)		
UO <sub>2</sub> 熱伝導率(7) Kjaer-Pedersen		
$K = 93 / (0.0224 \cdot T_{K} + 1.1 + 56 \cdot P + 3 \cdot G(B)) + 2.5 \cdot 10^{-14} \cdot T_{K}^{4}$		
$B \le 10$ $G = 0.5(B/10)^2$	IPTHCN=7	4.5
$B \ge 10$ $G = ((B - 7.5) / 10)^{0.5}$		
$P$ : porosity, $T_K$ : 温度(K), $B$ : 燃焼度(MWd/kg-U)		
UO <sub>2</sub> 熱伝導率(8) Baron & Couty		
$K(T) = \left[ (A + BT)^{-1} + CT^3 \right] \cdot D(T)  (W/mK)$		
$A = A_0 + A_1 x + A_2 g + A_3 g^2$ , $B = B_0 + B_1 g + B_2 g^2$		
$A_0 = 0.0254, A_1 = 4.0, A_2 = 0.3079, A_3 = 12.2031$		
$B_0 = 2.533 x 10^{-4}, B_1 = 8.606 x 10^{-4}, B_2 = -0.0154$	IPTHCN=8	4.6
$C=1.0x10^{-12}$ , g: Gd content (weight %)		
<i>x:</i> absolute value of (2-O/M)		
$D(T) = (1 - P \cdot \alpha(T))/(1 - 0.05\alpha(T))$		
$\alpha(T) = 2.7384 - 0.58 \times 10^{-3} \cdot T  (T \le 1273.15K)$		
$\alpha(T) = 2.0$ (T $\leq 1273.15K$ )		

UO2熱伝導率(10) Lucuta. Matzke & Hastings		
$\lambda = K_{1d} K_{1P} K_{2P} K_{3x} K_{4r} \lambda_0 \qquad (W/mK)$		
$\lambda_0 = \frac{1}{0.0375 + 2.165 \times 10^{-4} \cdot T} + \frac{4.715 \times 10^9}{T^2} \exp\left(-\frac{16361}{T}\right)  (W/mK)$		
$K_{1d}(\beta) = \left(\frac{1.09}{\beta^{3.265}} + \frac{0.0643}{\sqrt{\beta}}\sqrt{T}\right) \arctan\left(\frac{1}{1.09/\beta^{3.265} + (0.0643/\sqrt{\beta})\sqrt{T}}\right)$		
$K_{1P} = 1 + \frac{0.019\beta}{(3 - 0.019\beta)} \cdot \frac{1}{1 + \exp(-(T - 1200)/100)}$	IPTHCN=10	4.7
$K_{2P} = \frac{1-P}{1+(\sigma-1)P}, \sigma = 1.5$ (for spherical pore), P : porosity		
$K_{3x} = 1$		
$K_{4r} = 1 - \frac{0.2}{1 + \exp((T - 900)/80)}$		
T: K		
eta : burnup by at%		
$= 1.067 \times 10^{-4} \cdot Bu \qquad (Bu = MWd/tU)$		
Gd 入り UO <sub>2</sub> 熱伝導率(13) Fukushima		
$K = \frac{1}{1}$		
aT+b		
ここで		
$K$ :熱伝導率(W/m・K), $T$ :温度( $\mathbb{C}$ )		
a,b:Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 濃度の関数(下表)		
$Gd_2O_3$ (-) $a$ $b$		
$0.0 \qquad 2.32733 \times 10^{-4} \qquad 1.180229 \times 10^{-1}$		4.0
$0.03 \qquad 2.131412 \times 10^{-4} \qquad 1.732423 \times 10^{-1}$	IPTHCN=13	4.8
$0.057    1.996481 \times 10^{-4}    2.069985 \times 10^{-1}$		
$ 0.085   1.961735 \times 10^{-4}   2.342200 \times 10^{-1} $		
$Gd_2O_3$ の濃度に対する $a,b$ の値の補間式は $K = rA^{Gd}$ 式に、上記のテーブ		
ルより前後する Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 濃度に対して、K が一 するように r と A を求め		
て、この <i>r,A</i> の値を用いて K を決定する。		
この場合、変数 GD=Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 濃度(Wt.frac)を指定する。		
GDのDefault=0.0である。		

UO <sub>2</sub> 熱伝導率 (14) Baron		
$K_{95\%TD} = \frac{1}{A_0 + A_1 x + A_2 g + A_3 g^2 + (B_0 (1 + B_1 q) + B_2 g + B_3 g^2)T} + \frac{C + Dg}{T^2} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)  (W/m/K)$		
T = K,		
x = 不整定比の 対値, abs[2-O/M]) =Y (Default=0.0)		
q = プルトニウム重量比 (-) = PU (Default=0.0)		
g= ガドリニウム重量比(-)(Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 濃度の重量比), 0-12 %		
=GD (Default=0.0)		
k=Boltzmann 定数 (1.38・10 <sup>-23</sup> J/K)		
$W = 1.41 \text{ eV} = 1.41 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$		
$A_0 = 0.044819 + 0.005 \cdot BU + 20 \cdot (G - 5.4702)$ (mK/W)	IDTHCN-15	
$B_0 = (2.4544 - 0.0125 \cdot BU - 70 \cdot (G - 5.4702))10^{-4}$ (m/W)	-26	4.9
$A_1 = 4$ (-), $B_1 = 0.8$ (-)	-50	
$A_2 = 0.611 \text{ (mK/W)}$ $B_2 = 9.603 \cdot 10^{-4} \text{ (m/W)}$		
$A_3 = 11.081 \text{ (mK/W)}$ $B_3 = -1.768 \cdot 10^{-2} \text{ (m/W)}$		
$C = 5.516 \cdot 10^9$ (WK/m), $D = -4.302 \cdot 10^{10}$ (WK/m)		
BU = burn-up (GWd/tU), G = 格子定数(Å) =LT		
この式は95%TD ペレットに適用される。一般には、次式となる。		
$K = K_{95\%TD} \cdot (1 - \beta p) / (1 - 0.05\beta) \qquad \beta = 2.58 - 0.58 \cdot 10^{-3}T,  T : (°C)$		
[注 2: Y, PU, GD、および LT は name-list input parameters であり、		
LT $\mathcal{O}$ default = 5.4702.]		
(注3) たとえ MOX=0 (=Default value)の場合でも, Pu 重量比を PU によっ		
て指定すれば、Pu の効果を入れた計算をすることができる。		

UO <sub>2</sub> 熱伝導率 (15) Kitajima & Kinoshita		
$K_{mat} = \frac{1}{A + B \cdot T_k} + K_e \qquad (kW/mK)$		
ただし $K_e = 1.216 \times 10^{-5} \exp(1.867 \times 10^{-3}T)$		
$K_e$ は電子による熱伝導項であり、MATPRO-11 モデルを用いた。 また、 $K_{mat}$ は 100%TD の場合の値である。 一般には次式 K とする。 $K = F \cdot K_{mat}, F = 1.0 - \beta \cdot p,$ $\beta = 2.58 - 0.58 \times 10^{-3}T \rightarrow \text{Ref.}(2.13)$		
$T_k < 1273.15K$ $A = 40 + 4.12 \cdot Bu \qquad (Bu : MWd / kgU)$ 1) $B = 0.22 \qquad (Bu \le 50)$ $= 0.447 - 0.00453 \cdot Bu \qquad (50 < Bu \le 80)$ $= 0.084 \qquad (80 < Bu)$	IPTHCN=16	2.42
2) $T_k > 1473.15K$ $A = 40 + 1.74 \cdot Bu,  B = 0.22 + 0.0003 \cdot Bu$		
<ol> <li>1273.15≤T<sub>k</sub>≤1473.15K: K<sub>mat</sub>は二つの温度間の値を線型内挿して決定する。</li> </ol>		
ただし燃焼度は 207MeV/fission に基づく。		

UO2 熱伝導率       Halden model (Revised by Wiesenack) $K = F / \{ 0.1148 + 0.0040 \cdot B + 2.475 \times 10^{-4} (1 - 0.00333 \cdot B) \Theta \}$ $+ F \cdot 0.0132 \exp(0.00188 \cdot T)$ (W/mK) $F = (1 - \beta p) / (1 - 0.05 \cdot \beta)$ $\beta = 2.58 - 0.58 \times 10^{-3} T$ $\rightarrow \operatorname{Ref.}(2.13)$ $p$ : porosity, $B : $ 燃焼度 (MWd/kgUO2) 、 $\Theta = \min(T, 1650)$ $T : $ 温度(C)	IPTHCN=17 (Default)	2.15
UO <sub>2</sub> 熱伝導率 in FRAPCON-3: PNNL modified Halden model $K_{95} = 1/Q(x) + 0.0132 \exp(0.00188T)$ (W/mK) for 95%TD pellet. $Q(x) = 0.1148 + a \cdot gad + 1.1599x + 0.0040B + 2.475 \cdot 10^{-4}(1 - 0.0033B)\Theta$ a = 1.1599, "gad"= weight fraction of gadolinia, x = 2.00-O/M (oxygen to metal ratio) =Y (Default=0.0), B: burn-up (MWd/kgUO <sub>2</sub> ), $\Theta = \min(T, 1650), T$ : degree C.	IPTHCN=18	4.11

UO <sub>2</sub> 熱伝導率(9) Ohira & Itagaki (1)		
Original for 95%TD $UO_2$ pellet.		
$\lambda = \frac{1}{A + B \cdot T + f(Bu) + g(Bu) \cdot h(T)} - CT^{2} + DT^{4} \qquad (mK/W)$		
$f(Bu) = 1.87 \times 10^{-3} \cdot Bu$ , $g(Bu) = 0.038 \cdot Bu^{0.28}$	IPTHCN=90	0.1.4
Bu: Burnup (GWd/tU), T: Kelvin,	New Default	2.14
$h(T) = \frac{1}{1 + 396 \exp(-6380/T)}$		
$A = 4.52 \times 10^{-2}$ (mK/W), $B = 2.46 \times 10^{-4}$ (mK/W)		
C=5.47E-9 (W/m-K <sup>3</sup> ), D=2.29E-14 (W/m-K <sup>5</sup> )		

(10) Ohira & Itagaki (NFI) latest Model for 95%TD UO<sub>2</sub> and MOX pellets.  
Latest model:  

$$\lambda = \frac{1}{A + B \cdot T + \alpha \cdot \text{Gd} + \beta \cdot \text{P} + f(Bu) + g(Bu) \cdot h(T)} (W/\text{mK})$$

$$-CT^{2} + DT^{4}$$

$$f(Bu) = 1.87 \times 10^{-3} \cdot Bu,$$

$$g(Bu) = (8.07 \cdot 10^{-2} + 6.51 \cdot 10^{-4} \cdot Bu) \times (1 - \exp(-0.142 \cdot Bu))$$
Bu: Burnup (GWd/tHM), T: Kelvin,  

$$h(T) = \frac{1}{1 + 396 \exp(-6380/T)}$$

$$A = 4.53 \times 10^{-2} (\text{mK/W}), B = 2.46 \times 10^{-4} (\text{mK/W})$$
C=5.47E-9 (W/m-K<sup>3</sup>) D=2.29E-14 (W/m-K<sup>5</sup>)  

$$\alpha = 8.12 \cdot 10^{-3}, \text{ Gd: Gd}_{2}\text{O}_{3} \text{ concentration (wt%)}$$

$$\beta = 1.24 \cdot 10^{-3}, \text{ P: PuO}_{2} \text{ concentration (wt%)}$$
[注] この式は 95%TD ペレットに適用される。一般には、次式となる。  

$$K = K_{95\%TD} \cdot (1 - \beta p)/(1 - 0.05\beta), \beta = 2.58 - 0.58 \cdot 10^{-3}T, T: (^{\circ}\text{C})$$

Modified "Ohira & Itagaki model" in FRAPCON 3.3. for 95%TD pellet		
$\lambda = \frac{1}{A + a \cdot \text{gad} + B \cdot T + f(Bu) + (1 - 0.9 \exp(-0.04Bu)) \cdot g(Bu) \cdot h(T)} + \frac{E}{T^2} \exp(-F/T) \qquad (W/m-K) \\ f(Bu) = 1.87 \times 10^{-3} \cdot Bu, \qquad g(Bu) = 0.038 \cdot Bu^{0.28}, \\ Bu: \text{Burnup (GWd/tU)}, \qquad T: \text{ Kelvin}, \\ h(T) = \frac{1}{1 + 396 \exp(-6380/T)} \\ A = 4.52 \times 10^{-2} \qquad (\text{mK/W}), B = 2.46 \times 10^{-4} \qquad (\text{mK/W}) \\ \text{E=3.5E9 (W/K-m)}, \qquad \text{F=16361 (K)} \\ a = 1.1599,  \text{"gad"=weight fraction Gadolinia} \\ [注] この式は 95\%TD ペレットに適用される。一般には、次式となる。 \\ K = K_{95\%TD} \cdot (1 - \beta p)/(1 - 0.05\beta), \qquad \beta = 2.58 - 0.58 \cdot 10^{-3}T,  T:(^{\circ}C) \end{cases}$	IPTHCN=92	4.11

# (2) UO<sub>2</sub> 熱膨張

UO2熱膨張 (1) MATPRO-11	使用条件	ref.
$\frac{\Delta L}{L} = -4.972 \times 10^{-4} + 7.107 \times 10^{-6} T + 2.581 \times 10^{-9} T^2 + 1.140 \times 10^{-13} T^3$ $\frac{\Delta L}{L} : \text{ $k$} \text{ $k$} \text{$k$} \text{$k$} \text{$k$} \text{$k$}, \qquad T : \text{ $lag ($C$)}$	IPTHEX=0 (標準値) IPTHEX=1	3.4
UO <sub>2</sub> 熱膨張 (2) Burdick and Parker		
$\frac{\Delta L}{L} = -3.0289 \times 10^{-4} + 8.4217 \times 10^{-6} T + 2.1481 \times 10^{-9} T^2$	IPTHEX=2	*
T : 温度 (℃) 温度範囲: 27~1260℃		
$\Delta L/L: 27^{ m C}$ での長さを基準とした線熱膨張率		
UO <sub>2</sub> 熱膨張 (3) Halden		
$\frac{\Delta L}{L} = 6.0 \times 10^{-6} T + 2.0 \times 10^{-9} T^2 + 1.7 \times 10^{-12} T^3$	IPTHEX=3	*
T :温度(℃) 温度範囲:900~2,800℃(融点)		
UO <sub>2</sub> 熱膨張(4) Conway and Fincel	-	
$\frac{\Delta L}{L} = -1.723 \times 10^{-4} + 6.797 \times 10^{-6} T + 2.896 \times 10^{-9} T^2$	IPTHEX=4	*
T :温度 (℃) 温度範囲:1,000~2,250℃		

UO <sub>2</sub> 熱膨張(5) MATPRO-A		
熱歪み(=0 at 300 K): $\frac{\Delta L}{L_0} = K_1 T - K_2 + K_3 \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right)$	IPTHEX=5	2.11
T : 温度(K), k: Boltzmann 定数 $(1.38 \times 10^{-23} J/K)$		
$ED = 6.9 \times 10^{-20}$ : energy of formation of a defect (J)		
$K1 = 1.0x10^{-5} K^{-1}$ , $K2 = 3.0x10^{-3}$ , $K3 = 4.0x10^{-2}$		
UO <sub>2</sub> 熱膨張(6) Martin		
$273 \le T \le 923 \ K$		
$\Delta L(T) / L(273) = -2.66 \cdot 10^{-3} + 9.802 \cdot 10^{-6} T - 2.705 \cdot 10^{-10} T^2$		
$+4.391 \cdot 10^{-13} T^{3}$		
$L(T) = L(273) \cdot (9.9734 \cdot 10^{-1} + 9.802 \cdot 10^{-6}T)$		
$-2.705 \cdot 10^{-10} T^2 + 4.391 \cdot 10^{-13} T^3)$		
	IPTHEX=6	4.26
$973 \le T \le 3120 \ K$		
$\Delta L(T) / L(273) = -3.28 \cdot 10^{-3} + 1.179 \cdot 10^{-5} T - 2.429 \cdot 10^{-12} T^{2}$		
$+1.219 \cdot 10^{-12} T^3$		
$L(T) = L(273) \cdot (9.9672 \cdot 10^{-1} + 1.179 \cdot 10^{-5}T)$		
$-2.429 \cdot 10^{-9} T^2 + 1.219 \cdot 10^{-12} T^3)$		
UO <sub>2+x</sub> の non-stoichiometry は影響なし。		

(3) UO<sub>2</sub>密度

UO <sub>2</sub> 密度	MATPRO-Version 0	)9	使用条件	ref.
UO2理論密度(g	$p/cm^3$ ) : $\rho = 10.96$		常時	2.13

(4) UO2 ヤング率

UO <sub>2</sub> ヤング率 (1) MATPRO-Version 09	使用条件	ref.
$E = 2.26 \times 10^{11} (1 - 1.131 \times 10^{-4} T) [1 - 2.62(1 - D)]$ E:ヤング率 (Pa), T:温度 (°C), D::理論密度比	IPLYG=1	2.13
UO <sub>2</sub> ヤング率 (2) MATPRO-11		
$E = 2.334 \times 10^{11} [1 - 2.752(1 - D)] [1 - 1.0915 \times 10^{-4} T]$	IPLYG=2 Default	3.4
E: ヤング率(N/m <sup>2</sup> )、D: 理論密度比(-)、 T: 温度(K),		
## (5) UO2ポアソン比

UO <sub>2</sub> ポアソン比	MATPRO-Version 09	使用条件	ref.
=0.316		IPOIS=1	2.13

### (6) UO<sub>2</sub> Emissivity

UO <sub>2</sub> Emissivity	MATPRO-11	使用条件	ref.
T<1000 K $e = 0.8707;$	$\Gamma > 2050 \text{ K}$ $e = 0.4083$	常時	3.4
$1000 \le T \le 2050 \text{ K}$ $e = 1.3$	$311 - 4.404 \times 10^{-4} T$		

### (7) UO2ペレット融点

融点の燃焼度依存性は、Christensenの式<sup>(4.24)</sup>より、10GWd/t 当たり 32℃低下するとした。

ペレット融点(Solidus)	MATPRO-Version 11+Christensen	使用条件	ref.
$T_m = T_u - 5.414P + 0.007468P^2$	-0.0032Bu		
$T_m: ペレット融点 (K)$		常時	3.4
$T_u$ : UO <sub>2</sub> の未照射材の融点	(=3113K)		4.13
P : PuO <sub>2</sub> のモル分率(%)、	Bu:燃焼度(MWd/t)		

(8) UO<sub>2</sub>クリープ

$UO_2 \not \cap \mathcal{V} - \mathcal{T}(1)$ MATPRO-Version 09	使用条件	ref.
$\dot{\varepsilon} = \frac{\left(A_{1} + A_{2}\dot{F}\right)\sigma \cdot \exp\left(-Q_{1}/RT\right)}{\left(A_{3} + D\right)G^{2}} + \frac{A_{4}\sigma^{4.5}\exp\left(-Q_{2}/RT\right)}{\left(A_{5} + D\right)} + A_{6}\sigma\dot{F}\exp\left(-Q_{3}/RT\right)$		
$\dot{arepsilon}$ : 定常クリープ速度 $\left( l/h  ight)$		
$A_1 = 9.728 \times 10^6$ , $A_2 = 3.24 \times 10^{-12}$ , $A_3 = -87.7$ , $A_4 = 1.376 \times 10^{-4}$		
$A_5 = -90.5, \qquad A_6 = 9.24 \times 10^{-28}$	IPCRP=1	2.13
$Q_1 = 90,000 (cal/mol), Q_2 = 132,000 (cal/mol), Q_3 = 5,200 (cal/mol)$		
$F$ : 核分裂率 $8.4 \times 10^{17} \sim 1.18 \times 10^{20} (fission/m^3 \times s)$		
σ : 応力 1,000~16,000 (psi)		
T : 温度 713~2,073(K), D : 密度 92~98(%TD)		
$G$ : 粒径 4~35 ( $\mu$ m), $R$ : ガス定数 1.987 (cal/mol・K)		

$$\begin{split} & \text{UO}_2 & \not \text{U} - \vec{\mathcal{T}}(2) \quad \text{MATPRO-11} \\ \hline \dot{c}_c = \frac{(A_1 + A_2 \dot{F}) \sigma_1 \exp\left(-Q_1 / RT\right)}{(A_3 + D) G^2} + \frac{(A_4 + A_8 \dot{F}) \sigma_2^{4.5} \exp\left(-Q_2 / RT\right)}{A_6 + D} \quad (\text{s}^{-1}) \\ & + A_4 \sigma \dot{F} \exp\left(-Q_3 / RT\right) \\ & A_1 = 0.3919, \quad A_2 = 1.3100 \times 10^{-19} \quad , A_3 = -87.7, \quad A_4 = 2.0391 \times 10^{-25}, \\ & A_6 = -90.5, \quad A_7 = 3.72264 \times 10^{-35}, \quad A_8 = 0.0, \\ & Q_1 = 17884.8 \left\{ \exp\left[\frac{-20}{\log(x - 1.99999)} - 8.0\right] + 1.0 \right\}^{-1} + 72124.23 \\ & Q_2 = 19872.0 \left\{ \exp\left[\frac{-20}{\log(x - 1.99999)} - 8.0\right] + 1.0 \right\}^{-1} + 111543.5 \\ & Q_1, Q_2: \quad \exists \text{the } (\mathbb{K} \Rightarrow \mathcal{N} \neq - (\text{cal/mol}) \\ & x: \quad \bigotimes \# / \Delta \text{ and } [ \text{fagi } 2.0!!], \\ & \dot{F} = k \phi \Im \& \text{ig } ( \text{fission/m}^3 / \text{s}, \\ & \sigma = \kappa \dot{D}/(\text{Pa}) \quad [ \text{Equivalent stress } ?], \quad T: \texttt{lage} (\text{K}), \\ & D: \% = \texttt{lakebt}, \quad G = \texttt{stalk} \texttt{lake} \& (\mu \text{m}), \\ & Q_3 = -2.6167 \times 10^3, \quad \text{R} = 1.9872 \ (\text{cal/mol} \cdot \text{K}) \\ & \pounds \& C_1, \sigma : \quad \texttt{th } \text{likebt} \ (\text{Nm}^2) \\ & \sigma \leq \frac{16547416.8}{G^{0.5714}} \quad \mathcal{O} \succeq \And \quad \sigma_1 = \sigma, \quad \sigma_2 = 0.0 \\ & \sigma > \frac{16547416.8}{G^{0.5714}} \quad \mathcal{O} \succeq \And \quad \sigma_1 = \frac{16547416.8}{G^{0.5714}}, \quad \sigma_2 = \sigma \\ \end{array} \right\}$$

なお、	UO <sub>2</sub> クリ	リープ速度式を用い	いる場合には、	以下の調整パ	ペラメータがある。
-----	--------------------	-----------	---------	--------	-----------

変数名	内容	標準値
FCRFAC	クリープ速度式に対する倍率(変形モデル)	1.0
TCS	クリープ計算での参照温度のカットオフ値(変形モデル)(K)	2073.15

UO2 クリープ(3) SKI model for UO <sub>2</sub> 使用	用条件	ref.
Converted equation of Steady creep rate from original SKI equation: $\dot{\varepsilon} = A_1(\dot{F})\sigma^{4.5} \exp(-Q_1/RT) + \frac{A_2(\dot{F})\sigma}{G^2} \exp(-Q_2/RT) + C\sigma\dot{F},$ (1/s), ( $\sigma = MPa$ ) $A_1(\dot{F}) = \frac{1.38 \times 10^{-4} + 4.6 \times 10^{-17-6} \dot{F}}{-90.5 + \rho} \times 1.877 \times 10^{-10}$ $= \frac{2.59 \times 10^{-14} + 8.63 \times 10^{-33} \dot{F}}{-90.5 + \rho}$ (1/s), $A_2 = \frac{9.73 \times 10^6 + 3.24 \times 10^{-5-6} \dot{F}}{-87.7 + \rho} \times 6.895 \times 10^{-3}$ $= \frac{6.71 \times 10^4 + 2.23 \times 10^{-13} \dot{F}}{-87.7 + \rho}$ (1/s), $Q_1 = 5.523 \cdot 10^5$ (J/mol), $Q_2 = 3.766 \cdot 10^5$ (J/mol), $C = 7 \times 10^{-23-6} \times 6.895 \cdot 10^{-3} = 4.827 \cdot 10^{-31}$ $\dot{F} : \text{fission rate (fissions/m^3s)}$ [1 fissions/cm <sup>3</sup> s=10 <sup>-6</sup> fissions/m <sup>3</sup> s] $\sigma : \text{ uni-axial stress (MPa)}$ [1 psi= 6.895E-3 MPa], $G=10: \text{ grain size (assumed constant 10\mum)}$ $\rho : \text{ density (%TD), above 92\%. If it is less than 92\%, assume 92\%.$ $T : \text{ temperature (K)},  R : \text{ gas constant (8.31441 J/mol-K)}$	CRP=4 Default)	4.14

(4) Halden UO2 Creep model derived from Petitprez's report (HWR-714).		
$\dot{\varepsilon} = 8.577 \cdot 10^4 \exp\left(-\frac{3.505 \times 10^5}{RT}\right) + 1.48 \cdot 10^{-30} \sigma \cdot f$		
$\sigma$ : uni-axial stress (MPa), $f$ : fissions/m'-s		
R: 8.31441 (J/mol-K), T: temperature (K),	IPCRP=5	4.15
Derived from the correlation in Fig.26, assuming $f=1.2E19m^{-3}s^{-1}$ and		
σ=24 MPa.		

### (9) UO<sub>2</sub>スウェリング

UO<sub>2</sub>のスウェリングは、固体 FP によるスウェリングとガスバブルスウェリングとがある。以下の物性式オプションは、固体 FP スウェリングとガスバブルスウェリングをそれぞれ独立に扱う場合と、全体を1つの物性式を与える場合とに大別している。

$UO_2 スウェリング(1)$ Chubb	使用条件	ref.
(ガスバブルスウェリング) $ \left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{gs} = 4.396 \times 10^{2} \exp\left(-\frac{1.645 \times 10^{4}}{T_{s}}\right) $ $ T_{s} = T - 100 $ $ \left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{gs} : 10^{20} \text{ fissions/cm}^{3} \oplus \mathcal{D} \oplus \mathbb{R} \mathbb{R} \mathbb{H} \mathbb{H} \mathbb{H} \mathbb{H} \mathbb{H} \mathbb{H} \mathbb{H} H$	IFSWEL=0 (標準値)	2.46
UO <sub>2</sub> スウェリング(1') FEMAXI-III (固体 FP スウェリング) $\left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{ss} = 0.0025 : 10^{20} \text{ fissions/cm}^3 当りの体積固体 FP スウェリング$		1.2

#### なお、IFSWEL=0の場合には、以下の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
STFCP	ガスバブルスウェリングの発生を抑える平均接触圧力(Pa) (変形モデルで使用)	$-3 \times 10^{7}$
SPCON	ガスバブルスウェリングの発生を抑える平均接触圧力(Pa) (熱モデルで使用)	$-10^{6}$

UO <sub>2</sub> スウェリング (2)	FEMAXI model		
<u>FP ガスバブルスエリング</u> :第	2章8節を参照。		
<u>(固体 FP スウェリング= FEMAXI-III モデル)</u> $\left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{ss} = 0.0025 : 10^{20} \text{ fissions/cm}^3 当りの体積固体 FP スウェリング$		IFSWEL=1	
UO <sub>2</sub> スウェリング (3)	MATPRO-Version 09	_	
<u>中心温度範囲 T(℃)</u>	<u>スウェリング率(%/10<sup>20</sup>fiss/cm<sup>3</sup>)</u>		
$T \le 1,400$	0.28		
$1,400 \le T \le 1,800$	0.28[1+0.00575(T-1,400)]	IFSWEL=2	2.13
$1,800 \leq T \leq 2,200$	0.28[3.3 - 0.004(T - 1,800)]		
2,200 < T	0.476		

$UO_2 スウェリング (4)$ Kosaka 体積スエリング率: $\left(\frac{\Delta V}{V}\right) = 0.5\%/10$ MWd/kgUO <sub>2</sub>	IFSWEL=3	2.47
UO <sub>2</sub> スウェリング (5) Studsvik		
$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{SW} = \left(A_1 - C_1 \cdot FGR\right) \cdot Bu \qquad \left(0 \le Bu \le Bu_1\right)$		
$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{SW} = \left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{1}^{SW} + A_{2}\left(Bu - Bu_{1}\right)  \left(Bu_{1} < Bu\right)$		
ただし、 $\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{1}^{SW}$ は $Bu=Bu_{1}$ のときの体積スウェリング(%)	IFSWEL=4	2.48
$A_1 = 0.0947,$ $C_1 = 0.0004526,$ $Bu_1 = 57,$ $A_2 = 0.03158$		
$\left(rac{\Delta V}{V} ight)^{SW}$ :体積スウェリング(%):		
固体 FP+FP ガスの両方の効果を含む		
FGR : FP ガス放出率(%)、 Bu, Bu <sub>1</sub> : 燃焼度(MWd/kgU)		

(10) UO2焼きしまり

UO <sub>2</sub> 焼きしまり (1) FEMAX-III	使用条件	ref.
$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\Delta V^{\max}}{V} \left(1 - e^{-c \cdot Bu}\right) : 焼きしまりによる体積収縮$ $\frac{\Delta V^{\max}}{V} : 焼きしまりによる最大体積収縮$	IDENSF=0 (標準値)	1.2
Bu : 燃焼度(Mwd/t-UO <sub>2</sub> )		

なお、IDENSF=0の場合には、以下の調整パラメータを用いる。

変数名	内容	標準値
DMAX	焼きしまりによる最大体積収縮 $rac{\Delta V^{\max}}{V}$ (%)	1.0
SBU	焼きしまりの 90%完了燃焼度(MWd/t-UO <sub>2</sub> ) ( $C = \frac{2.3025}{SBU}$ で与えられる) ただし、 $exp(-2.3025) = 0.1$ である。	20000.0

UO <sub>2</sub> 焼きしまり (2) Rolstad	使用条件	ref.
焼きしまりによるペレット軸方向の長さの縮小変化 $\frac{\Delta L}{L}$ (%)は以下のよ		
し うに決定する。		
1) まず $D1$ を求める: $D1 = 22.2 \times \frac{(100 - TD)}{(TS - 1180)}$		
<i>TD</i> : 未照射 UO <sub>2</sub> の理論密度比(%TD)		
<i>TS</i> :焼結温度 (℃) (=TDNSF)		
もし <i>D</i> 1≥3.0ならば <i>D</i> 1=3.0とする。		
2) 次に、焼きしまりの燃焼度依存性を考慮するために 3.0-D1=3.0-0.93e <sup>-BU</sup> -2.07e <sup>-35BU</sup> となる BU=BU1 を求める。	IDENSF=1	4.16
3) $\frac{\Delta L}{L} = D1 - 0.93e^{-(BU+BU1)} - 2.07e^{-35(BU+BU1)}$ (%) を用いて $\frac{\Delta L}{L}$ (%) を燃焼度の関数として求める。 $BU: 燃焼度 (GWd/t-UO_2)$		

なお、IDENSF=1 に対しては、以下の調整パラメータを用いる。

変数名	内容	標準値
TDNSF	焼結温度(C)	1727.0 C

	UO2焼きしまり (3)	NRC	使用条件	ref.
焼き	しまりによる密度増加 $\Delta  ho$	$\left( g/cm^{3}\right) lt$		
	$\int \Delta \rho = 0$	$(BU \le BU_1)$		
	$\Delta \rho = m \log(BU) + b$	$\left(BU_1 < BU < BU_2\right)$		
	$\Delta \rho = \Delta \rho_{sn}$	$\left(BU \ge BU_2\right)$	IDENSF=2	4.17
	$\Delta  ho_{sn}$ :炉外熱処理(1,700°	C×24h)での密度増加(g/cm <sup>3</sup> )(=DMAX)		
	BU:燃焼度(MWd/t), A	$3U_1 = 20 \text{MWd/t},  BU_2 = 2000 \text{MWd/t}$		
	<i>m</i> , <i>b</i> :各燃焼度範囲で3	つの式を連続にする定数		

	なお、	ISENSF=2 の場合には、	以下の調整パラメータを用いる。
--	-----	-----------------	-----------------

変数名	内容	標準値
DMAX	炉外熱処理(1,700℃×24 h)での相対密度増加(%)	1.0

UO <sub>2</sub> 焼きしまり (4) Marlowe	使用条件	ref.
$\Delta \rho = \frac{M}{A} \ln \left( 1 + \frac{A D_{ir}^{0} F \dot{t}_{irr}}{G_{0}^{3}} \right)$ $\Delta \rho : 炉内焼きしまり量 (%TD) (=DMAX)$ $M : 焼きしまり速度定数 (%TD-cm)$ $A : 粒成長速度定数 (cm)$ $D_{irr}^{0} : 照射拡散定数=1.27 \times 10^{-29} (m^{3}/fiss.)$ $\dot{F} : 核分裂率 (fiss./cm^{3}.s)$ $t_{irr} : 照射時間 (s)$ $Ft_{irr} : 燃焼度 (fiss./cm^{3})$ $Go : 初期結晶粒径 (cm) (=GGO)$ $定数 M,A は照射する燃料と同バッチ作成のものを炉外熱処理試験する ことにより次式で求める。$ $A = \frac{G^{3} - G_{o}^{3}}{Dt}$ $M = \frac{A \Delta \rho_{h}}{\ln \left(1 + \frac{ADt}{G_{0}^{3}}\right)}$	IDENSF=3	4.18
$D = D_o \cdot \exp(-Q / RT)$		
G: 然处理後の結晶粒径 (cm) (=GG)		
$     L = 派処理時間 (S) (-SITIM)   $ $     \Delta \rho_{\mu}: 熱処理による密度変化 (%TD)   $		
<i>Do</i> : 熱拡散定数 2.32×10 <sup>-5</sup> (cm <sup>2</sup> /s)		
Q : 82,000cal/mol		
R : ガス定数 1.987(cal/mol/K); T : 処理温度(K)		

変数名	内 容	標準値
DMAX	炉心焼きしまり量(%TD)	1.0
GG	熱処理後の結晶粒径(m)	10 <sup>-5</sup>
GGO	初期結晶粒径(m)	$8 \times 10^{-6}$
SITIM	熱処理時間 (hr)	24.0

なお、IDENSF=3の場合には、以下の調整パラメータを用いる。

UO <sub>2</sub> 焼きしまり (5) Wiesenack (Halden)	使用条件	ref.
焼きしまりによる体積収縮は $\frac{\Delta V}{V} = -\begin{bmatrix} 0.01420(1 - \exp(-6.7943 \cdot BU)) \\ + 0.00793(1 - \exp(-1.1434 \cdot BU)) \end{bmatrix} \cdot ADST$ $BU: 燃焼度(MWd/kgUO_2)$ $ADST : 調整ファクター(=0.6)$	IDENSF=4	4.3
$UO_2 焼きしまり$ (6)Schlemmer and Ichikawa $\frac{\Delta D}{D} = 0.15 \cdot b$ (b $\leq 15 \text{ GWd/t}$ ) $\frac{\Delta D}{D} = -0.10 \cdot b$ (15 GWd/t $\leq b$ )ここで、D:密度 (%T.D.), b:燃焼度 (GWd/t)	IDENSF=30	4.19 4.20

以上のモデルにおける焼きしまりパラメータ DMAX は、軸方向の各セグメントに対して指定 する。すなわち、DMAX=DMAX(40), default=40\*1.0 (%) である。

#### (11) ペレットリロケーション

ペレットは、スタートアップ時に熱応力によって割れ、その時、ペレット片が径方向に移動し てギャップを狭める。この効果を初期リロケーションと呼ぶ。本コードでは、初期リロケーショ ンは、燃焼度 0、線出力 0 の冷却水条件下(hot stand-by)におけるギャップ幅に比例すると仮定し、  $REL = \gamma \cdot \left(r_{ci}^c - r_{pi}^c\right)$  (4.1.10) とおく。ここで、 $r_{ci}^c$ および $r_{pi}^c$ はそれぞれ hot stand-by における被覆管内半径およびペレット半 径(cm)である。  $\gamma$  は、実験データとの照合によって定められる経験的パラメータで、リロケーシ ョンパラメータと呼ばれる。なお、計算上のリロケーション量を調整するパラメータは以下のと おりである。

変数名	内容	標準値
XRELOC	リロケーションパラメータγ(熱モデル用)	0.35
FRELOC	リロケーションパラメータγ(変形モデル用)	0.5
EPSRLZ	軸方向リロケーションひずみ(変形モデル用)	0.003

(12) UO₂塑性

UO2の降伏応力およびひずみ硬化パラメータ(接線剛性)の物性式のオプションを以下に示す。

UO2塑性 (1) Tachibana	使用条件	ref.
引張試験 $\sigma_{Y} = \begin{cases} 66.9 - 0.0397 \cdot T + (520.0 - 0.386 \cdot T) \cdot \overline{\varepsilon}_{p} & (T \le 1200^{\circ}C) \\ 36.6 - 0.0144 \cdot T + (139.5 - 0.06875 \cdot T) \cdot \overline{\varepsilon}_{p} & (T > 1200^{\circ}C) \\ \end{cases}$ $H' = \begin{cases} 520.0 - 0.386 \cdot T & (T \le 1200^{\circ}C) \\ 139.5 - 0.06875 \cdot T & (T > 1200^{\circ}C) \\ 139.5 - 0.06875 \cdot T & (T > 1200^{\circ}C) \\ \sigma_{Y} :                                   $	IFY=1 (標準値)	4.21

UO2塑性 (2) Rodford		
$\sigma_{Y} = 1176.1 - 1.688 \cdot T + 8.179 \times 10^{-4} \cdot T^{2} - 1.293 \times 10^{-7} \cdot T^{3}$	IFY=0	4.22
$H'$ :接線剛性=0.0, $\sigma_{_Y}$ :降伏応力(MPa)		
$T$ : 温度( $^{\circ}$ C)		

(13) U	O2比熱
--------	------

UO <sub>2</sub> 比熱	MATPI	RO-11		使用条件	ref.
$C_{P} = \frac{K_{1}\theta^{2}\exp(\theta)}{T^{2}\left[\exp(\theta/T)\right]}$	$\frac{T}{T} + K_2T + \left(\frac{T}{T}\right) + \left($	$\left(\frac{O/M}{2}\right)\frac{K_3E_D}{RT^2}\exp\left(\frac{1}{2}\right)$	$\left(-E_{D} / RT\right)$		
C <sub>P</sub> :比熱(J/kg・K),	T: 温度(K)				
<i>O/M</i> : O/M 比(一),	<i>R</i> =8.3143(J/m	ol•K)			
	$UO_2$	PuO <sub>2</sub>	<u>Unit</u>	常時	3.4
$K_1$	296.7	347.4	J/kg•K		
$K_2$	$2.43 \times 10^{-2}$	$3.95 \times 10^{-4}$	$J/kg \cdot K^2$		
$K_3$	$8.745 \times 10^{7}$	$3.860 \times 10^{7}$	J/kg		
	535.285	571.000	K		
$E_D$	$1.577 \times 10^{5}$	$1.967 \times 10^{5}$	J/mol		

(14) UO2粒成長

UO2粒成長 (1)	Itoh (modified Ainscough)	使用条件	ref.
$\frac{dD}{dt} = K \left(\frac{1}{D} - \frac{1 + E \cdot N_f}{D_m}\right)$	$\left(\frac{N_{f}^{\max}}{N_{f}}\right)$		
D:時間tにおける	粒径(μm), t :時間 (h)		
<i>K</i> :速度定数 (μn	$n^2/h)$	IGRAIN=0	2.28
$K = 5.24 \times 10^7 \text{ er}$	$\exp\left(-2.67\times10^5\ /\ RT\right)$	(標準値)	
<i>R</i> =8.314 (J/mol •	K), T:温度(K)		
$D_m: 限界粒径(µ$	um) : $D_m = 2.23 \times 10^3 \text{exp} (-7620/\text{T})$		
E:フィッティン	グパラメータ		
$N_f$ :粒界での F	P ガス原子密度(atoms/cm <sup>2</sup> )		
$N_{f}^{\max}:$ 粒界での F	P ガス原子密度の飽和値(atoms/cm <sup>2</sup> )		

なお、IGRAIN=0の場合の調整パラメータは以下のとおりである。

変数名	内容	標準値
AG	フィッティングパラメータ E	1.0
GRWF	粒成長速度を GRWF 倍する。	1.5

UO <sub>2</sub> 粒成長 (2) Ainscough	使用条件	ref.
$\frac{dD}{dt} = k \left( \frac{1}{D} - \frac{1 + 0.002B}{D_m} \right)$ D:時間tにおける粒径 (µm), t:時間 (h) k:速度定数 (µm²/h): k = 5.24 × 10 <sup>7</sup> exp(-2.67 × 10 <sup>5</sup> / RT) R=8.314 (J/mol・K) T:温度 (K) ; 温度範囲:1,300~1,500°C B:燃焼度 (MWd/tU)	IGRAIN=1	2.29
UO2粒成長(3)       MacEwan $D^2 - D_o^2 = k_o t^{0.8} \exp(-87,000 / RT)$ D:時間tにおける粒径( $\mu$ m) $D$ :時間tにおける粒径( $\mu$ m) $h_o$ :初期粒径 $(\mu$ m) $k_o$ :比例定数 $(k_o=3.9 \times 10^{10})$ $t$ :時間(h), $R$ :ガス定数 1.987 (cal/mol·K) $T$ :温度(K); 温度範囲: 1,555~2,440°C	IGRAIN=2	4.23

UO <sub>2</sub> 粒成長 (4) Lyons		
$D^3 - D_o^3 = k_o \ e^{-Q/RT} \cdot t$		
$D$ :時間 t における粒径 ( $\mu$ m), $D_o$ : 初期粒径 ( $\mu$ m)		
$k_o: 速度定数  ( \mu m^3/h)$		
Q : 粒成長に必要な活性化エネルギー(cal/mol)	IGRAIN=3	4.24
$R = 1.987 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$		
T:温度(K), $t$ :時間(h)		
$K_o = \exp(5.096 + 2.476 \times 10^{-4} \cdot Q)$		
MacEwan の実験データに対して Q=119,000 (cal/mol)		
UO <sub>2</sub> 粒成長 (5) MATPRO-Version 09		
$D^4 - D_o^4 = 6.18 \times 10^{13} e^{-92,400/RT} \cdot t$		
$D$ :時間 t における粒径 ( $\mu$ m), $D_o$ : 初期粒径 ( $\mu$ m)	IGRAIN=4	2.13
R = 1.987 (cal/mol · K)		
T : 温度 (K), t : 時間 (h)		
UO2粒成長 (6) MATPRO-11		
Equiaxed grain growth:		
$D^4 - D_0^4 = 1.717 \times 10^{10} \exp(-3.87 \times 10^5 / RT) \cdot t$	IGRAIN=5	3.4
D: grain size (µm) D <sub>o</sub> :初期粒径(µm) R=8.314 J/molK		
t: time(s)		

## 4.2 MOX ペレット物性値

FEMAXI においては、MOX ペレットの様々な物性値を使用することができる。以下の表に示す Name-list parameters と物性式を用い、UO2燃料の場合との連続性と一貫性を持たせる。

### (1) FP ガスのパラメータ

FP ガス放出率	使用条件	Ref.
FEMAXI-VのFPガス放出モデルが与える放出率をFPMOX倍して用いる。	1.0 Default	
FP ガス組成 Option		
Xe/Krのペレット平均の比率を 87%/13% とする	IXEKR = 0 (Default)	
Xe/Krのペレット平均の比率を 86%/14% とする	IXEKR = 1	4.25
Xe/Krのペレット平均の比率を 16/1 とする	IXEKR $= 2$	
Xe/Krのペレット平均の比率は PLUTON の出力データを用いる。 ただし、PLUTON を利用しない場合 (IFLX=-1を指定しない場合) には、 IXRKR=3 は無視され、IXEKR=0 と同様の扱いとなる。	IXEKR = 3	

### (2) MOX 熱伝導率

MOX ペレット熱伝導率 (1) Martin	使用条件	Ref.
$f$ : モル fraction $(U_{1-f}, Pu_f)O_2$ として		
1) $0.12 \leq f \leq 0.30$ の場合		
$K_{MOX} = \left(0.037 + 3.33y + 2.37 \times 10^{-4} T_{K}\right)^{-1} + 78.9 \times 10^{-12} T_{K}^{3}$		
2) 0 $\leq f \leq 0.12$ の場合		
$K(f) = K_u \cdot (1 - f / 0.12) + K_{MOX} \cdot f / 0.12$		
ここで	IPTHCN=30	1 26
$K$ : 熱伝導率(W/m・K), $T_K$ : 温度(K)	II 11101\-30	4.20
: MO <sub>2-y</sub> ,		
$K_u$ :UO2 熱伝導率(W/m・K)		
$K_{u} = \left[ \left( 0.035 + 2.25 \cdot 10^{-4} \cdot T_{K} \right)^{-1} + 83.0 \cdot 10^{-12} \cdot T_{K}^{3} \right] \cdot \left( 1 + z \right)$		
$\left(z: UO_{2-z}, 0 \le z \le 0.05\right)$		

MOX ペレット熱伝導率 (2) MATPRO-11		
$K = P \left[ \frac{K_1}{K_2 + T} + K_3 \exp\left(K_4 T_C\right) \right]  \left(0^\circ < T_C \le 1550^\circ \text{C}\right)  (\text{W/cm} \cdot \text{K})$		
$K = P \left[ K_5 + K_3 \exp(K_4 T_C) \right] \qquad (1550^{\circ} \text{C} < T_C) \qquad (W/\text{cm} \cdot \text{K})$		
$P = \frac{1 - \beta(1 - D)}{1 - \beta(1 - 0.95)} : ポロシティ$	IPTHCN=31	3.4
D: 理論密度比(一)、 $\beta$ =2.58 $-0.58 \times 10^{3}T$ : 気孔率係数、 $T_{C}$ : 温度(°C)		
$K_1 = 33.0, K_2 = 375, K_3 = 1.54 \times 10^{4}, K_4 = 1.71 \times 10^{3}, K_5 = 0.0171$ f: weight fraction としてK は 0.05 ≤ f ≤ 0.30 に適用可能		
MOX ペレット熱伝導率 (3) Martin + Philipponneau		
$K(f,p) = [K_{UO2} \cdot (1 - f / 0.2) \cdot F(p) + K_{MOX} \cdot (f / 0.2) \cdot \alpha(p)]$		
ここで、 $K(f, p)$ : 熱伝導率 (W/m·K) $f: (U_{1-f}, Pu_f)O_2, 0 \le f \le 0.20$		
$F(p) = \frac{1-p}{1+2p},  \alpha(p) = \frac{1}{0.861} \cdot \frac{1-p}{1+2p},  p: \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ $		
z: O/M 比係数(MO <sub>2-z</sub> とする)	IPTHCN=32	4.26
:燃焼時係数(燃焼度 10 at.%で 0.1), $T_K$ :温度(K)		4.27
K <sub>MOX</sub> : MOX 燃料 (f=0.20) の熱伝導率(W/m・K)		
$V = -\left[\left(1.528\sqrt{z+0.00931} - 0.1055 + 0.44 \cdot \tau + 2.885 \cdot 10^{-4} \cdot T_{K}\right)^{-1}\right]$		
$K_{MOX} = \left[ +76.38 \cdot 10^{-12} \cdot T_{K}^{3} \right]$		
$K_{UO2}: UO_2 の熱伝導率(W/m・K)$		
$K_{UO2} = \left[ \left( 0.035 + 0.44 \cdot \tau + 2.25 \cdot 10^{-4} \cdot T_K \right)^{-1} + 83.0 \cdot 10^{-12} \cdot T_K^{3} \right] \cdot (1+z)$		
MOX ペレット熱伝導率 (4) Duriez et al.		
$\lambda = \lambda_{95\%} \times \left(\frac{1-p}{1+2p}\right) / \left(\frac{1-0.05}{1+2\times0.05}\right) \qquad (W/m \cdot K)$		
$\lambda_{95\%} = \frac{1}{(A+BT_K)} + \left(\frac{C}{T_K}\right) \exp\left(-\frac{D}{T_K}\right)$		1.00
A = A(x) = 2.85x + 0.035  (mK/W)	IPTHCN=33	4.28
$B = B(x) = (-7.15x + 2.86) \times 10  (m/W)$ $C = 1.689 \times 10^9  (WK/m) \qquad \qquad D = 13520  K$		
$C = 1.009 \times 10^{\circ} (mR/m)$ , $D = 15520^{\circ} R$ , $700K \le T_{\kappa} \le 2600K$		
f: モル fraction $(\mathbf{U}_{1-f}, \mathbf{Pu}_f)\mathbf{O}_2$ として 0.03 $\leq f \leq 0.15$		

MOX ペレット熱伝導率 (5) Philipponneau		
$K_{MOX} = \begin{bmatrix} \left(1.528\sqrt{z+0.00931} - 0.1055 + 0.44 \cdot \tau + 2.885 \cdot 10^{-4} \cdot T_{K}\right)^{-1} \\ +76.38 \cdot 10^{-12} \cdot T_{K}^{-3} \end{bmatrix} \cdot \alpha(p)$ ここで、 $K_{MOX}$ : MOX 燃料 ( $f=0.20$ ) の熱伝導率 (W/m·K) ( $0 \le f \le 0.20$ ; $f$ : molar fraction) $\alpha(p) = \frac{1}{0.861} \cdot \frac{1-p}{1+2p}, p$ : 気孔率, z: O/M 比係数 (MO <sub>2-z</sub> とする) : 燃焼度係数 (燃焼度 10 at% で 0.1), $T_{K}$ : 温度 (K)	IPTHCN=34	4.27
MOX ペレット熱伝導率 (6) Halden Model		
$K_{fuel} = \frac{K_{max} \cdot a_1}{a_2 + a_3 BU(1 - a_7 BU) + a_4 Gd + (a_5 - a_6 BU)T_c} \cdot F(p)  (W/ms)$ ただし $a_3 BU(1 - a_7 BU) = 18.4BU(1 - 0.003 \cdot BU)$ $F(p) = \left(\frac{1 - p}{1 + 2p}\right) / \left(\frac{1 - 0.05}{1 + 2 \times 0.05}\right),  p: \text{porosity}$ $a_1 = 40.4, \ a_2 = 464, \ a_3 = 18.4,$ $a_4 = 1.16, \ a_5 = 1.0, \ a_6 = 0.0032 \qquad T_c: C^\circ$ $a_7 = 0.003$ $K_{max} = 1.0  \text{for UO}_2$ $= 0.92  \text{for MOX}$ ここで, TD=0.95 を標準的条件として仮定する。 Name-list parameter: $K_{max} = \mathbf{KMOX} = 0.92  (\text{Default})$	IPTHCN=35	4.29



【注】Baron のモデルにおいては、name-list input PU (default=0.0) = PuO<sub>2</sub> 重量比 (→コード内部でモル 分率に変換する)、および Y (Default=0.0) =  $MO_{2-y}$ の y の値を指定する。

MOX 熱伝導率 (8) FRAPCON-3: PNNL-modified Halden model $K_{95} = 0.92 / Q(x) + 0.0132 \exp(0.00188T)$  (W/mK) $Q(x) = 0.1148 + a \cdot gad + 1.1599x + 0.0040B + 2.475 \cdot 10^{-4}(1 - 0.0033B)\Theta$ a = 1.1599, "gad"= weight fraction of gadolinia,<br/>x = 2.00-O/M (oxygen to metal ratio) =Y (Default=0.0),B: burn-up (MWd/kgUO<sub>2</sub>),  $\Theta = \min(T, 1650), T: degree C.$ Porosity p correction factor: $K(p) = 1.0789K_{95} \frac{1-p}{1+0.5p}$ 

MOX 熱伝導率 (9) PNNL model in FRAPCON-3, modified on the basis of the Duriez model.		
$K_{95} = 1/P(x) + \frac{C_{\text{mod}}}{T^2} \exp\left(-\frac{D}{T}\right)$ $P(x) = A(x) + a \cdot \text{gad} + B(x)T + f(Bu)$ $+ (1 - 0.9 \exp(-0.04Bu))g(Bu)h(T)$ $A(x) = 2.85x + 0.035 \text{ (mK/W)},  x=2.00\text{-O/M (oxygen to metal ratio =Y, default=0.0),}$ $a = 1.1599, \text{ "gad"=weight fraction gadolinia (not expected in MOX),}$ $B(x) = (2.86 - 7.15x) \cdot 10^{-4} \text{ (m/W)},$ $f(Bu)= 0.00187Bu : \text{effect of fission products in crystal matrix,}$ $g(Bu)= 0.038Bu^{0.28} : \text{effect of irradiation defects,}  Bu= burnup in GWd/tHM,$ $h(T)= 1/\left(1 + 396 \exp\left(-\frac{Q}{T}\right)\right): \text{ temperature dependence of annealing on irradiation defects.}$	IPTHCN=38	4.30
Q: "Q/R" 6380K, $C_{mod}$ =1.5E9 W-K/m, D=13520 K. Porosity <i>p</i> correction factor: $K(p) = 1.0789 K_{95} \frac{1-p}{1+0.5p}$		

(10) Ohira & Itagaki (NFI) The latest Model for 95%TD UO <sub>2</sub> and MOX pellets.		
Latest model: $\lambda = \frac{1}{A + B \cdot T + \alpha \cdot \text{Gd} + \beta \cdot \text{P} + f(Bu) + g(Bu) \cdot h(T)}  (W/\text{mK})$ $-CT^{2} + DT^{4}$ $f(Bu) = 1.87 \times 10^{-3} \cdot Bu$ $g(Bu) = (8.07 \cdot 10^{-2} + 6.51 \cdot 10^{-4} \cdot Bu) \times (1 - \exp(-0.142 \cdot Bu))$ $Bu: \text{Burnup (GWd/tHM)},  T: \text{Kelvin,}$ $h(T) = \frac{1}{1 + 396 \exp(-6380/T)}$	IPTHCN=91	4.10
$\begin{split} A &= 4.53 \times 10^{-2}  (\text{mK/W}),  B = 2.46 \times 10^{-4}  (\text{mK/W}) \\ \text{C} &= 5.47\text{E-9}  (\text{W/m-K}^3) \qquad \text{D} = 2.29\text{E-}14  (\text{W/m-K}^5) \\ \alpha &= 8.12 \cdot 10^{-3},  \text{Gd: Gd}_2\text{O}_3 \text{ concentration (wt%)} \\ \beta &= 1.24 \cdot 10^{-3},  \text{P: PuO}_2 \text{ concentration (wt%)} \\ \textbf{[注]} &= \mathcal{O} \textbf{:} \textbf{I} \textbf{:} \textbf{2} \textbf{5} \textbf{\%} \textbf{TD}  \overset{\sim}{\sim} \textbf{V} \checkmark \textbf{F} \textbf{i} \textbf{i} \textbf{B} \textbf{i} \textbf{A} \textbf{S},  - \textbf{R} \textbf{i} \textbf{C} \textbf{i},  \textbf{K} \textbf{I} \textbf{S} \textbf{S}, \\ K &= K_{95\%TD} \cdot (1 - \beta p) / (1 - 0.05 \beta), \qquad \beta = 2.58 - 0.58 \cdot 10^{-3} T,  T : (^{\circ}\text{C}) \end{split}$		

(3) MOX ペレットクリープ

(1) MOX クリープ	SKI-based MOX model	使用条件	ref.
1) $f_{H}=1$ $\dot{\varepsilon} = \frac{A_{2}(\dot{F})\sigma}{G^{2}} \exp A_{2} = \frac{2.63 \times 10^{5}}{-8}$ $Q_{2} = 3.776 \times 10^{6}$ $\sigma$ : uni-axial stress (MPa) $\sigma$ = 10: grain size (assume $\rho$ : density (%TD), above T : temperature (K), 2) $f_{H}=2$ $C = 5.56 \times 10^{-3}$ 3) $f_{H}=3$ $C = 9.73 \times 10^{-3}$	$p(-Q_2 / RT) + C\sigma \dot{F},$ $\frac{+8.93 \times 10^{-13} \dot{F}}{7.7 + \rho} \qquad (1/s),$ $D^5, \qquad C = 2.78 \times 10^{-30}$ $\dot{F} : \text{fission rate (fissions/m^3 s)}$ ed constant 10µm) $e 92\%, \text{ if less than 92\%, 92\%.}$ $R : \text{gas constant (8.31441 J/mol-K)}$ $^0, \text{ Others are the same.}$	f <sub>H</sub> =1: IPCRP=11 f <sub>H</sub> =2: IPCRP=12 f <sub>H</sub> =3: IPCRP=13	4.14

(2) Halden MOX Creep model  

$$\dot{\varepsilon} = 8.577 \cdot 10^4 \exp\left(-\frac{3.505 \times 10^5}{RT}\right) + 9.73 \cdot 10^{-30} \sigma \cdot f$$

$$\sigma : \text{uni-axial stress (MPa), } f : \text{fissions/m}^3 \text{-s}$$

$$R : 8.31441 (J/\text{mol-K}), \quad T : \text{temperature (K),}$$

$$IPCRP=15$$

$$4.15$$

(3) MOX ペレットクリーブ速度 MATPRO-11 model  

$$\dot{\varepsilon}_c = \frac{(B_1 + B_2 \dot{F})\sigma_1}{G^2} \exp[-Q_3 / T + B_3(1 - D) + B_4 f]$$
  
 $+ (B_5 + B_6 \dot{F})\sigma_2^{4.5} \exp[-Q_4 / T + B_7(1 - D) + B_4 f]$   
 $B_1=0.1007, B_2=7.57 \times 10^{20}$ ,  $B_3=33.3$ ,  $B_4=0.014$ ,  
 $B_5=6.469 \times 10^{-25}, B_6=0.0$ ,  $B_7=10.3$ ,  $Q_3=50327.1$ ,  $Q_4=70458.0$   
ここで、 $\dot{\varepsilon}_c : \mathcal{P}$  リープ速度 (S<sup>-1</sup>),  $\sigma_1 :$  相当応力(N/m<sup>2</sup>)  
G: 粒径 ( $\mu$ m)、 F: 核分裂率 (fissions/m<sup>3</sup>s) D: 理論密度比(-),  
p: 気孔率、 f: weight fraction of Pu, T: 温度 (K)  
 $\sigma :$  相当応力 (Nm<sup>2</sup>)  
ただし、  
 $\sigma \le \frac{16547416.8}{G^{0.5714}}$  のとき  $\sigma_1 = \sigma$ ,  $\sigma_2 = 0.0$ ,  
 $\sigma > \frac{16547416.8}{G^{0.5714}}$  のとき  $\sigma_1 = \frac{16547416.8}{G^{0.5714}}$ ,  $\sigma_2 = \sigma$ 



Fig.4.1 ペレットクリープの新モデル

(4) ポアソン比

MOXペレットポアソン比 (1) MATPRO-11	使用条件	Ref.
$\mu = 0.276$	IPOIS=30	3.4
MOX ペレットポアソン比 (2) Nutt + Yamada		
$\mu = (-0.23 \cdot f + 0.324) - 0.32 \cdot p$		4.31
ここで $p: 気孔率$ $f: モル fraction (U_{1-f}, Pu_f)O_2$	11 015 51	4.32
温度依存性は無いものとする。		

(5) ヤング率

MOX ペレットヤング率 (1) MATPRO-11	使用条件	Ref.
$E = 2.334 \times 10^{11} [1 - 2.752(1 - D)] [1 - 1.0915 \times 10^{-4} T] (1 + 0.15f)$ <i>E</i> : ヤング率(N/m <sup>2</sup> )、 <i>D</i> : 理論密度比(-)、 <i>T</i> : 温度(K), <i>f</i> : weight fraction of Pu	IPLYG=30	3.4



MOX ~	レット比熱 (1)	MATPRO-1	1	使用条件	Ref.
$C_{P,mox} = C$ $C_{P} = \frac{1}{T^{2}}$	$\frac{C_{P,UO2}(1-f)+C_{P,Pu}}{\frac{K_1\theta^2 \exp(\theta/T)}{2}\left[\exp(\theta/T)-1\right]^2} +$	$K_2 T + \left(\frac{O/M}{2}\right)^2$	$\frac{K_3 E_D}{RT^2} \exp\left(-\frac{E_D}{RT}\right)$		
f: weigh	t fraction of Pu			ISPH=30	3.4
C <sub>P</sub> : 比熱	(J/Kg·K), T: 温度	(K)			
0/M: 0/N	A比(一), R=8.314	3(J/mol⋅K)			
	$UO_2$	PuO <sub>2</sub>	<u>Unit</u>		
$K_1$	296.7	347.4	J/Kg•K		
<i>K</i> <sub>2</sub>	$2.43 \times 10^{-2}$	$3.95 \times 10^{-4}$	J/Kg·K <sup>2</sup>		
$K_3$	$8.745 \times 10^{7}$	$3.860 \times 10^{7}$	J/Kg		
	535.285	571.000	K		
$E_D$	$1.577 \times 10^{5}$	$1.967 \times 10^{5}$	J/mol		

# (7) 融点

MOX ペレット融点 (Solidus) (1)	MATPRO-11+Christensen	使用条件	Ref.
$T_m = T_u - 5.414 f_m + 0.007468 f_m^2 - T_m$ : ペレット融点(K), $T_u$ : UO <sub>2</sub> の未知 $f_m$ : weight fraction of Pu, $Bu$ : 燃焼度( 注) Christensen の式に基づき、10GWd/t	0.0032 <i>B<sub>u</sub></i> <sup>段射材の融点(=3113K) MWd/t) 当たり 32℃ 低下するとした。</sup>	常時 (UO <sub>2</sub> と 共通)	3.4 4.13

## (8) 熱膨張

MOX ペレット熱膨張率 (1) MATPRO-11	使用条件	Ref.
$\frac{\Delta L}{L} = \frac{\Delta L}{L} \bigg _{UO_2} (1 - f) + \frac{\Delta L}{L} \bigg _{PuO_2} f, \qquad \frac{\Delta L}{L} : \text{ $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{B}\mbox{$\mathcal{B}\mbox{$\mathcal{B}$\mbox{$\$		
$\frac{\Delta L}{L}\Big _{UO_2} = -4.972 \times 10^{-4} + 7.107 \times 10^{-6} T + 2.581 \times 10^{-9} T^2 + 1.140 \times 10^{-13} T^3$	IPTHEX=30	3.4
$\frac{\Delta L}{L}\Big _{P_{UO_2}} = -3.9735 \times 10^{-4} + 8.4955 \times 10^{-6} T + 2.1513 \times 10^{-9} T^2 + 3.7143 \times 10^{-16} T^3$		
T: 温度(°C), f: weight fraction of Pu		

MOX ペレット熱膨張率 (2)	Martin + Tokar	使用条件	Ref.
$\frac{\Delta L}{L}_{MOX} = \left[\frac{\Delta L}{L}_{UO2} \cdot (1-f) + \frac{\Delta L}{L}_{PuO2} \cdot f\right]$ ここで、 $\frac{\Delta L}{L}_{MOX}$ : MOX 燃料の熱膨張率、 $\frac{\Delta L}{L}_{PuO2}$ : PuO <sub>2</sub> の熱膨張率、 x: O/M 比係数(MO <sub>2x</sub> とする), f:	$\cdot$ (1+3.9·x) $\frac{\Delta L}{L_{UO2}}$ :UO2の熱膨張率、 モル fraction (U <sub>1-f</sub> , Pu <sub>f</sub> )O <sub>2</sub>		
$\frac{\Delta L}{L \ UO2} = (9.9734 \times 10^{-1} + 9.802 \times 10^{-6} \cdot T - 2.705 \times 10^{-6} \cdot T - 2.70$	$10^{-10} \cdot T^2 + 4.391 \times 10^{-13} \cdot T^3 - 1$	IPTHEX=31	4.26 4.33
$\frac{\Delta L}{L}_{UO2} = \left(9.9672 \times 10^{-1} + 1.179 \times 10^{-5} \cdot T - 2.429 \times 10^{-1}\right)$	$10^{-9} \cdot T^2 + 1.219 \times 10^{-12} \cdot T^3 - 1$		
$(279 \text{ K} \leq \text{T} \leq 1693 \text{ K})$ $\frac{\Delta L}{L}_{PuO2} = -1.2232 \times 10^{-4} + 7.5866 \times 10^{-6} \cdot (T - 27)^{-5.9768 \times 10^{-12}} \cdot (T - 273)^{3} + 4.4092 \times 10^{-15} \cdot (T - 273)^{4} - 1$	$(73) + 5.6948 \times 10^{-9} \cdot (T - 273)^2$ .2897 × 10 <sup>-18</sup> · $(T - 273)^5$		

MOX ペレット熱膨張率 (3) MATPRO	)-A		
熱歪み (=0 at 300 K): $\frac{\Delta L}{L_0} = K_1 T - K_2 + K_3 \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right)$			
T: 温度 (K)、 <u>Ep=7.0x10<sup>-20</sup></u> : 格子欠陥生成エネルギ	— (J)	IPTHEX=32	2.11
k: Boltzmann' 定数 (1.38×10 <sup>-23</sup> J/K)			
$K_1 = 9.0 \times 10^{-6} K^{-1}$ , $K_2 = 2.7 \times 10^{-3}$ , $K_3 = 7.0 \times 10^{-2}$			

(9) 焼きしまり

MOX ペレット焼きしまり密度変化 Schlemmer + Ichikawa	使用条件	Ref.
$\frac{\Delta D}{D} = 0.15 \cdot b  (b \le 15 \text{ GWd/t}) \qquad \frac{\Delta D}{D} = -0.10 \cdot b  (15 \text{ GWd/t} \le b)$	IDENSF=30	4.19
ここで、 D: 密度(%T.D.), b: 燃焼度(GWd/t)		4.20

# 4.3 ジルコニウム合金被覆管物性値

(1)被覆管熱伝導率

ジルカロイ熱伝導率	MATPRO-Version 09	)	使用条件	ref.
<b>R.T.~</b> 融点に対して				
$k = 7.51 + 2.09 \times 10^{-2} T - 1.45 \times$	$10^{-5}T^2 + 7.67 \times 10^{-9}T^3$	$(W/m \cdot K)$	常時	3.4
T:温度 (K)				

### (2) 被覆管酸化膜の熱伝導率、emissivity, ヤング率

ZrO2熱伝導率 (1)	MATPRO-A		使用条件	ref.
$k = 0.835 + 1.81 \times 10^{-4} T$ T:温度 (K)	(W/mK)		IZOX=1	2.11
ZrO2 熱伝導率 (2)	MATPRO-11			
$k = 1.96 - 2.41 \times 10^{-4} T + 6.43 \times 10^{-4} T$ : temperature (K)	$\times 10^{-7} T^2 - 1.95 \times 10^{-10} T^3$	(W/mK)	IZOX=2 Default	3.4

なお、酸化膜熱伝導率には以下の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
	ZrO2の熱伝導率式は	
CNOX	$K = (0.835 + 1.81 \times 10^{-4} \cdot T) \cdot f$	0.0
	$f = 1 - CNOX \cdot S$ , $S$ :酸化膜厚( $\mu m$ )	
	で与える。したがって、CNOX は酸化膜熱伝導率に酸化膜の厚みの効	
	果を入れるファクターである。	

$ZrO_2 \mathcal{O}$ emissivity		Ref.
$\varepsilon = 0.809$ とする	常時	*
ZrO <sub>2</sub> のヤング率 MATPRO-A		
$Y = -3.77 \times 10^7 T + 1.637 \times 10^{11} **** \qquad 300 < T < 1478 K$		
$Y = -8.024 \times 10^7 T + 2.225 \times 10^{11} \qquad 1478 < T < Tsol$	常時	2.11
(T <sub>sol</sub> =melting temperature of oxide; 2970K)		
$Y = 1 T_{sol} \leq T$		
Y: young's modulus (Pa) T: 温度(K)		

(3) ジルカロイヤング率

ジルカロイヤング率 (1) Fisher	使用条件	ref.
$E = [9.900 \times 10^{5} - 566.9 \times (T - 273.15)] \times 9.8067 \times 10^{4} $ (Pa) T: 温度(K)	IZYG=1	4.34
ジルカロイヤング率(2) MATPRO-A, -11 1) 相: $Y = (1.088 \times 10^{11} - 5.475 \times 10^{7} T + K_{1} + K_{2})/K_{3}$ (Pa) 2) $\beta$ 相: $Y = 9.21 \times 10^{10} - 4.05 \times 10^{7} T$ (Pa) T: 被覆管温度(K) K <sub>1</sub> : 酸化の効果を反映する項(Pa) K <sub>2</sub> : 冷間加工の効果を反映する項(Pa) K <sub>3</sub> : 高速中性子フルーエンスを反映する項(unitless) $K_{1} = (6.61 \times 10^{11} + 5.912 \times 10^{8} T)\Delta$ $K_{2} = -2.6 \times 10^{10} C$ , $K_{3} = 0.88 + 0.12 \exp\left(-\frac{\Phi}{10^{25}}\right)$ $\Delta$ :未照射被覆管の酸素濃度からの酸素濃度の増分(kg O/kg zircaloy). ただし未照射被覆管の酸素濃度は非常に低い(1.2gO/kg zircaloy ので、ど影響はない。 C: 冷間加工(断面減少率)、 $\Phi$ :高速中性子fluence (n/m <sup>2</sup> )	IZYG=2 Default	2.11, 3.4

### (4) 熱膨張率

ジルカロイ熱膨張(1) MATPRO-09	使用条件	ref.
27~800℃に対して		
軸方向熱膨張: $\Delta L / L_o = -2.506 \times 10^{-5} + 4.441 \times 10^{-6} T$	ICATHX=0	2.13
したがって熱膨張係数は $lpha$ = 4.441 × 10 <sup>-6</sup>	(標準値)	
半径方向熱膨張: $\Delta D / D_o = -2.373 \times 10^{-4} + 6.721 \times 10^{-6} T$		
したがって $lpha=6.721 imes10^{-6}$		
$T: 温度 (\mathbb{C})$ 、 : 熱膨張係数 ( $\mathbb{C}^{-1}$ )		
ジルカロイ熱膨張(2) Scott		
21~429°Cに対して 動士向教唆理: AL/L 4252220、206752T (in /in) × 10 <sup>-6</sup>	ICATHX=1	*
軸方回熱膨張: ΔL / $L_o = 42.55250 + 5.967551$ (In / In) × 10		
T: 温度 (°C)		

ジルカロイ熱膨張(3) MATPRO-A		
For 300 <t<1083 k<="" td=""><td></td><td></td></t<1083>		
$\varepsilon_{11} = 4.95 \times 10^{-6} T - 1.485 \times 10^{-3}$		
$\varepsilon_{33} = 1.26 \times 10^{-5} T - 3.78 \times 10^{-3}$		
$arepsilon_{11}$ :周方向熱膨張 (m/m)		
ε <sub>33</sub> : 軸方向熱膨張 (m/m)		
1083 <t<1244 k<="" td=""><td></td><td></td></t<1244>		
$\varepsilon_{11} = \left[ 2.77763 + 1.09822 \cos\left(\frac{T - 1083}{161}\pi\right) \right] \times 10^{-3}$	ICATHX=2	2.11
$\varepsilon_{33} = \left[ 8.76758 + 1.09822 \cos\left(\frac{T - 1083}{161}\pi\right) \right] \times 10^{-3}$		
1244 <t<2098 k<="" td=""><td></td><td></td></t<2098>		
$\varepsilon_{11} = 9.7 \times 10^{-6} T - 1.04 \times 10^{-2}$		
$\varepsilon_{33} = 9.7 \times 10^{-6} T - 4.4 \times 10^{-3}$		
ジルカロイ熱膨張(4) MATPRO-11	-	
300 <t<1073 k<="" td=""><td></td><td></td></t<1073>		
$\frac{\Delta L}{L_0} = 4.44 \times 10^{-6} T - 1.24 \times 10^{-3} : 軸方向熱膨張$	ICATHX=3	3.4
$\frac{\Delta D}{D_0} = 6.72 \times 10^{-6} T - 2.07 \times 10^{-3} : in each and e$		
ZrO <sub>2</sub> 熱膨張 MATPRO-A	-	
$\varepsilon_0 = 7.8 \times 10^{-6} T - 2.34 \times 10^{-3}$ 300 <t<1478 k<="" td=""><td></td><td></td></t<1478>		
(monoclinic ZrO <sub>2</sub> )	常時	2.11
$\varepsilon_0 = 1.302 \times 10^{-5} T - 3.338 \times 10^{-2}$ 1478 <t<2973 k<="" td=""><td></td><td></td></t<2973>		
(tetragonal and cubic ZrO <sub>2</sub> )		

なお、ICATHX=0の場合には以下の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
ATHEX	ジルカロイの軸方向熱膨張係数を ATHEX で与える。 標準値の場合が MATPRO-09 の値である。	$4.441 \times 10^{-6}$
RTHEX	ジルカロイの半径方向熱膨張係数を PTHEX で与える。 標準値の場合が MATPRO-09 の値である。	$6.721 \times 10^{-6}$

(5) ジルカロイクリープ [照射下]

照射下ジルカロイクリープ(1) MATPRO-Version 09	使用条件	ref.
$\dot{\varepsilon} = K\phi(\sigma + Be^{C\sigma}) \exp(-10,000 / RT)t^{-\frac{1}{2}}$ (D) $\dot{\varepsilon} : = \Box = \Delta p \cup \neg \neg$	CRPEQ =0	2.13
照射下ジルカロイクリープ (2) Franklin model $\varepsilon_{creep} = \frac{\Delta D}{D} = A \cdot t^m \cdot \phi^p \cdot \sigma_{\theta}^n \cdot \exp\left(-\frac{Q}{T}\right)$ $A = 1.11 \times 10^{-13} \qquad t: \text{hours}$ $m = 0.682 \qquad \phi: n/\text{cm}^2 \cdot \text{s} \ (>1\text{MeV})$ $p = 0.550 \qquad \sigma_{\theta}: \text{MPa}$ $n = 0.579 \qquad T: \text{Kelvin}$	CRPEQ=2	4.35

照射下ジルカロイクリープ (3) 燃安専モデル		
Zry-4 用 照射下クリープ式: $\dot{\varepsilon}^c = \dot{\varepsilon}_{th}^c + \dot{\varepsilon}_{irr}^c$ (1/hr)		
1) 熱クリープひずみ速度 : 熱クリープひずみを		
$\varepsilon_{th}^{c} = K \cdot t^{m}$ $\varepsilon \neq \Im \varepsilon$		
$\dot{\varepsilon}_{th}^{c} = mK^{\frac{1}{m}}\varepsilon_{H}^{(1-\frac{1}{m})}$		
$\varepsilon_{H}(=\varepsilon_{th}^{c}) = \sum_{k=1}^{n} \dot{\varepsilon}_{th,k}^{c} \cdot \Delta t_{k}$ : 前タイムステップ(n-1)までの		
熱クリープひずみ		
$K = \exp\left\{-13.3 + \left(-0.416 + 8.22 \times 10^{-4} T\right)\sigma_{eq} + 6.59 \times 10^{-3} T\right\}$		
$m = -1.07 + (-0.00343 + 7.27 \times 10^{-5} T)\sigma_{eq} + 1.95 \times 10^{-3} T$		
$\sigma_{_{eq}}$ :相当応力 (kgf/mm <sup>2</sup> )		
T:温度( )		
2) 照射クリープひずみ速度: (ただし、本式のソースは不明)		
$\dot{\varepsilon}_{irr}^{c} = 6.64 \times 10^{-25} \phi^{1.23} \sigma_{eq}^{1.34}$	CRPEQ=1	4.36
[数値計算での利用方法]		
式の形から、時間 $t$ を消去する必要はなく、 $f = \overline{\varepsilon}^c$ とおく。		
円周方向および軸方向のクリープひずみ増分は、		
$d\varepsilon_{\theta}^{c} = \frac{1}{2\overline{\sigma}} (2\sigma_{\theta} - \sigma_{z}) \cdot d\overline{\varepsilon}^{c}$		
$d\varepsilon_z^c = \frac{1}{2\overline{\sigma}} (2\sigma_z - \sigma_\theta) \cdot d\overline{\varepsilon}^c$		
である。なお、上式中の $\overline{\varepsilon}^c$ については $\overline{\varepsilon}^c = \overline{\varepsilon}_n^c + \theta \cdot d\overline{\varepsilon}^c  \left(\theta = \frac{1}{2}\right)$		
として与え、繰り返し収束計算により <i>€°</i> を求める。		

照射下ジルカロイクリープ	(4) Halden (McGrath) model		
$\varepsilon_{creep} = \frac{\Delta D}{D} = A \cdot t^m \cdot \phi^p$ $A = 1.6 \times 10^{-12}$ $m = 0.450$ $p = 0.550$ $n = 0.579$ $Q = 1173$	$ \sigma_{\theta}^{n} \cdot \exp\left(-\frac{Q}{T}\right) $ <i>t</i> :hours $\phi:n/cm^{2} \cdot s \ (>1MeV)$ $\sigma_{\theta}:MPa$ <i>T</i> :Kelvin	CRPEQ=3	4.37

(6) ジルカロイクリープ [高温・非照射]

高温ジルカロイクリープ (1) Rosinger		
$\dot{\varepsilon}_{\alpha} = 2000\sigma^{5.32} \exp\left(-\frac{34220}{T}\right) \qquad (730K \le T \le 1073K)$ $\dot{\varepsilon}_{\alpha} : \mathcal{P} \cup -\mathcal{P}$ 速度(s <sup>-1</sup> ), $\sigma : 相当応力(MPa)$ $940 \le T \le 1073 \text{ K}$ $\dot{\varepsilon}_{\alpha} = 2000\sigma^{5.32} \exp(-284600/kT)$ 1073 < T < 1273  K $\varepsilon_{\alpha+\beta} = \left\{1.0 - \left(\frac{T - 1073}{200}\right)^4\right\} \dot{\varepsilon}_{\alpha} + \left(\frac{T - 1073}{200}\right)^4 \dot{\varepsilon}_{\beta}$ $1273 \le T \text{ K}$ $\dot{\varepsilon}_{\beta} = 8.1\sigma^{3.79} \exp(-142300/kT)$ k: 8.314 J/mol·K	HTCRP=1 (Default)	4.38
高温ジルカロイクリープ (2) Donaldson		
$\dot{\varepsilon}_{0} = A_{1} \left(\frac{G}{T}\right) \left(\frac{\sigma_{0}}{G}\right)^{n} \exp\left(-\frac{Q_{1}}{RT}\right)$ $G = 3.326 \times 10^{10} - 2.244 \times 10^{7} (T - 273) + 2.161 \times 10^{3} (T - 273)^{2}  (\text{Nm}^{-2} (973 \le T \le 1273K))$ $\frac{A_{1}  (\text{N}^{-1}\text{m}^{2}\text{Ks}^{-1})  \text{n}  Q_{1}  (\text{kJmol}^{-1})  \text{*}}{Q_{1}  (\text{kJmol}^{-1})}$ Westinghouse tube $4.43 \times 10^{16}  5.31  0.06  266.8  14.0  20$ Wolverine tube $1.83 \times 10^{17}  5.43  0.02  272.2  12.0  21$ Sandvik(NRU) tube $6.54 \times 10^{16}  4.94  0.09  294.0  16.0  22$	) HTCRP=* 20 21 22	4.39
※ 通常運転及び過渡解析において、高温クリープモデル(1)と(2)が用いら	いるのは、高調	温クリープモ
デル(1)と(2)から求められるのクリーブ速度が、通常運転クリープモデ	レ(1)~(3)から	ら求められる
のクリーノ迷度を上回る場合においてのみでめる。 このとき CRPEQ=0、=1、=2であり、HTCRP=1 あるいは=20~22 とする。		

#### JAEA-Data/Code 2010-035

なお、ジルカロイクリープ式には、以下の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
CRFAC	クリープひずみ速度を CRFAC 倍する。	1.0
IPUGH	IPUGH=0: Pugh の反転を考慮しない。 IPUGH=1: Pugh の反転を考慮する。	0

## (7) 被覆管ポアソン比

ジルカロイポアソン比 Fisher	使用条件	ref.
$v = 0.3303 + 8.376 \times 10^{-5} (T - 273.15)$		
T:温度 (K)	常時	4.34
ZrO <sub>2</sub> ポアソン比 MATPRO-A		
v = 0.30	常時	2.11

### (8) ジルカロイ塑性

ジルカロイ歪硬化曲線式 (1)	FEMAXI-III model	計算条件	ref.
$\sigma = K\varepsilon^n$ $\sigma : 真応力 (kg/mm^2) , \varepsilon : ::::::::::::::::::::::::::::::::$	真ひずみ、 $n : 歪硬化指数$ $(kg / mm^2)$ $10^{-14}\phi$ $m^2$ ) $E > 1 MeV$ E > 1 MeV 結材) 余去材) $T \le 450 ^{\circ}$	ICPLAS=1	1.2

### ジルカロイ歪硬化曲線式については、次の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
ISTR	ISTR $\neq 0$ の場合には $K = \sigma_y + 33.44$ とする。	0

ジルカロイ歪硬化曲線式 (2) MATPRO-11		
以下の式において、歪み速度 $\dot{arepsilon}$ は前 time step で決定された値を用いる。		
$\sigma = K\varepsilon^n \left[\frac{\dot{\varepsilon}}{10^{-3}/s}\right]^m$		
σ: 真応力 (Pa)		
$\dot{arepsilon}$ : 真歪み速度. もし $\dot{arepsilon}$  ならば $\dot{arepsilon}$ =10 <sup>-5</sup> /s.		
T<850 K $n = -1.86 \times 10^{-2} + T [7.110 \times 10^{-4} - 7.721 \times 10^{-7} T]$		
$T \ge 850 \text{ K}$ $n = 0.027908$		
n にかかる調整ファクター RIC は、照射と冷間加工の効果を反映す		
る。		
$RIC = \left[0.847 \exp(-39.2CWN) + 0.153 + CWN(-9.16 \times 10^{-2} + 0.229CWN)\right]$		
$\times \exp\left[\frac{-\phi^{\frac{1}{3}}}{3.73 \times 10^7 + 2 \times 10^8 \cdot CWN}\right]$		
CWN: 歪み硬化指数に対する有効冷間加工(断面減少率)		
$\phi$ :有劾高速中性子 fluence (n/m <sup>2</sup> >1.0MeV)		
T $\leq$ 730 K $K = 1.0884 \times 10^9 - 1.0571 \times 10^6 T$	ICPLAS=2	3.4
730 <t<900 <math="" k="">K = A_1 + T[A_2 + T(A_3 + A_4 \cdot T)]</t<900>		
$A_1 = -8.152540534 \times 10^9$ , $A_2 = 3.368940331 \times 10^7$		
$A_3 = -4.317334084 \times 10^4$ , $A_4 = 1.769348499 \times 10^1$		
$900 \le \mathrm{T} \qquad \qquad K = \exp\left(8.755 + \frac{8663}{T}\right)$		
$DK = 0.546 \cdot CWK \cdot K + 5.54 \times 10^{-18} \phi$		
DK: strength coefficient for irradiated and cold-worked		
material minus the equations. (Pa)		
CWK: effective cold work for strength coefficient (unitless		
of area)		
$T \le 730 \text{ K}$ $m = 0.02$		
730 <t<900 <math="" k="">m = A_5 + T[A_6 + T(A_7 + A_8T)]</t<900>		
$A_5 = 2.063172161 \times 10^1,  A_6 = -7.704552983 \times 10^{-2}$		
$A_7 = 9.504843067 \times 10^{-5},  A_8 = -3.860960716 \times 10^{-8}$		
900 $\leq T \leq 1090$ K $m = -6.47 \times 10^{-2} + 2.203 \times 10^{-4} T$		

ジルカロイ歪硬化曲線式 (3) 修正 MATPRO-11 モデル		
以下の式において、歪み速度 $\dot{\epsilon}$ は前 time step で決定された値を 用いる。 $\sigma = K \epsilon^n \left[ - \frac{\dot{\epsilon}}{2} \right]^m$		
$\sigma: 真応力 (Pa)$ $\sigma: 真応力 (Pa)$ $\dot{\epsilon}: 真歪み速度.$ $        もし\dot{\epsilon} < 10^{-5}/s \ cost \ \dot{\epsilon} = 10^{-5}/s.        もし\dot{\epsilon} \ge 6.34 \cdot 10^{-3} s^{-1} cost \ \dot{\epsilon} = 6.34 \cdot 10^{-3} s^{-1}.(1) 歪み硬化指数 n$		
T<850 K $n = -1.86 \times 10^{-2} + T [7.110 \times 10^{-4} - 7.721 \times 10^{-7} T]$		
T>=850 K $n = 0.027908$ $RIC = \begin{bmatrix} 0.847 \exp(-39.2CWN) + 0.153 + CWN(-9.16 \times 10^{-2} + 0.229CWN) \end{bmatrix}$ $\times \exp \begin{bmatrix} \frac{-\phi^{\frac{1}{3}}}{3.73 \times 10^{7} + 2 \times 10^{8} \cdot CWN} \end{bmatrix}$ CWN: 歪み硬化指数に対する有効冷間加工(断面減少率) $\phi$ : 有効高速中性子 fluence (n/m <sup>2</sup> ) (>1.0MeV)	ICPLAS=3	
(2) 強度ファクターK: T<=730 K $K = 1.0884 \times 10^9 - 1.0571 \times 10^6 T$		
730 <t<900 <math="" k="">K = A_1 + T [A_2 + T (A_3 + A_4 \cdot T)]</t<900>		
$A_1 = -8.152540534 \times 10^9$ , $A_2 = 3.368940331 \times 10^7$ $A_3 = -4.317334084 \times 10^4$ , $A_4 = 1.769348499 \times 10^1$		
900<=T $K = \exp\left(8.755 + \frac{8663}{T}\right)$		
$DK = 0.546 \cdot CWK \cdot K + 5.54 \times 10^{-18} \phi \cdot \mathbf{KF} \qquad (\phi \le 2.6 \times 10^{25})$		
DK = 0.546 · CWK · K + 5.54 × 10 <sup>-18</sup> × 2.6 × 10 <sup>25</sup> · KF = 0.546 · CWK · K + 1.44 × 10 <sup>8</sup> · KF (2.6 × 10 <sup>25</sup> < ∅) ただし、KF は name-list parameter であり、KF=1.0 (Default) である。		





歪み関係 (ICPLAS=3) at 1.3x10<sup>26</sup> n/m<sup>2</sup>

ジルカロイ歪硬化曲線式 (4) 太田モデル		
3.6.2 被覆管の応力歪み関係のモデル (3)参照		
1) 応力と歪みの関係式		
弾性域; $\sigma = E\varepsilon$ , $E: ヤング率$		
中間領域; $\sigma = ax^3 + bx^2 + Ex + \sigma_1$		
ただし、 $x = \varepsilon - \varepsilon_1$		
塑性域; $\sigma = K \varepsilon^n \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{10^{-3}}\right)^m$		
K: 強度係数		
n: 歪み硬化指数		
$\dot{arepsilon}$ :真歪み速度. もし $\dot{arepsilon}$  $10^{-5}$ / s ならば $\dot{arepsilon}$ = 10 $^{-5}$ / s .		
m: 歪み速度感度係数		
以下では、 $K\left(rac{\dot{arepsilon}}{10^{-3}} ight)^m$ をまとめて $K'$ と表記する。		
2) 強度係数 K		2.5
① 応力除去材被覆管(PWR)の <i>K</i> (MPa)		5.5
温度 T 及び高速中性子フルエンス Φ (>1.0MeV)に依存するとして以下		
のとおり与える。		
T≤900 K (626.85°C) $K = L_1 - L_2(T - 273.15)$		
+ { $L_3 - L_4(T - 273.15)$ } · { $1 - \exp(-1.751 \times 10^{-25} \Phi)$ }		
$L_1 = 1745, \ L_2 = 2.517, \ L_3 = 526, \ L_4 = 0.748$		
$L_1 = 1745, \ L_2 = 2.517, \ L_3 = 526, \ L_4 = 0.748$ $K : MPa$ , T: Kelvin, $\Phi : neutrons/m^2$		
$L_1 = 1745, \ L_2 = 2.517, \ L_3 = 526, \ L_4 = 0.748$ $K : MPa, T: Kelvin, \Phi :neutrons/m^2$ $900 < T < 1000 K (626.85 \sim 726.85 °C)$ $K = A_1 + T \{A_2 + T(A_3 + TA_4)\}$		
$L_{1} = 1745, \ L_{2} = 2.517, \ L_{3} = 526, \ L_{4} = 0.748$ $K : MPa,  T: Kelvin,  \Phi : neutrons/m^{2}$ $900 < T < 1000 \text{ K } (626.85 \sim 726.85 ^{\circ}\text{C})$ $K = A_{1} + T \left\{ A_{2} + T (A_{3} + TA_{4}) \right\}$ $+ \left[ B_{1} + T \left\{ B_{2} + T (B_{3} + TB_{4}) \right\} \right] \times \left\{ 1 - \exp(-1.751 \cdot 10^{-25} \Phi) \right\}^{0.5}$		
$L_{1} = 1745, \ L_{2} = 2.517, \ L_{3} = 526, \ L_{4} = 0.748$ $K : MPa,  T: \text{Kelvin},  \Phi : \text{neutrons/m}^{2}$ $900 < T < 1000 \text{ K} (626.85 \sim 726.85 ^{\circ}\text{C})$ $K = A_{1} + T \left\{ A_{2} + T (A_{3} + TA_{4}) \right\}$ $+ \left[ B_{1} + T \left\{ B_{2} + T (B_{3} + TB_{4}) \right\} \right] \times \left\{ 1 - \exp(-1.751 \cdot 10^{-25} \Phi) \right\}^{0.5}$ $A_{1} = 3.041233371 \times 10^{4}, \qquad B_{1} = 3.3282432 \times 10^{2}$		
$L_{1} = 1745, \ L_{2} = 2.517, \ L_{3} = 526, \ L_{4} = 0.748$ $K : MPa,  T: Kelvin,  \Phi : neutrons/m^{2}$ $900 < T < 1000 \text{ K } (626.85 \sim 726.85 ^{\circ}\text{C})$ $K = A_{1} + T \left\{ A_{2} + T (A_{3} + TA_{4}) \right\}$ $+ \left[ B_{1} + T \left\{ B_{2} + T (B_{3} + TB_{4}) \right\} \right] \times \left\{ 1 - \exp(-1.751 \cdot 10^{-25} \Phi) \right\}^{0.5}$ $A_{1} = 3.041233371 \times 10^{4}, \qquad B_{1} = 3.3282432 \times 10^{2}$ $A_{2} = -8.285933869 \times 10^{1}, \qquad B_{2} = 2.98027653$		
$L_{1} = 1745, \ L_{2} = 2.517, \ L_{3} = 526, \ L_{4} = 0.748$ $K : MPa,  T: Kelvin,  \Phi : neutrons/m^{2}$ $900 < T < 1000 \text{ K } (626.85 \sim 726.85 ^{\circ}\text{C})$ $K = A_{1} + T \left\{ A_{2} + T (A_{3} + TA_{4}) \right\}$ $+ \left[ B_{1} + T \left\{ B_{2} + T (B_{3} + TB_{4}) \right\} \right] \times \left\{ 1 - \exp(-1.751 \cdot 10^{-25} \Phi) \right\}^{0.5}$ $A_{1} = 3.041233371 \times 10^{4}, \qquad B_{1} = 3.3282432 \times 10^{2}$ $A_{2} = -8.285933869 \times 10^{1}, \qquad B_{2} = 2.98027653$ $A_{3} = 7.490958541 \times 10^{-2}, \qquad B_{3} = -6.81286681 \times 10^{-3}$		



3) 歪み硬化指数 n

温度 T のみに依存するとして以下の式で計算する。照射による変化はないとしている。

T≤673.15 K (400°C)  $n = C_1 - C_2(T - 273.15)$ 673.15<T<1000 K (400~726.85°C)  $n = C_3 + T(C_4 + C_5T)$  $C_1 = 0.213$ ,  $C_2 = 1.808 \times 10^{-4}$ ,  $C_3 = 3.4708518 \times 10^{-2}$ ,

 $C_4 = 4.9565251 \times 10^{-4}$ ,  $C_5 = -5.0245302 \times 10^{-7}$ 

1000 K≤T (726.85°C~)  $n = C_6 = 0.027908$ 

4) 歪み速度感度係数 m

MATPRO から変更なし。温度 T のみに依存するとして以下の式で計算す

る。照射による変化はないとする。

 $T \le 730 \text{ K}$  (456.85°C) m = 0.02

730<T<900 K (456.85 $\sim$ 626.85 $^{\circ}$ C)

$$m = A_5 + T \left\{ A_6 + T (A_7 + A_8 T) \right\}$$

900 K  $\leq T$  (626.85°C~)  $m = A_9 + A_{10}T m = -6.47 \times 10^{-2} + 2.203 \times 10^{-4}T$ 

$A_5 =$	$2.063172161 \times 10^{1}$	$A_6 = -7.704552983 \times 10^{-2}$
$A_7 =$	$9.504843067  imes 10^{-5}$	$A_8 = -3.860960716 \times 10^{-8}$
$A_9 =$	$-0.67 \times 10^{-2}$	$A_{10} = -2.203 \times 10^{-4}$

(9) ジルカロイ照射成長

ジルカロイ照射成長(1)	MATPRO-Version 09	使用条件	ref.
照射成長 (一) : $\frac{\Delta L}{L} = A \left[ \exp(240.8) \right]$	$(8 / T) ] [\phi t]^{\frac{1}{2}} [1 - 3f_{z}] [1 + 2.0CW]$		
$A = 1.407 \times 10^{-16} \left( n \ / \ m^2 \right)$	) <sup>-1/2</sup> , T:温度 (K)	ICAGRW=1	2.13
$\phi t$ :高速中性子照射量 $(n$	$(E \ge 1MeV)$ ( $E \ge 1MeV$ )	Default	
$f_{\scriptscriptstyle Z}:$ 軸方向ファクター,	CW: コールドワーク		

ICAGRW=1の場合には、以下の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
CATEXF	軸方向ファクター $f_Z$	0.05
COLDW	コールドワーク CW	0.81

ジルカロイ照射成長(2) Manzel	使用条件	ref.
照射成長(%): $\frac{\Delta L}{L_o} = 0.1 (\phi \cdot t / 10^{21})^n$ $\phi \cdot t$ : 高速中性子フルエンス (n/cm <sup>2</sup> ) n : 0.65~0.67 の範囲の定数 (0.66 を使用)	ICAGRW=2	*
ジルカロイ照射成長(3) Hanerz		
ジルカロイ単結晶の C 軸に直角方向における照射成長(一) : $\left(\frac{\Delta L}{L_o}\right) \perp c = 6 \times 10^{-12} (\phi t)^{0.4}$ $\phi \cdot t$ : 高速中性子フルエンス (n/cm <sup>2</sup> )	ICAGRW=3	*
ジルカロイ照射成長(4) Hesketh	-	
照射成長(一): $\frac{\Delta L}{L_o} = A \cdot \sqrt{\phi \cdot t}$ $\phi \cdot t$ : 高速中性子フルエンス (n/cm <sup>2</sup> ) $A: フィッティング定数(=5 \times 10^{-14})$	ICAGRW=4	4.40

# <u>(11) ジルカロイ</u>比熱

ジルカロイ比熱	MATPRO- 09	使用条件	ref.
$Cp = 245.11 + 0.15558T - 3.3414 \times 10^{-5} T^2$			
<i>Cp</i> :比熱(J/kg・K)	T :温度(K) (300-1090K)	常時	2.13
ZrO <sub>2</sub> 比熱	Couglin	使用条件	ref.
Cp = 46.48 + 2.134T - 2.936	$\times 10^{-3} T^2 + 1.433 \times 10^{-6} T^3$	2년수 11년~	
<i>Cp</i> :比熱 (J/kg・K)	T :温度 (K)	吊時	*

(10) ジルカロイ密度

ジルカロイ密度	MATPRO-Version 09	使用条件	ref.
$\rho = 6.55  \left(g / cm^3\right)$		常時	2.13
ZrO <sub>2</sub> 密度	MATPRO-A		
$\rho = 5.6  \left(g / cm^3\right)$		常時	2.11

## (11) 被覆管腐食

被覆管の腐食速度は以下のオプションより選択する。

被覆管腐食速度(1) EPRI	使用条件	ref.
被覆管腐食速度: $dS / dt = (A / S^2) \exp(-Q_1 / RT)$ 遷移後腐食速度: $dS / dt = C \exp(-Q_2 / RT)$ , $C = C_0 + U(M\phi)^P$ 遷移の生じる酸化膜厚: $D \exp(-Q_3 / RT - ET)$ $dS / dt$ : 腐食速度( $\mu m / day$ ) $S$ : 酸化膜厚( $\mu m$ ) $T$ : 酸化膜厚( $\mu m$ ) T: 酸化膜足金属相の界面温度(K) $\phi$ : 高速中性子束( $n / cm^2 s$ ) R: 気体定数(1.987cal / mol · K) $A = 6.3 \times 10^9 (\mu m^3 / day)$ $Q_1 = 32289(cal / mol)$ $C_o = 8.04 \times 10^7 (\mu m / day)$ $U = 2.59 \times 10^8 (\mu m / day)$ $M = 7.46 \times 10^{-15} (cm^2 s / n)$ $P = 0.24$ $Q_2 = 27354(cal / mol)$ $D = 2.14 \times 10^7 (\mu m)$ $Q_3 = 10763(cal / mol)$ $E = 1.17 \times 10^{-2} (K^{-1})$	ICOPRO=1	2.12
被覆管腐食速度(2) MATPRO-A		
遷移前: $S = (4.976 \times 10^{-3} A \cdot t \cdot \exp(-15660 / T) + S_o^{-3})^{\frac{1}{3}}$ 遷移後: $S = 82.88A \cdot t \cdot \exp(-14080 / T) + S_{TRAN}$ 遷移時の酸化膜厚: $S_{TRAN} = 7.749 \times 10^{-6} \exp(-790 / T)$ S: 酸化膜厚 (m) , t: 時間 (days) A: 1.5 (for PWR) , =9 (for BWR)	ICORRO=2 (PWR) ICORRO=3 (BWR)	2.11

なお、ICORRO=0(標準値)の場合には被覆管の腐食は無いものとして扱う。

被覆管腐食には以下の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
FCORRO	酸化膜成長速度の加速因子 $\frac{ds}{dt} = (1 + 0.04\Delta T \cdot FCORRO) \frac{ds}{dt}$ $\Delta T$ :酸化膜内外面 (金属相との境界面 – 冷却水側) での温度差 (°C) とする。	0.0

コメント: Piling-Bwedworth Ratio of ZrO<sub>2</sub>  

$$\rho_{ZrO2}X = \rho_{Zr}Y + \alpha_{ox} \times \rho_{ZrO2}X$$
X: 酸化膜厚さ (µm)  
Y: 酸化膜に転換したジルカロイ金属相の厚み (µm)  
 $\rho_{Zr}$ : ジルカロイ密度 6.55 or 6.49 (MATPRO-A) (g/cm<sup>3</sup>)  
 $\rho_{ZrO2}$ : 酸化膜密度, 5.6 or 5.82 (MATPRO-A) (g/cm<sup>3</sup>)  
 $\alpha_{ox}$ : 酸化膜 ZrO<sub>2</sub> における酸素の重量比率 = 0.260  
Piling-Bedworth ratio =  $\frac{X}{Y} = \frac{\rho_{Zr}}{(1.0 - 0.26)\rho_{ZrO2}} = 1.51$  or 1.56 or 1.58
## 4.4 SUS304 ステンレス被覆管物性値

SUS304 熱伝導率			使用条件	ref.
T:温度 R.T.~848 (K)	$k = 0.1065 + 1.326 \times 10^{-4} T$	$(W/cm \cdot K)$	ITMC=41	Х

注:ジルカロイの熱伝導率を ITMC=1 (Default) と指定する。

SUS304 酸化膜の熱伝導率	使用条件	ref.
不 明; ジルカロイ酸化膜の熱伝導率と等しいと仮定する	IZOX=41	

注:ジルカロイ酸化膜の熱伝導率を IZOX=1 (Default) と指定する。

SUS 酸化膜の emissivity	使用条件	ref.
不 明; ジルカロイ酸化膜の emissivity と等しいと仮定する	OXEMS=41	

注:ジルカロイ酸化膜の emmisivity を OXEMS=1 (Default) として指定する。

SUS304 ヤング率	使用条件	ref.
${21840.0 - 9.326(T - 273.15)} \times 9.8067.10^{6}$ (Pa) T:温度(K)	IZYG=41	Х

SUS304 熱膨張	使用条件	ref.
T=300~848 Kに対して 熱膨張の係数(1/K)は $\lambda = 1.629 \times 10^{-5} + 3.285 \times 10^{-9} T$ $-2.198 \times 10^{-12} T^2 + 1.629 \times 10^{-15} T^3$ したがって熱膨張量は $\Delta L = \lambda \cdot \Delta T \cdot L_0$ となる。	ICATHX=41	X
不明;ジルカロイ酸化膜の熱膨張と等しいと仮定する	OXTHM=41	

注:ジルカロイ酸化膜の熱膨張率を OXTHM=1 (Default) と指定する。

SUS304 照射成長	計算条件	ref.
照射成長は0とする。	ICAGRW=41	Х

SUS304 ポアソン比		使用条件	ref.
$v = 0.265 + 7.875 \times 10^{-5} \left( T - 273.15 \right)$	T:温度 (K)	ICPOIS=41	Х

注:ジルカロイのポアソン比を ICPOIS=1 (Default) と指定する。

SUS304 照射クリープ	使用条件	ref.
$\begin{split} \dot{\varepsilon} &= \overline{E}\varphi\overline{\sigma}\left\{\left(C_1\overline{E}\cdot\varphi/C_2\right)\cdot\exp\left(-\overline{E}\cdot\varphi\cdot t/C_2\right)+C_3\right\}\\ \dot{\varepsilon} &: \ \mathcal{O} \cup -\mathcal{O} \cup \vec{\tau}$ み速度 (m/m・hr) $\overline{E} &= 中性子エネルギー(MeV),  \varphi = 高速中性子束(n/cm^2 \cdot s),\\ \overline{\sigma} &= \text{equivalent stress (psi), t: 時間(hour)}\\ C_1 &= 1.7 \times 10^{-23},  C_2 &= 5.5 \times 10^{15},  C_3 &= 2.7 \times 10^{-26}, \end{split}$	CRPEQ =41	х

SUS304 歪硬化曲線式	計算条件	ref.
$\sigma = K\varepsilon^n$ $\sigma$ :真応力 (kg/mm <sup>2</sup> )、 $\varepsilon$ :真ひずみ、 $n$ : 歪硬化指数		
$\sigma_{Y} = 3.945 \times 10^{8} - 2.25 \times 10^{5} \cdot T  (\phi t = 0 \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2}) $		
$\sigma_{\gamma} = 7.550 \times 10^8 - 6.13 \times 10^5 \cdot T  (\phi t = 1.5 \times 10^{20} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2}) \qquad \textcircled{2}$		
$\sigma_{Y} = 1.378 \times 10^{9} - 1.79 \times 10^{6} \cdot T  (\phi t = 1.45 \times 10^{21} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2})  (3)$	ICPLAS=41	v
$\sigma_{Y} = 1.093 \times 10^{9} - 6.60 \times 10^{5} \cdot T  (\phi t = 6.05 \times 10^{21} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2})  \textcircled{4}$	ICI LAS-41	Λ
$\sigma_{Y}(Pa),T(C)$ 照射量 $\phi t$ により線形補間する。		
ただし、 $\phi t = 6.05 \times 10^{21} \mathrm{n \cdot cm^{-2}}$ 以上は④式で固定する。		
なお、降伏応力の歪み硬化は考慮しない。		
したがって、 $\overline{\sigma} = K\overline{\varepsilon}^n$ において、 $K = \sigma_Y, n = 0$ である。		

SUS304 密度	MATPRO-A model	計算条件	ref.
$7.9 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ at 300K		ICDENS =41	

SUS304 比熱	MATPRO-A model	計算条件	ref.
$300 \le T < 1558K$			
$C_p = 326 + 0.298 \cdot T - 9$	$9.56 \cdot 10^{-5} T^2$ (J/kgK)		
$T \ge 1558K$		ICSPH=41	
$C_p = 558.228$			

X : 原子力船「むつ」の安全評価にかかる解析 (第2分冊)
 (日本原子力船研究開発事業団受託調査報告書) 昭和 56 年1月
 日本原子力研究所 燃料安全第一研究室 菊地章、市川逵生

# 4.5 その他の物性値・モデル

## (1) FP ガス拡散定数 (2.8.15 FP ガス原子の拡散定数 参照)

FP 原子拡散定数(1) Turnbull et al.	使用条件	ref.
$D = 7.6 \times 10^{-10} \exp\left(-7 \times 10^4 / RT\right) + S^2 j_v V + 2 \times 10^{-40} F\left(m^2 / s\right)$ $j_v = 10^{13} \exp\left(-5.52 \times 10^4 / RT\right)$ $V = \frac{\left(\alpha_s S^2 + ZV_o\right)}{2Z} \left[ \left(1 + \frac{4K'Z}{j_v \left(\alpha_s S^2 + ZV_o\right)^2}\right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]$ $V_o = \exp\left(-5.52 \times 10^4 / RT\right)$ $R : \mathcal{J} \land \mathbb{E} \mathfrak{B} = 1.987 (cal/mol/K)$ $T : \mathbb{E} \mathfrak{B}  (K)$ $S : \mathbb{R} \neq \mathfrak{I} \checkmark \mathcal{I} \vee \mathcal{I} \mathbb{E} \mathfrak{B} = \Omega^{\frac{1}{3}}$ $\Omega : \mathbb{R} \neq \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} = \Omega^{\frac{1}{3}}$ $\Omega : \mathbb{R} \neq \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} = \Omega^{10^{15}} (m^{-2}, \mathfrak{I} \vee \mathcal{I} \oplus \mathfrak{I})$ $Z = 2  (\mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I})$ $K' = 10^4  (\mathbb{R} \neq \mathfrak{I} \mathrel{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I})$ $K' = 10^4  (\mathbb{R} \neq \mathfrak{I} \mathrel{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I})$ $F = 10^{19}  (fissions / m^3 \cdot s, \ \mathfrak{K} \mathfrak{I} \mathrel{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I} \mathfrak{I}$	IDCNST=1	2.26
FP 原子拡散定数(2)White & Tucker $D_1 = 1.09 \cdot 10^{-17} \exp(-6614/T)$ (m²/s)T>1650 K $D_2 = 2.14 \cdot 10^{-13} \exp(-22884/T)$ (m²/s)1381 <t<1650 k<="" td=""><math>D_3 = 1.51 \cdot 10^{-17} \exp(-9508/T)</math>(m²/s)T&lt;1381 K</t<1650>	IDCNST=2	2.24
FP 原子拡散定数(3)       Kitajima & Kinoshita $D = D_1 + D_2 + D_3$ (cm <sup>2</sup> /s) $D_1 = 2 \cdot 10^{-21} \exp\left\{-\frac{1.0 \cdot 10^5}{1.986} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{1280}\right)\right\}$ $D_2 = 2 \cdot 10^{-40} \exp\left\{-\frac{2.76 \cdot 10^4}{1.986} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{1300}\right)\right\}$ $D_3 = 2 \cdot 10^{-40} F$ $F = 10^{19}$ (Fission/m <sup>3</sup> /s, 核分裂速度)、       T: 温度 (K)	IDCNST=3	2.35

FP 原子拡散定数(4)Modified Turnbull $D = AM1 \cdot 7.6 \times 10^{-10} \exp(-7 \times 10^4 / RT)$ + $BM1 \cdot (S^2 j_v V + 2 \times 10^{-40} F)$ (m²/s)whereName-list parameter:AM1=1.0 (Default), BM1=4.0 (Default)	IDCNST=4	4.41
FP 原子拡散定数(5)       White model $D = AM1 \cdot 7.6 \times 10^{-10} \exp(-7 \times 10^4 / RT)$ $+1.5 \times 10^{-17} \sqrt{R} \exp(-10600 / T)$ (m²/s) $+7.67 \times 10^{-22} R \cdot \exp(-2785 / T)$ (T: Kelvin, R: Watts / g)	IDCNST=5	2.35

FP 原子拡散定数 (6) Kogai model		
$D = D_a + D_b + D_c  (m^2/s)$		
$D_a = (7.6 \times 10^{-10} + 6.84 \times 10^{-9} \cdot Bu/40) \exp(-70000/RT)$		
Bu: GWd/t (40 is an upper limit), though provisionally Bu is assumed to		
be 0 in the code because this term gives an excessive increase to $D_a$ in high		
burnup region.		
$D_b = s^2 j_v V$		
$s = \Omega^{1/3} = 3.4454 \times 10^{-10} (m)$		
$j_v = 10^{13} \exp(-55200/RT)$ (s <sup>-1</sup> )		
$V = (\alpha_s s^2 + ZV_0) / 2Z \left[ \left( 1 + 4K' Z / \left( j_v (\alpha_s s^2 + ZV_0)^2 \right) \right)^{0.5} - 1 \right]$	IDCNST=6	2.32
$\alpha_s = 10^{15} (m^{-2}), Z = 100,$		
$V_0 = \exp(-55200/RT)$		
$K' = 5 \times 10^5 \Omega \dot{f} = 2 \times 10^{-4}  (\mathrm{s}^{-1})  ,$		
$D_c = 2 \times 10^{-40} \dot{f}$ , $\dot{f}$ : fissions/(m <sup>3</sup> · s) = fixed at 10 <sup>19</sup> .		
for "test D" : $D_a = 6.4 \times 10^{-5} \exp(-132000/RT)$		
T: Kelvin, $R=1.987  cal/(mol.K)$		



図 4.3 FP ガス原子拡散定数の温度依存性の比較

### (2) He-Xe ガス相互拡散定数

He-Xe ガス相互拡散定数	Present	使用条件	ref.
$D^{12} = \frac{3}{8} \left(\frac{\pi kT}{2m^*}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{n\pi d_{12}^2}  \left(m^2 / s\right)$			
$m^* = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ (m : 1 分子)	の重量)		
$d_{12} = \frac{1}{2} (d_1 + d_2)$ ( <i>d</i> : 分子の)	直径) = $3.45 \times 10^{-10}$ ( <i>m</i> )	常時	2.53
$n = n_1 + n_2$ (分子密度)			
k : ボルツマン定数 (=1.380	$0 \times 10^{-16} erg / K$		
T : 温度 (K)			

## (3) ギャップ熱伝達率

ギャップコンダクタンスモデルは以下のオプションより選択する。

ギャップコンダクタンス (2) Ross & Stoute	使用条件	ref.
2.5 節参照。なお、ヘリウム、窒素、クリプトン、キセノンの熱伝導 率は 以下のとおりである。(MAPRO-Version 09) $K_{He} = 3.366 \times 10^{-3} T^{0.668}$ , $K_{N_2} = 2.091 \times 10^{-3} T^{0.846}$ $K_{Kr} = 4.726 \times 10^{-5} T^{0.923}$ , $K_{Xe} = 4.0288 \times 10^{-5} T^{0.872}$ K:熱伝導率 (W/m-k), T:温度 (K)	IGAPCN=0 (標準値)	2.17

ギャップコンダクタンス (3)
 Ross and Stoute.

 
$$h_{gap} = h_g + h_s$$
 $h_{gap} : \ref{equiverent} \ref{equ$ 

ギャップコンダクタンス(4) Dean		
$h_{gap} = h_s + h_g$		
$h_{gap}: \# v \vee \mathcal{T} \neg \mathcal{T} \not \Rightarrow \mathcal{T} \neg \mathcal{T} \not \Rightarrow \mathcal{T} \land \mathcal{T} .$		
$h_{g}$ : 非接触ギャップコンダクタンス $\left(Btu  /  h \cdot ft^{2} \cdot {}^{o}F ight)$		
$h_{s}$ :接触ギャップコンダクタンス $\left(Btu / h \cdot ft^{2} \cdot {}^{o}F\right)$		
$h_s = 280 \cdot \frac{P}{M_2} \cdot \frac{K_1 \cdot K_2}{K_1 + K_2} \cdot \left(\frac{1}{\lambda_1 \cdot \lambda_2}\right)^{\frac{1}{2}}$		
P : 接触圧 (psi) ; P=267~675psi (18.6~45.7kgf/cm <sup>2</sup> )		
M <sub>2</sub> :ジルカロイのマイヤー硬度 (psi)		
$M_2=120,000$ psi (84.4kg/cm <sup>2</sup> )		
K <sub>1</sub> および K <sub>2</sub> :ペレットおよび被覆管の熱伝導度		
$K_1 = 2.20 Btu / h \cdot ft \cdot F \left( 0.038W / cm \cdot C \right)$	IGAPCN=3	*
$K_2 = 8.09 Btu / h \cdot ft \cdot F \left( 0.14W / cm \cdot C \right)$		
$\lambda_1$ および $\lambda_2$ :ペレットおよび被覆管の表面プロフィルの波長 (in)		
$\lambda_1 \cdot \lambda_2 \sim RUo_2$		
$R_{Zr}$ (粗さ) = 50 <sup>+10</sup> <sub>-5</sub> × 10 <sup>-6</sup> rms(in)		
$h_g = \frac{K_g}{0.52 \cdot \delta}$		
$K_{g}$ : ギャップガス熱伝導度 $(Btu / h \cdot ft \cdot {}^{o}F)$		
Ar : 0.0168, He : 0.139, FP : 0.0088		
$\delta$ : ペレットー被覆管ギャップ(ft); $\delta \sim Ruo_2$		
Modified Dean equation: $h_s = 0.6P$ , $h_g = \frac{K_g}{\delta + 14.4 \times 10^{-6}}$		

なお、IGAPCN=0,2の場合には、以下の調整パラメータがある。

変数名	内容	標準値
R1	ペレット表面粗さ( $\mu m$ )	1.0

#### (4) 被覆管表面熱伝達率

被覆管表面熱伝達率には、2章で示したように、Chen, Dittus-Boelter 及び他の経験式を用いる。 ただし、調整パラメータ AKFAC の値を指定すれば、表面熱伝達係数は AKFAC 倍される。AKFAC の標準値は 1.0 である。

また、入力パラメータ **ISCNHAL=**1 とすれば、以下に示す **Stovacek**<sup>(4.42)</sup>の Halden 炉における 経験式を使うことができる。

 $h = 27.6 + 0.0110 \cdot q + 0.00001152 \cdot q^2 \quad (kW/m^2K)$ (4.5.1)

q: linear heat rate (kW/m)

### 4.6 燃焼度の単位換算

コード内では必要に応じて、以下の換算を行う。

### 4.6.1 燃焼度の単位換算

(1)  $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup> 1 fission で発生する熱エネルギー 200 MeV  $10^{20}$  fissions / cm<sup>3</sup> =  $2x10^{28}$  eV / cm<sup>3</sup> 1cm<sup>3</sup>=10.96・f (g) f:理論密度比  $10^{20}$  fissions / cm<sup>3</sup> = 1.825x10<sup>27</sup> / f eV/g  $1 eV = 1.602 \quad 10^{-19}$  Joule  $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup>=2.924x10<sup>8</sup>/f Joule/g (A) 1MWD/tUO<sub>2</sub>=8.64  $10^4$  Joule/gUO<sub>2</sub>  $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup>=3.384x10<sup>3</sup>/f MWD/tUO<sub>2</sub> f=0.95 のとき  $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup>=3.562x10<sup>3</sup> MWD/tUO<sub>2</sub>  $1 \text{ MWD/tUO}_2 = 1.1344 \text{ MWD/tU}$  $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup>=4.040x10<sup>3</sup> MWD/tU (B) となる。

(2) 燃焼率 (FIMA: Fissions per initial metal atoms) と燃焼度 GWd/tU の換算 FIMA=(核分裂数/初期重元素原子数)である。ここで、初期重元素原子数とは、燃料に含まれ る [fertile isotopes:238U、240Pu など] および [fissile isotopes] の総原子数である。

1% FIMA = 1at% – burnup  $\cong 225$ MWh/kgU  $\cong 9375$ MWd/teU 10 at% – burnup  $\cong 100$ GWd/tU

#### (3) サブルーチン FSWELL での換算

◆ BU2 (GJ/KgU) から BUC (10<sup>20</sup>fissions/cm<sup>3</sup>) への換算

上記 (A)式より  $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup>=2.924x10<sup>8</sup>/f (Joule/gUO<sub>2</sub>)

 $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup>=292.4/f (Joule/kgUO<sub>2</sub>)

1 Joule/KgUO<sub>2</sub>=1.1344 (Joule/KgU)

 $10^{20}$  fissions/cm<sup>3</sup>=331.7/f (Joule/kgUO<sub>2</sub>)

であるので、換算係数は331.7/fとなる。

### 4.6.2 ガドリニア入り燃料の燃焼度計算について

FEMAXI コードでは、ペレット中に含まれる Gd の重量比が与えられたときの燃焼 度の算出を以下のようにしている。

#### (1) 質量数と密度

① 質量数

 $^{235}$ U
 :
  $A_{U235}$ =235
  $^{238}$ U
 :
  $A_{U238}$ =238

 Gd
 :
  $A_{Gd}$ =157.25(平均質量数)
 O
 :
  $A_O$ =16

2 密度

UO<sub>2</sub> : 
$$\rho_{UO_2} = 10.96(g/cm^3)$$
  
Gd :  $\rho_{Gd} = 8.20(g/cm^3)$ 

(Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の密度が不明のためとり合えず上記の値を用いる)

#### (2) ガドリニアの存在比 X<sub>Gd</sub>の算出

<sup>235</sup>Uの濃縮をENR とし、Gd の重量比をW<sub>Gd</sub>とすると、  $A_U = A_{U238}(1 - ENR) + A_{U235} \cdot ENR$   $W_{Gd} = \frac{A_{Gd} \cdot X_{Gd}}{(A_U + A_O \cdot 2)(1 - X_{Gd}) + (A_{Gd} + A_O \cdot 1.5)X_{Gd}}$ より、X<sub>Gd</sub>を算出する。

(例) ENR=0.05, 
$$W_{G_d}=0.1 \mathcal{O}$$
場合  
 $A_U = 238 \times 0.95 + 235 \times 0.05 = 237.85$   
 $0.1 = \frac{157.25 X_{Gd}}{(237.85 + 16 \times 2)(1 - X_{Gd}) + (157.25 + 16 \times 1.5) X_{Gd}}$  となる。  
 $X_{Gd} = 0.1625$ 

(3) ペレット密度の算出

$$\rho = \frac{1}{\frac{W_{Gd_2O_3}}{\rho_{Gd}} + \frac{W_{UO_2}}{\rho_{UO_2}}} \cdot f, \qquad f: 理論密度比$$

$$W_{Gd_2O_3} = \frac{A_{GdO_{1.5}} \cdot X_{Gd}}{A} \quad (ガドリニアの重量比)$$

$$W_{UO_2} = \frac{A_{UO_2}(1 - X_{Gd})}{A} \quad (UO_2 \mathcal{O} 重量比)$$

$$A_{UO_2} = A_U + A_O \cdot 2$$

$$A_{GdO_{1.5}} = A_{Gd} + A_O \cdot 1.5$$

$$A = A_{UO_2}(1 - X_{Gd}) + A_{GdO_{1.5}} \cdot X_{Gd}$$

(例) ENR=0.05,  $W_{G_d}$ =0.1, f=0.95 の場合  $X_{Gd}$ =0.1625 より、 $A_{UO_2}$ =269.85,  $A_{GdO_{1.5}}$ =181.25, A=255.46 となり、 $W_{Gd_2O_3}$ =0.1153,  $W_{UO_2}$ =0.8847 となるので、  $\rho = \frac{0.95}{\frac{0.1153}{8.20} + \frac{0.8847}{10.96}} = 10.023(g/cm^3)$ 

#### (4) 燃焼度の計算

(例) ENR=0.05, *W*<sub>Gd</sub>=0.1, f=0.95 でペレット直径 1cm,線出力 300W/cm で 1000 日間照 射したときの燃焼度は、以下のようになる。

ペレット単位長さ当りの体積は  

$$\pi r_p^2 = 3.14 \times 0.5^2 = 0.7854 \ (cm^3/cm)$$
 であるので単位長さ当りの重量は、  
 $10.023 \times 0.7854 = 7.872 \ (g/cm)$   
 $= 7.872 \times 10^{-6} \ (t/cm)$ 

Uの重量比 W<sub>U</sub>は、

$$W_{U} = \frac{A_{U}}{A_{UO_{2}}} \cdot W_{UO_{2}} = \frac{237.85}{269.85} \cdot 0.8847 = 0.7798$$
$$Bu = \frac{300 \times 10^{-6} (MW/cm) \times 1000(d)}{7.872 \times 10^{-6} (t/cm) \times 0.7798} = 48871 (MWd/tU)$$

となる。

同条件で UO<sub>2</sub> ペレットの場合の燃焼度は、  

$$\rho_{UO_2} = 10.96 \times 0.95 = 10.412 \ (g/cm^3)$$
より、単位長さ当りの重量は、  
 $10.412 \times 0.7854 = 8.178 \ (g/cm)$   
 $= 8.178 \times 10^{-6} \ (t/cm)$   
 $W_U = \frac{A_U}{A_{UO_2}} W_{UO_2} = \frac{237.85}{269.85} \cdot 1 = 0.8814$ 

であるので、

$$Bu = \frac{300 \times 10^{-6} (MW/cm) \times 1000 (d)}{8.178 \times 10^{-6} (t/cm) \times 0.8814} = 41620 \quad (MWd/tU) \quad \succeq t_{\alpha} \gtrsim_{\circ}$$

したがって同条件での燃焼度は $W_{G_d}=0.1$ の場合 $UO_2$ 燃料に比べ燃焼度は1.174倍になる。

## 参考文献 4

- (4.1) Washington A.B.G., Preferred Values for the Thermal Conductivity of Sintered Ceramic Fuel for Fast Reactor Use, UKAEA TRG 2236(D) (1973).
- (4.2) Ishimoto S., Hirai M., Ito K. and Korey Y., J. Nucl. Sci. Technol., 31, p.796-802 (1994).
- (4.3) Wiesenack W., Vankeerberghen M. and Thankappan R., Assessment of UO<sub>2</sub> Conductivity Degradation Based on In-pile Temperature Data, HWR-469 (1996).
- (4.4) Forsberg K., Lindstrom F. and Massih A.R., Modelling of Some High Burnup Phenomena in Nuclear Fuel, IAEA TCM on Water Reactor Fuel Element Modelling at High Burnup and its Experimental Support, Windermere, U.K. Sept.(1994).
- (4.5) Kjaer-Pedersen N., Rim Effect Observations from the Third Riso Fission Gas Project, Fission Release and Fuel Rod Chemistry Related to Extended Burnup,

```
IAEA -TECDOC-697 (1993).
Baron D. and Couty J.C., A Proposal for a Unified Fuel Thermal Conductivity
```

- (4.6) Baron D. and Couty J.C., A Proposal for a Unified Fuel Thermal Conductivity Model Available for UO<sub>2</sub>, (U-PuO)<sub>2</sub>, and UO<sub>2</sub>-Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> PWR Fuel, IAEA TCM on Water Reactor Fuel Element Modelling at High Burnup and its Experimental Support, Windermere, U.K. Sept.(1994).
- (4.7) Lucuta P.G., Matzke Hj. and Hastings I.J., A Pragmatic Approach to Modelling Thermal Conductivity of Irradiated UO<sub>2</sub> Fuel: Review and Recommendations, J.Nucl.Mater. 232, pp.166-180 (1996).
- (4.8) Fukushima S., Ohmichi T., Maeda A., and Watanabe H., The Effect of Gadolinium Content on the Thermal Conductivity of Near-Stoichiometric (U,Gd)O2 Solid Solutions, J.Nucl.Mater. 105, p.201-210 (1982).
- (4.9) Baron D., About the Modelling of Fuel Thermal Conductivity Degradation at High-Burnup Accounting for Recovering Process with Temperature, Proceedings of the Seminar on Thermal Performance of High Burn-up LWR fuel, pp.129-143, Cadarache, France, 3-6 March (1998).
- (4.10) Kamimura J., Ide H., Ohira K., Itagaki N., Thermal and Mechanical Behavior Modeling For High Burnup Fuel, Proc. of 2008 Water Reactor Fuel Performance Meeting, No.8118, October, Seoul, Korea (2008).
- (4.11) Lanning D., Beyer C., Geelhood K., FRAPCON-3 Updates, Including Mixed- Oxide Fuel Properties, NUREG/CR-6534, Vol.4, PNNL-11513 (2005).
- (4.12) Martin D.G., A Re-Appraisal of the Thermal Conductivity of UO2 and Mixed (U, Pu) Oxide Fuels, J. Nucl. Mater., 110, p.73-94 (1982).
- (4.13) Christensen, J.A et al., Melting Point of Irradiated Uranium Dioxide, WCAP-6065 (1965).

- (4.14) Massih A.R., Models for MOX fuel behavior; A selective review, SKI Report 2006:10 (2006).
- (4.15) Benoit Petitprez, Ramp Tests with Two High Burnup MOX Fuel Rods in IFA-629.3, HWR-714 (2002).
- (4.16) Rolstad E. Hanevik A and Knudsen K., Measurements of the Length Changes of UO<sub>2</sub> Fuel Pellets during Irradiation, Paper #17 in Enlarged Halden Programme Group Meeting on Computer Control and Fuel Research Related to Safe and Economic Plant Operation, Sandefjord, Norway, June 1974, HPR-188 (1975).
- (4.17) USNRC, WASH-1236 (1972).
- (4.18) Marlowe M.O., Predicting In-Reactor Densification Behavior of UO<sub>2</sub>, Trans. ANS 17, p.166 (1974).
- (4.19) Schlemmer F.U. et al., IAEA Technical Committee Meeting on Recycling of Pu and U in Water Reactor Fuels, Cadarache, France, Nov. (1989).
- (4.20) 市川逵生、他、日本原子力学会 39, p. 93 (1997).
- (4.21) Tachibana T., Furuya H. and Koizumi M., Dependence on Strain Rate and Temperature Shown by Yield Stress of Uranium Dioxide, J. Nucl. Sci. Technol., 13, p.497-502 (1976).
- (4.22) Rodford C. and Terwilliger R., Compressive Deformation of Polycrystalline UO<sub>2</sub>, J.Am.Ceram.Soc. 58 (1975).
- (4.23) MacEwan J.R., Grain Growth in Sintered Uranium Dioxide: I, Equiaxed Grain Growth, J. Am. Cer. Soc. 45, p.37 (1962).
- (4.24) Lyons M.F., Boyle R.F., Davis J.H., Hazel V.E. and Rowland T.C., Nucl. Eng. Design 21, p.167 (1972).
- (4.25) Cadelli N. et al., Post Irradiation of Plutonium Bearing Fuel Elements Irradiated in LWR Power Plants A European Community Campaign, IAEA MO1 (1984).
- (4.26) Martin D.G., The Thermal Expansion of Solid UO<sub>2</sub> and (U, Pu) Mixed Oxides A Review and Recommendations, J.Nucl.Mater.,152, pp.94-101 (1988).
- (4.27) Philipponneau Y., Thermal Conductivity of (U, Pu)O<sub>2-x</sub> Mixed Oxide Fuel, J.Nucl.Mater.,188, pp.194-197 (1992).
- (4.28) Duriez C., Alessandri J.P., Gervais T. and Philipponneau Y., Thermal conductivity of hypostoichiometric low Pu content (U, Pu)O<sub>2-x</sub> mixed oxide, J.Nucl.Mater. 277 pp.143-158 (2000).
- (4.29) Gates G.A., Takano K. and White B.J., Thermal Performance of MOX Fuel, HWR-589 (1999).

- (4.30) Lanning D., Beyer C., Geelhood K., FRAPCON-3 Updates, Including Mixed- Oxide Fuel Properties, NUREG/CR-6534, Vol.4, PNNL-11513 (2005).
- (4.31) Nutt A.W. Jr et al., J.Am.Ceram.Soc., 53, p.205 (1970).
- (4.32) Yamada K. et al., Technol.Reps. Osaka Univ., 47, p.181 (1997).
- (4.33) Tokar M., Nutt A. and Keenan T.K., Linear Thermal Expansion of Plutonium Dioxide, Nucl.Technol., 17, pp.147-152 (1973).
- (4.34) Fisher E.F. and Renken C.J., Single-Crystal Elastic Moduli and the hcp-bcc Transformation in Ti, Zr, and Hf, Phys. Rev. pp.A482-A494 (1954).
- (4.35) Franklin D.G., Lucas G.E. and Bement A.L., Creep of Zirconium Alloys in Nuclear Reactors, ASTM STP-815, pp.103-105 (1983).
- (4.36) 燃料安全特別専門委員会「ジルカロイ被覆管の非弾性特性の研究」、 (財)原子力安全性研究協会 (1986年2月)
- (4.37) McGrath M.A., In-Reactor Creep of Zircaloy Cladding, Proc. 2000 Int.Topical Meeting on LWR Fuel Performance, Park City, Utah, USA (2000).
- (4.38) Rosinger H.E, Bera P.C. et al., Steady-State Creep of Zircaloy-4 Fuel Cladding J.Nucl.Mater., 82, p.286(1979).
- (4.39) Donaldson A.T., Horwood R.A. and Healey T., Biaxial Creep Deformation of Zircaloy-4 in the High Alpha-phase Temperature Range, Water Reactor Fuel Element Performance Computer Modelling, edited by J. Gittus, pp.81-95, APPLIED SCIENCE PUBLISHERS, London and New York
- (4.40) Hesketh R.V., Non-linear Growth in Zircaloy-4, J.Nucl.Mater.30, p. 217-222 (1969).
- (4.41) Turnbull J.A., White R.J. and Wise C., The Diffusion Coefficient for Fission Gas Atoms in Uranium Dioxide (IAEA-TC-659/3.5) IWGFPT/32, p.174.
- (4.42) Slovacek M., Zirconium Oxide Conductivity Assessment with Cladding Elongation Data from IFA-515.9, HWR-354 (1993).

## 謝 辞

本コードの開発及び検証に当たり、原研機構安全研究センターの中村仁一氏、永瀬文久氏、お よび前バージョン FEMAXI-6 の所内外、国外ユーザーの方々から、改良箇所のご指摘、モデリン グ、物性の収集整理にわたって多大のご教示・ご援助・ご協力をいただいた。こうしたご協力な くして FEMAXI-7 の開発は不可能であった。ここに深い感謝の意を表する。 This is a blank page.

表 1. SI 基本单位			
甘大昌	SI 基本ì	単位	
巫平里	名称	記号	
長さ	メートル	m	
質 量	キログラム	kg	
時 間	秒	s	
電 流	アンペア	А	
熱力学温度	ケルビン	Κ	
物質量	モル	mol	
光度	カンデラ	cd	

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例			
如女母 SI 表	基本単位		
和立重 名称	記号		
面 積 平方メートル	m <sup>2</sup>		
体 積 立法メートル	m <sup>3</sup>		
速 さ , 速 度 メートル毎秒	m/s		
加速 度メートル毎秒毎	秒 m/s <sup>2</sup>		
波 数 毎メートル	m <sup>-1</sup>		
密度, 質量密度キログラム毎立方	メートル kg/m <sup>3</sup>		
面 積 密 度キログラム毎平方	メートル kg/m <sup>2</sup>		
比体積 立方メートル毎キ	ログラム m <sup>3</sup> /kg		
電 流 密 度 アンペア毎平方	メートル $A/m^2$		
磁界の強さアンペア毎メー	トル A/m		
量濃度(a),濃度モル毎立方メー	トル mol/m <sup>3</sup>		
質量濃度 キログラム毎立法	メートル kg/m <sup>3</sup>		
輝 度 カンデラ毎平方	メートル $cd/m^2$		
屈 折 率 <sup>(b)</sup> (数字の) 1	1		
比 透 磁 率 (b) (数字の) 1	1		

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。
 (b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのこと を表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

			SI 組立甲位	
組立量	名称	記号	他のSI単位による 表し方	SI基本単位による 表し方
平 面 鱼	ラジアン <sup>(b)</sup>	rad	1 <sup>(b)</sup>	m/m
· 協 角	ステラジア、/(b)	er <sup>(c)</sup>	1 (b)	$m^{2/m^2}$
周 波 数	ヘルツ <sup>(d)</sup>	Hz	1	s <sup>-1</sup>
力	ニュートン	Ν		m kg s <sup>-2</sup>
压力, 応力	パスカル	Pa	N/m <sup>2</sup>	$m^{-1} kg s^{-2}$
エネルギー,仕事,熱量	ジュール	J	N m	$m^2 kg s^2$
仕 事 率 , 工 率 , 放 射 束	ワット	W	J/s	m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup>
電荷,電気量	クーロン	С		s A
電位差(電圧),起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 kg s^{-3} A^{-1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2} kg^{-1} s^4 A^2$
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	$m^2 kg s^{\cdot 3} A^{\cdot 2}$
コンダクタンス	ジーメンス	s	A/V	$m^{2} kg^{1} s^{3} A^{2}$
磁東	ウエーバ	Wb	Vs	$m^2 kg s^{\cdot 2} A^{\cdot 1}$
磁束密度	テスラ	Т	Wb/m <sup>2</sup>	$\text{kg s}^{2}\text{A}^{1}$
インダクタンス	ヘンリー	Н	Wb/A	$m^2 kg s^2 A^2$
セルシウス温度	セルシウス度 <sup>(e)</sup>	°C		K
光東	ルーメン	lm	cd sr <sup>(c)</sup>	cd
照度	ルクス	lx	lm/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> cd
放射性核種の放射能 <sup>(f)</sup>	ベクレル <sup>(d)</sup>	Bq		s <sup>-1</sup>
吸収線量,比エネルギー分与,	グレイ	Gv	J/kg	$m^2 s^{-2}$
カーマ				
線量当量,周辺線量当量,方向	シーベルト <sup>(g)</sup>	Sv	J/kg	$m^2 s^{2}$
性線量当量, 個人線量当量		2.		
酸素活性	カタール	kat		s <sup>1</sup> mol

(a)SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはや

(a)SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはや コヒーレントではない。
 (b)ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。 実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明示されない。
 (c)測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d)ヘルツは周期現象についてのみ、ベクレルは放射性抜種の統計的過程についてのみ使用される。
 (e)セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。
 (e)セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度で表すために使用される。
 (f)数単位を通の大きさは同一である。したがって、温度差や温度問隔を表す数値はとちらの単位で表しても同じである。
 (f)数単性核種の放射能(activity referred to a radionuclide)は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g)単位シーベルト(PV,2002,70,205)についてはCIPM勧告2(CI-2002)を参照。

表4.単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

	S	I 組立単位	
組立量	名称	記号	SI 基本単位による 表し方
粘质	Eパスカル秒	Pa s	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-1</sup>
カのモーメント	ニュートンメートル	N m	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup>
表 面 張 九	コニュートン毎メートル	N/m	kg s <sup>-2</sup>
角 速 度	ミラジアン毎秒	rad/s	m m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> =s <sup>-1</sup>
角 加 速 度	E ラジアン毎秒毎秒	$rad/s^2$	$m m^{-1} s^{-2} = s^{-2}$
熱流密度,放射照度	E ワット毎平方メートル	W/m <sup>2</sup>	kg s <sup>-3</sup>
熱容量,エントロピー	- ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2 kg s^{2} K^{1}$
比熱容量, 比エントロピー	- ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	$m^2 s^{-2} K^{-1}$
比エネルギー	- ジュール毎キログラム	J/kg	$m^{2} s^{2}$
熱 伝 導 率	『ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup>
体積エネルギー	- ジュール毎立方メートル	J/m <sup>3</sup>	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-2</sup>
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s <sup>-3</sup> A <sup>-1</sup>
電 荷 密 度	E クーロン毎立方メートル	C/m <sup>3</sup>	m <sup>-3</sup> sA
表 面 電 荷	ラクーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> sA
電 束 密 度 , 電 気 変 位	エクーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> sA
誘 電 率	『ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2$
透 磁 辛	ミ ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s <sup>-2</sup> A <sup>-2</sup>
モルエネルギー	- ジュール毎モル	J/mol	$m^2 kg s^2 mol^1$
モルエントロピー,モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	$m^{2} kg s^{2} K^{1} mol^{1}$
照射線量(X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg <sup>−1</sup> sA
吸収線量率	ミグレイ毎秒	Gy/s	$m^2 s^{-3}$
放射 強度	E ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 m^{-2} kg s^{-3} = m^2 kg s^{-3}$
放射輝 度	<b>E</b> ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 sr)$	m <sup>2</sup> m <sup>-2</sup> kg s <sup>-3</sup> =kg s <sup>-3</sup>
酵素活性濃度	Eカタール毎立方メートル	kat/m <sup>3</sup>	m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> mol

表 5. SI 接頭語					
乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
$10^{24}$	<b>э</b> 9	Y	$10^{-1}$	デシ	d
$10^{21}$	ゼタ	Z	$10^{-2}$	センチ	с
$10^{18}$	エクサ	Е	$10^{-3}$	ミリ	m
$10^{15}$	ペタ	Р	$10^{-6}$	マイクロ	μ
$10^{12}$	テラ	Т	$10^{-9}$	ナノ	n
$10^{9}$	ギガ	G	$10^{-12}$	ピコ	р
$10^{6}$	メガ	М	$10^{-15}$	フェムト	f
$10^3$	キロ	k	$10^{-18}$	アト	а
$10^{2}$	ヘクト	h	$10^{-21}$	ゼプト	z
$10^{1}$	デ カ	da	$10^{-24}$	ヨクト	У

表6.SIに属さないが、SIと併用される単位				
名称	記号	SI 単位による値		
分	min	1 min=60s		
時	h	1h =60 min=3600 s		
日	d	1 d=24 h=86 400 s		
度	۰	1°=(п/180) rad		
分	,	1'=(1/60)°=(п/10800) rad		
秒	"	1"=(1/60)'=(п/648000) rad		
ヘクタール	ha	1ha=1hm <sup>2</sup> =10 <sup>4</sup> m <sup>2</sup>		
リットル	L, 1	1L=11=1dm <sup>3</sup> =10 <sup>3</sup> cm <sup>3</sup> =10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup>		
トン	t	$1t=10^{3}$ kg		

\_

表7.	SIに属さないが、	SIと併用される単位で、	SI単位で
	まとわて粉は	ぶ 中 瞬時 ほう や て そ の	

衣される奴他が夫厥的に待られるもの				
名称	記号	SI 単位で表される数値		
電子ボルト	eV	1eV=1.602 176 53(14)×10 <sup>-19</sup> J		
ダルトン	Da	1Da=1.660 538 86(28)×10 <sup>-27</sup> kg		
統一原子質量単位	u	1u=1 Da		
天 文 単 位	ua	1ua=1.495 978 706 91(6)×10 <sup>11</sup> m		

表8.SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位				
名称			記号	SI 単位で表される数値
バ	1	ル	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=10 <sup>5</sup> Pa
水銀柱ミリメートルmmHg			mmHg	1mmHg=133.322Pa
オン	グストロー	- 4	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 <sup>-10</sup> m
海		里	М	1 M=1852m
バ	-	$\sim$	b	1 b=100fm <sup>2</sup> =(10 <sup>-12</sup> cm)2=10 <sup>-28</sup> m <sup>2</sup>
1	ツ	ŀ	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネ	-	パ	Np	ar送佐1
ベ		ル	В	▶ 51 単位との 叙 値的 な 阕徐 は 、 対 数 量の 定 義 に 依 存.
デ	ジベ	N	dB -	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位				
名称	記号	SI 単位で表される数値		
エルグ	erg	1 erg=10 <sup>-7</sup> J		
ダイン	dyn	1 dyn=10 <sup>-5</sup> N		
ポアズ	Р	1 P=1 dyn s cm <sup>-2</sup> =0.1Pa s		
ストークス	St	$1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{\cdot 1} = 10^{\cdot 4} \text{m}^2 \text{ s}^{\cdot 1}$		
スチルブ	$^{\rm sb}$	1 sb =1cd cm <sup>-2</sup> =10 <sup>4</sup> cd m <sup>-2</sup>		
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm <sup><math>-2</math></sup> 10 <sup>4</sup> lx		
ガル	Gal	$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm s}^{\cdot 2} = 10^{\cdot 2} \text{ms}^{\cdot 2}$		
マクスウェル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{ G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$		
ガウス	G	$1 \text{ G} = 1 \text{Mx cm}^{2} = 10^{4} \text{T}$		
エルステッド <sup>(c)</sup>	Oe	1 Oe ≙ (10 <sup>3</sup> /4π)A m <sup>-1</sup>		

(c) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ▲ 」 は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例						
名称					記号	SI 単位で表される数値
キ	ユ		IJ	ĺ	Ci	1 Ci=3.7×10 <sup>10</sup> Bq
$\scriptstyle  u$	$\sim$	ŀ	ゲ	$\sim$	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$
ラ				ド	rad	1 rad=1cGy=10 <sup>-2</sup> Gy
$\boldsymbol{\nu}$				L	rem	1 rem=1 cSv=10 <sup>-2</sup> Sv
ガ		$\boldsymbol{\mathcal{V}}$		7	γ	1 γ =1 nT=10-9T
フ	I		N	11		1フェルミ=1 fm=10-15m
メー	- トル	系	カラゞ	ット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10-4kg
$\mathbb{P}$				ル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
÷	17		11	_	1	1cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J
13	Ц		<i>y</i>		cal	(「IT」カロリー)4.184J(「熱化学」カロリー)
Ξ	ク			$\sim$	μ	$1 \mu = 1 \mu m = 10^{-6} m$

この印刷物は再生紙を使用しています