



JAEA-Data/Code

2022-003

DOI:10.11484/jaea-data-code-2022-003

ピン・イン・ブロック型高温ガス炉の燃料棒からの 核分裂生成物放出量計算コード FORNAX-A1.0

FORNAX-A1.0 for Calculation of Fission Product Release Amount
from Fuel Rods of Pin-in-block-type High Temperature Gas-cooled Reactors

相原 純

Jun AIHARA

高速炉・新型炉研究開発部門

炉設計部

Reactor Systems Design Department

Sector of Fast Reactor and Advanced Reactor Research and Development

June 2022

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Data/Code

本レポートは国立研究開発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。
本レポートはクリエイティブ・コモンズ 表示 4.0 国際 ライセンスの下に提供されています。
本レポートの成果（データを含む）に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の
条件で利用してください。（<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja>）
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト（<https://www.jaea.go.jp>）
より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 JAEA イノベーションハブ 研究成果利活用課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方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.
This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License
(<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en>).
Even if the results of this report (including data) are not copyrighted, they must be used under
the same terms and conditions as CC-BY.
For inquiries regarding this report, please contact Institutional Repository and Utilization Section,
JAEA Innovation Hub, Japan Atomic Energy Agency.
2-4 Shirakata, 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

ピン・イン・ブロック型高温ガス炉の燃料棒からの 核分裂生成物放出量計算コード FORNAX-A1.0

日本原子力研究開発機構 高速炉・新型炉研究開発部門 炉設計部
相原 純

(2022 年 3 月 10 日受理)

FORNAX-A1.0 は、ピン・イン・ブロック型の高温ガス炉燃料棒からの核分裂生成物(FP)放出量を計算するための計算コードである。FORNAX-A1.0 はフィックの法則に基づいており、通常運転時及び、事故時における FP 放出量の計算を行うことができる。ただし、FORNAX-A1.0 で取り扱うことが可能な事故とは、核分裂速度・温度・被覆燃料粒子の破損割合の変化により記述できる事象に限られる。黒鉛スリーブ及び燃料コンパクトの酸化・破損・燃料核の溶融を伴うような事故は取り扱うことができない。本稿は、この FORNAX-A1.0 の概要及び基礎式について説明するものである。

**FORNAX-A1.0 for Calculation of Fission Product Release Amount
from Fuel Rods of Pin-in-block-type High Temperature Gas-cooled Reactors**

Jun AIHARA

Reactor Systems Design Department,
Sector of Fast Reactor and Advanced Reactor Research and Development,
Japan Atomic Energy Agency
Oarai-machi, Higashiibaraki-gun, Ibaraki-ken

(Received March 10, 2022)

FORNAX-A1.0 is a calculation code for amount of fission product (FP) released from fuel rods of pin-in-type high temperature gas-cooled reactors (HTGRs). FORNAX-A1.0 is based on Fick's laws of diffusion and can calculate FP release amount from fuel rod under normal operation and accidents without failure (including oxidation) of graphite sleeves and fuel compacts and without melting of fuel kernel, for example, stopping fission and increase in temperature and/or failure fraction of coated fuel particles. This report is for explanation of outline, basic formulae and numerical analysis method of FORNAX-A1.0 code.

Keywords: FORNAX-A1.0, Fission Product Release, High Temperature Gas-cooled Reactor (HTGR), Fuel, Fick's Laws of Diffusion

目 次

1. 序論	1
2. FORNAX-A1.0 の概要及び FORNAX-A からの変更点	2
2.1 FORNAX-A1.0 の概要	2
2.1.1 主な入力項目	2
2.1.2 計算の流れの概略	2
2.1.3 「事故」の取り扱い	2
2.1.4 CFP 体系の概要	2
2.1.5 燃料棒体系の概要	3
2.1.6 特記事項	3
2.2 FORNAX-A からの変更点	4
3. FORNAX-A1.0 の基礎式	6
3.1 はじめに	6
3.1.1 FORNAX-A1.0 における計算全体の流れ	6
3.1.2 本章の構成	6
3.2 CFP 体系の基礎式	6
3.2.1 はじめに	6
3.2.2 FP 輸送の基礎式	8
3.2.3 CFP 表面における境界条件	11
3.2.4 FP 放出速度及び FP 保持量	12
3.3 燃料棒体系の基礎式	12
3.3.1 はじめに	12
3.3.2 FP 輸送の基礎式及び燃料棒表面における境界条件	13
3.3.3 核種 i の燃料コンパクトへの放出速度 (G_i) の計算	15
3.3.4 FORNAX コードに準拠する場合の燃料棒表面における境界条件	20
3.3.5 FP 放出量の基礎式	24
3.4 拡散係数の計算	24
4. まとめ	28
謝辞	28
参考文献	28
付録 A 数値解析手法	32
付録 B 陽解法及びクランク・ニコルソン法による時間の離散化	41
付録 C FORNAX-A1.0 における時間刻み幅の自動設定(オプション)	42
付録 D SOR 法	45

付録 E 動作確認	47
付録 F いくつかのパラメータについて	
FORNAX コードでの計算に用いられていたと思われる数値	65
付録 G FORNAX-A1.0 の問題点	67
付録 H 本報告の目次(完全版)	74

Contents

1. Introduction	1
2. Outline of FORNAX-A1.0 and changes from FORNAX-A	2
2.1 Outline of FORNAX-A1.0	2
2.1.1 Main items to be input	2
2.1.2 Outline of calculation flow	2
2.1.3 Treatment of “accident”	2
2.1.4 Outline of CFP system	2
2.1.5 Outline of fuel rod system	3
2.1.6 Special notes	3
2.2 Changes from FORNAX-A	4
3. Basic equations of FORNAX-A1.0	6
3.1 Forward	6
3.1.1 Calculation flow in FORNAX-A1.0	6
3.1.2 Structure of this chapter	6
3.2 Basic equations in CFP system	6
3.2.1 Forward	6
3.2.2 Basic equations for FP transport	8
3.2.3 Boundary condition on surface of CFP	11
3.2.4 Release speed and contained amount of FP	12
3.3 Basic equations in fuel rod system	12
3.3.1 Forward	12
3.3.2 Basic equations for FP transport and boundary condition on surface of fuel rod	13
3.3.3 Calculation of speed of release of nuclide i to fuel compact (Gi)	15
3.3.4 Boundary condition on fuel rod based on FORNAX code	20
3.3.5 Basic equations for FP release amount	24
3.4 Calculation of diffusion coefficients	24
4. Summary	28
Acknowledgements	28
References	28
Appendix A Numerical method for analysis	32
Appendix B Discretization of time by explicit method or Crank - Nicholson scheme	41
Appendix C Automatic setting of time pitch width in FORNAX-A1.0 (option)	42
Appendix D SOR method	45

Appendix E Validation	47
Appendix F Concrete values of some parameters considered to be used in calculations by FORNAX code	65
Appendix G Problems on FORNAX-A1.0	67
Appendix H Full version of contents of this report	74

1. 序論

本稿は、通常運転時及び事故時におけるピン・イン・ブロック型の高温ガス炉燃料からの核分裂生成物(FP)放出量を計算するための計算コードである FORNAX-A1.0 の概要及び基礎式を解説するものである。FORNAX-A1.0 は FORNAX-A¹⁾にいくつかの変更を加えたものである。

まず第 2 章にて FORNAX-A1.0 の概要及び FORNAX-A からの変更点について述べる。次に第 3 章にて FORNAX-A1.0 の基礎式を示し、第 4 章にてまとめを述べる。

2. FORNAX-A1.0 の概要及び FORNAX-A からの変更点

FORNAX-A1.0 は、FP の輸送現象はフィックの法則で近似できるという仮定に基づいた計算コードである。FORNAX-A1.0 の基礎式については次章以降で述べるが、その理解を容易にするため、本章ではまず概要を述べる。また、FORNAX-A¹⁾からの変更点も述べる。

2.1 FORNAX-A1.0 の概要

2.1.1 主な入力項目

主な入力項目は以下の通りである。

- 温度履歴
- FP の核分裂による生成速度履歴
- 被覆燃料粒子(CFP)の破損割合の履歴
CFP の破損割合はコード内では計算しない。入力データである。
- FP の半減期・崩壊時の分岐割合
- 各部分における FP の拡散係数を計算するためのパラメータ
- 体系の寸法各種

2.1.2 計算の流れの概略

各タイムステップにおいて、

- (1) まず、CFP 体系における FP 輸送計算を行い、FP 放出速度を計算する。
- (2) 上記(1)の CFP からの FP 放出を燃料棒体系における FP 発生源の 1 つとして扱い、燃料棒体系における FP 輸送計算を行う。

なお、CFP 体系における FP 輸送計算は、燃料棒体系におけるそれに対して独立である。

2.1.3 「事故」の取り扱い

- 事故時用の特別な計算モードは存在しない。
基礎式は通常運転時・事故時共通である。
- FORNAX-A1.0 において取り扱い可能な「事故」とは、温度上昇・CFP の破損割合増加、スクラムによる核分裂停止等、入力データとして与えることが可能な現象に限られる。
- 黒鉛スリーブ及び燃料コンパクトの酸化または機械的原因による損傷、燃料核の溶融等、取り扱えない「事故」も存在する。

2.1.4 CFP 体系の概要

詳細は 3.2 節で述べる。

(1) 形状

- 球対象系である。

(2) モード

- 健全 CFP 及び、2 種類の破損 CFP(3.2.1.1 項参照)の計 3 種類を取り扱う。

(3) FP 輸送に関して取り扱う現象

1) FP の生成・消滅

- 核分裂による生成
- 崩壊による消滅
- 親核種の崩壊による生成

2) FP の輸送

- 拡散
- 反跳放出

(4) その他

- 各モードの CFP は、計算開始から終了までずっとそのモードのままであるとする。
- CFP 体系において計算するのは、各モードの CFP1 個当たりの FP 放出速度・保持量等。
- CFP 破損割合の変化等を考慮してコンパクトへの FP 放出速度を計算するのは下記 2.1.5 小節で述べる「燃料棒体系」においてである。

2.1.5 燃料棒体系の概要

詳細は 3.3 節で述べる。

(1) 形状等

- 中心軸に対して回転対称である円筒または円柱形状である。
本来の FORNAX-A1.0 では球状の燃料要素は取り扱いえない。ただし、プログラムに軽微な変更を施せば²⁾取り扱うことが可能である。
- 燃料コンパクト及び黒鉛スリーブから成る。破損した燃料棒は扱わない。
- 実際の燃料コンパクトは CFP と母材の混合系であるが、一様な連続体として扱う。

(2) FP 輸送に関して取り扱う現象

1) FP の生成・消滅

- CFP 及び汚染ウランからの放出
なお、CFP 中に保持されている FP は「燃料棒体系に存在する FP」に含まれない。
- 崩壊による消滅
- 親核種の崩壊による生成

2) FP の輸送

- 拡散
- 黒鉛スリーブ外表面における冷却材への放出

2.1.6 特記事項

(1) 動作確認のため、高精度で FP プロファイルが出力されるようにした。

FP プロファイルより、あるタイムステップにおいて基礎方程式が満たされているかどうか

を Excel 等の表計算ソフトにより確認可能である。

- (2) FP 濃度依存の拡散係数も扱えるようにした。(次節も参照)
- (3) 時間刻み幅を自由に設定できるよう、数値解法としては陰解法を採用した。
- (4) 一般に、計算結果と実験データがよく一致するための要件は以下の通りである。

1) 本質的な要件

- 実際の現象が計算コードにおいて仮定している現象に近いこと。
- 計算に用いた物性値が現実に近いこと。

2) 計算に関する要件

- 計算コードが正しく動作していること。
- 空間メッシュ、時間刻み幅を十分に細かく設定していること。

計算結果と実験データを比較してよくあわないことは必ずしも計算コードが正しく動作していないことが原因ではない。今後、実験データとの比較により FORNAX-A1.0 の検証を行う場合には、計算コードが正しく動作していることの他に、実際の現象が計算コードにおいて仮定している現象に近いこと、用いた物性値が適切かどうかについても留意すべきである。

2.2 FORNAX-A からの変更点

FORNAX-A1.0 の FORNAX-A からの変更点は下記(1)-(4)の通りである。

- (1) FP の拡散係数が FP 濃度にも依存することとした。(3.4 節参照)

この変更自体には実用性はない。しかし、これによって、プログラムに軽微な変更を施せば様々な拡散係数の様々な濃度依存性を扱うことができるようになった。意義の詳細については付録 G を参照すること。

- (2) CFP 温度の燃料棒中の径方向依存性も扱えることとした。(3.4 節参照)

FORNAX-A においては計算時間が大きくなることを避けるため、計算点 1 点につき CFP 温度は 1 つとしたが、FORNAX-A1.0 においては「CFP 温度は燃料棒中の位置に依存する」という条件も取り扱えることとした。ただし、

- 計算時間が大きくなるためオプションとした。
- 各 CFP 中の温度は、FORNAX-A と同様に「一様」のままとした(3.4.節参照)。

なお、FORNAX-A においてもプログラムに軽微な変更を施すことにより CFP 温度の燃料棒中の位置依存性を取り扱うことができた²⁾が、黒鉛スリーブ/冷却材における境界条件に制限があった(文献 2)中の付録 C 参照)。

- (3) 黒鉛スリーブ/冷却材における境界条件が「FP 濃度=0」ではない場合(3.3.4 小節で後述)に必要な収束計算の収束条件を変更した。

この変更は数値計算のみに関することなので本編では述べないが、最も重要な変更点である。なぜなら、この変更により、黒鉛スリーブ表面における FP の蒸気圧が小さい場合も扱えることになったからである。付録 A 中の A.4 節参照。

- (4) 燃料コンパクトから黒鉛スリーブへの FP の放出量が出力されるようにした。

FORNAX-A においても FP プロファイルからユーザーが計算することで燃料コンパクトか

らの FP 放出量を得ることができたが、FORNAX-A1.0 においては最終出力ファイルに含まれることとした。この変更は後処理プログラムにのみ関係する変更なので、本稿(付録も含む)では特に説明しない。

3. FORNAX-A1.0 の基礎式

3.1 はじめに

3.1.1 FORNAX-A1.0 における計算全体の流れ

FORNAX-A1.0 においては後述するように、CFP のモードを 3 種類(健全+破損 2 種類)とする。FORNAX-A1.0 では各タイムステップにおいて、まず CFP 体系において、計算開始時からずっと各モードであり続ける CFP における FP 輸送の計算を行う。(照射または事故時の CFP の破損(モードの変化)の取り扱いについては 3.3.3.1 項参照)

次に、上記の CFP 体系の計算結果を入力の一部として、燃料棒体系における FP 輸送の計算を行う。

燃料棒体系での計算結果は CFP 体系での計算結果に依存するが、CFP 体系での計算結果は燃料棒体系での計算結果に対して独立である。

3.1.2 本章の構成

本章では、まず 3.2 節で CFP 体系の基礎式について述べる。次に燃料棒体系での基礎式を 3.3 節で述べる。最後に、両体系において共通である拡散係数の計算方法を 3.4 節にて纏めて述べる。

3.2 CFP 体系の基礎式

3.2.1 はじめに

3.2.1.1 CFP 体系での FP 輸送現象モデルの概要

(1) CFP は、Fig. 1 に示すような燃料核の中心を原点とした球対称極座標系で表される。また、CFP は以下の 3 種類に分類され、その各々について FP 輸送の計算が行われる。

◆ 健全 CFP (Fig. 2(a)参照)

健全 CFP は燃料核、バッファ層、IPyC 層、SiC 層、OPyC 層から成る。

◆ SiC 破損 CFP (Fig. 2(b)参照)

SiC 層の破損は「SiC 層の欠如」として扱う。即ち、SiC 破損 CFP は燃料核、バッファ層、IPyC 層、隙間、OPyC 層から成る。なお、

➤ IPyC 層外面において FP 濃度 = 0
とする。

➤ IPyC 層外面における FP 放出速度 = OPyC 層内面における FP 流入速度
とする。

◆ 貫通破損 CFP (Fig. 2(c)参照)

貫通破損 CFP は裸の燃料核として取り扱う。即ち、貫通破損 CFP は燃料核のみから成る。

なお、各々のモードの CFP は、照射開始時からそのモードであったものとする。実際の現象においては、例えば健全 CFP が貫通破損した場合、内部に保持されていた FP が徐々に放出され、CFP 内での FP 分布が照射開始時から貫通破損 CFP であったものと等しくなるまでに

ある程度の時間がかかる。しかし、FORNAX-A1.0 においてはそのような中間状態は考慮しない。FORNAX-A1.0 における照射中の破損割合の変化の扱いについては 3.3.3 小節で述べる。

(2) FP 輸送に関連しては以下の現象を扱う。

- ◆ FP の生成・消滅
 - 核分裂による生成
 - 被覆層中に汚染ウランが存在する場合も取り扱える。
 - 当該核種の崩壊による消滅
 - 親核種の崩壊による生成
- ◆ FP の輸送
 - 拡散
 - 反跳放出
 - ✓ 反跳放出領域において核分裂により生成した FP は、生成した瞬間に全量がそのすぐ外の領域へ放出されることとする。
 - ✓ 各モードの CFP ごとの反跳放出領域については Fig. 2(a)~(c)を参照すること。
 - 燃料核以外においても反跳放出領域を設定している理由は、上記のように被覆層中にも汚染ウランが存在する場合も想定しているからである。
 - ✓ 各領域における反跳距離は入力データで設定する。

(3) 境界条件等は以下の通りである。

- ◆ CFP の中心において FP の濃度勾配=0
- ◆ 各領域境界において障壁係数を設定できる。
 - ただし、SiC 破損 CFP における IPyC/SiC, SiC/OPyC 境界は除く。
 - 障壁係数とは、境界外面における FP 濃度の境界内面における FP 濃度に対する比である。
- ◆ CFP 表面における境界条件は下記(a)-(c)から選択する。なお、「CFP 表面」とは、健全 CFP 及び SiC 破損 CFP については OPyC 層外表面、貫通破損 CFP については燃料核表面である。
 - (a) CFP 表面において FP 濃度 = 0
 - (b) 外挿距離を設定
 - (c) CFP 表面において FP 濃度勾配 = 0

(a)を選択すると保守的(CFP から放出される FP 量が多い)な評価ができる。(b)を選択するなら適切な外挿距離を設定する必要がある。(c)を選択すると FP の CFP からの拡散放出は起こらない。(反跳放出は起こる。)

(4) その他

- ◆ CFP 体系において計算するものは、各モードの CFP1 個当たりの FP 放出速度・保持量等である。
 - CFP 破損割合等を考慮してコンパクトへの FP 放出速度を計算するのは「燃料棒体系」においてである。
- ◆ CFP 体系における計算においては、CFP 中の温度は一樣であるとする。ただし、CFP の温度(各 CFP 中では一樣)が燃料棒中の径方向位置に依存するというオプションは選択できる。

3.2.1.2 本節の構成

本節では、前項でその概要を述べた、CFP 体系での FP 輸送現象モデルについて述べる。

このモデルを表す CFP 内における FP 輸送の基礎式を、前項(1)で述べた CFP のモードごとに 3.2.2 小節で述べる。ただし、CFP 表面における境界条件については各モード共通であるため、3.2.3 小節にてまとめて述べる。また、3.3 節で述べる燃料棒体系における FP 輸送計算に必要な CFP からの FP 放出速度、CFP 中の FP 保持量の計算について 3.2.4 小節で述べる。

3.2.2 FP 輸送の基礎式

本節では、健全 CFP、SiC 破損 CFP、貫通破損 CFP 各々について、CFP 内の FP 輸送の基礎式を示す。

3.2.2.1 健全 CFP の場合

健全 CFP の場合の CFP 内における FP 輸送の基礎式は以下の通りである。

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial t} dv = [-\nabla \cdot J_{pi} + \sum_k (u_{ik} \cdot C_{pk}) + \beta_{pi} - ha_i] dv + Jh_i Sh \quad (1)$$

ただし、 C_{pi} : CFP 中における FP 核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

t : 時刻 [sec]

J_{pi} : CFP 中における FP 核種 i の拡散の流束 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

なお、

$$J_{pi} = -D_{pi} \nabla C_{pi} \quad (2)$$

ここで、 D_{pi} : CFP 体系における核種 i の拡散係数 [cm^2/s](頻度因子及び活性化エネルギー計算用の諸々のパラメータ並びに温度が入力データ)

拡散係数の計算方法については 3.4 節にて述べる。

u_{ik} : FP 核種 k の崩壊による FP 核種 i の生成速度 [1/s] ($k=i$ の場合は減少速度)

$$u_{ii} = -\lambda_i$$

$$u_{ik} = \varepsilon_{ik} \lambda_k \text{ for } i \neq k$$

λ_i : FP 核種 i の崩壊定数 [1/sec] (入力データ)

ε_{ik} : 核種 k が崩壊により核種 i になる分岐割合 [-] (入力データ)

β_{pi} : CFP 中における核分裂による核種 i の生成速度 [μ mol/cm³/sec]

(入力データ)

ha_i : 反跳放出による核種 i の放出速度 [μ mol/cm³/sec]

(反跳距離が入力データ)

$$\text{反跳領域において } ha_i = \beta_{pi}$$

$$\text{それ以外において } ha_i = 0$$

なお、健全 CFP の反跳躍領域については、Fig. 2(a)を参照。

Jh_i : 反跳放出による核種 i の流入の流束 [μ mol/cm²/sec]

Sh : 反跳領域外面の面積[cm²]

(反対跳距離・CFP 各部寸法が入力データ)

$$\text{反跳領域外面において } Jh_i Sh = \int_{\text{その反跳領域}} \beta_i dv$$

$$\text{それ以外において } Jh_i = 0$$

燃料核中心において

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial r} = 0 \quad (3)$$

各領域境界(燃料核/バッファ、バッファ/IPyC、IPyC/SiC、SiC/OPyC)において

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{C_{pi}(r_m + h, t)}{C_{pi}(r_m - h, t)} = \phi_{i,m} \quad (4)$$

ただし、 $C_{pi}(r, t)$: FP 核種 i の濃度 [μ mol/cm³]

r_m : m 番目の境界の位置 [cm]

$\phi_{i,m}$: m 番目の境界における FP 核種 i の障壁係数。(入力データ)

CFP 表面における境界条件については 3.2.3 小節にて後述する。

3.2.2.2 SiC 破損 CFP の場合

IPyC 層外面までにおいて

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial t} dv = [-\nabla \cdot J_{pi} + \sum_k (u_{ik} \cdot C_{pk}) + \beta_{pi} - ha_i] dv + Jh_i Sh \quad (5)$$

燃料核中心において

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial r} = 0 \quad (6)$$

IPyC 層外面において

$$C_{pi} = 0 \quad (7)$$

OPyC 層内表面において

$$J_{pi} S_o = J_{Ii} S_I + \int \text{IPyC 層における反跳領域} \beta_{pi} dv \quad (8)$$

ただし、 S_o : OPyC 層内面の面積 [cm²] (CFP 各部寸法が入力データ)

J_{Ii} : 核種 i の IPyC 層外面における拡散流束 [μ mol/cm²/sec]

S_I : IPyC 層外面の面積 [cm²] (CFP 各部寸法が入力データ)

OPyC 層中において

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial t} dv = [-\nabla \cdot J_{pi} + \sum_k (u_{ik} \cdot C_{pk}) + \beta_{pi} - ha_i] dv + Jh_i Sh \quad (9)$$

燃料核/バッファ、バッファ/IPyC 境界において

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{C_{pi}(r_m + h, t)}{C_{pi}(r_m - h, t)} = \phi_{i,m} \quad (10)$$

ただし、 $C_{pi}(r, t)$: CFP 中の FP 核種 i の濃度 [μ mol/cm³]

r_m : m 番目の境界の位置 [cm]

$m = 1$ for 燃料核/バッファ、 $m=2$ for バッファ/IPyC

SiC 破損 CFP の反跳領域については Fig. 2(b)を参照のこと。CFP 表面における境界条件については 3.2.3 小節にて後述する。

3.2.2.3 貫通破損 CFP（裸の燃料核）の場合

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial t} dv = [-\nabla \cdot J_{pi} + \sum_k (u_{ik} \cdot C_{pk}) + \beta_{pi} - h a_i] dv + J h_i S h \quad (11)$$

燃料核中心において

$$\frac{\partial C_{pi}}{\partial r} = 0 \quad (12)$$

CFP 表面(貫通破損 CFP の場合、燃料核表面)における境界条件については 3.2.3 小節にて後述する。

3.2.3 CFP 表面における境界条件

「CFP 表面」とは、健全 CFP 及び SiC 破損 CFP については OPyC 層外表面であり、貫通破損 CFP（裸の燃料核）については燃料核表面のことである。

CFP 表面における境界条件としては、以下の(a)-(c)のうちからオプションで選択する。

(a) CFP 表面において $C_{pi} = 0$

(b) 核種 i の外挿距離を $I_{DK,i}$ [cm](入力データ)として、

$$\partial C_{pi,in} / \partial r + C_{pi,out} / I_{DK,i} = 0 \quad (13)$$

ただし、 $C_{pi,in}$: CFP 表面すぐ内側における CFP 中の核種 i の濃度 [μ mol/cm²/sec]

$C_{pi,out}$: CFP 表面すぐ外側における CFP 中の核種 i の濃度 [μ mol/cm²/sec]

$$C_{pi,out} = \phi_h C_{pi,in} \quad (14)$$

ただし、 ϕ_h : CFP 表面における障壁係数 [-]。(入力データ)

(c) CFP 表面において $\frac{\partial C_{pi}}{\partial r} = 0$

3.2.4 FP 放出速度及び FP 保持量

CFP1 個当たりの FP 放出速度及び FP 保持量が各タイムステップ各モードごとに計算される。これらは、燃料棒体系の FP 輸送計算において使用するデータである。

CFP1 個当たりの核種 i の放出速度 Re_i [μ mol/sec] は以下の(15)式で表される。

$$Re_i = J_{hi} S_s + \int_{\text{CFP 最外領域における反跳領域}} \beta_{pi} dv \quad (15)$$

ただし、 J_{hi} : CFP 表面における核種 i の拡散流束 [μ mol/cm²/sec]

S_s : CFP の表面積 [cm²]。(CFP 各部寸法が入力データ)

CFP1 個当たりの核種 i の保持量 In_i [μ mol] は以下の(16)式で表される。

$$In_i = \int_{\text{CFP}} C_{pi} dv \quad (16)$$

なお、(15)式における反跳による放出の項で積分を行う「CFP 最外領域における反跳領域」とは、

- 健全 CFP 及び SiC 破損 CFP : OPyC 層中の反跳領域
- 貫通破損 CFP : 燃料核中の反跳領域

を示す。(Fig. 2 参照)

3.3 燃料棒体系の基礎式

3.3.1 はじめに

3.3.1.1 燃料棒体系での FP 輸送現象モデルの概要

(1) 燃料棒は、Fig. 3 に示すような、燃料棒中心を原点とした軸対称円筒座標系で表されるとする。また、

- ◆ 燃料棒は、燃料コンパクトと黒鉛スリーブから成る。
- ◆ 燃料コンパクトは CFP と母材の混合系ではなく、一様な連続体とみなす。
- ◆ 破損した黒鉛スリーブ及び燃料コンパクトの取り扱いができない。

(2) FP 輸送に関連しては以下の現象を扱う。

- ◆ FP の生成・消滅
 - CFP からの放出
 - 燃料コンパクト母材中の汚染ウランの核分裂による生成
 - 当該核種の崩壊による消滅
 - 親核種の崩壊による生成
- ◆ FP の輸送
 - 拡散
 - 黒鉛スリーブ表面における冷却材への放出

(3) 境界条件等は以下の通りである。

- ◆ 燃料棒の中心において
FP の濃度勾配=0
- ◆ 燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界において
 - 「障壁係数」を設定可能である。
- ◆ 燃料棒表面（黒鉛スリーブ外表面）において
以下の 2 種類から選択する。
 - FP 濃度 = 0
 - FORNAX-A1.0 の前身である FORNAX コード³⁾に準拠
冷却材流量等に依存する境界条件。

(4) その他

- ◆ 燃料棒についての「計算点 1 点」とは、1 本の燃料棒のある高さを持った軸方向領域を指す。
 - 高さは入力データとして指定。(通常は単位長さとする)
 - 計算点 1 点において、温度及び出力は軸方向においては一様であるとする。
- ◆ 燃料棒における FP 輸送の方程式を解くにあたっては、燃料棒中の径方向温度分布を考慮する。
- ◆ 燃料棒体系における FP 量としては、CFP に保持されている FP 量は含まない。一方、体積としては CFP の体積も含む。即ち、
燃料棒体系におけるある領域 X における核種 i の濃度
= 領域 X に存在する核種 i のうち、
CFP の外に存在するものの量 [μ mol]
÷ 領域 X の体積(CFP も含む) [cm^3]
である。

3.3.1.2 本節の構成

本節では、前項で概要を述べた FORNAX-A1.0 における燃料棒体系での FP 輸送現象モデルについて述べる。

このモデルを表す燃料棒内における FP 輸送の基礎式を 3.3.2 小節で一通り述べる。基礎式に含まれる項目のうち、複雑なものについては 3.3.3 及び 3.3.4 小節で述べる。

最後に、本コードの目的である燃料棒からの FP 放出量計算の基礎式を 3.3.5 小節で述べる。

3.3.2 FP 輸送の基礎式及び燃料棒表面における境界条件

燃料棒内における FP 輸送の基礎式は以下の通りである。

$$\frac{\partial C_{ci}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_{ci} + \sum_k (u_{ik} \cdot C_{ck}) + G_i \quad (17)$$

ただし、 C_{ci} ：核種 i の燃料棒体系における濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

CFP 中に含まれる核種 i の量は含まない。(上記 3.3.1 小節(4)参照)

J_{ci} ：核種 i の燃料棒体系における拡散流束 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

なお、

$$J_{ci} = -D_{ci} \nabla C_{ci} \quad (18)$$

ここで、 D_{ci} ：燃料棒体系における核種 i の拡散係数 [cm^2/s] (頻度因子及び活性化エネルギー計算用の諸々のパラメータ並びに温度が入力データ)

拡散係数の計算方法については 3.4 節にて述べる。

G_i ：核種 i の燃料棒体系における生成速度 [$\mu \text{ mol/cm}^3/\text{sec}$]

3.3.3 小節にて計算法を述べる。

また、3.2 節においても述べた通り、

u_{ik} ：FP 核種 k の崩壊による FP 核種 i の生成速度 [1/s] ($k=i$ の場合は減少速度)

$$u_{ii} = -\lambda_i$$

$$u_{ik} = \varepsilon_{ik} \lambda_k \text{ for } i \neq k$$

λ_i ：FP 核種 i の崩壊定数 [1/sec] (入力データ)

ε_{ik} ：核種 k が崩壊により核種 i になる分岐確割合 [-] (入力データ)

燃料コンパクトが円柱形の場合は燃料コンパクト中心で、燃料コンパクトが円筒形の場合は燃料コンパクト内表面において、

$$\frac{\partial C_{ci}}{\partial r} = 0 \quad (19)$$

燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界において

$$C_{ci,cout} = \phi_c C_{ci,cin} \quad (20)$$

ただし、 $C_{ci,cout}$ ：燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界すぐ外側における核種 i の燃料棒体系における濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

ϕ_c ：燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界の障壁係数 [-]。(入力データ)

$C_{ci,cin}$ ：燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界すぐ内側における核種 i の燃料棒体系における濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

燃料棒表面（黒鉛スリーブ外表面）における境界条件は、以下の 2 つから選択する。

- 燃料棒表面において $C_{ci} = 0$
- FORNAX-A の前身である FORNAX コード³⁾に準拠する。

燃料棒表面における FP 濃度は、冷却材の流量等に依存する。具体的なことは 3.3.4 小節にて述べる。

3.3.3 核種 i の燃料コンパクトへの放出速度 (G_i) の計算

核種 i の燃料コンパクトへの放出速度 (G_i) は、以下の 3.3.3.1 及び 3.3.3.2 項の手順で求める。なお、本小節では、 r 依存性の有無を明確にするため、 r 依存性がある(場合もある)パラメータには下添字 r を加える。

3.3.3.1 燃料コンパクト単位体積当たりの FP 放出速度

まず、燃料コンパクト単位体積当たりの FP 放出速度を求める。FP 放出の源は、CFP からの放出、及び燃料コンパクト母材中の汚染ウランの核分裂による生成である。

(1) 以下の仮定をおく。

3.2.1.1 項(1)で述べたように、実際の現象においては、例えば健全 CFP が貫通破損した場合、内部に保持されていた FP が徐々に放出され、CFP 内での FP 分布が照射開始時から貫通破損 CFP であったものと等しくなるまでにある程度の時間がかかる。しかし、FORNAX-A1.0 においてはそのような中間状態は考慮しない。即ち、

- 破損モードが A から B に変化した CFP は、その瞬間に CFP 内での FP 分布が、照射開始時から破損モード B であった CFP のそれと等しくなるとする。

ただし、A= 健全 or SiC 破損

A= 健全の場合、B= SiC 破損 or 貫通破損

A= SiC 破損の場合、B= 貫通破損

- その際に生じる CFP 内での FP 保有量の差は、破損の瞬間にコンパクトへ放出されるとする。

(2) また、時刻 $t - \Delta t$ [s] ~ t [s] における CFP 内での核種 i の収支は以下の通りである。

ただし、 Δt は微小時間である。

CFP 内の保有増加量 [μ mol]

= CFP 内での核分裂による生成量 [μ mol]

+CFP 内での親核種の崩壊による生成量 [μ mol]

−CFP 内で当該核種の崩壊による消滅量 [μ mol]

−燃料コンパクトへの放出量 [μ mol] (拡散・反跳による放出も破損モード変化に伴う放出も含む)

従って、

燃料コンパクトへの放出量 [$\mu \text{ mol}$] (拡散・反跳による放出も破損モード変化に伴う放出も含む)

$$\begin{aligned}
 &= \text{CFP 内での核分裂による生成量} [\mu \text{ mol}] \\
 &\quad + \text{CFP 内での親核種の崩壊による生成量} [\mu \text{ mol}] \\
 &\quad - \text{CFP 内で崩壊による消滅量} [\mu \text{ mol}] \\
 &\quad - \text{CFP 内の保有増加量} [\mu \text{ mol}] \\
 &= \text{CFP 内での核分裂による生成量} [\mu \text{ mol}] \\
 &\quad + \text{CFP 内での親核種の崩壊による生成量} [\mu \text{ mol}] \\
 &\quad - \text{CFP 内で崩壊による消滅量} [\mu \text{ mol}] \\
 &\quad - \{(\text{時刻 } t \text{ における CFP 内の保有量}) - (\text{時刻}(t - \Delta t) \text{ における CFP 内の保有量})\} [\mu \text{ mol}]
 \end{aligned}$$

- (3) 従って、時刻 t 、燃料コンパクト中心から $r[\text{cm}]$ の位置における燃料コンパクト単位体積当たりの FP 放出速度 $Ret_{i,r} [\mu \text{ mol}/\text{cm}^3/\text{sec}]$ は、汚染ウランからの放出分も考慮して、

$$Ret_{i,r} = n \cdot \{ Gen_{In,i,r} \cdot f_{IN} + Gen_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + Gen_{b,i,r} \cdot f_b - (In_{av,i,r} - In'_{av,i,r}) / \Delta t \} + Re_{contami,i} \quad (21)$$

ただし、 n : コンパクト中の単位体積当たり CFP 数 [$1/\text{cm}^3$] (入力データ)

f_{IN} , f_{SiC} , f_b : 時刻 t における健全 CFP、SiC 破損 CFP、貫通破損 CFP 各々の割合。
足すと 1 になる。(入力データ)

$Gen_{In,i,r}$, $Gen_{SiC,i,r}$, $Gen_{b,i,r}$:

時刻 t における健全 CFP、SiC 破損 CFP、貫通破損 CFP 各々 1 個当たりの燃料コンパクト中心から $r[\text{cm}]$ の位置における核種 i の正味の生成速度 [$\mu \text{ mol}/\text{s}$]

CFP 中の FP 量は拡散係数を通して CFP 温度にも依存するため「CFP 温度は各 CFP が存在する燃料コンパクト中の径方向位置の温度」というオプションを選んだ場合、 r に依存する。

$In_{av,i,r}$, $In'_{av,i,r}$: 各々時刻 t 及び時刻 $t - \Delta t$ における燃料コンパクト中心から $r[\text{cm}]$ の位置における CFP1 個当たり平均の核種 i の保有量 [$\mu \text{ mol}$]

CFP 中の FP 量は CFP 温度にも依存するため、「CFP 温度は各 CFP が存在する燃料コンパクト中の径方向位置の温度」というオプションを選んだ場合、 r に依存する。

$Re_{contami,i}$: 燃料コンパクト母材中の汚染ウランからの核種 i の発生速度

[$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3/\text{sec}$] 後述の(27)式参照

- ここで、 $Gen_{In,i,r}$ 、 $Gen_{SiC,i,r}$ 、 $Gen_{b,i,r}$ は以下の(22)-(24)式で表される。

$$Gen_{In,i,r} = \int_{\text{コンパクト中位置 } r \text{ における健全 CFP 内}} \left\{ \sum_k (u_{ik} \cdot C_{pk}) + \beta_{pi} \right\} dv \quad (22)$$

$$Gen_{SiC,i,r} = \int_{\text{コンパクト中位置 } r \text{ における SiC 破損 CFP 内}} \left\{ \sum_k (u_{ik} \cdot C_{pk}) + \beta_{pi} \right\} dv \quad (23)$$

$$Gen_{b,i,r} = \int_{\text{コンパクト中位置 } r \text{ における貫通破損 CFP 内}} \left\{ \sum_k (u_{ik} \cdot C_{pk}) + \beta_{pi} \right\} dv \quad (24)$$

なお、 C_{pk} はCFPの温度にも依存する。従って、「CFP温度は各CFPが存在する燃料コンパクト中の径方向位置の温度」というオプションを選んだ場合は $Gen_{In,i,r}$ 、 $Gen_{SiC,i,r}$ 、 $Gen_{b,i,r}$ は r にも依存する。

- また、 $In_{av,i,r}$ は以下の(25)式で表される。

$$In_{av,i,r} = In_{In,i,r} \cdot f_{IN} + In_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + In_{b,i,r} \cdot f_b \quad (25)$$

ただし、 $In_{In,i,r}$ 、 $In_{SiC,i,r}$ 、 $In_{b,i,r}$ ：

各々時刻 t における燃料コンパクト中心から r [cm]の位置における健全CFP、SiC破損CFP、貫通破損CFP1個当たり核種 i の保有量
[μ mol] (16)式参照
CFP中のFP量はCFP温度にも依存するため、「CFP温度は各CFPが存在する燃料コンパクト中の径方向位置の温度」というオプションを選んだ場合、 r に依存する。

- 同様に、 $In'_{av,i,r}$ は以下の(26)式で表される。

$$In'_{av,i,r} = In'_{In,i,r} \cdot f'_{IN} + In'_{SiC,i,r} \cdot f'_{SiC} + In'_{b,i,r} \cdot f'_b \quad (26)$$

ただし、 $In'_{In,i,r}$ 、 $In'_{SiC,i,r}$ 、 $In'_{b,i,r}$ ：

各々時刻 $t - \Delta t$ における燃料コンパクト中心から r [cm]の位置における健全CFP、SiC破損CFP、貫通破損CFP1個当たり核種 i の保有量
[μ mol] (16)式参照
CFP中のFP量はCFP温度にも依存するため、「CFP温度は各CFPが存在する燃料コンパクト中の径方向位置の温度」というオプションを選んだ場合、 r に依存する。

f'_{IN} 、 f'_{SiC} 、 f'_b ：時刻 $t - \Delta t$ における健全CFP、SiC破損CFP、貫通破損CFPの割合 [-]。足すと1になる。(入力データ)

➤ また、 $Re_{contami,i}$ は以下の(27)式で表される。

$$Re_{contami,i} = \beta_{k,i} \cdot f_{contami} \quad (27)$$

ただし、 $\beta_{k,i}$: 核分裂による核種 i の生成速度 [$\mu \text{ mol/cm}^3/\text{sec}$]。(入力データ)

$f_{contami}$: 燃料コンパクト汚染ウラン割合 [-]。(入力データ)

(4) ここで、以下の(28)式で定義される $In''_{av,i,r}$ を導入する。

$$In''_{av,i,r} = In'_{IN,i,r} \cdot f_{IN} + In'_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + In'_{b,i,r} \cdot f_b \quad (28)$$

この(28)式を(21)式に代入すると、

$$\begin{aligned} Ret_{i,r} &= n \cdot \{ Gen_{IN,i,r} \cdot f_{IN} + Gen_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + Gen_{b,i,r} \cdot f_b - (In_{av,i,r} - In'_{av,i,r}) / \Delta t \} \\ &\quad + Re_{contami,i} \\ &= n \cdot \{ Gen_{IN,i,r} \cdot f_{IN} + Gen_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + Gen_{b,i,r} \cdot f_b \\ &\quad - (In_{av,i,r} - In''_{av,i,r} + In''_{av,i,r} - In'_{av,i,r}) / \Delta t \} + Re_{contami,i} \\ &= n \{ Gen_{IN,i,r} \cdot f_{IN} + Gen_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + Gen_{b,i,r} \cdot f_b - (In_{av,i,r} - In''_{av,i,r}) / \Delta t \\ &\quad - (In''_{av,i,r} - In'_{av,i,r}) / \Delta t \} + Re_{contami,i} \\ &= n [\{ Gen_{IN,i,r} - (In_{IN,i,r} - In'_{IN,i,r}) / \Delta t \} \cdot f_{IN} \\ &\quad + \{ Gen_{SiC,i,r} - (In_{SiC,i,r} - In'_{SiC,i,r}) / \Delta t \} \cdot f_{SiC} \\ &\quad + \{ Gen_{b,i,r} - (In_{b,i,r} - In'_{b,i,r}) / \Delta t \} \cdot f_b \\ &\quad - (In''_{av,i,r} - In'_{av,i,r}) / \Delta t] + Re_{contami,i} \quad (29) \end{aligned}$$

(5) ここで、

$$Gen_{IN,i,r} - (In_{IN,i,r} - In'_{IN,i,r}) / \Delta t$$

= 健全 CFP1 個当たり {核種 i の正味の生成速度 - 核種 i の保有量の増加速度}

= 健全 CFP1 個当たりの核種 i の拡散・反跳による放出速度

であるから、

$$Gen_{IN,i,r} - (In_{IN,i,r} - In'_{IN,i,r}) / \Delta t = Re_{IN,i,r} \quad (30)$$

である。

ただし、 $Re_{IN,i,r}$: 燃料コンパクト中心から $r[\text{cm}]$ の位置における健全 CFP1 個当たり核種 i の放出速度 [$\mu \text{ mol/s}$] ((15)式参照)

➤ 同様に、

$$Gen_{SiC,i,r} - (In_{SiC,i,r} - In'_{SiC,i,r}) / \Delta t = Re_{SiC,i,r} \quad (31)$$

$$Gen_{b,i,r} - (In_{b,i,r} - In'_{b,i,r}) / \Delta t = Re_{b,i,r} \quad (32)$$

ただし、 $Re_{SiC,i,r}$, $Re_{b,i,r}$: 燃料コンパクト中心から r [cm] の位置における SiC 破損 CFP、貫通破損 CFP1 個当たり核種 i の放出速度 [μ mol/s] ((15)式参照)

➤ 従って、(29)式は、

$$Ret_{i,r} = n \cdot (Re_{IN,i,r} \cdot f_{IN} + Re_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + Re_{b,i,r} \cdot f_b - Inn_{i,r}) + Re_{contami,i} \quad (33)$$

$$Inn_{i,r} = (In''_{av,i,r} - In'_{av,i,r}) / \Delta t \quad (34)$$

(6) ここで、(26)及び(28)式を(34)式に代入すると、

$$Inn_{i,r} = In'_{IN,i,r} \cdot (f_{IN} - f'_{IN}) / \Delta t + In'_{SiC,i,r} \cdot (f_{SiC} - f'_{SiC}) / \Delta t + In'_{b,i,r} \cdot (f_b - f'_b) / \Delta t \quad (35)$$

(7) f_{IN} , f_{SiC} , f_b は t の連続関数であるとする、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限において、(35)式は、

$$\begin{aligned} Inn_{i,r} &\rightarrow In'_{IN,i,r} \frac{df_{IN}}{dt} + In'_{SiC,i,r} \frac{df_{SiC}}{dt} + In'_{b,i,r} \frac{df_b}{dt} \\ &\rightarrow In_{IN,i,r} \frac{df_{IN,i}}{dt} + In_{SiC,i,r} \frac{df_{SiC,i}}{dt} + In_{b,i,r} \frac{df_{b,i}}{dt} \end{aligned} \quad (36)$$

となる。

➤ 従って(33)式より、

$$\begin{aligned} Ret_{i,r} &= n \cdot \{ Re_{IN,i,r} \cdot f_{IN} + Re_{SiC,i,r} \cdot f_{SiC} + Re_{b,i,r} \cdot f_b \\ &\quad - (In_{IN,i,r} \frac{df_{IN}}{dt} + In_{SiC,i,r} \frac{df_{SiC}}{dt} + In_{b,i,r} \frac{df_b}{dt}) \} + Re_{contami,i} \end{aligned} \quad (37)$$

となる。

ただし、実際の数値計算においては、 Δt を「タイムステップ幅」、 $In'_{IN,i,r}$, $In'_{SiC,i,r}$, $In'_{b,i,r}$ を「前タイムステップにおける各モードの CFP1 個あたり FP 保有量」、 $f'_{IN,i}$, $f'_{SiC,i}$, $f'_{b,i}$ を「前タイムステップにおける各モードの CFP の割合」として(33),(35)式を用いて $Ret_{i,r}$ を計算してい

る。

3.3.3.2 G_i の計算

上記 3.3.3.1 項で計算した $Ret_{i,r}$ から $G_{i,r}$ を求める。

オプションにより以下の 2 つのうちいずれかを選択する。

- 燃料コンパクト中にて $G_{i,r} = Ret_{i,r}$
 その他にて $G_{i,r} = 0$
- FORNAX-A の前身である FORNAX コード³⁾に準拠する方法

$$G_{i,r} = FERMI(r) \cdot Ret_{i,r} \quad (38)$$

$$FERMI(r) = 1 / [\exp\{(r - AFERMI) / BFERMI\} + 1] \quad (39)$$

ここで、 $AFERMI$: 燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界の燃料コンパクト中心からの距離
 [cm]

$BFERMI$: 定数($=5.0 \times 10^{-3}$) [cm]

3.3.4 FORNAX コードに準拠する場合の燃料棒表面における境界条件

本小節では、燃料棒表面（黒鉛スリーブ外表面）における境界条件として、オプションである FORNAX コード³⁾に準拠するについて具体的に述べる。これは、対象核種として Cs を想定したものである。

3.3.4.1 全体の流れ

本小節で説明する境界条件においては、燃料棒表面における FP 濃度が冷却材の流量等に依存する。このような場合の黒鉛スリーブ/冷却材境界の概念図を Fig. 4 に示す。

まず、黒鉛スリーブ/冷却材の境界において以下の 2 つの物理的条件が両方満たされなければならないとする。

- (a) 黒鉛スリーブ側及び冷却材側で FP の流束が等しい。
- (b) 黒鉛スリーブ側及び冷却材側で FP の蒸気圧が等しい。

次に、核種 i の黒鉛スリーブ/冷却材境界すぐ内側における濃度 $C_{ci,in}$ [μ mol/cm³] 及びすぐ外側における濃度 $C_{ci,out}$ [μ mol/cm³] を下記(40)式で表す。

$$\eta_i \cdot C_{ci,in} = C_{ci,out} \quad (40)$$

ただし、 η_i : 黒鉛スリーブ/冷却材境界における核種 i の障壁係数 [-]。

ほかの障壁係数と異なり、 η_i は入力データではなく未知数である。また、 $C_{ci,in}$ も未知数である。上記2つの物理的条件(a)(b)を満たすような η_i 及び $C_{ci,in}$ を反復計算により決定する。この反復計算については付録Aで述べる。

以下に上記2つの物理的条件(a)(b)を表す方程式について説明する。

(a) 黒鉛スリーブ側及び冷却材側でFPの流束が等しい。

$$\begin{aligned} \text{従って、} J = J_{ci,in} = J_{ci,out} = -D_{i,gs} \cdot \left. \frac{\partial C_{ci}}{\partial r} \right|_{in} &= \alpha_{D,i} \cdot (C_{ci,out} - C_{ci,o}) \text{ であるから、} \\ -D_{i,gs} \left. \frac{\partial C_{ci}}{\partial r} \right|_{in} &= \alpha_{D,i} \cdot (\eta_i \cdot C_{ci,in} - C_{ci,o}) \end{aligned} \quad (41)$$

ただし、 $D_{i,gs}$ ：黒鉛スリーブ表面における黒鉛スリーブ中核種*i*の拡散係数 [cm²/s]

(頻度因子及び活性化エネルギー計算用の諸パラメータ並びに温度が入力データ)

ただし、表面拡散用の特別な拡散係数を設定するわけではない。

計算方法については3.4節を参照。

$\alpha_{D,i}$ ：冷却材側境界面における核種*i*の物質伝達係数 [cm/s]

η_i 及び $C_{ci,in}$ に対して独立。詳細は3.3.4.2項にて述べる。

$C_{ci,o}$ ：冷却材中の核種*i*の濃度 [μ mol/cm³]。(入力データ)

(b) 黒鉛スリーブ側及び冷却材側でFPの蒸気圧が等しい。

従って、 $P_{i,out} = R_g \cdot (T_{out} + 273) \cdot C_{ci,out} = R_g \cdot (T_{out} + 273) \cdot \eta_i C_{ci,in}$ であるから、

$$P_{i,in} = R_g \cdot (T_{out} + 273) \cdot \eta_i C_{ci,in} \quad (42)$$

ただし、 $P_{i,in}$ ：黒鉛スリーブ/冷却材境界における黒鉛スリーブ側の核種*i*の表面蒸気圧 [Pa]

未知数 $C_{ci,in}$ を含む関数である。これについては3.3.4.3項にて述べる。

R_g ：ガス定数 (= 8.314 [J/mol/K])

T_{out} ：冷却材温度 [°C]。(入力データ)

3.3.4.2 黒鉛スリーブ/冷却材境界における物質伝達係数 $\alpha_{D,i}$

ここでは、上記(41)式における $\alpha_{D,i}$ の計算法を述べる。なお、FORNAX-A1.0で扱う冷却材流路の形状は環状流路である。

- (1) まず、ヘリウム(冷却材)の密度 ρ_{He} [kg/m³]、粘性係数 μ [Pa・sec]、He と核種 i の相互拡散係数 D_{He-i} [m²/s] を計算する。ただし、相互拡散係数を定める式は、核種 i として Cs を想定したものである。

$$\rho_{He} = \frac{10^{-3}}{1 + 0.00351 \cdot T_{out}} \cdot \frac{P_{He}}{60} \quad (43)$$

$$\mu = \left\{ \frac{1.799}{10^6} \cdot 0.8779 \cdot \left(\frac{T_{out} + 273.15}{6.03} \right)^{0.645} \right\} \cdot 10^{-1} \quad (44)$$

$$D_{He-i} = D_{He-i}^0 \cdot \left(\frac{P_0}{P_{He}} \right) \cdot \left(\frac{T_{out} + 273.15}{T_0 + 273.15} \right)^m \quad (45)$$

ただし、 P_{He} : He の圧力 [Pa] (入力データ)

D_{He-i}^0 : 標準温度(T_0)標準圧力(P_0)における He と核種 i の相互拡散係数 [m²/s]
(入力データ)

P_0 : 標準圧力 [Pa] (入力データ)

T_0 : 標準温度 [°C] (入力データ)

m : モデル定数[-](入力データ)

- (2) He のレイノルズ数 Re [-]、He の核種 i についてのシュミット数 Sc_i [-] を計算する。

$$Re = d_c V \rho_{He} / \mu \quad (46)$$

$$Sc_i = \mu / (\rho_{He} D_{He-i}) \quad (47)$$

ただし、 d_c : 冷却材流路の等価直径 [m] (入力データ)

下記の冷却材の内外径からプログラム内で計算するのではなく、別途入力する。
これは FORNAX コード³⁾でそうになっていたことをそのまま踏襲したためである。
(FORNAX コードでなぜそうになっていたかは不明)なお、

$d_c = 4 \times \text{流路断面積} / \text{流路断面の壁面長さ}$
である。

V : He の流速 [m/s] (入力データ)

- (3) 以下の 2 つの値を計算する。

$$\alpha_t(Re) = 0.018(d_o / d_i)^{0.1}(D_{He-i} / d_c) Re^{0.8} Sc_i^{0.4} \times 10^2 \quad (48)$$

$$\alpha_{ho}(Re) = 0.116(D_{He-i} / d_c)(Re^{0.67} - 125) Sc_i^{0.33} \times 10^2 \quad (49)$$

ただし、 d_o : 流路外径 [m] (入力データ)

d_i : 流路内径 [m] (入力データ)

(4) 更に、以下の値を計算する。

$$\xi = \alpha_t(5000) / \alpha_{h0}(5000) \quad (50)$$

(5) 最後に物質伝達係数 $\alpha_{D,i}$ を計算する。

1) $2200 < Re \leq 5000$ の場合

$$\alpha_{D,i} = \xi \cdot 0.116 \cdot (D_{He-i} / d_c) \cdot (Re^{0.67} - 125) \cdot S_{ci}^{0.33} \cdot 10^2 \quad (51)$$

2) $5000 < Re$ の場合

$$\alpha_{D,i} = \alpha_t(Re) \quad (52)$$

3.3.4.3 黒鉛スリーブ側の核種 i の表面蒸気圧 $P_{i,in}$

FORNAX-A1.0 においては、以下の 4 つからオプションで選択することになっている。

- Henrian 型の蒸気圧
- Freundlich 型の蒸気圧
- $C_{ci,in}$ によって上記 2 つを切り替える。

後述の(53)式で表される遷移濃度(C_t)を境に、

$C_{ci,in} / \rho_g < C_t$ の場合 : Henrian 型

$C_{ci,in} / \rho_g \geq C_t$ の場合 : Freundlich 型

ここで、 ρ_g : 黒鉛スリーブの密度 [g/cm³] (入力データ)

- Henrian 型と Freundlich 型の圧力を合計する。

以下、遷移濃度、Henrian 型及び Freundlich 型の蒸気圧の計算法を述べ、最後に $P_{i,in}$ の算出法を述べる。

(1) 遷移濃度 C_t [μ mol/g-carbon] は以下の(53)式で計算される。 C_t の単位に注意すること。

$$\ln C_t = F + G \cdot (T_{in} + 273) \quad (53)$$

ただし、 F, G : 定数。(入力データ)

T_{in} : 黒鉛スリーブの外表面温度 [°C] (入力データ)

黒鉛スリーブ/冷却材境界の内側という意味で in の添字を使っている。

(2) Henrian 型蒸気圧 P_H [Pa]は以下の(54)式で計算される。

$$P_H = \exp\left(A + \frac{B}{T_{in} + 273}\right) \cdot C_t^{\left(D - 1 + \frac{E}{T_{in} + 273}\right)} \cdot \left(\frac{C_{ci,in}}{\rho_g}\right) \quad (54)$$

ただし、 A 、 B 、 D 、 E : 定数。(入力データ)

(3) Freundlich 型蒸気圧 P_F [Pa]は以下の(55)式で計算される。

$$P_F = \exp\left(A + \frac{B}{T_{in} + 273}\right) \cdot \left(\frac{C_{ci,in}}{\rho_g}\right)^{\left(D + \frac{E}{T_{in} + 273}\right)} \quad (55)$$

(4) $P_{i,in}$ は以下の(56)式で計算される。

$$P_{i,in} = f_H P_H + f_F P_F \quad (56)$$

ただし、 f_H 、 f_F は 1 または 0 の値をとり、本小節の冒頭で述べたオプションによって決まる。
ごく簡単なことなので、具体的な記述は省略する。

3.3.5 FP 放出量の基礎式

燃料棒外表面単位面積当たり冷却材への核種 i の放出量(当該または先祖核種が CFP を含む燃料棒中で核分裂により生成し、その時点において CFP を含む燃料棒の外に存在する核種 i の量)を R_{ci} [μ mol/cm²]とすると、下記の(57)式が成り立つ。

$$\frac{dR_{ci}}{dt} = J_{ci}|_{\text{黒鉛スリーブ外表面}} + \sum_k (u_{ik} \cdot R_{ck}) \quad (57)$$

3.4 拡散係数の計算

FORNAX-A1.0 においては拡散係数が FP 濃度にも依存することとした。2.2 節(1)で述べたように、この変更自体には実用性はない。その意義等については 2.2 節(1)で簡単に述べた通りである。詳細については付録 G を参照すること。

ある時刻において、FP 核種 i の領域 k の位置 r における拡散係数 $D_{i,k,r}$ [cm²/s]は下記(58)式で計算される。

$k = 1, 2, \dots, 5$ は各々領域が燃料核、バッファ層、...、OPyC 層であることを示し、 $k=6, 7$ は各々

領域が燃料コンパクト及び黒鉛スリーブであることを示す。即ち、 $D_{i,k,r}$ は、 $k=1\sim5$ であれば CFP 体系における拡散係数であり、 $k=6,7$ であれば燃料棒体系における拡散係数である。

$$D_{i,k,r} = A_{i,k,r} \cdot \exp \left\{ -Q_{i,k,r} / R_g / (T_{k,r} + 273) \right\} \cdot 10^4 \quad (58)$$

$A_{i,k,r}$: FP 核種 i の領域 k の位置 r における拡散係数の頻度因子 [m²/s]

下記(59),(60),(61),(62)式参照

$Q_{i,k,r}$: FP 核種 i の領域 k の位置 r における拡散係数の活性化エネルギー [J/mol]

下記(63),(64),(65),(66)式参照

$T_{k,r}$: 領域 k の位置 r における温度 [°C]

$k=1\sim5$ の場合(求めるべき拡散係数が CFP 中のものである場合)、オプションにより下記いずれかを選択する。

- 入力データで CFP 温度として与えた 1 つの温度
- 各 CFP が存在する燃料コンパクト中の径方向位置の温度と等しいとする。

上記いずれを選択した場合でも、CFP 中の温度は同様であるとする。

$C'_{1,k,r} \cdot C'_{2,k,r} \cdots \neq 0$ の場合、

$$a_{k,r} = C'_{1,k,r}^{Ea_{1,k}} \cdot C'_{2,k,r}^{Ea_{2,k}} \cdots \quad (59)$$

$$A_{i,k,r} = a_{k,r} \cdot A_{i,k0} \quad (60)$$

$C'_{1,k,r} \cdot C'_{2,k,r} \cdots = 0$ の場合、

$$A_{i,k,r} = A_{i,k0} \quad (61)$$

$A_{i,k0}$ は、下記に示すように $A_{i,k,r}$ とは単位が異なるが、(61)式を採用の場合は便宜的に無視することとする。「0 の 0 乗」がエラーの原因になることを回避するためである。理論的に正しくないが、最初の 1 タイムステップのみであれば影響は小さいと考えられる。

$C'_{i,k,r}$: CFP 体系の場合と燃料棒体系の場合各々について下記の通り。単位はどちらの場合でも $[\frac{\mu\text{mol}}{\text{cm}^3}]$ である。

- $k=1\sim5$ の場合(CFP 体系の場合): FP 核種 i の、健全 CFP 中の領域 k 中の位置 r における前タイムステップにおける濃度。1 タイムステップ目については FP 濃度プロファイル初期値(入力データまたはその内

挿値。普通は 0) が用いられる。

上記のように、計算対象の CFP の破損モードによらず現在のところ $C'_{i,k,r}$ は健全 CFP についての値しかとることができない。(付録 G 参照)

- $k=6,7$ の場合(燃料棒体系の場合) : FP 核種 i の領域 k 中の位置 r における前タイムステップにおける濃度。1 タイムステップ目については FP 濃度プロファイル初期値(入力データまたはその内挿値。普通は 0) が用いられる。

$Ea_{j,k}$: 領域 k における FP の拡散係数の頻度因子に対する核種 j の濃度に乗すべき冪数 [-]

$a_{j,k}$: 領域 k における頻度因子の FP 核種 j 濃度への依存係数 $\left[\frac{10^6 \cdot A_k \mu \text{mol}^{A_k}}{m^3 \cdot A_k} \right]$
ただし

$$A_k = \sum_j Ea_{j,k} \quad (62)$$

$A_{i,k0}$: 領域 k における FP 核種 i の濃度依存頻度因子 $\left[\frac{10^{-6} A_k \cdot m^{2+3A_k}}{s \cdot \mu \text{mol}^{A_k}} \right]$

FORNAX-A1.0 では時間依存で入力できる。

である。なお、頻度因子に濃度依存性が無ければ、すべての j について $Ea_{j,k} = 0$ である。従って、

- (62)式より $A_k=0$ となるため、 $A_{i,k0}$ の単位は $[\text{m}^2/\text{s}]$ である。
- (59)(60)式より $A_{i,k,r} = A_{i,k0}$ であり、 $A_{i,k0}$ は頻度因子と一致する。

$C'_{1,k,r} \cdot C'_{2,k,r} \cdots \neq 0$ の場合、

$$q_{k,r} = C'_{1,k,r}^{Eq_{1,k}} \cdot C'_{2,k,r}^{Eq_{2,k}} \cdots \quad (63)$$

$$Q_{i,k,r} = q_{k,r} \cdot Q_{i,k0} \quad (64)$$

$C'_{1,k,r} \cdot C'_{2,k,r} \cdots = 0$ の場合、

$$Q_{i,k,r} = Q_{i,k0} \quad (65)$$

$Q_{i,k0}$ の単位は、下記に示すように $Q_{i,k,r}$ とは単位が異なるが、(65)式を採る場合は便宜的に無視することとする。「0 の 0 乗」がエラーの原因になることを回避するためである。理論的に正しくな

いが、最初の 1 タイムステップのみであれば影響は小さいと考えられる。

$Eq_{j,k}$: 領域 k における FP の拡散係数の活性化エネルギーに対する核種 j の濃度に
乗すべき冪数 [-]。

$q_{j,k}$: 領域 k における活性化エネルギーの FP 核種 j 濃度への依存係数 $\left[\frac{\text{mol}^{B_k}}{m^{3B_k}}\right]$
ただし

$$B_k = \sum_j Eq_{j,k} \quad (66)$$

$Q_{i,k0}$: 領域 k における FP 核種 i の濃度依存活性化エネルギー $\left[\frac{\text{J} \cdot m^{3B_k}}{\text{mol}^{1+B_k}}\right]$
FORNAX-A1.0 では時間依存で入力できる。

である。なお、活性化エネルギーに濃度依存が無ければ、すべての j について $Eq_{j,k} = 0$ である。
従って、

- (66)式より $B_k=0$ となるため、 $Q_{i,k0}$ の単位は [J/mol] である。
- (63),(64)式より $Q_{i,k,r} = Q_{i,k0}$ であり、 $Q_{i,k0}$ は活性化エネルギーと一致する。

4. まとめ

通常運転時及び事故時におけるピン・イン・ブロック型の高温ガス炉燃料からの FP 放出量を計算するための計算コードである FORNAX-A1.0 の概要、基礎式を説明した。

謝辞

本稿を作成するにあたり 懇篤なるご指導を賜った高温工学試験研究炉部(当時)の伊与久達夫氏、ご指導ご高覧を賜った水素・熱利用研究開発部の中川繁昭氏、及び、プログラムの修正にあたって貴重なご助言を戴いた炉設計部の後藤実氏並びに炉設計部(当時)の井坂和義氏に心より御礼申し上げます。

参考文献

- 1) 相原純 他: “ピン・イン・ブロック型高温ガス炉の燃料棒からの核分裂生成物放出計算コード FORNAX-A”, JAEA-Data/Code 2013-025 (2014), 64p.
- 2) 相原純 他: “FORNAX-A の応用”, JAEA-Technology 2015-040 (2016), 32p.
- 3) S. Mitake et al.: “An Analytical Study of Volatile Metallic Fission Product Release from Very High Temperature Gas-cooled Reactor Fuel and Core”, Nucl. Technol. 81, pp.7-12 (1988).

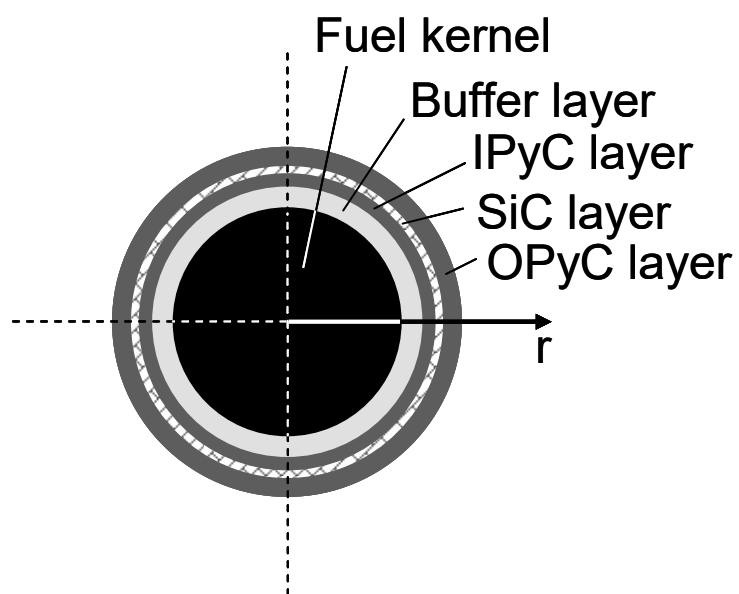


Fig. 1 Schematics of CFP system

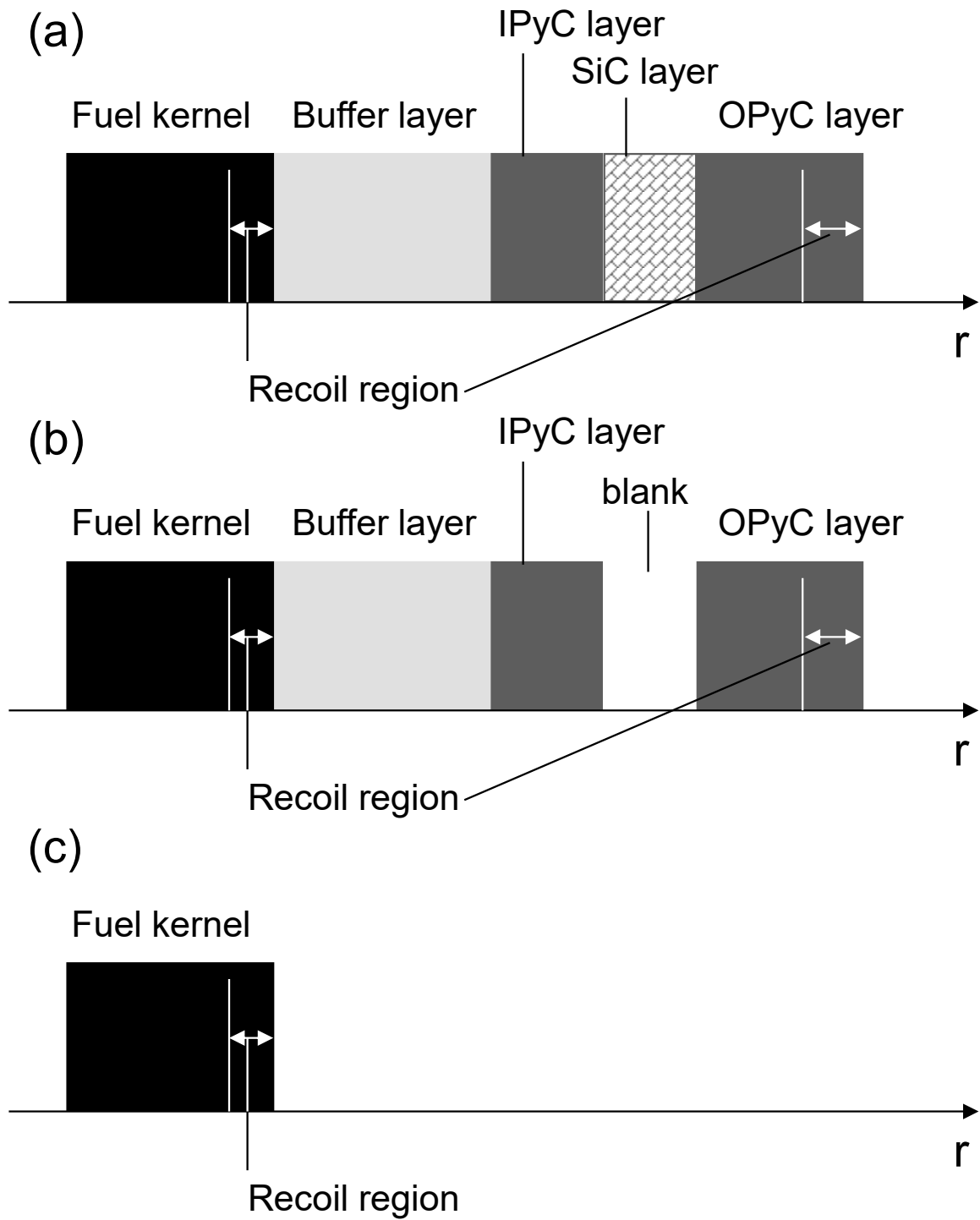


Fig. 2 Recoil regions in CFPs of each mode, (a) Intact CFP, (b) SiC failed CFP, (c) Through coating failed CFP

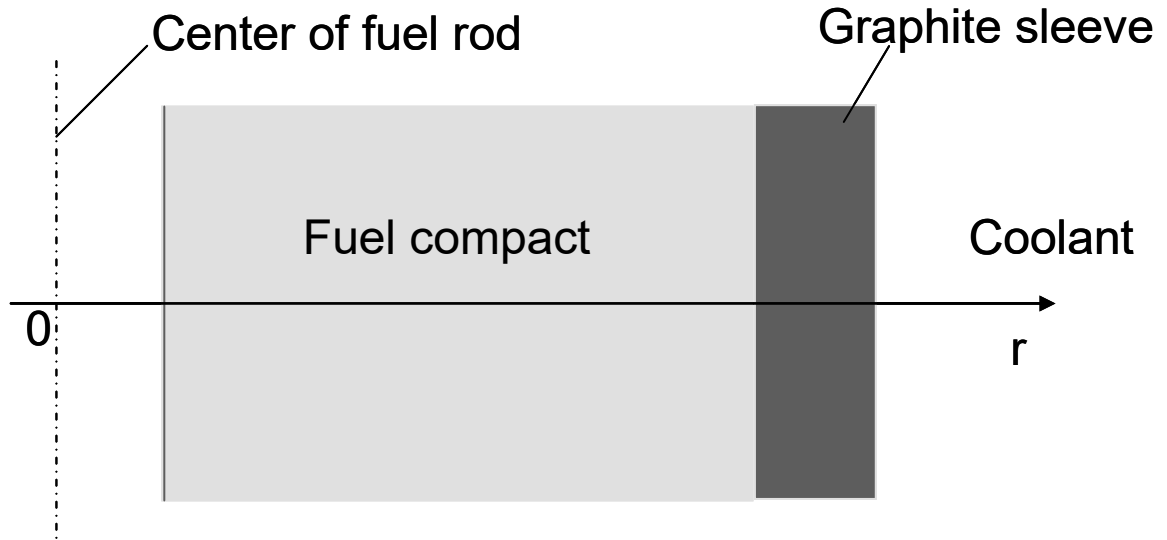


Fig. 3 Schematics of fuel rod system

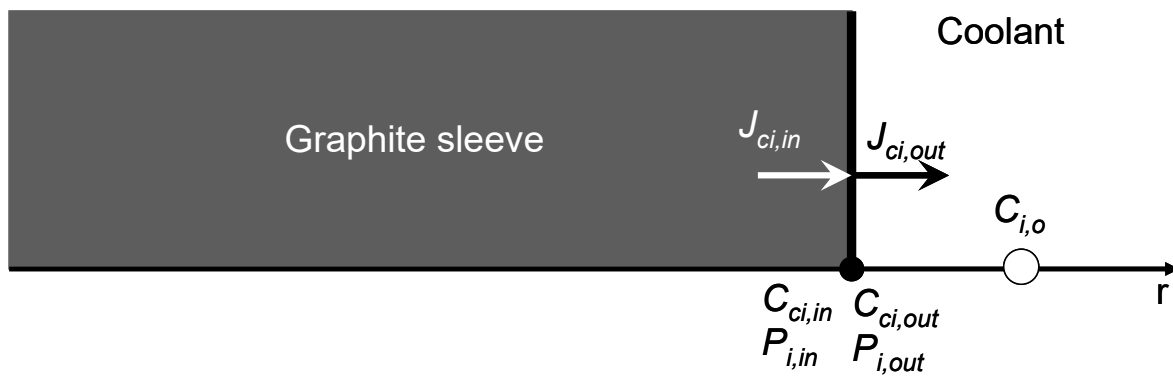


Fig. 4 Schematics of graphite sleeve/coolant boundary in case that boundary conditions depend on velocity, temperature and pressure of coolant, and FP concentration in coolant

付録 A 数値解析手法

A.1 はじめに

本付録は、FRONAX-A1.0 において FP プロファイルを求めるための数値解析手法を解説するものである。まず A.2 節にて FP 輸送の方程式の離散化について説明する。次に A.3 節にて離散化した方程式の解法について説明する。最後に A.4 節にて、本編 3.3.4 小節にて述べた、燃料棒表面における境界条件が冷却材流量等にも依存する場合の反復計算について説明する。

なお、求めた各タイムステップにおける FP プロファイルから様々な値(FP 放出速度、FP 保持量、など)を計算するための方法は本付録の範囲外である。

A.2 FP 輸送の方程式の離散化

A.2.1 空間の離散化

FORNAX-A1.0 では基礎方程式の空間的離散化に対し、コントロールボリューム法を適用した。コントロールボリューム法では、着目要素に対し基礎方程式に空間積分を実施する。

以下に FP 輸送の基礎方程式の例を示す。

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\nabla \cdot J_i + \sum_k (u_{ik} \cdot C_k) + \beta_i \quad (\text{A-1})$$

ここで、 C_i : FP 核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

t : 時刻 [sec]

J_i : FP 核種 i の流束 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

u_{ik} : FP 核種 k の崩壊による FP 核種 i の生成速度 [1/s] ($k=i$ の場合は減少速度)

$$u_{ii} = -\lambda_i$$

$$u_{ik} = \varepsilon_{ik} \lambda_k \quad \text{for } i \neq k$$

λ_i : FP 核種 i の崩壊定数 [1/sec](入力データ)

ε_{ik} : 核種 k が崩壊により核種 i になる分岐割合 [-](入力データ)

β_i : 核分裂による核種 i の生成速度 [$\mu \text{ mol/cm}^3/\text{sec}$] (入力データ)

ここで、(A-1)式をコントロール・ボリューム法で離散化すると、以下の(A-2)式に変換される。

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} \cdot \Delta v = \sum_j (S_j \cdot Q_{i,j}) + (\sum_k u_{ik} \cdot C_k + \beta_i) \cdot \Delta v \quad (\text{A-2})$$

ここで、 Δv : 要素体積[cm³]

S_j : 要素境界面 j の面積[cm²]

$Q_{i,j}$: 要素境界面 j からの着目要素への FP 核種 i の流束 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

この積分操作により、着目する物理量(FP核種濃度)の収支がとれて計算誤差が生じにくくなる。
また、プログラムの軽微な変更(Δv 及び S_j の計算式の書き換え)により、体系の形状をある程度変更することができる A-1)。

A.2.2 時間の離散化

A.2.2.1 時間進行の扱い

ここでは時間進行について考える。まず式(A-2)の左辺であるが、これは非定常項であり次式で離散化される。

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} \cdot \Delta v = \frac{c_i^n - c_i^{n-1}}{\Delta t^n} \cdot \Delta v \quad (\text{A-3})$$

ここで、 C_i^n : 着目する時刻ステップ(時刻ステップ n)の FP 核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

C_i^{n-1} : 前時刻ステップ(時刻ステップ $n-1$)の FP 核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

Δt^n : 時刻ステップ n における時間刻み幅 [s]

次に(A-2)式の右辺において、時間変化を伴う物理量に対しどの時刻の値を用いるか決めなくてはならないが、FORNAX-A1.0 では上記のうち非定常項以外を新時刻ステップの値とする以下の陰解法を採用した。陰解法は時間刻みが自由に設定でき、物理現象が緩慢なところで時間刻み幅を大きく取ることが可能であるという利点がある。

$$\frac{c_i^n - c_i^{n-1}}{\Delta t^n} \cdot \Delta v = \sum_j (S_j \cdot Q_{i,j}^n) + (\sum_k u_{ik} \cdot C_k^n + \beta_i^n) \cdot \Delta v \quad (\text{A-4})$$

ここで、 β_i^n : 時刻ステップ n の核分裂による核種 i の生成速度 [$\mu \text{ mol/cm}^3/\text{sec}$] (入力データ)

$Q_{i,j}^n$: 時刻ステップ n の要素境界面 j より着目要素への FP 核種 i の流束
[$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

A.2.2.2 時間刻みの設定方法

上記の通り、FORNAX-A1.0 では陰解法を採用したが、この陰解法においては時間刻みを自由に設定できるが、最適な時間刻み幅を設定するには、試行錯誤を要する場合がある。陰解法において時間刻みの設定が最適かどうかの判断は難しく、時間刻み幅を半分にして再計算を行い計算結果に大きな変動が生じなければ最適と判断するのが一般的である。ただし時間刻み幅を小さくすればするほど計算時間は増大するため、作業効率も考慮しつつ時間刻みの設定を行わなければならない。

なお FORNAX-A1.0 では、時間刻み幅を直接指定する方法の他、自動的に時間刻み幅を設定

する方法を選択オプションとして用意した。(付録 C 参照)

A.3 離散化方程式の解法

本節では、上記(A-4)式を反復計算により解く方法を説明する。A.3.1 小節で一通り概要を述べる、収束判定については別途 A.3.2 小節で述べる。

A.3.1 概要

まず、陰解法による基礎方程式(A-4)を FP 核種濃度に着目した形に整理する。

$$\frac{C_{i,m}^n - C_{i,m}^{n-1}}{\Delta t^n} \cdot \Delta v_m = a_{w,i,m}^n \cdot C_{i,m-1}^n + a_{p,i,m}^n \cdot C_{i,m}^n + a_{e,i,m}^n \cdot C_{i,m+1}^n - \lambda_i \cdot C_{i,m}^n \cdot \Delta v_m + G_{i,m}^n \quad (\text{A-5})$$

ただし、上添字の n 及び $n-1$ は時刻ステップを、下添字の $m-1, m, m+1$ は要素の番号を示す。

(A-5)式の新時刻ステップの FP 核種 i 濃度の一次の項をすべて左辺に移項すると、

$$\begin{aligned} -a_{w,i,m}^n \cdot C_{i,m-1}^n + \left(\frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} - a_{p,i,m}^n + \lambda_i \cdot \Delta v_m \right) \cdot C_{i,m}^n - a_{e,i,m}^n \cdot C_{i,m+1}^n \\ = G_{i,m}^n + C_{i,m}^{n-1} \cdot \frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} \end{aligned} \quad (\text{A-6})$$

さらに式を整理すると次式を得る。

$$A_{i,m,m-1} \cdot C_{i,m-1}^n + A_{i,m,m} \cdot C_{i,m}^n + A_{i,m,m+1} \cdot C_{i,m+1}^n = Z_{i,m} \quad (\text{A-7})$$

$$A_{i,m,m-1} = -a_{w,i,m}^n \quad (\text{A-8})$$

$$A_{i,m,m} = \left(\frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} - a_{p,i,m}^n + \lambda_i \cdot \Delta v_m \right) \quad (\text{A-9})$$

$$A_{i,m,m+1} = -a_{e,i,m}^n \quad (\text{A-10})$$

$$Z_{i,m} = G_{i,m}^n + C_{i,m}^{n-1} \cdot \frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} \quad (\text{A-11})$$

これをすべての要素について行い、まとめると以下の行列式を得る。(n_x は要素数)

$$A_i^n \overrightarrow{C_i^n} = \overrightarrow{Z_i^n} \quad (\text{A-12})$$

ここで、 $\overrightarrow{Z_i^n}$ は他の FP 核種の崩壊による生成や境界条件など FP 核種濃度にも依存する。即ち、 $\overrightarrow{Z_i^n}$ もまた変数である。従って、(A-12)式から得られた $\overrightarrow{C_i^n}$ は暫定解である。即ち、実際には

$$A_i^n \overrightarrow{Cd_i^n} = \overrightarrow{Zd_i^n} \quad (\text{A-13})$$

ただし、

$$A_i^n = \begin{pmatrix} A_{i,1,1}^n & A_{i,1,2}^n & & 0 \\ A_{i,2,1}^n & A_{i,2,2}^n & A_{i,2,3}^n & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & A_{i,nx-1,nx}^n & A_{i,nx,nx}^n \end{pmatrix} \quad (\text{A-14})$$

$$\overrightarrow{Cd_i^n} = \begin{pmatrix} Cd_{i,1}^n \\ Cd_{i,2}^n \\ \vdots \\ Cd_{i,nx}^n \end{pmatrix} \quad (\text{A-15})$$

$$\overrightarrow{Zd_i^n} = \begin{pmatrix} Zd_{i,1} \\ Zd_{i,2} \\ \vdots \\ Zd_{i,nx} \end{pmatrix} \quad (\text{A-16})$$

ここで、 $Cd_{i,m}^n$ ：着目する時刻ステップ(時刻ステップ n)、要素 m における核種 i の濃度の暫定解 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

$Zd_{i,m}^n$ ：目する時刻ステップ(時刻ステップ n)、要素 m における核種 i にかかる Z の暫定値 [$\mu \text{ mol/s}$]。 $\overrightarrow{C_j^n}$ にも依存する。($\overrightarrow{C_j^n}$ の下添え字が i ではないことに注意せよ)

(A-12)式中の行列 A_i^n も時刻ステップのみならず核種にも依存することに注意せよ。

FORNAX-A1.0 においては、

$$A_i^n \overrightarrow{Cd_i^{n,k}} = \overrightarrow{Zd_i^{n,k}} \quad (\text{A-17})$$

上記(A-17)式を解くことによって得た $\overrightarrow{Cd_i^{n,k}}$ を用いて $\overrightarrow{C_i^{n,k}}$ を

$$\overrightarrow{C_i^{n,k}} = \omega \overrightarrow{Cd_i^{n,k}} + (1 - \omega) \overrightarrow{C_i^{n,k-1}} \quad (\text{A-18})$$

ここで、 ω ：緩和係数[-] (入力データで与える。 $0 < \omega < 1.0$)
とし、収束するまで反復計算を行う。

この(A-17),(A-18)式の反復計算を行って(A-13)式を解く方法としては TDMA 法((A-17)式をガウスの消去法で解く)または SOR 法(付録 D 参照)を採用した。基本的には TDMA 法を用いて計算するが、FORNAX-A1.0 の前身である FORNAX-A の試計算で燃料棒体系の FP 核種濃度計算で異常に反復計算回数が多い事例があったため、燃料棒体系の計算については反復計算回数が 20 回を超えた場合 SOR 法に切り替えることとした。

TDMA 法は境界条件の伝播が早いいため、計算が敏感すぎて微小な振動を繰り返した可能性がある。したがって、SOR 法では通常は速く収束させるために ω として 1 より大きな値を用いるが(この場合、 ω を加速係数と呼ぶ)、安定性を確保することに重点を置くため 1 より小さな値を用いることとした。

A.3.2 収束判定

FORNAX-A1.0 では、(A-17),(A-18)式の反復計算の度にすべての要素で収束判定値(ε_1 、 ε_2 、 ε_3)を算出し、許容値 $\varepsilon_{\max}$ (入力データ)を下回った時点で計算が収束したと判定する。

$$\varepsilon_1 = |C_{i,m}^{n,k} - C_{i,m}^{n,k-1}| \quad (\text{A-19})$$

$$\varepsilon_2 = \left| \left(C_{i,m}^{n,k} - C_{i,m}^{n,k-1} \right) / \left(C_{i,m}^{n,k} - C_{i,m}^{n-1,k} \right) \right| \quad (\text{A-20})$$

$$\text{ただし、} C_{i,m}^{n,k} - C_{i,m}^{n-1,k} \neq 0$$

$$\varepsilon_3 = \left| \left(C_{i,m}^{n,k} - C_{i,m}^{n,k-1} \right) / C_{i,m}^{n,k} \right| \quad (\text{A-21})$$

ただし、 $C_{i,m}^{n,k} \neq 0$

[上添字]

$n, n-1$: 時刻ステップ

$k, k-1$: 反復計算回数

[下添字]

m : 要素番号

なお FORNAX-A1.0 では、各時刻ステップにおいて FP 核種濃度の最大値を調べ、着目する要素の FP 核種濃度がこの最大値の 10^{-20} 以下である場合は計算誤差と同等と考え、収束判定より除外することとした。

A.4 反復計算による黒鉛スリーブ外面すぐ内側における FP 濃度及び障壁係数の求め方

ここでは、本編 3.3.4 小節で述べた、燃料棒表面(黒鉛スリーブ外面)においてオプションである FORNAX コード A-2)に準拠する場合の燃料棒表面における境界条件を適用する場合、反復計算によって黒鉛スリーブ外面すぐ内側における FP 濃度及び障壁係数を求める方法を具体的に述

べる。Fig. A-1 にこのような場合の黒鉛スリーブ/冷却材境界の概念図を示す。

(1) 本編中(40)-(42)式を以下に再度書く。

$$\eta_i \cdot C_{ci,in} = C_{ci,out} \quad (\text{A-22})$$

ただし、 η_i ：黒鉛スリーブ/冷却材における核種 i の障壁係数 [-]

他の境界とは異なり、未知数である。

$C_{ci,in}$ ：黒鉛スリーブ/冷却材境界すぐ内側における核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

$C_{ci,out}$ ：黒鉛スリーブ/冷却材境界すぐ外側における核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

$$-D_{i,gs} \left. \frac{\partial C_{ci}}{\partial r} \right|_{in} = \alpha_{D,i} \cdot (\eta_i \cdot C_{ci,in} - C_{ci,o}) \quad (\text{A-23})$$

ただし、 $D_{i,gs}$ ：黒鉛スリーブ表面における黒鉛スリーブ中核種 i の拡散係数 [cm^2/s](頻度因子と活性化エネルギー計算用パラメータ・温度が入力データ)

$\alpha_{D,i}$ ：冷却材側境界面における核種 i の物質伝達係数 [cm/s]

η_i 及び $C_{ci,in}$ に対して独立。これの求め方については本編 3.3.4.2 項で述べた。

$C_{ci,o}$ ：冷却材中の核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$](入力データ)

$$P_{i,in} = R_g \cdot (T_{out} + 273) \cdot \eta_i C_{ci,in} \quad (\text{A-24})$$

ただし、 $P_{i,in}$ ：黒鉛スリーブ/冷却材境界における黒鉛スリーブ側の核種 i の表面蒸気圧 [Pa]
未知数 $C_{ci,in}$ を含む関数である。これについては本編 3.3.4.3 項にて述べた。

R_g ：ガス定数 (= 8.314 [J/mol/K])

T_{out} ：冷却材温度 [°C](入力データ)

(2) $P_{i,in}$ の具体的な関数形については上記のように本編 3.3.4.3 項で述べたが、ここでは以下のように $C_{ci,in}$ の関数として記述する。

$$P_{i,in} = f_{press}(C_{ci,in}) \quad (\text{A-25})$$

(3) ここで、(A-23)式の左辺を離散化する。

$$-D_{i,gs} \left. \frac{\partial C_{ci}}{\partial r} \right|_{in} = -D_{i,m} \frac{C_{ci,in} - C_{ci,m}}{\Delta r_m} \quad (\text{A-26})$$

ただし、 $D_{i,m}$ ：黒鉛スリーブの最も外側の要素における核種 i の拡散係数 [cm^2/s]

$D_{i,gs}$ と同じ。(頻度因子と活性化エネルギー計算用パラメータ・温度が入力データ)

$C_{ci,m}$ ：黒鉛スリーブの最も外側の要素の中心点における核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$]

Δr_m ：黒鉛スリーブの最も外側の要素の幅の半分 [cm]

(4) (A-26)式を(A-23)式に代入して $C_{ci,in}$ について整理すると、

$$C_{ci,in} = \frac{D_{i,m} \cdot C_{ci,m} + \Delta r_m \cdot \alpha_{D,i} \cdot C_{ci,o}}{D_{i,m} + \Delta r_m \cdot \alpha_{D,i} \cdot \eta_i} \quad (\text{A-27})$$

である。また、 η_i について整理すると、

$$\eta_i = \frac{D_{i,m} \cdot (C_{ci,m} - C_{ci,in}) + \Delta r_m \cdot \alpha_{D,i} \cdot C_{ci,o}}{C_{ci,in} \Delta r_m \cdot \alpha_{D,i}} \quad (\text{A-28})$$

(5) ここで、反復計算で求める $C_{ci,in}$ 、 η_i の妥当性を示す指標として、 g_{press} を以下のように定義する。

$$g_{press}(C_{ci,in}, \eta_i) = R_g(T_{out}+273) \eta_i C_{ci,in} - f_{press}(C_{ci,in}) \quad (\text{A-29})$$

(A-24)(A-25)式より、 $C_{ci,in}$ 、 η_i が物理的に妥当な値であれば g_{press} は 0 となる。従って、 g_{press} が 0 に充分近い値になるように $C_{ci,in}$ 、 η_i を反復計算により求めれば良い。

(6) FORNAX-A1.0 においては $C_{ci,in}$ 、 η_i は具体的には以下のようにして求めている。

- ① η_i の暫定値として $\eta_{i,1} = 1.0$ 、 $\eta_{i,2} = 0.95$ と設定し、(A-27)式より対応する $C_{ci,in}$ の暫定値 $C_{ci,in,1}$ 、 $C_{ci,in,2}$ を各々計算する。
- ② $\eta_{i,1}$ 、 $\eta_{i,2}$ 及び $C_{ci,in,1}$ 、 $C_{ci,in,2}$ を(A-29)式に代入し、対応する g_{press} 値である $g_{press,1}$ 、 $g_{press,2}$ を求める。
- ③ ニュートン法により新たな $C_{ci,in}$ の暫定値 $C_{ci,in,3}$ を求める。即ち、

$$C_{ci,in,3} = C_{ci,in,1} - \omega_{press} \cdot \left(\frac{C_{ci,in,1} - C_{ci,in,2}}{g_{press,1} - g_{press,2}} \right) \cdot g_{press,1} \quad (A-30)$$

ただし、 ω_{press} ：緩和係数。FORNAX-A1.0 では 0.5 としている。

- ④ $C_{ci,in,3}$ に対応する η_i 値である $\eta_{i,3}$ を(A-28)式より求める。
- ⑤ 以下同様に②-④を繰り返して $C_{ci,in,4}$ 、 $C_{ci,in,5}$ 、.....を求め、 $g_{press,4}$ 、 $g_{press,5}$ 、.....を求める。

FORNAX-A においては $g_{press,k}$ を収束判定に用いていたが(文献[*01]中付録 A 参照)、FORNAX-A1.0 においては $g_{press,k}$ [Pa]を $f_{press,k}$ [Pa]で相対化した下記(A-31)式に示すパラメータ $g'_{press,k}$ [-]を導入し、これを収束判定に用いることとした。

$$g'_{press,k} = \text{abs}(g_{press,k} / f_{press,k}) \quad (A-31)$$

FORNAX-A1.0 においては、

$$g'_{press,k} < \varepsilon_{max,g'} \quad (A-32)$$

が満たされるまで②-④を繰り返すこととした。

ただし、 $\varepsilon_{max,g'}$ ： g'_{press} の許容値(入力データ)

参考文献

- A-1) 相原純 他: “FORNAX-A の応用”, JAEA-Technology 2015-040 (2016), 32p.
- A-2) S. Mitake et al.: “An Analytical Study of Volatile Metallic Fission Product Release from Very High Temperature Gas-cooled Reactor Fuel and Core”, Nucl. Technol. 81, pp.7-12 (1988).

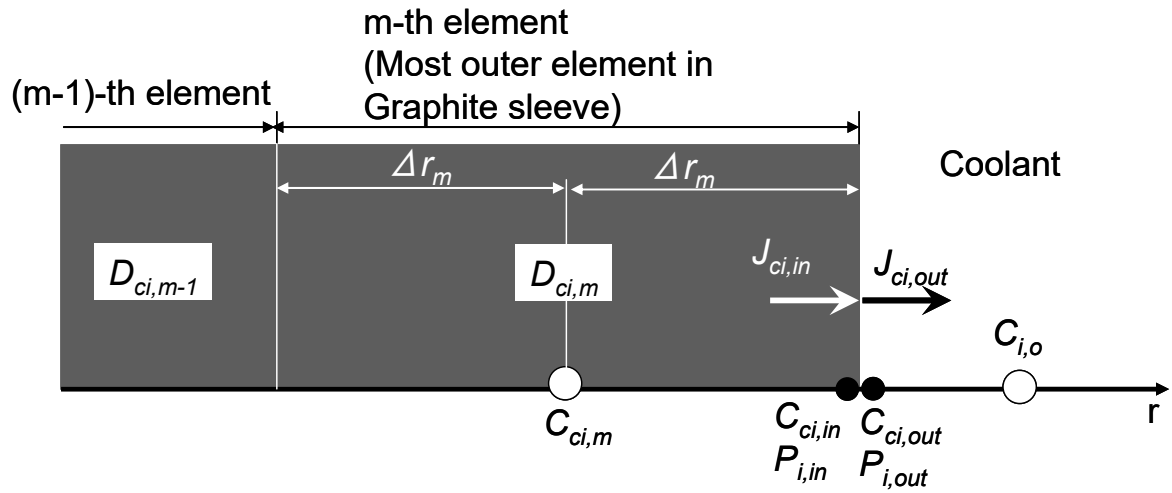


Fig. A-1 Schematic of graphite sleeve/coolant boundary in discretized system, in case that boundary conditions depend on velocity, temperature and pressure of coolant, and FP concentration in coolant

付録 B 陽解法及びクランク・ニコルソン法による時間の離散化

付録 A で述べたように、FORNAX-A1.0 においては付録 A 中の(A-2)式を時間について離散化する方法として陰解法を用いている。陽解法もクランク・ニコルソン法も用いていない。

ここではあくまでも参考のため陽解法及びクランク・ニコルソン法を用いると、付録 A 中の式(A-4)式に相当する式がどうなるか、下記に各々示す。

(1) 陽解法 (時間変化を伴う物理量として前時刻の値を用いる)

$$\frac{C_i^n - C_i^{n-1}}{dt} \cdot dv = \sum_j (S_j \cdot Q_{i,j}^{n-1}) + \left(\sum_k u_{ik} \cdot C_k^{n-1} + \beta_i^{n-1} \right) \cdot dv \quad (\text{B-1})$$

(2) クランク・ニコルソン法 (時間変化を伴う物理量として前時刻、新時刻の平均値を用いる)

$$\begin{aligned} \frac{C_i^n - C_i^{n-1}}{dt} \cdot dv = & 0.5 \cdot \left\{ \sum_j (S_j \cdot Q_{i,j}^{n-1}) + \left(\sum_k u_{ik} \cdot C_k^{n-1} + \beta_i^{n-1} \right) \cdot dv \right\} \\ & + 0.5 \cdot \left\{ \sum_j (S_j \cdot Q_{i,j}^n) + \left(\sum_k u_{ik} \cdot C_k^n + \beta_i^n \right) \cdot dv \right\} \end{aligned} \quad (\text{B-2})$$

付録 C FORNAX-A1.0 における時間刻み幅の自動設定(オプション)

FORNAX-A1.0 では、時間刻み幅を直接指定する方法の他、自動的に時間刻み幅を設定する方法を選択オプションとして用意した。以下に詳細をまとめる。この方法は、付録 B で説明したクランク・ニコルソン法に基づいている。

ただし、FORNAX-A1.0 における離散化法としてクランク・ニコルソン法は採用していない。クランク・ニコルソン法に基づいた方法で時間刻み幅の自動設定を行うオプションを用意しているというだけである。

クランク・ニコルソン法における基礎方程式は下記(C-1)式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{C_i^n - C_i^{n-1}}{\Delta t^n} \cdot \Delta v = 0.5 \cdot \left\{ \sum_j (S_j \cdot Q_{i,j}^{n-1}) + \left(\sum_k u_{ik} \cdot C_k^{n-1} + \beta_i^{n-1} \right) \cdot \Delta v \right\} \\ + 0.5 \cdot \left\{ \sum_j (S_j \cdot Q_{i,j}^n) + (\sum_k u_{ik} \cdot C_k^n + \beta_i^n) \cdot \Delta v \right\} \quad (C-1) \end{aligned}$$

ここで、 C_i^n : 着目する時刻ステップ(時刻ステップ n)の FP 核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

Δt^n : 時刻ステップ n における時間刻み幅 [s]

Δv : 要素体積 [cm^3]

S_j : 要素境界面 j の面積 [cm^2]

$Q_{i,j}^n$: 要素境界面 j からの着目要素への FP 核種 i の時刻ステップ n における流束 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

u_{ik} : FP 核種 k の崩壊による FP 核種 i の生成速度 [1/s] ($k=i$ の場合は減少速度)

$$u_{ii} = -\lambda_i$$

$$u_{ik} = \varepsilon_{ik} \lambda_k \text{ for } i \neq k$$

λ_i : FP 核種 i の崩壊定数 [1/sec] (入力データ)

ε_{ik} : 核種 k が崩壊により核種 i になる分岐割合 [-] (入力データ)

β_i^n : 時刻ステップ n における核分裂による核種 i の生成速度 [$\mu \text{ mol/cm}^3/\text{sec}$]

(C-1)を更に FP 核種濃度に着目して式を整理する。

$$\begin{aligned} & \frac{C_{i,m}^n - C_{i,m}^{n-1}}{\Delta t^n} \cdot \Delta v_m \\ &= 0.5 \cdot (a_{w,i,m}^n \cdot C_{i,m-1}^n + a_{p,i,m}^n \cdot C_{i,m}^n + a_{e,i,m}^n \cdot C_{i,m+1}^n - \lambda_i \cdot C_{i,m}^n \cdot \Delta v_m + G_{i,m}^n) \\ & \quad + 0.5 (a_{w,i,m}^{n-1} \cdot C_{i,m-1}^{n-1} + a_{p,i,m}^{n-1} \cdot C_{i,m}^{n-1} + a_{e,i,m}^{n-1} \cdot C_{i,m+1}^{n-1} \end{aligned}$$

$$-\lambda_i \cdot C_{i,m}^{n-1} \cdot \Delta v_m + G_{i,m}^{n-1}) \quad (C-2)$$

ここで、 $C_{i,m}^n$: タイムステップ n 、要素 m における FP 核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^3$]

G_m^n : FP 核種 i の濃度の一次の項以外を集めたもの [$\mu \text{ mol/sec}$]

$a_{w,i,m}^n$: FP 核種 i の濃度 $C_{i,m-1}^n$ にかかる係数 [cm^3/sec]

$a_{p,i,m}^n$: FP 核種 i の濃度 $C_{i,m}^n$ にかかる係数 [cm^3/sec]

$a_{e,i,m}^n$: FP 核種 i の濃度 $C_{i,m+1}^n$ にかかる係数 [cm^3/sec]

[上添字]

$n, n-1$: 時刻ステップ

[下添字]

$m-1, m, m+1$: 要素番号

上式を更に整理すると次式を得る。

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} - 0.5 \cdot (a_{p,i,m}^n - \lambda_i \cdot \Delta v_m) \right) \cdot C_{i,m}^n \\ &= \left(\frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} + 0.5 \cdot (a_{p,i,m}^{n-1} - \lambda_i \cdot \Delta v_m) \right) \cdot C_{i,m}^{n-1} \\ & \quad + 0.5 \cdot (a_{w,i,m}^n \cdot C_{i,m-1}^n + a_{e,i,m}^n \cdot C_{i,m+1}^n + G_{i,m}^n) \\ & \quad + 0.5 \cdot (a_{w,i,m}^{n-1} \cdot C_{i,m-1}^{n-1} + a_{e,i,m}^{n-1} \cdot C_{i,m+1}^{n-1} + G_{i,m}^{n-1}) \end{aligned} \quad (C-3)$$

ここで $C_{i,m}^n$ 、 $C_{i,m}^{n-1}$ 各項の係数に着目するが、この係数の符号が異なると、時間の進行に従い振動が生じ、計算が発散してしまうため計算を安定して行うには両者とも符号が等しくなければならない。

なお $C_{i,m}^n$ 、 $C_{i,m}^{n-1}$ の係数中の $a_{p,m,i}^n$ 、 $a_{p,m,i}^{n-1}$ は拡散および物質伝達による移送項から派生する係数である。移送項においては、付録 A 中(A-1)式から(A-2)式への変換において流束 Q_i の方向は着目要素に流入する方向を正とした。ここで物質伝達を例とすると流束 Q_i は次式で表される。

$$Q_{i,w} = \alpha_{i,w} \cdot (C_{i,m-1} - C_{i,m}) = \alpha_{i,w} \cdot C_{i,m-1} - \alpha_{i,w} \cdot C_{i,m} \quad (C-4)$$

$$Q_{i,e} = \alpha_{i,e} \cdot (C_{i,m+1} - C_{i,m}) = \alpha_{i,e} \cdot C_{i,m+1} - \alpha_{i,e} \cdot C_{i,m} \quad (C-5)$$

ここで $\alpha_{i,w}$ 、 $\alpha_{i,e}$ は物質伝達係数を意味する。

上記より着目要素に流入する方向を正とした場合、 $C_{i,m}$ の係数は $-\alpha_{i,w}, -\alpha_{i,e}$ となり、必ず負の値になることが分かる。これは拡散による移送についても同様であるため、(C-2)式および(C-3)式において $a_{p,i,m}$ は必然的に負の値となる。

また λ_i は正であるから、(C-3)式の左辺の $C_{i,m}^n$ の係数は常に正となる。

$$\frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} - 0.5 \cdot (a_{p,i,m}^n - \lambda_i \cdot \Delta v_m) > 0.0 \quad (\text{C-6})$$

以上より計算が安定に行われるためには、以下の条件を満たす必要がある。

$$\frac{\Delta v_m}{\Delta t^n} + 0.5 \cdot (a_{p,i,m}^{n-1} - \lambda_i \cdot \Delta v_m) > 0.0 \quad (\text{C-7})$$

$$\Delta t^n < \frac{-2 \cdot \Delta v_m}{a_{p,i,m}^{n-1} - \lambda_i \cdot \Delta v_m} \quad (\text{C-8})$$

さて、FORNAX-A1.0では時間刻みの設定を自動的に行うようにオプション選択した場合、以下のように時間刻み幅を計算する。

まず、すべての要素、すべての核種に対して下記(C-9)式で表される $\Delta t_{i,m}^n$ を計算する。

$$\Delta t_{i,m}^n = \frac{-2 \cdot \Delta v_m}{(a_{p,i,m}^{n-1} - \lambda_i \cdot \Delta v_m)} \quad (\text{C-9})$$

そして、その時間ステップにおける時間刻み幅 Δt^n を下記(C-10)式で計算する。

$$\Delta t^n = \min(\Delta t_{i,m}^n) / 5 \quad (\text{C-10})$$

$\Delta t_{i,m}^n$ の最小値を更に1/5にして時間刻み幅として用いる理由は、計算の安定を図るためである。

付録 D SOR 法

本付録は、付録 A 中で、FORNAX-A1.0 における(A-12)式の数値解法の 1 つとして挙げられた SOR 法について説明するものである。

付録 A 中(A-12)式を再掲する。

$$A_i^n \overrightarrow{C_i^n} = \overrightarrow{Z_i^n} \quad (\text{D-1})$$

上添え字 n : 時刻ステップ

下添え字 i : 核種

ただし、 A_i^n : $nx \times nx$ の正方行列

$\overrightarrow{C_i^n}$: nx 次元のベクトル

$\overrightarrow{Z_i^n}$: nx 次元のベクトル。 $\overrightarrow{C_j^n}$ にも依存する。 $(\overrightarrow{C_j^n})$ の下添え字が i ではないことに注意)

上記のように、 $\overrightarrow{Z_i^n}$ は $\overrightarrow{C_j^n}$ にも依存するため、 $\overrightarrow{Z_i^n}$ も未知数である。従って、実際には $\overrightarrow{Z_i^n}$ は暫定値であり、 $\overrightarrow{C_i^n}$ は暫定解である。

$\overrightarrow{C_i^n}$ 及び $\overrightarrow{Z_i^n}$ の k 回目反復計算時の暫定解及び暫定値を $\overrightarrow{Cd_i^{n,k}}$ 及び $\overrightarrow{Zd_i^{n,k}}$ として、

$$A_i^n \overrightarrow{Cd_i^{n,k}} = \overrightarrow{Zd_i^{n,k}} \quad (\text{D-2})$$

ただし、 $\overrightarrow{Cd_i^n}$: nx 次元のベクトル

$\overrightarrow{Zd_i^n}$: nx 次元のベクトル。 $\overrightarrow{C_j^n}$ にも依存する。 $(\overrightarrow{C_j^n})$ の下添え字が i ではないことに注意)

が成立するとする。

そして、(D-2)を解くことによって得られた $\overrightarrow{Cd_i^{n,k}}$ を用いて

$$\overrightarrow{C_i^{n,k}} = \omega \overrightarrow{Cd_i^{n,k}} + (1 - \omega) \overrightarrow{C_i^{n,k-1}} \quad (\text{D-3})$$

ただし、 ω : 緩和係数[-]

とする。

ここで、 A_i^n を下記(D-4)式のように分解する。

$$A_i^n = L_i^n + D_i^n + U_i^n \quad (\text{D-4})$$

ただし、 L_i^n : $n \times n$ の下三角行列

D_i^n : $n \times n$ の対角行列

U_i^n : $n \times n$ の上三角行列

(D-4)式を(D-2)式に代入すると、

$$(L_i^n + D_i^n + U_i^n) \overrightarrow{cd_i^{n,k}} = \overrightarrow{zd_i^{n,k}} \quad (\text{D-5})$$

となり、更に変形して、

$$D_i^n \overrightarrow{cd_i^{n,k}} = \overrightarrow{zd_i^{n,k}} - L_i^n \overrightarrow{cd_i^{n,k}} - U_i^n \overrightarrow{cd_i^{n,k}} \quad (\text{D-6})$$

が成り立つ。

ここで、もしも $\overrightarrow{cd_i^{n,k}}$ 及び $\overrightarrow{zd_i^{n,k}}$ が収束するならば、 $k \rightarrow \infty$ において、

$$\overrightarrow{zd_i^{n,k}} = \overrightarrow{z_i^{n,k}} \quad \text{for } k \rightarrow \infty \quad (\text{D-7})$$

$$\overrightarrow{cd_i^{n,k}} = \overrightarrow{c_i^{n,k}} = \overrightarrow{c_i^{n,k-1}} \quad \text{for } k \rightarrow \infty \quad (\text{D-8})$$

従って、もしも $\overrightarrow{cd_i^{n,k}}$ 及び $\overrightarrow{zd_i^{n,k}}$ が収束するならば、 $k \rightarrow \infty$ において、(D-8)式を(D-6)式に代入して、

$$D_i^n \overrightarrow{cd_i^{n,k}} = \overrightarrow{zd_i^{n,k}} - L_i^n \overrightarrow{c_i^{n,k}} - U_i^n \overrightarrow{c_i^{n,k-1}} \quad \text{for } k \rightarrow \infty \quad (\text{D-9})$$

(D-3)(D-9)式より $\overrightarrow{cd_i^{n,k}}$ を消去すると、

$$\begin{aligned} \overrightarrow{c_i^{n,k}} = \{ I + \omega (D_i^n)^{-1} L_i^n \}^{-1} \{ (1 - \omega) I - \omega (D_i^n)^{-1} U_i^n \} \overrightarrow{c_i^{n,k-1}} \\ + \omega (D_i^n + \omega L_i^n)^{-1} \overrightarrow{zd_i^{n,k}} \quad \text{for } k \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (\text{D-10})$$

ただし、 I : $n \times n$ の単位行列

なお、 $\omega=1$ の場合をガウス・ザイデル法と言う。

付録 E 動作確認

E.1 はじめに

本付録において、FORNAX-A からの変更(本編中 2.2 節)のうち、最も重要かつ、動作確認の方法が複雑な「黒鉛スリーブ/冷却材における境界条件が”FP 濃度=0”ではない場合(FORNAX コード E-1)に準拠)に必要となる収束計算の収束条件の変更」について、燃料棒体系の動作確認を行った例を示す。CFP 体系における動作確認は省略する。(FORNAX-A での動作確認の例が文献 E-2) 中付録 B に示されている)

「FP の拡散係数の FP 濃度依存性の追加」もまた重要であるが、付録 G で述べるように何の変更も施さない本来の FORNAX-A1.0 においては実用性がないため、動作確認を兼ねた応用例を将来別稿にて示すこととする。

なお、本編中 2.1.6 小節(4)にも述べた通り、計算結果と実験結果がよくあうためには、FORNAX-A1.0 が正しく動作する以外の要件も満たす必要があることに注意せよ。

E.2 動作確認の方法

E.2.1 全体の流れ

動作確認においては、ある条件で FORNAX-A1.0 で計算したあるタイムステップ n の FP 濃度分布等について、下記(1)(2)を行うことをもって動作確認とする。

- (1) タイムステップ n において燃料棒表面における反復計算が収束していることを確認する。
(E.2.2 節)

また、燃料棒表面から冷却材に放出される FP の流束を計算する。(下記(2)にて使用)

- (2) FORNAX-A1.0 で計算されたタイムステップ n における燃料棒体系における FP 濃度分布が基礎式を満たしていることを確認する。(E.2.3 節)

なお、FORNAX-A1.0 においては FP 濃度分布以外にも様々な値(例：各破損モードの CFP 一個あたり FP 放出速度)が出力されるが、ここでは FP 濃度分布と入力データのみを用いて動作確認を行うとする。

E.2.2 燃料棒表面における境界条件が FORNAX コードに準拠する場合のあるタイムステップにおける反復計算の検証及びスリーブ外面における FP の拡散流束の計算

E.2.2.1 基礎式

燃料棒表面における境界条件が FORNAX コードに準拠する場合、スリーブ/冷却材境界における境界条件は、本編中(41)(42)式より、

$$-D_{i,gs} \left. \frac{\partial C_{ci}}{\partial r} \right|_{in}^n = \alpha_{D,i} \cdot \left(\eta_i^n \cdot C_{ci,in}^n - C_{ci,o}^n \right) \quad (E-1)$$

$$P_{i,in}^n = R_g \cdot (T_{out}^n + 273) \cdot \eta_i^n C_{ci,in}^n \quad (E-2)$$

ただし、 $D_{i,gs}^n$: タイムステップ n における黒鉛スリーブ表面における黒鉛スリーブ中核種 i の拡散係数 [cm^2/s](頻度因子・活性化エネルギー・温度が入力データ)

C_{ci}^n : タイムステップ n における燃料棒体系の核種 i の濃度分布 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$]

$\alpha_{D,i}^n$: タイムステップ n における冷却材側境界面における核種 i の物質伝達係数 [cm/s] 本編中 3.3.4.2 項参照。

η_i^n : タイムステップ n における黒鉛スリーブ/冷却材における核種 i の障壁係数 [-]

$C_{ci,in}^n$: タイムステップ n における黒鉛スリーブ/冷却材境界すぐ内側における核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$]

$C_{ci,o}^n$: タイムステップ n における冷却材中の核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$](入力データ)

$P_{i,in}^n$: タイムステップ n における黒鉛スリーブ/冷却材境界における黒鉛スリーブ側の核種 i の表面蒸気圧 [Pa]

R_g : ガス定数 (= 8.314 [J/mol/K])

T_{out}^n : タイムステップ n における冷却材温度 [$^{\circ}\text{C}$](入力データ)

更に、(E-1)式右边を付録 A 中(A-26)式によって離散化して代入すると、

$$-D_{ci,Mc}^n (C_{ci,in}^n - C_{ci,Mc}^n) / \Delta r_{Mc} = \alpha_{D,i}^n (\eta_i^n C_{ci,in}^n - C_{ci,o}^n) \quad (\text{E-3})$$

ただし、 $D_{ci,Mc}^n$: タイムステップ n 、燃料棒体系での最外要素 Mc における核種 i の拡散係数 [cm^2/s](頻度因子・活性化エネルギー・温度が入力データ)

$C_{ci,Mc}^n$: タイムステップ n 、節点 Mc (最外要素 Mc の中央の点)における核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$]

Δr_{Mc} : 最外要素 Mc のメッシュ幅の半分(節点 Mc と最外面の距離) [cm]

これを付録 A 中の(A-27)式と同様に $C_{ci,in}^n$ について整理すると、

$$C_{ci,in}^n = (D_{ci,Mc}^n C_{ci,Mc}^n + \Delta r_{Mc} \alpha_{D,i}^n C_{ci,o}^n) / (D_{ci,Mc}^n + \Delta r_{Mc} \alpha_{D,i}^n \eta_i^n) \quad (\text{E-4})$$

これを付録 A 中の(A-28)式と同様に η_i^n について整理すると、

$$\eta_i^n = \{D_{ci,Mc}^n (C_{ci,Mc}^n - C_{ci,in}^n) + \Delta r_{Mc} \alpha_{D,i}^n C_{ci,o}^n\} / (C_{ci,in}^n \Delta r_{Mc} \alpha_{D,i}^n) \quad (\text{E-5})$$

また、反復計算で求める $C_{ci,in}$ 、 η_i の収束判定に用いるパラメータとして、付録 A 中の(A-31)式にて定義した g'_{press} を再掲する。

$$g'_{press}(C_{ci,in}^n, \eta_{I^n}) = \text{abs}[R_g(T_{out}^n + 273) \eta_{I^n} C_{ci,in}^n / f_{press}(C_{ci,in}^n) - 1] \quad (\text{E-6})$$

ただし、 $f_{press}(C_{ci,in}^n)$ は、本編中 3.3.4.3 項で述べた方法で求める黒鉛スリーブ側の核種 i の表面蒸気圧 [Pa]である。

E.2.2.2 あるタイムステップにおける反復計算の検証及びスリーブ外面における FP の拡散流束の計算

あるタイムステップ n における反復計算の検証及びスリーブ外面における FP の拡散流束の計算の方法は下記の通りである。

- (1) 本編中の 3.3.4.2 項に示した方法で α_{D,I^n} を求める。
- (2) 反復計算の検証を行う。
 - ① 本編中 3.3.4.3 項で述べた方法で $f_{press}(C_{ci,in}^n)$ を求める。
 - ② (E-5)式より η_{I^n} を求める。
 - ③ (E-6)式より $g'_{press}(C_{ci,in}^n, \eta_{I^n})$ を求める。
 - ④ 求めた $g'_{press}(C_{ci,in}^n, \eta_{I^n})$ が収束判定値(入力データ)以下であることを確認する。
- (3) スリーブ最外面における FP の拡散流出の流束 $J_{ci,w,Mc}^n$ を計算する。
(E-1)式の右辺又は左辺を用いて計算する。即ち、

$$J_{ci,w,Mc}^n = -D_{ci,Mc}^n \frac{C_{ci,in}^n - C_{ci,Mc}^n}{\Delta r_{Mc}} = \alpha_{D,I^n} (\eta_{I^n} C_{ci,in}^n - C_{ci,o}^n) \quad (\text{E-7})$$

である。

E.2.3 あるタイムステップにおける燃料棒体系の FP 濃度分布が基礎式を満たしていることの確認

E.2.3.1 全体の流れ

燃料棒中の FP 輸送の方程式である本編中(17)式を下記に再掲する。

$$\frac{\partial C_{ci}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_{ci} + \sum_k (u_{ik} \cdot C_{ck}) + G_i \quad (\text{E-8})$$

ただし、 t : 時刻 [sec]

J_{ci} : 燃料棒中における FP 核種 i の拡散の流束 [μ mol/cm²/sec]

u_{ik} : FP 核種 k の崩壊による FP 核種 i の生成率 [-] ($k=i$ の場合は減少率)

$$u_{ii} = -\lambda_i$$

$$u_{ik} = \varepsilon_{ik} \lambda_k \quad \text{for } i \neq k$$

λ_i : FP 核種 i の崩壊定数 [1/sec](入力データ)

ε_{ik} : 核種 k が崩壊により核種 i になる分岐率 [-](入力データ)

G_i : 核種 i の燃料棒体系における単位体積あたり生成速度 [μ mol/cm³/sec]

これをコントロールボリューム法及び陰解法にて離散化すると、

$$(C_{ci,mc}^n - C_{ci,mc}^{n-1}) \Delta v_{mc} / \Delta t^n = J_{ci,e,mc}^n S_e - J_{ci,w,mc}^n S_w + \Delta v_{mc} \sum_k u_{ik} C_{ck,mc}^n + \Delta v_{mc} G_{i,mc}^n \quad (\text{E-9})$$

ただし、 $C_{ci,mc}^n$: タイムステップ n 、燃料棒体系の節点 mc (要素 mc の中央の点) における

燃料棒体系の核種 i の濃度 [μ mol/cm³]

Δv_{mc} : 燃料棒体系の要素 mc の体積 [cm³]

Δt^n : タイムステップ n の幅 [s]

$J_{ci,e,mc}^n$: タイムステップ n における燃料棒体系の要素 $mc-1$ から要素 mc への核種 i の拡散による流入の流束 [μ mol/cm²/s] (E.2.3.2.2 項で述べる)

S_e : 燃料棒体系の要素 $mc-1$ と要素 mc の境界面積 [cm²]

$J_{ci,w,mc}^n$: タイムステップ n における燃料棒体系の要素 mc から要素 $mc+1$ (または冷却材) への核種 i の拡散による流出の流束 [μ mol/cm²/s] (E.2.3.2.1 項で述べる)

S_w : 燃料棒体系の要素 mc と要素 $mc+1$ の境界面積 [cm²]

$G_{i,mc}^n$: タイムステップ n 、燃料棒体系の要素 mc における核種 i の単位体積あたり生成速度 [μ mol/cm³/s] (E.2.3.2.3 項で述べる)

$C_{ci,mc}^n$ 、 $C_{ci,mc}^{n-1}$ 等を用いて(E-9)式の左辺と右辺を各々計算する。計算した両辺の一致度の指標として、下記(E-12)式で各要素における左辺と右辺の誤差 $Gosa_{ci,mc}^n$ を定義する。

$$Uhen_{ci,mc}^n = J_{ci,e,mc}^n S_e - J_{ci,w,mc}^n S_w + \Delta v_{mc} \sum_k u_{ik} C_{ck,mc}^n + \Delta v_{mc} G_{i,mc}^n \quad (\text{E-10})$$

$$Sahen_{ci,mc}^n = (C_{ci,mc}^n - C_{ci,mc}^{n-1}) \Delta v_{mc} / \Delta t^n \quad (\text{E-11})$$

$$Gosa_{ci,mc}^n = \text{abs}[(Uhen_{ci,mc}^n - Sahen_{ci,mc}^n) / Sahen_{ci,mc}^n] \quad (\text{E-12})$$

すべての燃料棒体系の要素について $Gosa_{ci,mc}^n$ が 0 に近い値であることを確認することをもって「タイムステップ n における燃料棒体系における FP 濃度分布が基礎式を満たしていることの確認」とする。

次小節では $J_{ci,e,mc}^n$, $J_{ci,w,mc}^n$, $G_{i,mc}^n$ 各々の計算方法を述べる。 $\sum_k u_{ik} C_{ck,mc}^n$ の計算方法は簡単なので説明は省略する。

E.2.3.2 (E-9)式右边各項の計算方法

E.2.3.2.1 流出の拡散流束 $J_{ci,w,mc}^n$ の計算方法

E.2.3.2.1.1 着目した燃料棒体系の要素 m_c がスリーブ最外面ではない場合

タイムステップ n において燃料棒体系の要素 m_c より要素 m_{c+1} へ流出する核種 i の拡散の流束 $J_{ci,w,mc}^n$ は以下の式で表される (Fig. E-1 参照)。

$$J_{ci,w,mc}^n = -D_{ci,mc}^n (C_{ci,w}^n - C_{ci,mc}^n) / \Delta r_{mc} \quad (E-13)$$

$$J_{ci,w,mc}^n = -D_{ci,mc+1}^n (C_{ci,mc+1}^n - \phi_{i,mc} C_{ci,w}^n) / \Delta r_{mc+1} \quad (E-14)$$

ただし、 $D_{ci,mc}^n$: タイムステップ n 、燃料棒体系の要素 m における核種 i のコンパクト中の拡散係数 [cm^2/s] (頻度因子・活性化エネルギー・温度が入力データ)

$C_{ci,w}^n$: タイムステップ n における燃料棒体系の要素 m_c の外境界のすぐ内側における核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$]

$\phi_{i,mc}$: 燃料棒体系の要素 m_c /要素 m_{c+1} 境界における障壁係数 [-] (入力データ)

Δr_{mc} : 燃料棒体系の要素 m_c のメッシュ幅の半分 [cm]

これら 2 式より $C_{ci,w}^n$ を消去すると、

$$J_{ci,w,mc}^n = D_{ci,mc}^n D_{ci,mc+1}^n (\phi_{i,m} C_{ci,mc}^n - C_{ci,mc+1}^n) / (D_{ci,mc}^n \Delta r_{mc+1} + \phi_{i,mc} D_{ci,mc+1}^n \Delta r_{mc}) \quad (E-15)$$

E.2.3.2.1.2 着目した燃料棒体系の要素 m_c がスリーブ最外面である場合
(E-7)式で表される。

E.2.3.2.2 流入の拡散流束 $J_{ci,w,mc}^n$ の計算方法

E.2.3.2.2.1 着目した燃料棒体系の要素 m_c がコンパクト最内面ではない場合

着目した燃料棒体系の要素 m_c がコンパクト最内面ではない場合、流入の拡散流速は、そのすぐ外側の要素からの流出の拡散流速と等しいため、(E-15)式より、

$$\begin{aligned} J_{ci,e,mc}^n &= J_{ci,w,mc-1}^n \\ &= D_{ci,mc-1}^n D_{ci,mc}^n (\phi_{i,mc-1} C_{ci,mc-1}^n - C_{ci,mc}^n) / (D_{ci,mc-1}^n \Delta r_{mc} + \phi_{i,mc-1} D_{ci,mc}^n \Delta r_{mc-1}) \end{aligned} \quad (E-16)$$

E.2.3.2.2.2 着目した燃料棒体系の要素 m_c がコンパクト最内面である場合
最も内側の要素へ流入する核種 i の拡散の流束は 0 である。

E.2.3.2.3 燃料棒体系における単位体積当たり FP 生成速度の計算法

E.2.3.2.3.1 全体の流れ

- (1) タイムステップ n 、燃料棒体系における要素 m_c における健全 CFP、SiC 破損 CFP、貫通破損 CFP 各々からの CFP 一個あたり核種 i の放出速度 $Re_{IN,i,mc}^n$ 、 $Re_{SiC,i,mc}^n$ 、 $Re_{b,i,mc}^n$ [μ mol/s]を求める。その方法は E.2.3.2.3.2 で述べる。
- (2) タイムステップ n 、燃料棒体系における要素 m_c における健全 CFP、SiC 破損 CFP、貫通破損 CFP 一個の中の核種 i の保有量 $In_{IN,i,mc}^n$ 、 $In_{SiC,i,mc}^n$ 、 $In_{b,i,mc}^n$ [μ mol]を求める。計算方法は簡単なので説明は省略する。
- (3) タイムステップ n 、燃料棒体系における要素 m_c における燃料コンパクト体系に単位体積当たり放出される核種 i の放出速度 $Ret_{i,mc}^n$ [μ mol/cm³/sec]を計算する。
ここでは離散化して計算するので、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限をとる前の式を用いる。燃料コンパクト単位体積当たりの FP 放出速度を計算する本編中の式(33)及び(35)より、

$$Ret_{i,mc} = N \cdot (Re_{IN,i,mc}^n \cdot f_{IN}^n + Re_{SiC,i,mc}^n \cdot f_{SiC}^n + Re_{b,i,mc}^n \cdot f_b^n - Inn_{i,mc}^n) + Re_{contami,i}^n \quad (E-17)$$

$$Inn_{i,mc}^n = In_{IN,i,mc}^{n-1}(f_{IN}^n - f_{IN}^{n-1}) / \Delta t^n + In_{SiC,i,mc}^{n-1}(f_{SiC}^n - f_{SiC}^{n-1}) / \Delta t^n + In_{b,i,mc}^{n-1}(f_b^n - f_b^{n-1}) / \Delta t^n \quad (E-18)$$

ただし、 N : 燃料コンパクト単位体積当たりの CFP 数 [1/cm³](入力データ)

f_{IN}^n 、 f_{SiC}^n 、 f_b^n : タイムステップ n における健全 CFP 割合、SiC 破損 CFP 割合、貫通破損 CFP 割合[-] 足すと 1 になる。(入力データ)

$In_{IN,i,mc}^n$ 、 $In_{SiC,i,mc}^n$ 、 $In_{b,i,mc}^n$:

タイムステップ n 、燃料棒体系における要素 m_c における健全 CFP、SiC 破損 CFP、貫通破損 CFP 一個の中の核種 i の保有量 [μ mol]
求め方は簡単なので説明は省略する。

$Re_{contami,i}^n$: タイムステップ n における燃料コンパクト汚染ウランからの核種 i の発生速度 [μ mol/sec] 本編中(27)式参照。

- (4) $Ret_{i,mc}^n$ から $G_{i,mc}^n$ を求める。オプションにより以下の 2 つのうちいずれかを選択する。

➤ コンパクト全域で一様に FP が放出されるとする方法

燃料コンパクト中にて $G_{i,mc}^n = Ret_{i,mc}^n$

その他にて $G_{i,mc}^n = 0$

- FORNAX コード E-1) に準拠し、コンパクト表面近傍では放出量が少ないとする方法

$$G_i^n(r) = FERMI(r) \cdot (Ret_i^n + Ret_i^{n-1}) / 2 \quad (E-19)$$

$$FERMI(r) = 1 / [\exp\{(r - AFERMI) / BFERMI\} + 1] \quad (E-20)$$

ここで、 $AFERMI$: 燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界位置 [cm]

$BFERMI$: 定数(=5.0 x 10⁻³) [cm]

r : 位置 [cm]

E.2.3.2.3.2 一個の CFP からの FP 放出速度の計算方法

E.2.3.2.3.2.1 全体の流れ

- (1) 燃料棒体系における要素 m_c における CFP 表面における核種 i の拡散流束 $J_{hj,i,mc}^n$

[μ mol/cm²/sec] を求める。

ただし、 $j=1$ の時健全 CFP、 $j=2$ の時 SiC 破損 CFP、 $j=3$ の時貫通破損 CFP を示す。求め方については E.2.3.2.3.2.2 で述べる。

- (2) 燃料棒体系における要素 m_c における 1 個の CFP からの核種 i の放出速度 $Re_{j,i,mc}^n$

[μ mol/cm²/sec] を求める。

ただし、 $j=1$ の時健全 CFP、 $j=2$ の時 SiC 破損 CFP、 $j=3$ の時貫通破損 CFP を示す。

本編中(15)式より、

$$Re_{j,i,mc}^n = J_{hj,i,mc}^n S_{sj} + \int_{\text{CFP 最外領域における反跳領域}} \beta_{pi} dv \quad (E-21)$$

ただし、 S_{sj} : CFP の表面積 [cm²]。(CFP 各部寸法が入力データ)

$j=1$ の時健全 CFP、 $j=2$ の時 SiC 破損 CFP、 $j=3$ の時貫通破損 CFP を示す。

なお、

$S_{s1} = S_{s2}$ = OPyC 層の外表面積、 S_{s3} = 燃料核の表面積

であることに注意せよ。

β_{pi} : CFP 中における核分裂による核種 i の生成速度 [μ mol/cm³/sec] (入力データ)

E.2.3.2.3.2.2 CFP 表面における核種 i の拡散流束の求め方

本編中 3.2.3 小節で述べたように、FORNAX-A1.0 において、CFP 表面(健全 CFP 及び SiC 破損 CFP については OPyC 層外表面、貫通破損 CFP については燃料核表面)における FP 濃度の境界条件は 3 種類の中からオプションにより選択することになっている。以下、境界条件ごとに燃料棒体系における要素 m_c における CFP 表面における核種 i の拡散流束 $J_{hj,i,mc}^n$ の求め方を述べる。

E.2.3.2.3.2.1 CFP 表面において FP 濃度=0 である場合

$$J_{hj,i,mc}^n = D_{pi,mc,Mp^n} C_{pi,mc,Mp^n} / \Delta r_{Mp} \quad (\text{E-22})$$

ただし、 D_{pi,mc,Mp^n} ：タイムステップ n 、燃料棒体系における要素 m_c の CFP の CFP 体系での最外要素 M_p における核種 i の CFP 中の拡散係数 [cm^2/s](頻度因子・活性化エネルギー・温度が入力データ)

C_{pi,mc,Mp^n} ：タイムステップ n 、燃料棒体系における要素 m_c の CFP の節点 M_p (CFP 体系での最外要素 M_p の中央の点)における核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$]

Δr_{Mp} ：CFP 体系における最外要素 M_p のメッシュ幅の半分 [cm]

E.2.3.2.3.2.2 外挿距離を設定する場合

本編中(13)及び(14)式を再掲する。

$$\partial C_{pi,in} / \partial r + C_{pi,out} / I_{DK,i} = 0 \quad (\text{E-23})$$

ただし、 $C_{pi,in}$ ：CFP 表面すぐ内側における CFP 中の核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^2/\text{sec}$]

r ：CFP 中心からの距離 [cm]

$C_{pi,out}$ ：CFP 表面すぐ外側における CFP 中の核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^2/\text{sec}$]

$I_{DK,i}$ ：核種 i の外挿距離 [cm]

$$C_{pi,out} = \phi_h C_{pi,in} \quad (\text{E-24})$$

ただし、 ϕ_h ：CFP 表面における障壁係数 [-]。(入力データ)

(E-24)式を(E-23)式に代入すると、

$$\partial C_{pi,in} / \partial r + \phi_h C_{pi,in} / I_{DK,i} = 0 \quad (\text{E-25})$$

(E-25)式を離散化すると、

$$(C_{pi,mc,in}^n - C_{pi,mc,Mp^n}) / \Delta r_{Mp} + \phi_h C_{pi,mc,in}^n / I_{DK,i} = 0 \quad (\text{E-26})$$

ただし、 $C_{pi,mc,in}^n$ ：タイムステップ n 、燃料棒体系の要素 m_c における CFP 表面すぐ内側における CFP 中の核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^2/\text{sec}$]

$C_{pi,mc,out}^n$ ：タイムステップ n 、燃料棒体系の要素 m_c における CFP 表面すぐ外側にお

ける CFP 中の核種 i の濃度 [$\mu \text{ mol/cm}^2/\text{sec}$]

$I_{DK,i}$: 核種 i の外挿距離 [cm] (入力データ)

(E-26)式を $C_{pi,mc,in}^n$ について整理すると、

$$C_{pi,mc,in}^n = I_{DK,i} C_{pi,mc,Mp}^n / (I_{DK,i} + \Delta r_{Mp} \phi_h) \quad (\text{E-27})$$

従って、

$$\begin{aligned} J_{hj,i,mc}^n &= -D_{pi,mc,Mp}^n \partial C_{pi,mc,in} / \partial r = D_{pi,mc,Mp}^n \phi_h C_{pi,mc,in} / I_{DK,i} \\ &= D_{pi,mc,Mp}^n \phi_h C_{pi,mc,Mp}^n / (I_{DK,i} + \Delta r_{Mp} \phi_h) \end{aligned} \quad (\text{E-28})$$

なお、 $I_{DK,i} = 0$ 、即ち「CFP 表面で核種 i の濃度=0」になる場合、(E-28)式は(E-22)式と一致する。

E.2.3.2.3.2.2.3 CFP 表面において FP 濃度勾配=0 である場合

$$J_{hj,i,mc}^n = -D_{pi,mc,Mp}^n \partial C_{pi,mc,in}^n / \partial r = 0 \quad (\text{E-29})$$

E.3 動作確認の条件

Table E-1 に示すように、4 年間の通常運転の後、事故が発生したとする。事故時は核分裂は停止していたとする。通常運転時及び事故時の燃料棒中の温度分布を Fig. E-2 に示す。その他の計算条件を Table E-2～E-6 に示す。核種が 1 種のみ(チェーンなし)である等、単純である。ただし、拡散係数の頻度因子(正確には濃度依存頻度因子。本ケースでは拡散係数が FP 濃度に依存しないため、濃度依存頻度因子は頻度因子と一致する)は時間依存することとした。ついでに濃度依存頻度因子の時間依存性が取り扱えることを確認するためである。なお、この計算条件は仮想的なものである。

E.4 結果

本編中 2.1.3 小節で述べたように、FORNAX-A1.0 においては事故時用の特別な計算モードが存在するわけではないが、通常運転時・事故時各々のある時刻において動作確認を行った結果を述べる。

E.4.1 事故前(通常運転時)

時刻 432000 s (5 日)において動作確認を行った。当該タイムステップ及び前タイムステップ ($t = 431970$ s)における燃料棒体系の FP 濃度分布を各々 Fig. E-3 及び E-4 に示す。また、当該タイムステップにおける健全 CFP 中の FP 濃度分布を Fig. E-5 に示す。

- (1) E.2.2.2 小節で述べた方法で求めた当該タイムステップにおける $g'_{press}(C_{ci,in}^n, \eta, i^n)$ は 9.473×10^{-8} であり、収束判定値(10^{-7} , Table E-6 参照)より小さかった。即ち、当該タイムステップにおいて燃料棒表面における反復計算が収束していることを確認した。また、当該タイムステップにおけるスリーブ最外面における FP の拡散流出の流束 $J_{ci,w,Mc}^n$ は $3.442 \times 10^{-16} [\mu \text{ mol/cm}^2/\text{s}]$ であった。
- (2) E.2.3 節で述べた方法で求めた当該タイムステップにおける燃料棒体系における各要素のパラメータ $Gosa_{ci,mc}^n$ を Fig. E-6 に示す。すべての要素において 6.2×10^{-5} 未満という小さな値であった。従って、当該タイムステップにおける燃料棒体系の FP 濃度分布は基礎式を満たしていた。

以上により、当該タイムステップにおいて FORNAX-A1.0 は正しく動作していたことが確認された。

E.4.2 事故時

時刻 126230370 s (4 年+約 1 日)において動作確認を行った。当該タイムステップ及び前タイムステップ($t = 126230345$ s)における燃料棒体系の FP 濃度分布を各々 Fig. E-7 及び E-8 に示す。また、当該タイムステップにおける健全 CFP 中の FP 濃度分布を Fig. E-9 に示す。

- (1) E.2.2.2 小節で述べた方法で求めた当該タイムステップにおける $g'_{press}(C_{ci,in}^n, \eta, i^n)$ は 9.388×10^{-8} であり、収束判定値(10^{-7} , Table E-6 参照)より小さかった。即ち、当該タイムステップにおいて燃料棒表面における反復計算が収束していることを確認した。また、当該タイムステップにおけるスリーブ最外面における FP の拡散流出の流束 $J_{ci,w,Mc}^n$ は $1.464 \times 10^{-7} [\mu \text{ mol/cm}^2/\text{s}]$ であった。
- (2) E.2.3 節で述べた方法で求めた当該タイムステップにおける燃料棒体系における各要素のパラメータ $Gosa_{ci,mc}^n$ を Fig. E-10 に示す。すべての要素において 6.2×10^{-5} 未満という小さな値であった。従って、当該タイムステップにおける燃料棒体系の FP 濃度分布は基礎式を満たしていた。

以上により、当該タイムステップにおいて FORNAX-A1.0 は正しく動作していたことが確認された。

参考文献

- E-1) S. Mitake et al.: “An Analytical Study of Volatile Metallic Fission Product Release from Very High Temperature Gas-cooled Reactor Fuel and Core”, Nucl. Technol. **81**, pp.7-12 (1988).
- E-2) 相原純 他: “ピン・イン・ブロック型高温ガス炉の燃料棒からの核分裂生成物放出計算コード FORNAX-A”, JAEA-Data/Code 2013-025 (2014), 64p.

Table E-1 Calculation condition (1/6): outline of operation and temperature history

Outline of normal operation and accident	stop of fission by scram and increase in temperature, after normal operation for 4 years.
Temperature during normal operation	See Fig. E-2
Temperature during accident	

Table E-2 Calculation condition (2/6): Information related to FP generation

Rate of generation by fission*1 [$\mu\text{mol}/\text{cm}^3/\text{s}$]	1.0×10^{-6} (constant)
Decay constant [1/s]	7.302778×10^{-10}

*1 only during normal operation, only in fuel kernel

Table E-3 Calculation condition (3/6): specifications of CFP system

Radius of fuel kernel [cm]	3.00×10^{-2}
Thickness of buffer layer [cm]	6.00×10^{-3}
Thickness of IPyC layer [cm]	3.00×10^{-3}
Thickness of SiC layer [cm]	2.50×10^{-3}
Thickness of OPyC layer [cm]	4.50×10^{-3}
Contamination uranium	fissile exists only in fuel kernel

Table E-4 Calculation condition (4/6): specifications of fuel rod system

Inner radius of fuel compact [cm]	5.00×10^{-1}
Outer radius of fuel compact [cm]	1.30
Number of CFPs in fuel compact per unit volume [$1/\text{cm}^3$]	6.117E+02
Profile of rate of FP from CFPs per unit volume in fuel compact	uniform
Through coating failure CFP fraction	0 (constant)
SiC layer failure CFP fraction	0 (constant)
Outer diameter of graphite sleeve [cm]	1.70
Density of sleeve [g/cm^3]	1.77
Outer radius of coolant channel [cm]	2.05
Length of fuel rod system [cm]	1.0
Contamination uranium	fissile exists only in fuel kernel

Table E-5 Calculation condition (5/6): information related to transportation of FPs in CFP and fuel rod.

	Pre-exponential factor [cm ² /s]	Activation energy [J/mol]	Recoil distance [cm]
in fuel kernel	6.75×10^{-6} *1 6.9×10^{-6} *2	1.77×10^5	7.70×10^{-4}
in buffer layer	6.69×10^{-2} *1 6.8×10^{-2} *2	1.98×10^5	—
in IPyC layer	6.69×10^{-5} *1 6.8×10^{-5} *2	1.98×10^5	—
in SiC layer	1.77×10^{-7}	1.76×10^5	—
in OPyC layer	6.69×10^{-5} *1 6.8×10^{-5} *2	1.98×10^5	—
Barrier factors in CFP	1 for all boundary		
Boundary condition at surface of CFP	concentration = 0 at surface of CFPs		
in fuel compact	9.00×10^1 *1 9.50×10^1 *2	1.57×10^5	—
in sleeve	9.00×10^{-2} *1 9.50×10^{-2} *2	1.57×10^5	—
Boundary condition at surface of fuel rod	See Table E-6.		
Barrier factors at compact/sleeve	1 for all boundary		

*1 until time = 5184000 [s] (about 60 days), *2 after time = 5184000 [s] (about 60 days)

Table E-6 Calculation condition (6/6): information related to release of FPs on surface of fuel rod

Type of boundary condition between sleeve/coolant	same as FORNAX-code
Type of surface vapor pressure of FP on sleeve side	switch Henrian-type and Freundlich-type at transition concentration
Tolerance of g'_{press} ($\varepsilon_{max,g'}$ in eq. (A-32) in Appendix A)	1×10^{-7}
Standard pressure for calculation of coolant/FP interdiffusion coefficient “P ₀ ” [Pa]	1×10^5
Standard temperature for calculation of coolant/FP interdiffusion coefficient “T ₀ ” [°C]	0
Model constant for calculation of coolant/FP interdiffusion coefficient “m”	1.8
Coolant/FP interdiffusion coefficient at T ₀ [°C] and P ₀ [Pa] [cm ² /s]	2.7
constant "A" for calculation of vapor pressure	24
constant "B" for calculation of vapor pressure	-3.60×10^4
constant "D" for calculation of vapor pressure	-1.56
constant "E" for calculation of vapor pressure	6.12×10^3
constant "F" for calculation of transient concentration	2.04
constant "G" for calculation of transient concentration	-1.78×10^{-3}
inner diameter of flow channel of coolant [cm]	1.7
outer diameter of flow channel of coolant [cm]	2.05
equivalent diameter of flow channel of coolant [cm]	0.7
initial concentration of FPs in coolant	0 (constant)
velocity of coolant [m/s]	44.7 (constant)
pressure of coolant [Pa]	4.00×10^6 (constant)

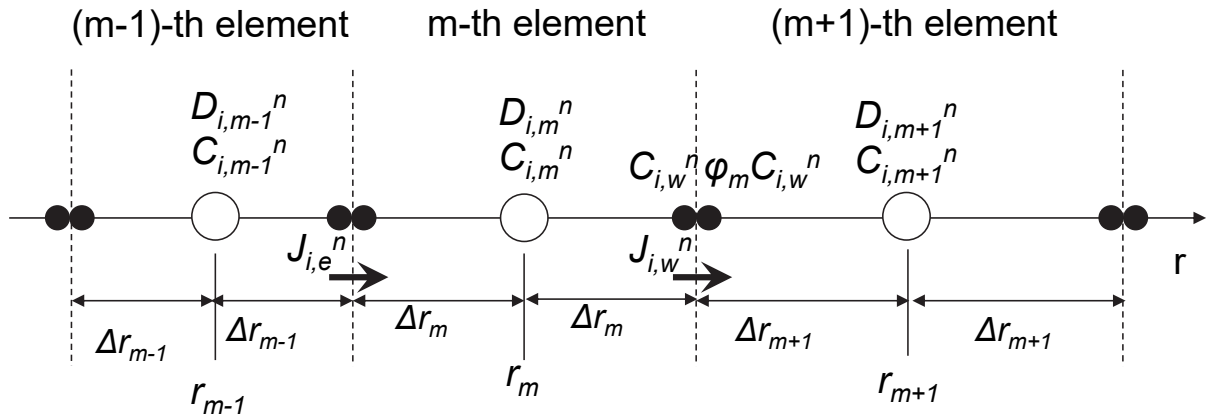


Fig. E-1 Schematic of diffusion flux in discretized system

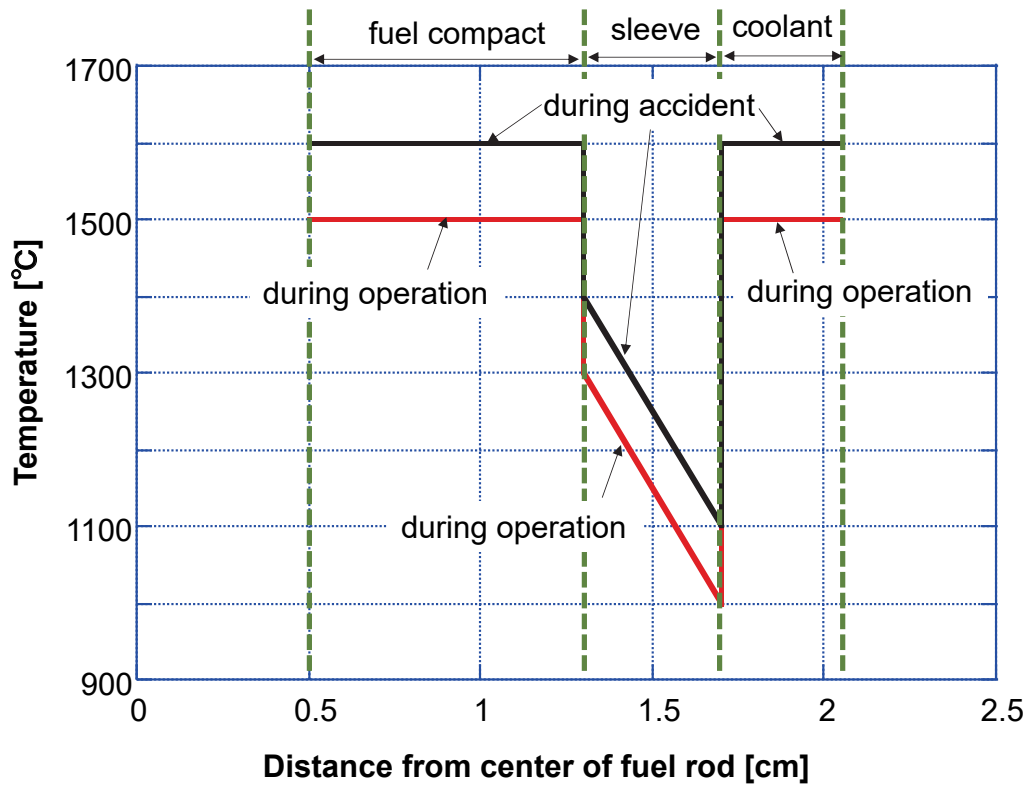


Fig. E-2 Temperature distributions in fuel rod and coated fuel particles

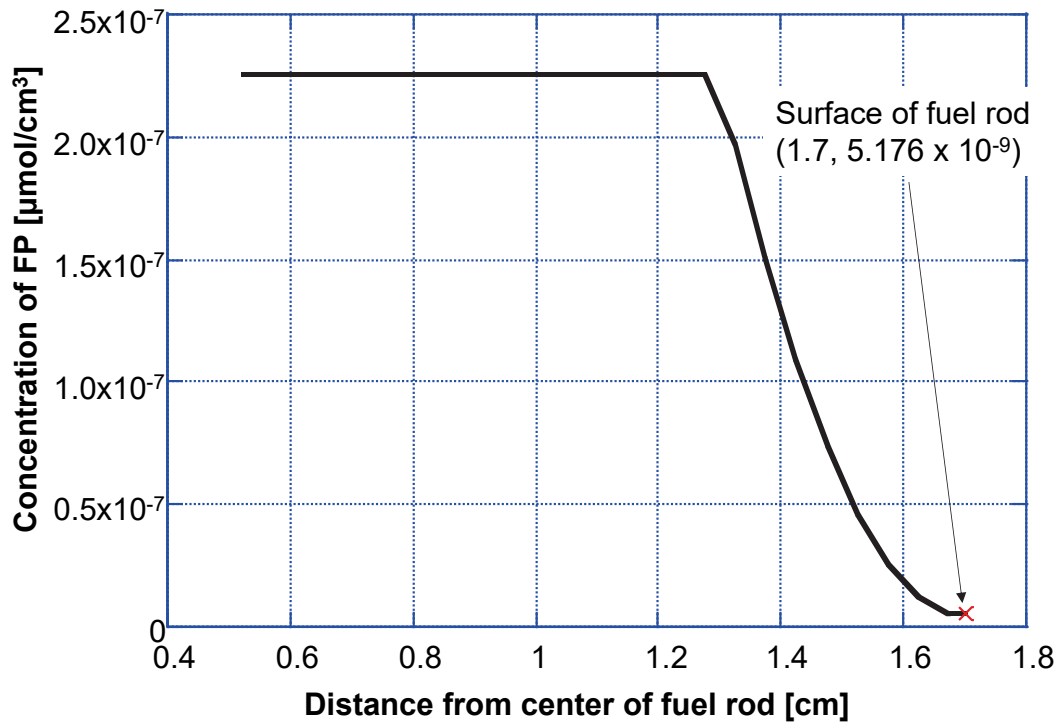


Fig. E-3 Distribution of FP concentration in fuel rod system at $t = 432000 \text{ s} = 5 \text{ days}$

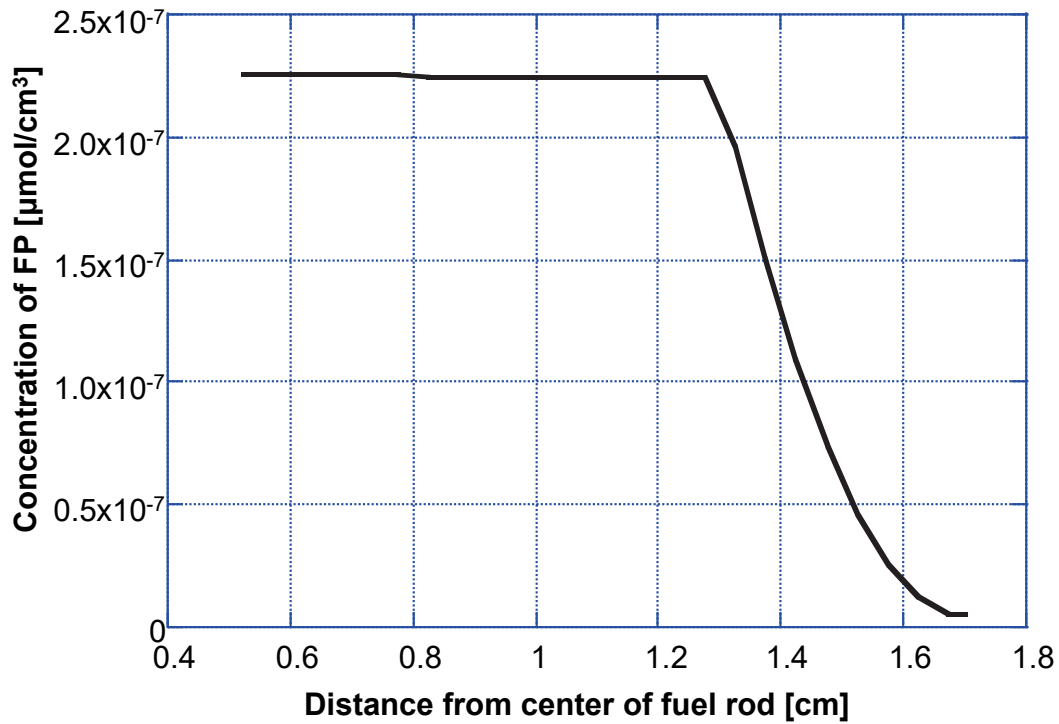


Fig. E-4 Distribution of FP concentration in fuel rod system at previous time stem of $t = 432000 \text{ s}$ (431970 s)

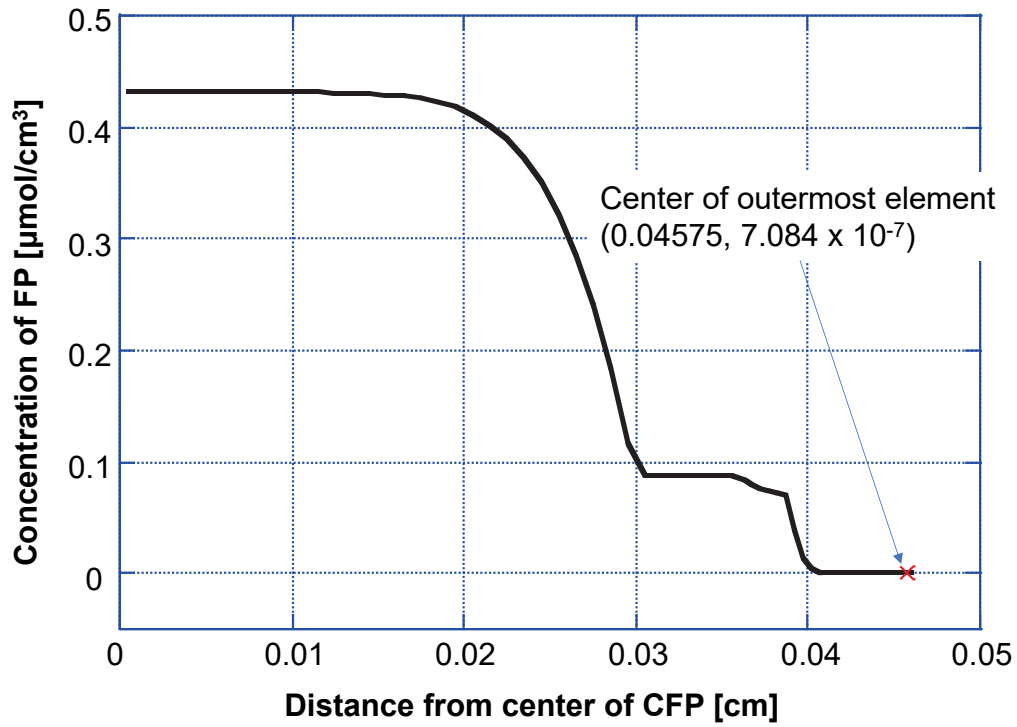


Fig. E-5 Distribution of FP concentration in intact CFP in CFP system at 432000 s = 5 days.

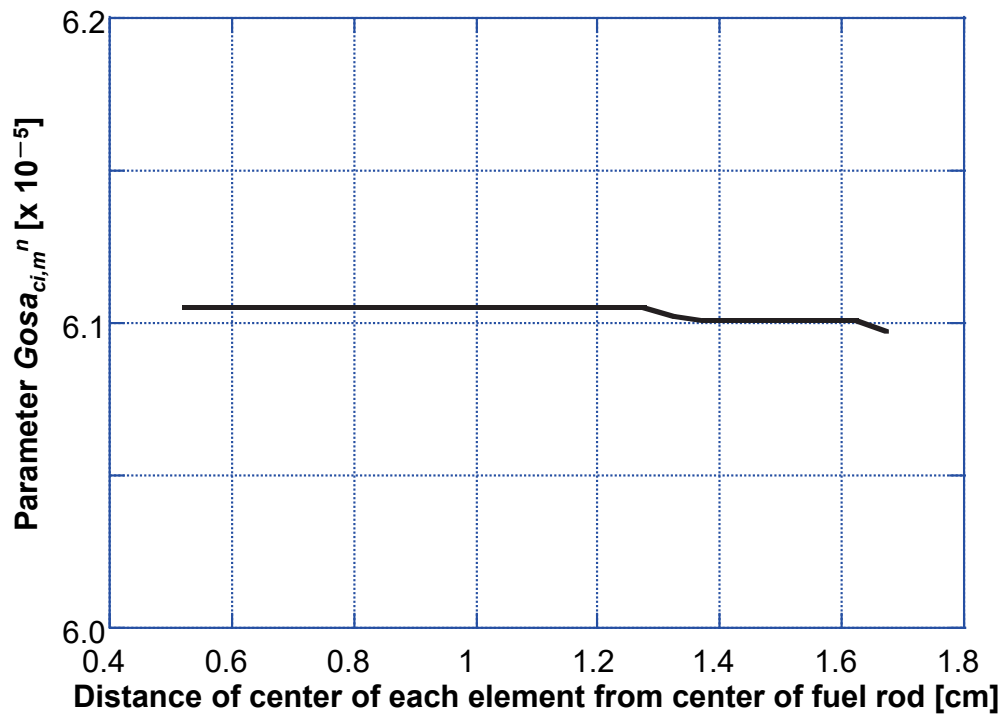


Fig. E-6 Parameter $Gosa_{ci,m}^n$ in eq. (E-12) in each element (time = 432000 s = 5 days.)

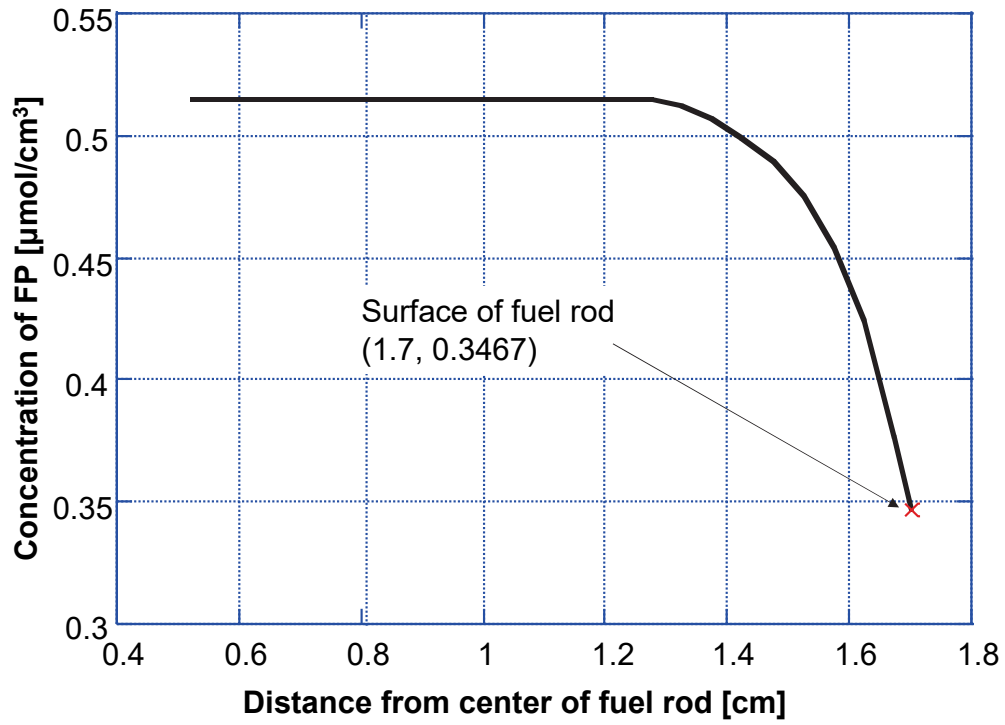


Fig. E-7 Distribution of FP concentration in fuel rod system at $t = 126230370$ s = about 4 years + 1 day.

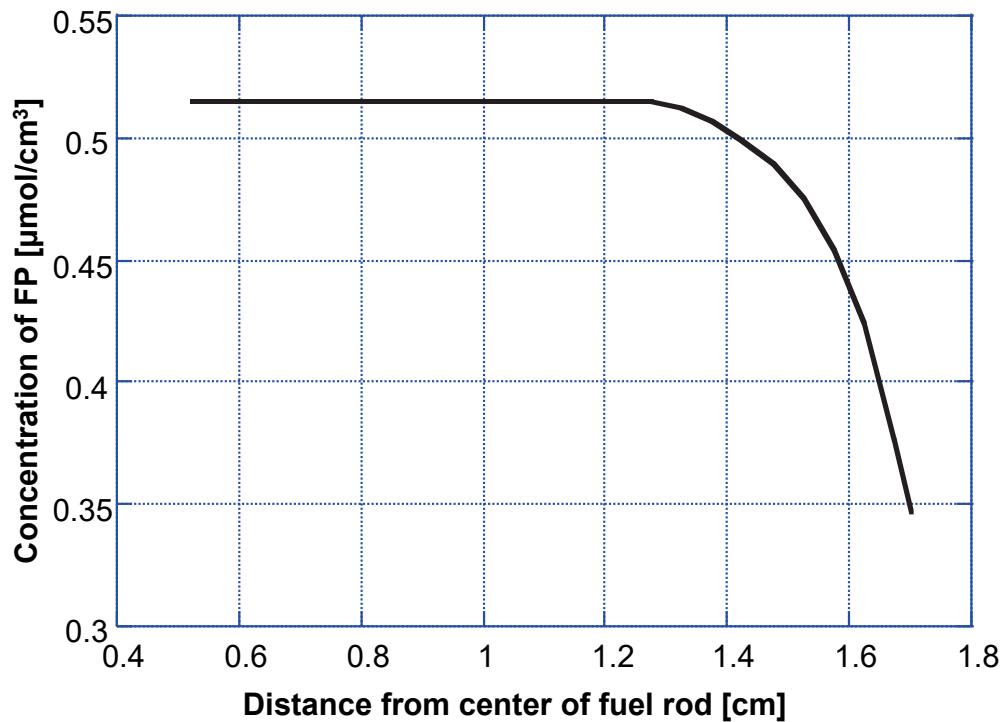


Fig. E-8 Distribution of FP concentration in fuel rod system at previous time stem of $t = 126230370$ s (126230345 s)

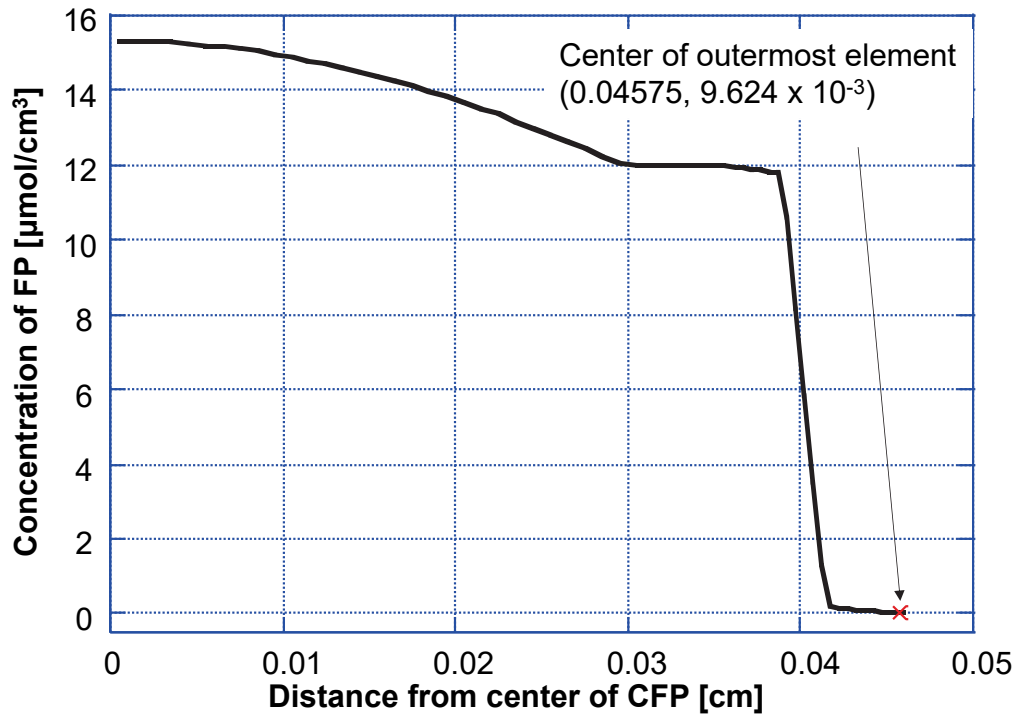


Fig. E-9 Distribution of FP concentration in intact CFP in CFP system at $t = 126230370$ s = about 4 years + 1 day.

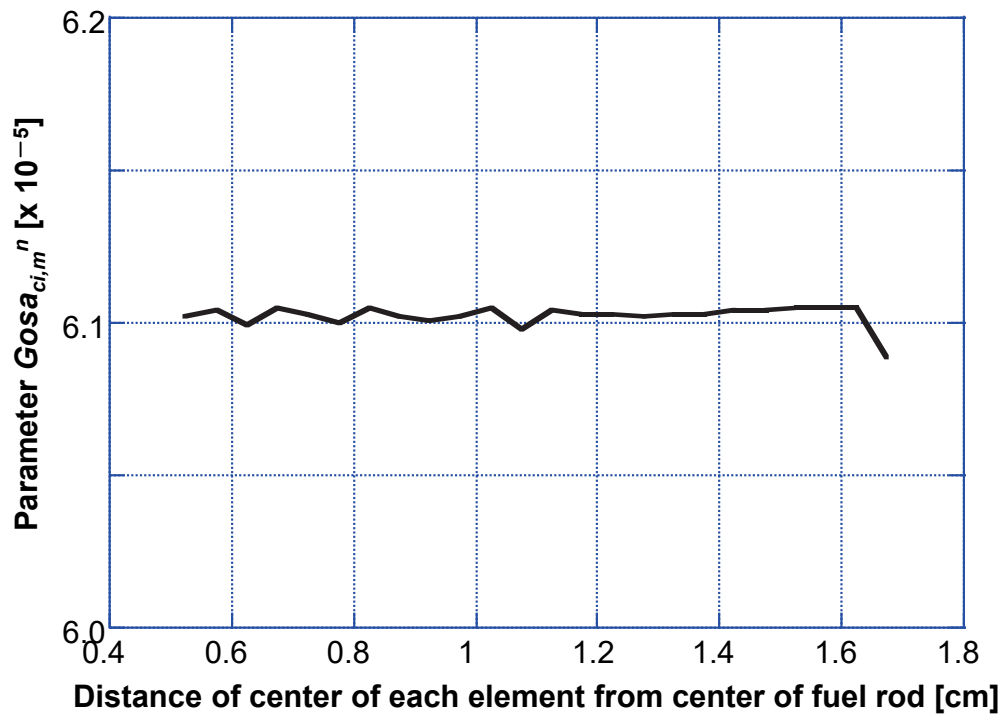


Fig. E-10 Parameter $Gosa_{ci,m}^n$ in eq. (E-12) in each element ($t = 126230370$ s = about 4 years + 1 day.)

付録 F いくつかのパラメータについて FORNAX コードでの計算に用いられていたと思われる数値

F.1 はじめに

FORNAX-A1.0 の前身である FORNAX は 1980 年代に開発されたコードである。FORNAX の基礎式及びパラメータの中には、実験的に得たと思われるものも含まれる。そのような式及びパラメータについては出典を明確にしておくことが非常に重要であるが、FORNAX の詳細を纏めた公開文献は存在しない。FORNAX での計算結果を含む公開文献は存在する F-1~F-3 が、コードの内容については概要の説明しかなされていない。現存する未公開資料においても、具体的な式や値が書いてあったとしてもその根拠・出典については書かれていないことが多い。

本付録では、本編で述べた基礎式のうちいくつか、及び、基礎式で用いられていたパラメータのうちいくつかについて、FORNAX コードを用いた計算で実際に用いられていたらしき値を示す。このような情報は、公開文献として残しておかなければ、今後ますます失われる恐れがあるからである。現時点で出典が判明しているものについては出典も示す。

なお、文献 F-1~F-3)で行われた計算のすべてが、本付録で示すパラメータの値を用いて行われたものとは限らない。各文献での計算に用いられていたと判明しているもの(実際には、各文献で明記されているもの)についてはそのように記述した。

また、物性値に関するものを含む FORNAX-A1.0 の問題点については付録 G に纏めた。

F.2 注意事項

上記のように、ここで述べている値の中には「用いられていた“らしき”値」も含まれる。出典を明記していないものについては確実ではないことには注意を払うべきである。

F.3 用いられていたと思われる数値

(1) 燃料核における Cs の反跳距離: 7.7 [μ m]

(2) 本編中(45)式における Cs についての各パラメータ

- $D_{He-Cs}^0 = 2.70 \times 10^{-4}$ [m^2/s]
- $P_0 = 1.00 \times 10^5$ [Pa]
- $T_0 = 0.0$ [$^{\circ}\text{C}$]
- $m = 1.8$

(3) 本編中(53)(54)(55)式における Cs についての各パラメータ

文献 F-1)で用いられている。その出典は F-4)である。式そのものの出典も F-4)である。

- $A = 24.00$
- $B = -3.573 \times 10^4$
- $D = -1.561$
- $E = 6.123 \times 10^3$
- $F = 2.035$

➤ $G = -1.786 \times 10^{-3}$

(4) 各境界における Cs についての障壁係数

- FORNAX と FORNAX-A1.0 では、障壁係数の定義における分母と分子が逆である。即ち、FORNAX における障壁係数= η に相当する FORNAX-A1.0 における障壁係数= $1/\eta$ である。以下の値は FORNAX-A1.0 で用いられるべき値に換算した(=逆数にした)値である。
 - ✓ 燃料コンパクト/黒鉛スリーブ境界:0.1 (FORNAX-A1.0 で用いられるべき値に換算)
 - ✓ その他の境界: 1
- 文献 F-1)においては「スリーブと燃料コンパクト各々への Cs の平衡蒸気圧を計算するための定数(本編中(53),(54),(55)式中の定数 A,B,D-G に相当)から燃料コンパクト/スリーブ間の障壁係数を計算した」と書いてあるが、詳細は記されていない。

参考文献

- F-1) S. Mitake et al.: “An Analytical Study of Volatile Metallic Fission Product Release from Very High Temperature Gas-cooled Reactor Fuel and Core”, Nucl. Technol. 81, pp.7-12 (1988).
- F-2) K. Sawa et al.: “Verification of Fission Product Release Model from High Temperature Engineering Test Reactor Fuel”, J. Nucl. Sci. Technol. 29, pp.842-850 (1992).
- F-3) 飛田勉 他: “破損被覆燃料粒子からの金属核分裂生成物の放出(ICF-51H キャプセル照射試験)”, JAERI-Research 96-014 (1996), 34p.
- F-4) B. F. Myers and W. E. Bell: “Cesium Transport Data for HTGR Systems”, GA-A 13990 (1979).

付録 G FORNAX-A1.0 の問題点

G.1 はじめに

本付録では、FORNAX-A1.0 の問題点を纏める。(改良のための予算・計算時間・妥当な関数 and/or パラメータを設定できるかどうか、という観点で)現実的な範囲で今後の改良が期待できること、期待できないこと、放置しておいても問題ないものがあるが、特に区別せずに記述する。また、問題点というよりは、FORNAX コードから受け継いだよくわからないパラメータ等についての推測も記述する。

G.2 CFP 体系における FP 輸送モデルの問題点

G.2.1 健全 CFP 及び SiC 破損 CFP 中の燃料核表面の FP 濃度

FORNAX-A1.0 では、健全 CFP 及び SiC 破損 CFP において、燃料核/バッファ層境界の FP 濃度に障壁係数を設定している。これは、貫通破損 CFP(裸の燃料核)における燃料核表面の条件(FP 濃度=0、等。本編中 3.2.3 小節参照)とは全く異なる。即ち、貫通破損 CFP においては燃料核中の FP 濃度分布は被覆層中のそれに対して独立であるが、健全 CFP 及び SiC 破損 CFP の場合は独立ではない。被覆層によって FP がよく閉じ込められていると、燃料核/バッファ層境界におけるバッファ層中の FP 濃度がなかなか下がらないため、燃料核からなかなか FP が放出されない。即ち、先が詰まるため FP が燃料核からなかなか出て行かない。

一方、CFP の内圧破損確率計算コードである FIGHT コード^{G-1,G-2)}及び、FIGHT コードの一部分を抜き出して改良したものである Code-B-2.5.2^{G-3)}においては、希ガス FP の燃料核からの放出量計算は「燃料核表面において FP 濃度=0」という仮定に基づいて行われる。また、金属 FP である Pd による SiC 層の腐食量を評価するコードである PdSiC コード^{G-4,G-5)}も「燃料核表面において Pd 濃度=0」という仮定に基づいている。

FP の元素によってどちらが現実の現象により近いかわかるとは思われるが、少なくとも希ガス FP については、バッファ層中の移動において、熱分解炭素中(固体中)を拡散する量よりも、ポア中を気体として移動する量の方が圧倒的に多いと思われる。従って、健全 CFP 及び SiC 破損 CFP においても、燃料核表面において貫通破損 CFP と同様の境界条件も設けられるように改良することが望ましい。即ち、FP 核種ごとに、健全 CFP 及び SiC 破損 CFP において、燃料核表面における FP 濃度は、以下の少なくとも 2 つのオプションから選べるように改良することが望ましい。

- バッファ層内表面における FP 濃度との比がある決まった値、もしくは、タイムステップごとに何等かの方法(G.3.2 節参照)で与えられる値になる。
- 裸の燃料核の場合と等しい。

この改良は、現実的な予算の範囲で行えると思われる。

なお、後者を選んだ場合、前者を選んだ場合よりも保守的な評価になる。仮想的な条件ではあるが、付録 E における動作確認の条件において、照射開始後 4 年(事故発生時)の時点で健全 CFP の燃料核に保持されている FP の量は、裸の燃料核のその約 9.6 倍である。

G.2.2 破損 CFP の取り扱い

G.2.2.1 「破損した CFP」の取り扱い

FORNAX-A1.0 においては、「SiC 破損 CFP」及び「貫通破損 CFP」は、各々「SiC 層が欠如した CFP」及び「裸の燃料核」として扱われる(本編 3.2.2.2 及び 3.2.2.3 項参照)。この取り扱いは保守性は保証するが、実際の現象をよく模擬しているわけではない。

CFP を球対称系(1次元)とみなす限り、被覆層に亀裂が入った CFP 中の FP の輸送を正しく取り扱うことは不可能であるが、CFP を 3 次元として取り扱い、様々な亀裂を仮定した計算を行うことも計算時間の観点から現実的とは言えない。

一方、破損した被覆層中の FP の拡散係数を別途設定し、CFP を球対称系とみなして FP 輸送計算を行うことは、改良のための予算及び計算時間の観点から現実的である。ただし、「破損した被覆層中の拡散係数」を適切に設定できなければ無意味である。

G.2.2.2 「CFP の照射中または事故中における破損」の取り扱い

本編中 3.3.3.1 項(1)で述べたように、実際の現象においては、例えば健全 CFP が貫通破損した場合、内部に保持されていた FP が徐々に放出され、CFP 内での FP 濃度分布が照射開始時から貫通破損 CFP であったものと等しくなるまでにある程度の時間がかかる。しかし、FORNAX-A1.0 においてはそのような中間状態は考慮しない。即ち、破損モードが A から B に変化した CFP は、その瞬間に CFP 内での FP 分布が、照射開始時から破損モード B であった CFP のそれと等しくなるとされる。この取り扱い方は保守性は保証するが、実際の現象をよく模擬しているわけではない。実際の現象をよりよく模擬するためには、以下の 2 つの方法が考えられる。

(1) (仮定した現象の範囲内で)正しく計算する。

ある 1 個の CFP が、ある時刻で破損モードが A から B に変化する場合は FP 放出速度の履歴を(仮定した現象の範囲内で)正しく計算することは可能である(ただし、FORNAX-A1.0 でこのような計算を行えるわけではない)。このようにして計算した個々の CFP からの FP 放出速度の履歴に基づいて燃料コンパクト中に放出される FP の量を計算すれば、燃料棒からの FP 放出量を(仮定した現象の範囲内で)正しく計算することが可能である。そのようにコードを改良することは現実的な予算の範囲で行えると思われるが、計算時間の観点で現実的かどうかについては検討を要する。

(2) 中間状態を 2 つの状態の線形結合で表す。

ある 1 個の CFP が、ある時刻 t_1 [s] で破損モードが A から B に変化するとする。ある時刻 t_2 [s] ($t_2 \geq t_1$) におけるその CFP 中の、CFP 中心からの距離 r [cm] における核種 i の CFP 体系における濃度を $C_{pi,A \rightarrow B}(t_1, t_2, r)$ [μ mol/cm³] とすると、 $C_{pi,A \rightarrow B}(t_1, t_2, r)$ は、下記(G-1)式で表されると仮定する。

$$C_{pi,A \rightarrow B}(t_1, t_2, r) = SENI_{A \rightarrow B}(t_2 - t_1) \times C_{pi,B}(t_2, r) + \{1 - SENI_{A \rightarrow B}(t_2 - t_1)\} \times C_{pi,B}(t_1, r) \quad (G-1)$$

ただし、

$SENI_{A \rightarrow B}(t)$ [-]:

$dSENI_{A \rightarrow B}(t)/dt \geq 0$ 、 $SENI_{A \rightarrow B}(0)=0$ 、 $SENI_{A \rightarrow B}(\infty)=1$ である関数。

$C_{pi,X}(t, r)$ [mol/cm³]: 照射開始時からずっと破損モードが X である CFP 中の、時刻 t [s]、CFP 中心からの距離 r [cm]における核種 i の CFP 体系における濃度。

燃料コンパクト中に放出される FP の量が上記(G-1)式に基づいて計算されるようにコードを改良することは、予算及び計算時間の観点で現実的である。ただし、適切な $SENI_{A \rightarrow B}(t)$ を設定できなければ無意味である。

G.2.3 その他

- FORNAX-A1.0 においては、CFP 表面における FP 濃度の境界条件として「FP の濃度勾配 = 0」も選べるようにしてしまった(本編中 3.2.3 小節参照)。この場合、CFP からの FP の拡散による放出は起こらない。このような現象は実際にはあり得ない。
- FORNAX-A1.0 においては「反跳領域で核分裂により生成した FP はすべて外の領域に放出される」とされている(本編中 3.2.2 小節参照)。しかし、上記の FIGHT コード G-1,G-2)、Code-B-2.5.2^{G-3)}、及び PdSiC コード G-4,G-5)においてはそうではない。なお、FORNAX-A1.0 における上記の仮定により保守性は保証される。

G.3 燃料棒体系における FP 輸送モデルの問題点

G.3.1 燃料コンパクトの取り扱い

本編中 3.3.1.1 項で述べたように、燃料コンパクトは一様な連続体として扱っているが、実際には CFP と母材の混合物である。

燃料コンパクトを CFP と母材の混合物として取り扱うことは技術的には可能である(FORNAX-A1.0 で可能なわけではない)が、計算時間が膨大になるため、安全性評価のための道具としては現実的ではない。しかし、母材単独の試料を用いて得た母材中の FP の拡散係数のデータが存在するならば、燃料コンパクトを一様な連続体として扱う場合に用いるべき「燃料コンパクト中の」拡散係数を評価するためにはこのような計算が有効と考えられる。

G.3.2 燃料コンパクト/スリーブ間の障壁係数の問題点

燃料コンパクト/スリーブ間の障壁係数(本編中(20)式参照)を入力データとせず、各タイムステップごとに計算(F.3 章(4)参照)するという選択肢も選べるような改良を検討すべきである。

F.3 章(4)に書いてあるように、Cs の場合に「各タイムステップごとに計算した」とされる文献

G-6)において、具体的にどのようにして計算されたか不明であるが、以下のように推測される。

まず、以下の仮定をおく。

- 燃料コンパクト外表面及びスリーブ内表面において FP の表面蒸気圧が等しい。
- 燃料コンパクト外表面及びスリーブ内表面の両方において、FP の平衡蒸気圧は本編中(54)式(Henrian 型)で表される。

すると、燃料コンパクト/スリーブ間の障壁係数は燃料コンパクト外表面温度とスリーブ内面温度の関数となり(証明省略)、各タイムステップごとに求めることが可能である。ここで、文献 G-7)には燃料コンパクト母材の場合の表面蒸気圧計算用のパラメータも示されている。従って、どちらの表面においても Cs の表面蒸気圧が十分に小さい場合(=Henrian 型で表される領域)においては、燃料コンパクト/スリーブ間の障壁係数を理論的に簡単に求めることが可能である。

なお、燃料コンパクト外表面及びスリーブ内表面における表面蒸気圧の両方またはどちらか片方が Freundlich 型(または Henrian 型と Freundlich 型の合計)である場合、障壁係数は FP 濃度をも含む関数となり(証明省略)、収束計算が必要となる。ただし、FORNAX-A1.0 で導入した濃度依存拡散係数におけると同様に、前タイムステップの濃度で代用するならば収束計算は不要になる。

G.3.3 燃料棒表面における境界条件についての問題点

- 燃料棒表面における境界条件の種類は 1 種類しか設定できない。元素ごとに設定できるように改良すべきである。
- 「FORNAX コードに準拠する場合の燃料棒表面における境界条件」を選んだ場合は、
 - ✓ 本編中(45),(53)-(55)式中の各種パラメータのセットは 1 種類しか設定できない。これを元素ごとに設定できるように改良すべきである。
 - ✓ 少なくとも本編中(45)式に相当する式は、式の形式自体も Cs を想定したものである。別の元素についても燃料棒表面において「FORNAX コードに準拠する場合の燃料棒表面における境界条件」と同等の機構での放出を取り扱うならば、少なくとも本編中(45)式に相当する式については検討の必要がある。
- 本編中(41)式における冷却材中の核種 i の濃度 $C_{ci,o}$ は入力データである。
 - ✓ $C_{ci,o} = 0$ とすれば保守的な評価になることが保証される。
 - ✓ 放出された FP の原子炉内での挙動をプログラムに組み込み、 $C_{ci,o}$ もプログラムで計算するように改良すれば、合理的な評価が可能になる。このような改良は技術的には可能と思われる。
 - しかし、改良のための予算・計算時間の観点で現実的かどうかについては検討を要す。
 - このような改良を行うためには、一度の計算で炉心全体を取り扱う必要がある。FORNAX-A1.0 での一度の計算では、1 本の燃料棒の、軸方向に温度一定とみなして差し支えない程度のごく短い領域しか取り扱っていない。

G.3.4 その他

- 本編中(39)式は恐らく、CFP が燃料コンパクトの表面まで均一に分布し得ないことを考慮するための補正と推定されるが、式の形及び、 $BFERMI$ の値の根拠が不明である。
- 本編中(50)式で定義される ξ は、恐らく、He のレイノルズ数 $Re = 5000$ (乱流と層流の境界として設定された値と推測される) にて物質伝達係数 $\alpha_{D,i}$ が不連続にならないように設定されたパラメータと推定される。
- 本編中(46)式中の d_c (冷却材流路の等価直径) はプログラム内で計算せずに、別途入力データとして与えることになっている。これは保守的な評価のためと推定されるがよくわからない。

G.4 拡散係数の計算方法についての問題点

G.4.1 拡散係数の FP 濃度依存性の取り扱いについての問題点

- (1) 拡散係数の FP 濃度への依存性が FP 核種に依らず同じである。

例えば、FP 核種 i の拡散係数 D_i [cm^2/s] が核種 i の濃度 C_i [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$] に比例するならば、FP 核種 j ($i \neq j$) の拡散係数 D_j [cm^2/s] もまた C_i [$\mu \text{ mol}/\text{cm}^3$] に比例することになる。

このような依存性に汎用性はない。しかし、拡散係数を計算するサブルーチン中の変数に「FP 濃度」を組み込んだので、プログラムに軽微な変更を施せば様々な拡散係数の様々な濃度依存性を扱うことができるようになった。

- (2) 本編中(58)式中の $A_{i,k,r}$ 及び $Q_{i,k,r}$ は、正確に言うと「現タイムステップにおける」FP 濃度ではなく「前タイムステップにおける」FP 濃度に依存することとした。

「現タイムステップにおける」FP 濃度に依存した場合、拡散係数が未知数になるため、プログラムに軽微な変更を施す程度のことで様々な依存性を扱うことができないからである。

- (3) 更に、CFP 体系の場合には、本編中(58)式中の $A_{i,k,r}$ 及び $Q_{i,k,r}$ は「当該破損モードの」CFP 中の FP 濃度ではなく「健全」CFP 中の FP 濃度に依存することになっている。

➤ (前タイムステップにおける)「当該破損モードの」CFP 中の FP 濃度に依存することとするよう、コードを改良することは現実的である。

➤ ただし、現状でもソースコードに軽微な変更を施すことにより拡散係数が「前タイムステップにおけるある破損モード(固定)の CFP 中の FP 濃度」に依存するように改良することは可能である。

✓ これにより、文献 G-8) 中第 4 章を参考にして、拡散係数が「前タイムステップにおける当該破損モードの CFP 中の FP 濃度」に依存する場合の計算も可能になると考えられる。

✓ ただし、

- 文献 G-8) 中第 4 章と同様に、黒鉛スリーブ外表面における境界条件についての制限が生じることになると考えられる。
- 照射中または事故時の CFP の破損モードの変化(追加破損)の取り扱いについては別途検討が必要である。

G.4.2 CFP 中の温度分布の取り扱いについての問題点

FORNAX-A1.0 では CFP 温度の燃料棒中の径方向依存性は扱えることとしたが、各 CFP 中の温度は、FORNAX-A と同様に「一様」のままとした。CFP 中の温度分布を考慮した FP 輸送の計算を行うようにコードを改良することは技術的には可能である。ただし、計算時間の観点で現実的かどうかについては検討を要す。

G.5 物性値についての問題点

G.5.1 本質的な問題

どんな詳細なモデルを構築し、時間的・空間的メッシュを細かく切ったとしても、良い物性値を用いなければ意味はない。特に、良い拡散係数を用いることは大変重要である。しかし、CFP の被覆層中の拡散係数を得ることは大変難しい。

G.5.2 物性値の根拠・出典についての問題

付録 F で述べたように、FORNAX-A1.0 の前身である FORNAX^{G-1,G-2)}において使用されていた物性値については根拠・出典が不明なものが多い。従って、

- FORNAX コードからそのまま FORNAX-A1.0 に引き継いだ式 and/or パラメータのうち、根拠が不明なものについては、根拠がはっきりしているものになるべく置き換えるべきである。
- FORNAX コードからそのまま FORNAX-A1.0 に引き継いだ式 and/or パラメータのうち、根拠が判明しているものについても、新しい知見に基づくものに置き換えることを検討するべきである。

参考文献

- G-1) K. Sawa et al.: “Development of a Coated Fuel Particle Failure Model under High Burnup Irradiation”, J. Nucl. Sci. Technol. 33, pp.712-720 (1996).
- G-2) 沢和弘 他: “高温ガス炉運転中の被覆燃料粒子挙動及び核分裂生成物ガス挙動解析コード”, JAEI-Data/Code 99-034 (1999), 115p.
- G-3) 相原純 他: “被覆燃料粒子の応力計算のための Code-B-2.5.2”, JAEA-Data/Code 2019-018 (2020), 22p.
- G-4) 片西昌司 他: “高温ガス炉ガスタービン発電システム(GTHTR300)用高燃焼度燃料の成立性評価, (I)”, 日本原子力学会論文誌 1, pp.373-383 (2002).
- G-5) 相原純 他: “小型高温ガス炉システム HTR50S の第 I 期第 1 段階の炉心の通常運転時における被覆燃料粒子の健全性の予備的評価”, JAEA-Technology 2014-009 (2014), 29p.
- G-6) S. Mitake et al.: “An Analytical Study of Volatile Metallic Fission Product Release from Very High Temperature Gas-cooled Reactor Fuel and Core”, Nucl. Technol. 81, pp.7-12 (1988).
- G-7) B. F. Myers and W. E. Bell: “Cesium Transport Data for HTGR Systems”, GA-A 13990

(1979).

G-8) 相原純 他: “FURNAX-A の応用”, JAEA-Technology 2015-040 (2016), 32p.

付録 H 本報告の目次(完全版)

本編	1
1. 序論	1
2. FORNAX-A1.0 の概要及び FORNAX-A からの変更点	2
2.1 FORNAX-A1.0 の概要	2
2.1.1 主な入力項目	2
2.1.2 計算の流れの概略	2
2.1.3 「事故」の取り扱い	2
2.1.4 CFP 体系の概要	2
2.1.5 燃料棒体系の概要	3
2.1.6 特記事項	3
2.2 FORNAX-A からの変更点	4
3. FORNAX-A1.0 の基礎式	6
3.1 はじめに	6
3.1.1 FORNAX-A1.0 における計算全体の流れ	6
3.1.2 本章の構成	6
3.2 CFP 体系の基礎式	6
3.2.1 はじめに	6
3.2.1.1 CFP 体系での FP 輸送現象モデルの概要	6
3.2.1.2 本節の構成	8
3.2.2 FP 輸送の基礎式	8
3.2.2.1 健全 CFP の場合	8
3.2.2.2 SiC 破損 CFP の場合	10
3.2.2.3 貫通破損 CFP (裸の燃料核) の場合	11
3.2.3 CFP 表面における境界条件	11
3.2.4 FP 放出速度及び FP 保持量	12
3.3 燃料棒体系の基礎式	12
3.3.1 はじめに	12
3.3.1.1 燃料棒体系での FP 輸送現象モデルの概要	12
3.3.1.2 本節の構成	13
3.3.2 FP 輸送の基礎式及び燃料棒表面における境界条件	13
3.3.3 核種 i の燃料コンパクトへの放出速度 (G_i) の計算	15
3.3.3.1 燃料コンパクト単位体積当たりの FP 放出速度	15
3.3.3.2 G_i の計算	20
3.3.4 FORNAX コードに準拠する場合の燃料棒表面における境界条件	20
3.3.4.1 全体の流れ	20

3.3.4.2 黒鉛スリーブ/冷却材境界における物質伝達係数 $\alpha_{D,i}$	21
3.3.4.3 黒鉛スリーブ側の核種 i の表面蒸気圧 $P_{i,in}$	23
3.3.5 FP 放出量の基礎式	24
3.4 拡散係数の計算	24
4. まとめ	28
謝辞	28
参考文献	28
付録 A 数値解析手法	32
A.1 はじめに	32
A.2 FP 輸送の方程式の離散化	32
A.2.1 空間の離散化	32
A.2.2 時間の離散化	33
A.2.2.1 時間進行の扱い	33
A.2.2.2 時間刻みの設定方法	33
A.3 離散化方程式の解法	34
A.3.1 概要	34
A.3.2 収束判定	36
A.4 反復計算による黒鉛スリーブ外面すぐ内側における FP 濃度及び障壁係数の求め方	36
参考文献	39
付録 B 陽解法及びクランク・ニコルソン法による時間の離散化	41
付録 C FORNAX-A1.0 における時間刻み幅の自動設定(オプション)	42
付録 D SOR 法	45
付録 E 動作確認	47
E.1 はじめに	47
E.2 動作確認の方法	47
E.2.1 全体の流れ	47
E.2.2 燃料棒表面における境界条件が FORNAX コードに準拠する場合の あるタイムステップにおける反復計算の検証 及びスリーブ外面における FP の拡散流束の計算	47
E.2.2.1 基礎式	47

E.2.2.2 あるタイムステップにおける反復計算の検証	
及びスリーブ外面における FP の拡散流束の計算	49
E.2.3 あるタイムステップにおける燃料棒体系の	
FP 濃度分布が基礎式を満たしていることの確認	49
E.2.3.1 全体の流れ	49
E.2.3.2 (E-9)式右边各項の計算方法	51
E.2.3.2.1 流出の拡散流束 $J_{ci,w,mc}^n$ の計算方法	51
E.2.3.2.1.1 着目した燃料棒体系の要素 m_c が	
スリーブ最外面ではない場合	51
E.2.3.2.1.2 着目した燃料棒体系の要素 m_c が	
スリーブ最外面である場合	51
E.2.3.2.2 流入の拡散流束 $J_{ci,w,mc}^n$ の計算方法	51
E.2.3.2.2.1 着目した燃料棒体系の要素 m_c が	
コンパクト最内面ではない場合	51
E.2.3.2.2.2 着目した燃料棒体系の要素 m_c	
がコンパクト最内面である場合	52
E.2.3.2.3 燃料棒体系における単位体積当たり FP 生成速度の計算法	52
E.2.3.2.3.1 全体の流れ	52
E.2.3.2.3.2 一つの CFP からの FP 放出速度の計算方法	53
E.2.3.2.3.2.1 全体の流れ	53
E.2.3.2.3.2.2 CFP 表面における核種 i の拡散流束の求め方	53
E.2.3.2.3.2.2.1 CFP 表面において FP 濃度=0 である場合	54
E.2.3.2.3.2.2.2 外挿距離を設定する場合	54
E.2.3.2.3.2.2.3 CFP 表面において FP 濃度勾配=0 である場合	55
E.3 動作確認の条件	55
E.4 結果	55
E.4.1 事故前(通常運転時)	55
E.4.2 事故時	56
参考文献	56
付録 F いくつかのパラメータについて FORNAX コードでの計算に	
用いられていたと思われる数値	65
F.1 はじめに	65
F.2 注意事項	65
F.3 用いられていたと思われる数値	65
参考文献	66

付録 G FORNAX-A1.0 の問題点	67
G.1 はじめに	67
G.2 CFP 体系における FP 輸送モデルの問題点	67
G.2.1 健全 CFP 及び SiC 破損 CFP 中の燃料核表面の FP 濃度	67
G.2.2 破損 CFP の取り扱い	68
G.2.2.1 「破損した CFP」の取り扱い	68
G.2.2.2 「CFP の照射中または事故中における破損」の取り扱い	68
G.2.3 その他	69
G.3 燃料棒体系における FP 輸送モデルの問題点	69
G.3.1 燃料コンパクトの取り扱い	69
G.3.2 コンパクト/スリーブ間の障壁係数の問題点	69
G.3.3 燃料棒表面における境界条件についての問題点	70
G.3.4 その他	71
G.4 拡散係数の計算方法についての問題点	71
G.4.1 拡散係数の FP 濃度依存性の取り扱いについての問題点	71
G.4.2 CFP 中の温度分布の取り扱いについての問題点	72
G.5 物性値についての問題点	72
G.5.1 本質的な問題	72
G.5.2 物性値の根拠・出典についての問題	72
参考文献	72
付録 H 本報告の目次(完全版)	74

This is a blank page.

