

水素挙動統合解析システムの開発

Development of Hydrogen Behavior Integrated Analysis System

寺田 敦彦 トエ トエ アウン 日野 竜太郎 原井 康考
佐々木 岳 新家谷 英之 山下 俊幸 米田 次郎
岡林 一木 坂本 裕之 高橋 永 岩本 智也
佐藤 郁也 松本 昌昭 小澤 賢翁 菅田 学

Atsuhiko TERADA, Thwe Thwe Aung, Ryutaro HINO, Yasutaka HARAI
Gaku SASAKI, Hideshi SHINGEYA, Toshiyuki YAMASHITA, Jiro YONEDA
Kazuki OKABAYASHI, Hiroyuki SAKAMOTO, Hisashi TAKAHASHI, Tomoya IWAMOTO
Fumiya SATO, Masaaki MATSUMOTO, Katsuhito KOZAWA and Manabu HISHIDA

福島廃炉安全工学研究所
廃炉環境国際共同研究センター

Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science
Fukushima Research and Engineering Institute

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。
本レポートの転載等の著作権利用は許可が必要です。本レポートの入手並びに成果の利用(データを含む)
は、下記まで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ウェブサイト (<https://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究開発推進部 科学技術情報課
〒 319-1112 茨城県那珂郡東海村大字村松 4 番地 49
E-mail: ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.
Reuse and reproduction of this report (including data) is required permission.
Availability and use of the results of this report, please contact
Library, Institutional Repository and INIS Section,
Research and Development Promotion Department,
Japan Atomic Energy Agency.
4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1112, Japan
E-mail: ird-support@jaea.go.jp

水素挙動統合解析システムの開発

日本原子力研究開発機構
福島廃炉安全工学研究所 廃炉環境国際共同研究センター

寺田 敦彦、トエ トエ アウン、日野 竜太郎^{*1}
原井 康考^{*2}、佐々木 岳^{*2}、新家谷 英之^{*2}、山下 俊幸^{*2}、米田 次郎^{*2}
岡林 一木^{*3}、坂本 裕之^{*4}、高橋 永^{*4}、岩本 智也^{*4}
佐藤 郁也^{*5}、松本 昌昭^{*5}、小澤 賢翁^{*6}、菱田 学^{*6}

(2025年 8月 28日受理)

福島第一原子力発電所事故の経験や、事故から得られた教訓を踏まえ、原子炉のみならず廃止措置、廃棄物管理における水素安全評価・対策に適切に対応するための基盤技術の高度化を図ることを目的として、水素の発生から拡散、燃焼・爆発に至る挙動を予測する解析システムの開発を行った。本システムでは、汎用コード (FLUENT、AUTODYN) を活用し、そこに新規にモジュールやプリ／ポストプロセッサを組み込むことで、一般的な実用に堪える解析システムを整備するとともに、より高い汎用性と低コストでの導入が可能なオープンソースコード (OpenFOAM) を活用したシステムの開発を並行して進め、原子力施設の水素防災計画に利用できる形での基盤技術の提供を目指している。これまで、PWR 原子力発電施設を対象に、実用的な観点から考慮すべき現象（火炎伝播加速現象の評価技術、格納容器規模の現象への適用性）に対処するためのシステムの拡充を行った。

本報告書は、水素挙動統合解析システムの概要、取り扱い方法及び実機解析事例についてまとめたものである。

本報告書は、経済産業省資源エネルギー庁からの受託事業として、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が代表で実施した「原子力の安全性向上に資する技術開発事業（水素安全対策高度化）」の成果である。

原子力科学研究所：〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2 番地 4

*1 2022年9月にて退職

*2 三菱重工業

*3 MHI ソリューションテクノロジーズ

*4 MHI NS エンジニアリング

*5 三菱総合研究所

*6 菱友システムズ

Development of Hydrogen Behavior Integrated Analysis System

Atsuhiko TERADA, Thwe Thwe Aung, Ryutaro HINO^{*1}

Yasutaka HARAI^{*2}, Gaku SASAKI^{*2}, Hideshi SHINGEYA^{*2}, Toshiyuki YAMASHITA^{*2}

Jiro YONEDA^{*2}, Kazuki OKABAYASHI^{*3}, Hiroyuki SAKAMOTO^{*4}

Hisashi TAKAHASHI^{*4}, Tomoya IWAMOTO^{*4}

Fumiya SATO^{*5}, Masaaki MATSUMOTO^{*5}, Katsuhito KOZAWA^{*6} and Manabu HISHIDA^{*6}

Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science

Fukushima Research and Engineering Institute

Japan Atomic Energy Agency

Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 28, 2025)

Based on the lessons learned from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station accident, we have highly paid attention to the advancement of the fundamental technologies which are indispensable in timely response to hydrogen safety measures and assessments especially in both nuclear reactors and decommissioning. Focusing on this attention, we developed an analysis system that predicts the behavior of hydrogen from generation to diffusion, combustion and explosion. The system utilizes the commercial computational fluid dynamics software (FLUENT, AUTODYN), and incorporates new modules and pre/post-processors in order to withstand the general practical use. We also developed a system by utilizing open-source code (OpenFOAM) that can be used in hydrogen disaster prevention plans for nuclear facilities. So far, we have expanded the system to deal with the phenomena that should be considered from the practical point of view for PWR (Pressurized Water Reactor) in nuclear power plants. This report summarizes the overview of the integrated analysis system for hydrogen behavior, the handling method, and real scale analysis examples.

Keywords: Hydrogen Safety, Mixing/Dispersion Calculation, Combustion/Explosion Calculation, Impact Calculation, Coupled Calculation

The report was performed in the Advanced Nuclear Hydrogen Safety Research Program funded by the Agency for Natural Resources and Energy of the Ministry of Economy, Trade and Industry.

*1 Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science until September 30, 2022

*2 Mitsubishi Heavy Industries, Ltd.

*3 MHI Solution Technologies Co.,LTD.

*4 MHI NS Engineering Co., Ltd.

*5 Mitsubishi Research Institute, Inc.

*6 Ryoyu Systems Co., Ltd.

目次

1. 緒言	1
2. 水素挙動統合解析システムの概要	2
3. 各コードの説明と使用方法	5
3.1 FLUENT による移流拡散解析	5
3.1.1 モデル及び解法	5
3.1.2 使用方法	9
3.2 FLUENT による燃焼解析	15
3.2.1 モデル及び解法	15
3.2.2 使用方法	22
3.3 OpenFOAM による移流拡散解析	32
3.3.1 モデル及び解法	32
3.3.2 使用方法	37
3.4 OpenFOAM による燃焼解析	40
3.4.1 モデル及び解法	40
3.4.2 使用方法	52
3.5 拡散解析から燃焼解析の引き継ぎ (FLUENT→OpenFOAM)	53
3.5.1 インターフェースツールの仕様	53
3.5.2 使用方法	53
3.6 燃焼解析から構造強度解析の引き継ぎ (OpenFOAM→AUTODYN)	58
3.6.1 インターフェースツールの仕様	58
3.6.2 インターフェース使用方法及び手順	59
4. 計算事例	75
4.1 CFD 解析の精度検証のための試験照合解析事例	75
4.1.1 FLUENT による拡散試験照合解析事例	77
4.1.2 OpenFOAM による拡散試験照合解析事例	91
4.1.3 FLUENT による燃焼試験照合解析事例	100
4.1.4 OpenFOAM による燃焼試験照合解析事例	108
4.2 実機 PWR 格納容器内水素挙動の計算事例	118
4.2.1 PWR 格納容器内の移流拡散解析	118
4.2.2 PWR 格納容器内の燃焼解析	129
4.2.3 PWR 格納容器構造解析	137
5. まとめ	147
謝辞	147
参考文献	148

Contents

1. Introduction	1
2. Overview of hydrogen behavior integrated analysis system.....	2
3. Description and usage of each code: User's Manual	5
3.1 Dispersion simulation by FLUENT	5
3.1.1 Model and solution	5
3.1.2 How to use code	9
3.2 Combustion analysis by FLUENT	15
3.2.1 Model and solution	15
3.2.2 How to use code	22
3.3 Dispersion analysis by OpenFOAM	32
3.3.1 Model and solution	32
3.3.2 How to use code	37
3.4 Combustion analysis by OpenFOAM.....	40
3.4.1 Model and solution	40
3.4.2 How to use code	52
3.5 Data transfer from diffusion analysis to combustion analysis (FLUENT→OpenFOAM).....	53
3.5.1 Interface tool specifications	53
3.5.2 How to use tool	53
3.6 Data transfer from combustion analysis to structural strength analysis (OpenFOAM→AUTODYN).....	58
3.6.1 Interface tool specifications	58
3.6.2 How to use interface tool and procedure	59
4. Calculation example	75
4.1 Example of test collation analysis for accuracy verification of CFD analysis	75
4.1.1 Example of Diffusion Test Verification Analysis by FLUENT	77
4.1.2 Example of Diffusion Test Verification Analysis by OpenFOAM	91
4.1.3 Example of Combustion Test Verification Analysis by FLUENT	100
4.1.4 Example of Combustion Test Verification Analysis by OpenFOAM	108
4.2 Example of hydrogen behavior in PWR containment vessel during severe accident	118
4.2.1 Dispersion analysis in PWR containment vessel.....	118
4.2.2 Combustion analysis in PWR containment vessel	129
4.2.3 PWR containment vessel structural analysis	137
5. Concluding Remarks.....	147
Acknowledgements	147
References	148

表リスト

表 3.2-1	AMR 適用条件	21
表 3.4.1-1	燃焼解析用 OpenFOAM の主な改修の概要	43
表 3.4.1-2	層流燃焼速度 Look-up テーブルパラメータ	48
表 3.4.1-3	自着火遅れ Look-up テーブルパラメータ	49
表 3.4.1-4	燃焼ガス組成 Look-up テーブルパラメータ	50
表 3.6.2-1	入力ファイルリスト	59
表 3.6.2-2	キーワードの種類	64
表 3.6.2-3	各ユーザ変数の内容	71
表 4.1-1	燃焼試験の照合解析マトリクス	75
表 4.1-2	水素の拡散・混合に関する試験の全体マトリクス	76
表 4.1.1-1	解析条件 (TOSQAN 試験 ISP-47 FLUENT 照合解析)	79
表 4.1.1-2	解析条件 (流入混合気の流入質量及び温度)	80
表 4.1.1-3	解析条件 (NUPEC 拡散試験 M-7-1 FLUENT 照合解析)	85
表 4.1.1-4	解析条件 (NUPEC 拡散試験 M-4-3 FLUENT 照合解析)	86
表 4.1.1-5	解析条件 (NUPEC 拡散試験 M-8-1 FLUENT 照合解析)	87
表 4.1.2-1	解析条件 (OpenFOAM による TOSQAN 試験 (ISP-47) 照合解析)	92
表 4.1.2-2	解析条件 (OpenFOAM による NUPEC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析)	97
表 4.1.3-1	解析条件 (FLUENT による RUT 試験 (sth8) 照合解析)	102
表 4.1.3-2	FLUENT による RUT 照合解析結果 (DDT 発生有無の比較)	103
表 4.1.3-3	解析条件 (FLUENT による NTS 試験 (P-15) 照合解析)	106
表 4.1.4-1	解析条件 (OpenFOAM による RUT 試験 (sth8) 照合解析)	109
表 4.1.4-2	解析条件 (OpenFOAM による RUT 試験 (RUT22) 照合解析)	110
表 4.1.4-3	OpenFOAM による RUT 照合解析結果 (DDT 発生有無の比較)	110
表 4.1.4-4	解析条件 (OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験 (B-4-5, B-4-6, B-7-1, B-7-2) 照合解析)	115
表 4.2.1-1	FLUENT による実機移流拡散解析の設定値例 (「大破断 LOCA 時に低圧注入機能、高圧注入機能及び格納容器スプレイ注入機能が喪失する事故」)	122
表 4.2.1-2	OpenFOAM による実機移流拡散解析の設定値例 (「加圧器気相部破断後に炉心損傷に至り、格納容器スプレイ注入機能が喪失する事故」)	125
表 4.2.2-1	CV 内燃焼解析条件 (FLUENT)	131
表 4.2.2-2	CV 内燃焼解析条件 (OpenFOAM)	134
表 4.2.3-1	AUTODYN による鋼製 CV 構造解析の設定値例	138
表 4.2.3-2	AUTODYN による PCCV 構造解析の設定値例	143

図リスト

図 2.1	水素挙動統合解析システムの基本構成	4
図 3.1.2-1	User-Defined Function Hooks の設定画面	10
図 3.1.2-2	変数初期化の UDF 設定	10
図 3.1.2-3	凝縮計算の UDF 設定	11
図 3.1.2-4	除去される質量の UDF 設定	11
図 3.1.2-5	除去される H ₂ O 質量の UDF 設定	11
図 3.1.2-6	凝縮熱の UDF 設定	12
図 3.1.2-7	粒子計算設定画面	12
図 3.1.2-8	スプレイ水の粒子設定	13
図 3.1.2-9	壁面の伝熱設定	14
図 3.1.2-10	Profile の読み込み方	14
図 3.2.2-1	UDM の設定	22
図 3.2.2-2	UDM 一覧	23
図 3.2.2-3	UDS の設定	23
図 3.2.2-4	Function Hooks 設定	24
図 3.2.2-5	Materials 設定	25
図 3.2.2-6	Progress Variable sources 設定	25
図 3.2.2-7	User Scalar 0 sources 設定	26
図 3.2.2-8	ジャーナル入力例（黄色の部分は(ii)の設定）	26
図 3.2.2-9	Execute on Demand	27
図 3.2.2-10	Execute on Demand 実行事例	27
図 3.2.2-11	UDS の設定（ ξ 輸送方程式組み込み時）	28
図 3.2.2-12	User Scalar 1 sources 設定	29
図 3.2.2-13	Flame Speed Model の変更	29
図 3.2.2-14	Gradient Adaption パネル設定	30
図 3.2.2-15	Mesh Adaption Controls パネル設定	31
図 3.3.1-1	reactingParcelFilmFoam における液膜モデルの考え方	36
図 3.4.1-1	OpenFOAM における AMR の手順	41
図 3.4.1-2	ddtFoam への AMR 適用の課題	42
図 3.4.1-3	HLLC(Riemann)と Central upwind の比較	43
図 3.4.1-4	ddtFoam と改修した ddtrhoCDyMFoam を用いた shock tube 計算結果の比較	44
図 3.4.1-5	水蒸気輸送方程式の組込み	45
図 3.4.1-6	水蒸気熱物性の組込み	46
図 3.4.1-7	層流燃焼速度：実験、解析結果	47
図 3.4.1-8	層流燃焼速度解析結果	48

図 3.4.1-9	自着火遅れの解析例	49
図 3.4.1-10	解析スキームの変更	51
図 3.5.2-1	FLUENT の混相流計算における Phase ごとの ID の見方	55
図 3.5.2-2	FLUENT における化学種の定義順序	55
図 3.5.2-3	圧力の設定例	57
図 3.6.1-1	インターフェース概要	58
図 3.6.2-1	OpenFOAM の圧力データファイルの例 (Excel で表示) (ファイル名の例 : t=40.csv)	61
図 3.6.2-2	時刻一圧力情報ファイル (Excel で表示) (ファイル名の例 : 「OpenFOAM_file_list.csv」)	62
図 3.6.2-3	インターフェース条件ファイル (ファイル名の例 : 「pwr_rv_opf_1a_cond.txt」)	63
図 3.6.2-4	サブドメインの概要図	65
図 3.6.2-5	最大圧 (IPMODE=1) 及び簡易平均 (IPMODE=2) の負荷圧力算出方法	66
図 3.6.2-6	シェル中心最短 (IPMODE=3) の負荷圧力算出方法	66
図 3.6.2-7	負荷圧力の簡易平均の方法	67
図 3.6.2-8	圧力負荷方向の設定	68
図 3.6.2-9	境界条件の設定	69
図 3.6.2-10	ユーザ変数の設定 (1)	70
図 3.6.2-11	ユーザ変数の設定 (2)	72
図 3.6.2-12	ユーザ変数の設定 (3)	73
図 3.6.2-13	ログファイルの例	74
図 4.1.1-1	TOSQAN 試験体系	78
図 4.1.1-2	メッシュ図	78
図 4.1.1-3	混合気の流入質量流量及び温度	80
図 4.1.1-4	容器内圧力の経時変化	81
図 4.1.1-5	NUPEC 拡散試験体系	84
図 4.1.1-6	メッシュ図	84
図 4.1.1-7	M-7-1 照合解析結果	88
図 4.1.1-8	M-4-3 照合解析結果	89
図 4.1.1-9	M-8-1 照合解析結果	90
図 4.1.2-1	OpenFOAM による TOSQAN 試験 メッシュ図	92
図 4.1.2-2	OpenFOAM による TOSQAN 試験 (ISP-47) 照合解析条件	93
図 4.1.2-3	OpenFOAM による TOSQAN 試験 (ISP-47) 照合解析結果 (容器内圧力)	95
図 4.1.2-4	OpenFOAM による NUPEC 拡散試験照合解析 メッシュ図	96
図 4.1.2-5	OpenFOAM による NUPEC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析結果 (圧力)	98

図 4.1.2-6	OpenFOAM による NUPEC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析結果 (ヘリウム濃度分布)	98
図 4.1.2-7	OpenFOAM による NUPEC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析結果 (高さ方向のヘリウム濃度分布 (1800s))	99
図 4.1.3-1	RUT 試験体系	101
図 4.1.3-2	FLUENT による RUT 試験照合解析ケース (sth8)	101
図 4.1.3-3	FLUENT による RUT 試験照合解析 メッシュ図	102
図 4.1.3-4	FLUENT による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果 (火炎位置)	103
図 4.1.3-5	FLUENT による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果 (火炎伝播速度)	104
図 4.1.3-6	NTS 試験体系	105
図 4.1.3-7	FLUENT による NTS 試験照合解析 メッシュ図	106
図 4.1.3-8	FLUENT による NTS 試験 (P-15) 照合解析結果 (容器内圧力)	107
図 4.1.3-9	FLUENT による NTS 試験 (P-15) 照合解析 (鉛直方向火炎伝播速度)	107
図 4.1.4-1	OpenFOAM による RUT 試験照合解析 メッシュ図	109
図 4.1.4-2	OpenFOAM による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果 (火炎位置)	111
図 4.1.4-3	OpenFOAM による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果 (火炎伝播速度)	111
図 4.1.4-4	OpenFOAM による RUT 試験 (RUT22) 照合解析結果 (火炎位置)	112
図 4.1.4-5	OpenFOAM による RUT 試験 (RUT22) 照合解析結果 (火炎伝播速度)	112
図 4.1.4-6	NUPEC 大規模燃焼試験体系	114
図 4.1.4-7	OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験照合解析 メッシュ図	114
図 4.1.4-8	OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験照合解析結果 (火炎伝播速度 (最大値))	116
図 4.1.4-9	OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験 (B-4-5) 照合解析結果 (圧力 (一般部下部))	116
図 4.1.4-10	OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験 (B-4-6) 照合解析結果 (圧力 (一般部下部))	117
図 4.2.1-1	簡易解析結果	119
図 4.2.1-2	解析領域、解析メッシュ図及び放出位置	123
図 4.2.1-3	拡散解析結果 (コンタ断面：1 次系ループ部破断口)	124
図 4.2.1-4	実機解析メッシュの全体図と断面図	126
図 4.2.1-5	拡散解析結果 (水素濃度分布)	127
図 4.2.1-6	拡散解析結果 (速度ベクトル図)	128
図 4.2.2-1	実機解析メッシュの全体図と断面図	132
図 4.2.2-2	FLUENT 拡散解析結果の水素濃度分布と FLUENT 燃焼解析の初期 水素濃度分布の比較	132

図 4.2.2-3	火炎面の進展状況 (AEI : 拡散計算約 456 秒時点から引き継ぎ) …	133
図 4.2.2-4	実機解析メッシュの全体図と断面図……………	135
図 4.2.2-5	解析結果: 火炎面時間変化……………	136
図 4.2.3-1	AUTODYN による鋼製構造解析の解析モデル図 ……	139
図 4.2.3-2	OpenFOAM 燃焼解析の圧力結果と AUTODYN に入力した圧力条件 の比較 ……	139
図 4.2.3-3	AUTODYN による鋼製 CV 構造解析の解析結果例 (鋼板の相当塑 性ひずみ) ……	142
図 4.2.3-4	AUTODYN による PCCV 構造解析の解析モデル図 ……	144
図 4.2.3-5	AUTODYN による PCCV 構造解析の解析結果例 ……	146

This is a blank page.

1. 緒 言

福島第一原子力発電所事故は社会に衝撃を与え、特に水素爆発によるインパクトの大きさは一般市民の視点から見ると非常に大きなものであったといえる。事故から得られた教訓を踏まえ、格納容器内の水素の漏洩、拡散、爆発燃焼挙動を解明し、水素リスクを正確に評価することが求められている¹⁾。日本の原子力施設におけるシビアアクシデントのシナリオに沿った水素リスク評価を行うためには、国内外における従来及び現在の水素安全対策に係る取組みを把握し、残された課題を明確化したうえで、適切な解析コード開発、検証解析を実施していくことが不可欠である。

原子力事故解析では、一般的には集中定数系（LP: Lumped Parameter）コードが使用されてきているが²⁾、水素安全対策の合理的な高度化や水素安全評価の更なる信頼性の向上に向けて、LP コードでは評価できない原子炉格納容器（CV: Containment Vessel）、及び原子炉建屋（RB:Reactor-Building）内での局所的な水素濃度上昇の影響、火炎加速による安全機器の健全性等の把握には課題がある³⁾。そこで、LP コードを補完するものとして、局所的な水素濃度上昇や火炎加速を精緻に評価可能な数値流体力学（CFD: Computational Fluid Dynamics）解析が期待されている。一方、具体的な原子力事故解析が対象とする期間は長く、計算負荷が非常に大きいため、現状では全期間を CFD コードにて解析を行うことは困難である場合が多い。そのため、現段階では、まず LP コードにて全体的な挙動・傾向を把握し、詳細検討が必要な期間・場所を限定したのち、LP コードによる解析結果を境界条件として、CFD コードによる解析を実施する等の評価の流れが、実用性が高いと考えられる。

そこで本報告では以上の観点から、経済産業省資源エネルギー庁からの受託研究「発電用原子炉等安全対策高度化技術基盤整備事業（水素安全対策高度化）」において、CFD コードを活用して開発した、水素の発生から拡散、燃焼・爆発に至る挙動を予測する解析システムの概要と構成する水素拡散、燃焼解析等の各コードに導入した物理モデル及び各コードを連成させるためのインターフェースの機能について概説する。併せて、各コードを用いた各種試験データとの照合解析及び実機 PWR 格納容器内の水素挙動解析についての計算事例を解析上の留意点とともに紹介する。

2. 水素挙動統合解析システムの概要

プラント設計におけるシミュレーションを用いた安全性評価においては、理論的及び実験的な研究が活発に行われ、現象の解明とともにコンピュータ技術の目覚ましい進歩もあり、流体解析手法と構造解析手法を用いた数値解析による爆発現象を再現するモデルやこれを導入したシミュレーションコードが開発され、より現実的な現象解析及び災害影響評価が可能になってきている。特に、原子力施設のシビアアクシデント時における格納容器内及び原子炉建屋内の水素挙動評価については、研究機関、事業者、製造メーカー等において各種シビアアクシデントコード (MELCOR⁴⁾、MAAP⁵⁾、GOTHIC⁶⁾ 等) が活用されるとともに、OECD/NEA 等の国際的な枠組みでコード検証や現象のより詳細な解明が進められている^{3,7,8)}。

これらの状況を踏まえ、特に CFD 技術の活用に注目して、シビアアクシデントコードの仕様や課題等を調査し、広く産業界で活用されている汎用コードをベースにシビアアクシデント特有の現象（例えば、水素の混合挙動、水蒸気の凝縮等）や緩和系設備（再結合触媒器（PAR）、イグナイタ等）をモデル化して組み込むことで、実用レベルのシステム構築を早期に進めた。また、並行して、実験データや機構論的な背景に基づいた、詳細な相変化や燃焼等の複雑な現象についてのモデル技術の高度化、大規模計算への適用性、原子力分野以外の利用ユーザ層の獲得等を考慮して、オープンソースコードによる基盤技術の開発も行った。図 2.1 に、事故進展シナリオに基づいて発生した水素が漏洩拡散し、燃焼爆発が生じた場合の建屋・機器に対する影響評価を予測する水素挙動統合解析システムの基本構成をまとめた。

数値シミュレーションは、事故漏洩シナリオ（漏洩箇所、漏洩流体組成、漏洩量、構造物との境界条件、雰囲気等）に基づき、大きく分けて 3 つの解析フェーズ（①水素ガスの漏洩・拡散を扱う移流拡散解析、②着火から爆燃、爆轟及び爆風圧の伝播を扱う爆燃及び爆風伝播解析、③爆風圧による構造物への影響評価解析）で構成され、建屋やプラント設備全般に及ぼす各種影響の検討を実施できるように整備した。特に、PWR 原子力発電施設を対象に、実用的な観点から考慮すべき現象（火炎伝播加速現象の評価技術、格納容器規模の現象への適用性）³⁾に対処するためにシステムの拡充を行った。また、このシステムは、汎用 CFD コードと衝撃（構造強度解析）コードデータの受け渡し（引き継ぎ）について、インターフェースを用いて連結させることで、統合的に対象事象を一貫して解析できるように整備した。主要なシステムは、汎用商用コードの熱流体解析コード ANSYS FLUENT⁹⁾、及び衝撃解析コード AUTODYN¹⁰⁾、オープンソースコードの熱流体解析コード OpenFOAM¹¹⁾で構成される。これらのコードは、ANSYS-FLUENT と OpenFOAM は、①、②の事象に対して、AUTODYN は③の事象に対して、使用実績や検証事例、豊富な機能と高度な拡張性を有しており、早期にシステムの基盤技術の構築が可能と考えた¹⁾。一方、シビアアクシデント時の水素挙動は複雑であり、既存のコード機能では十分な対応は難しい。そこで、商用コード（FLUENT、AUTODYN）については、ユーザに一部公開されているサブルーチン機能を用いて、モデルの改良を行った。コード間のインターフェースは、一時的なファイルの受け渡

しをベースとしており、上記コード以外を利用ユーザが選定された場合にも、柔軟に対応可能な汎用性を考慮した。特に火炎加速や爆轟遷移といった現象に対しては、近年、公開されたオープンソースコード（OpenFOAM : ddtFoam²²⁾）をベースに開発を進めた。各解析フェーズの概要と新たに開発に取り組んだ項目を以下に示す。

(1) 移流拡散解析

事故漏洩シナリオに基づき、水素ガスが所定の場所から漏洩するとして移流拡散解析を実施する。これにより、構造物による影響や水素と空気との混合、さらにその混合に伴う気体の温度変化や浮力の影響を考慮した濃度分布を予測する。移流拡散解析の結果は、爆燃解析、燃焼影響解析の初期条件や、シビアアクシデント事故進展解析コードの領域分割処理の適性化等に活用される。既存の CFD コード機能では、水素ガスの漏洩位置や流出条件によって発生が懸念される成層化の生成消失過程や大量の水蒸気の蒸発・凝縮プロセスの再現性等に課題がみられる^{12,13)}。ここでは、新たに、水蒸気雰囲気中での水素ガスの移流解析や燃焼解析をするために必要な水蒸気の凝縮（空間、壁面）モデル、機器モデル（再結合触媒器（PAR）、イグナイタ、格納容器再循環ユニット）に関するユーザ定義関数やソースコードを作成し、FLUENT への導入及び OpenFOAM の開発に反映した。

(2) 爆燃及び爆風伝播解析

移流拡散解析の結果を初期条件とし、着火シナリオ（着火時間、着火源の場所）に基づいて爆燃及び爆風伝播解析を実施する。爆風圧の大きさは、プラント内における配管や機器、建屋などの閉塞性や配置状況などにより大きく影響を受け、特に、内部構造物の配置状況によっては燃焼が促進され、爆風圧は大きくなる傾向も考えられる。そのため、解析では、区画の形状や配置状況、配管内においては障害物の配置状況等を考慮した火炎の伝播挙動への影響や、機器、建屋の表面に負荷される圧力変動等を求める。爆風伝播解析の結果は、構造物への影響評価解析の荷重条件として用いる。既存の CFD コード機能では、水蒸気雰囲気中での燃焼挙動特性、爆轟への詳細な遷移過程のみならず、燃焼空間のスケール効果や濃度斑が局在する場合の火炎伝播速度の加速・減速効果の再現性等に課題がみられる^{14,15)}。ここでは、水蒸気特有の燃焼反応特性について素反応モデルを用いた CANTERA¹⁶⁾等による化学反応計算をもとにテーブル化するとともに、解適合格子法（AMR）を活用した大規模計算の効率化、自着火現象や火炎面の輸送方程式を考慮した燃焼モデルに関するユーザ定義関数やソースコードの作成を行い、FLUENT への導入及び OpenFOAM の開発に反映した。

(3) 燃焼影響評価解析

水素拡散解析から得られた水素ガス濃度分布から推定される爆轟時に生じるエネルギーや爆風伝播解析で得られた爆風圧を荷重条件として、構造物との相互作用評価を実施する。影響評価という点では、爆風圧に対する構造強度評価とともに、対策の観点から、破損状況等から着火原因や爆発の形態の解明といった爆発事故に至った原因の究明を図るために評価を視野にいれた仕様を考慮することも重要と考えている。既存のコード機能では、主たる

建築材料である鉄筋コンクリート等の破壊特性モデルや流体構造連成等に課題がみられる^{17,18)}。ここでは、ひずみ速度依存性等の衝撃特性を整理してデータ化するとともに、FLUENT または OpenFOAM の燃焼解析結果として得られた爆風圧分布を AUTODYN の境界条件とするためのインターフェースプログラムを作成した。また、ベント等構造物の脆弱部破損後の水素の移流拡散、燃焼挙動についても、インターフェースを介してメッシュを再構築することで連成解析が可能な処理を設けた。

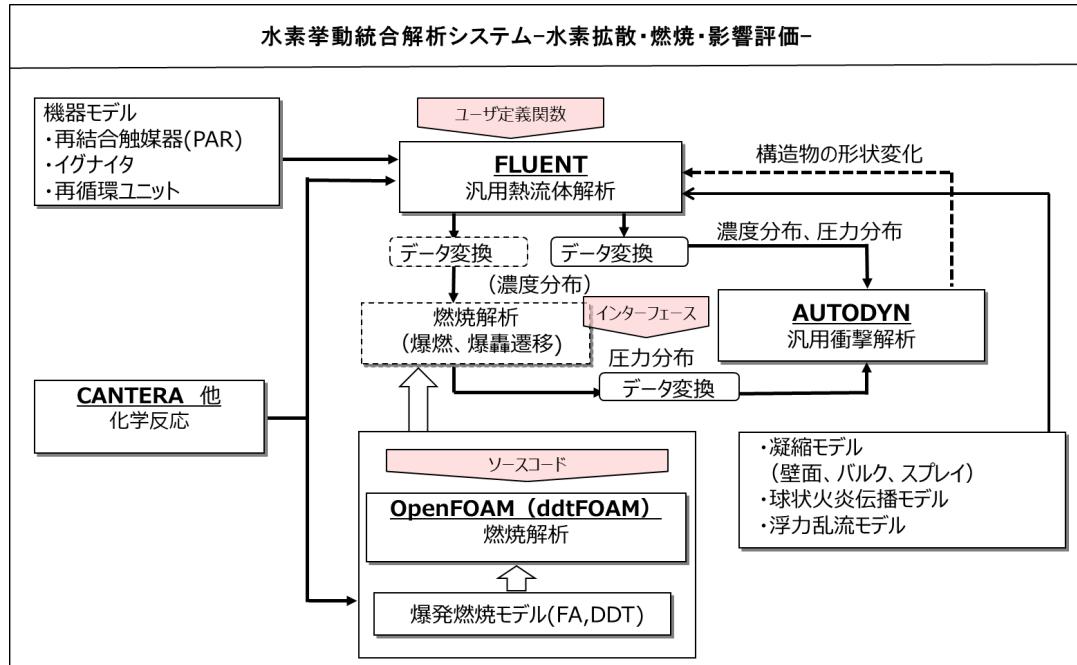


図 2.1 水素挙動統合解析システムの基本構成

(: 開発した箇所)

3. 各コードの説明と使用方法

本章では、水素挙動統合解析システムについて、各解析フェーズと使用するコードごとに開発したモデルを中心に概要と使用法をまとめた。

3.1 FLUENT による移流拡散解析

本章では、移流拡散解析に用いた基本式をはじめとして、凝縮・スプレイに関するモデルと FLUENT での具体的な設定方法を記載した。

3.1.1 モデル及び解法

使用している基礎式と、そこで用いられている凝縮モデルについて以下に示す。

(1) 基礎方程式¹⁹⁾

格納容器内の水素拡散挙動解析（移流拡散解析）は、以下の時間平均の基礎方程式（式 3.1-1～3.1-4）に基づいて実施する。なお、凝縮した水分は、凝縮量を気相から除去する。概ね、気体単相での計算となる。

<連続の式>

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.1-1)$$

ρ : 密度

t : 時間

\vec{v} : 速度ベクトル

<運動方程式>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}_{eff} - \frac{2}{3} k I) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3.1-2)$$

$$\bar{\tau}_{eff} = (\mu + \mu_t) \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right]$$

p : 圧力

$\bar{\tau}_{eff}$: 乱流における応力テンソル

I : 単位テンソル

\vec{g} : 重力加速度

\vec{F} : 体積力

μ : 粘性係数

μ_t : 乱流粘性係数

<エネルギー方程式>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k \nabla T - \sum_j h_j \vec{j}_j + (\tau \cdot \vec{v}) \right) = S_h \quad (3.1-3)$$

 E : 総エネルギー (J) ρ : 密度 (kg/m³) k : 熱伝導率 (W/m/K) p : 圧力 (Pa) T : 温度 (K) h : 顯エンタルピー (J) J : 拡散流束 (kg/m²-s) S_h : ユーザ定義の体積熱源 (J) τ : 応力テンソル (Pa)

<化学種の輸送方程式：化学反応による生成は除く>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + S_i \quad (3.1-4)$$

 ρ : 密度 (kg/m³) Y_i : 化学種 i の質量分率 (-) S_i : ユーザ定義ソースから追加させるソース項 (kg/m³/s) J_i : 物質拡散流束 (kg/m²/s)

<乱流モデル (Realizable k-ε) >

乱流エネルギー k の輸送方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} k) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (3.1-5)$$

$$G_k = \mu_t S^2 \quad G_b = -\vec{g} \frac{\mu_t}{\rho P r_t} \nabla \rho \quad Y_M = \frac{2 \rho k \varepsilon}{\gamma R T}$$

$$S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

 k : 乱流エネルギー σ_k : k に関する乱流プラントル数 G_k : 平均速度勾配による生成項 G_b : 浮力による生成項 \vec{g} : 重力ベクトル

Y_M : 圧縮性乱流における膨張変動項

S : ひずみ速度テンソルの強さ

u_i, u_j : 速度ベクトルの各方向成分

(S を解く方向に垂直な 2 成分)

γ : 比熱比

R : 気体定数

ε : k の散逸率

乱流エネルギー散逸率 ε の輸送方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\varepsilon) \\ = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v\varepsilon}} \\ + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \rho C_{3\varepsilon} G_b \end{aligned} \quad (3.1-6)$$

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad \eta = S \frac{k}{\varepsilon}$$

$$C_{3\varepsilon} = \tanh \left| \frac{v}{u} \right|$$

$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$: 定数 ($\sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.2$)

$C_{1\varepsilon}, C_2$: 定数 ($C_{1\varepsilon} = 1.44, C_2 = 1.9$)

v : 重力ベクトルに平行な流速の成分

u : 重力ベクトルに垂直な流速の成分

(2) 水蒸気の凝縮とスプレイ水の噴射挙動の取り扱い

水蒸気霧団気中での水素ガスの移流解析や燃焼解析をするために、移流拡散解析において、自由空間の広い格納容器内の壁面や空間中で生じる水蒸気の凝縮（空間、壁面）やシビアアクシデントの際に噴射されるスプレイ水の挙動とこれによる伝熱現象を考慮することは重要である。

(a) 壁面凝縮

壁面凝縮モデルは、式 (3.1-7) に示すように壁面近傍のセルから凝縮量に相当する水蒸気質量をシンクする方法で考慮する。この凝縮モデルは、代表長さを壁面から 1 層目のセル中心までの長さとすることで、1 次元的に無次元化した凝縮量として表現することができる。

<壁面凝縮の式>²⁰⁾

$$\dot{m} = \frac{S_h D}{L} \rho \ln \left(\frac{P - P_s}{P - P_b} \right) \quad (3.1-7)$$

 \dot{m} : 凝縮速度 (kg/m²s) S_h : シャーウッド数 (-) D : 非凝縮性ガスの拡散係数 (m²/s) L : 拡散長さ (m) ρ : 気相密度 (kg/s) P : 霧囲気全圧 (Pa) P_s : 表面温度での水蒸気飽和圧力 (Pa) P_b : 霧囲気中の水蒸気分圧 (Pa)

(b) 空間凝縮

式 (3.1-8)、式 (3.1-9) に示すように、空間凝縮モデルは空間内の霧滴水量が閾値を超えた場合に凝縮して落下する（系内から差し引く）として計算を行う。

<空間凝縮の式>²¹⁾

$$\frac{dm_{fo}}{dt} = CfoV(\rho H2O, sat - \rho H2O, \infty) \quad (3.1-8)$$

$$\frac{dm_{ra}}{dt} = CraV(0.002 - \rho H2O, \infty) \quad (3.1-9)$$

 Cfo : 実験から求めた定数 (0.1/s) Cra : 実験から求めた定数 (0.01/s) V : 体積 (m³) ρ : 密度 (kg/m³) m_{fo} : 霧滴質量 (kg) m_{ra} : 雨滴質量 (kg)

(3) スプレイ水の噴射挙動¹⁹⁾

スプレイ水の噴射挙動は、FLUENT の分散相の機能を用いて考慮する。分散相では粒子の集合体であるパーセルを散布し、雰囲気との運動量及び熱のやり取りを行う。その効果により、雰囲気中の流れ場が変化し、かつ空間中の温度が低下することから、上記 3.1.1(2)の空間凝縮と併せて閾値を超えた雲水量が空間凝縮として差し引かれる。分散相で考慮する式は以下の通りである。

<粒子の運動方程式>

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g_x(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_x \quad (3.1-10)$$

 u_p : 流速 (m/s) t : 時間 (s) $F_D(u - u_p)$: 単位粒子質量あたりの抗力 (力/単位粒子質量) (m/s²) g : 重力加速度 (m/s²) ρ : 密度 (kg/m³)

<エネルギー保存式>

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \epsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (3.1-11)$$

 m_p : 粒子質量 (kg) c_p : 粒子の比熱 (J/kg-K) A_p : 粒子の表面積 (m²) T_∞ : 連続相の局所温度 (K) h : 対流伝熱に関する係数 (W/m²-K) ϵ_p : 粒子放射率 (無次元) σ : ステファン・ボルツマン定数 (5.67×10^{-8} W/m²-K⁴) θ_R : 輻射温度, $\left(\frac{G}{4\sigma}\right)^{1/4}$

3.1.2 使用方法

FLUENT の各種設定は、基本的に FLUENT ユーザマニュアル²²⁾に基づき、乱流モデル、境界条件などの設定を行う。格納容器内の移流拡散解析において特有の条件設定として、以下の点について注意する必要がある。

(1) 水蒸気の凝縮モデル UDF のフック

水蒸気の凝縮モデルの UDF のフックは以下の手順で行う。

(a) User-Defined タブから Function Hooks... をクリック

開いた User-Defined Function Hooks (図 3.1.2-1) から、変数初期化 UDF、凝縮計算用 UDF をそれぞれ Initialization (図 3.1.2-2)、Adjust (図 3.1.2-3) の Edit から開き、以下のように設定する。

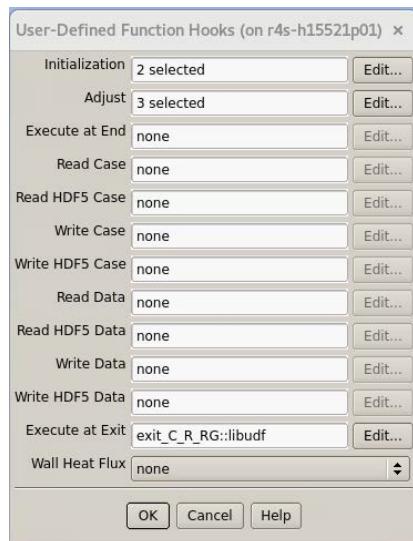


図 3.1.2-1 User-Defined Function Hooks の設定画面

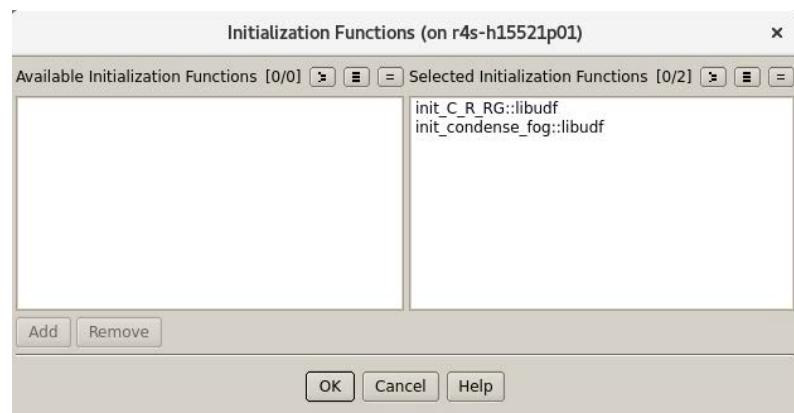


図 3.1.2-2 変数初期化の UDF 設定

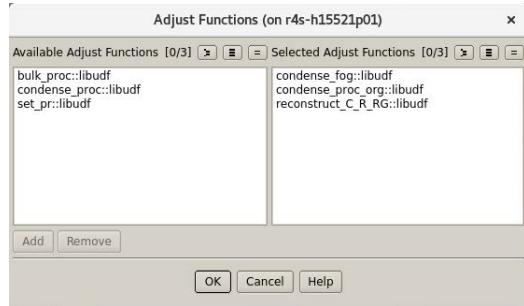


図 3.1.2-3 凝縮計算の UDF 設定

- (b) Setup の Cell Zone Condition の Fluid から、設定する領域名をダブルクリック Fluid 画面が開いたら Source Terms に□を入れて、Source Terms タブに切り替える。除去される質量、除去される H₂O の質量、凝縮熱をそれぞれ Mass (図 3.1.2-4)、H₂O (図 3.1.2-5)、Energy (図 3.1.2-6) の Edit から開き、以下のように設定する。

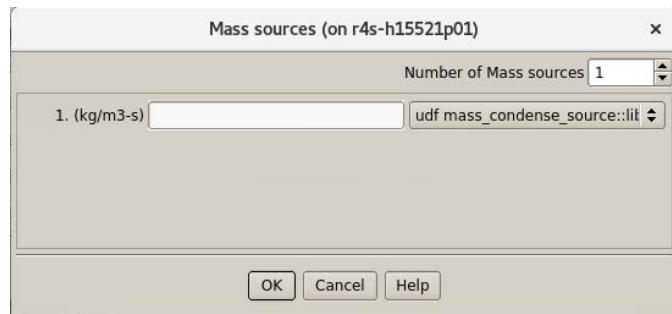
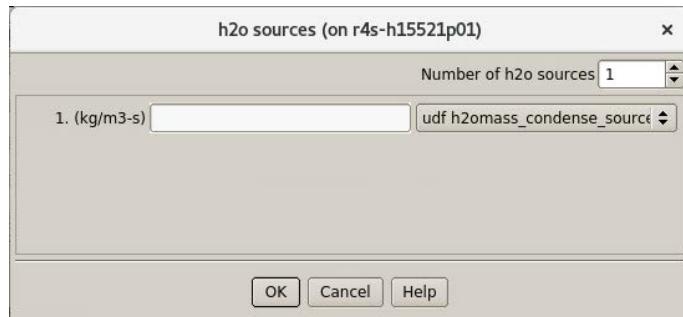


図 3.1.2-4 除去される質量の UDF 設定

図 3.1.2-5 除去される H₂O 質量の UDF 設定

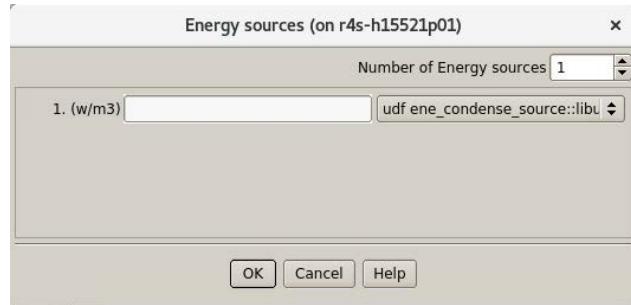


図 3.1.2-6 凝縮熱の UDF 設定

(2) スプレイ水の噴射挙動モデルの設定

スプレイ水の噴射挙動モデルの設定は、以下のように行う。

Setup の Models の Discrete Phase 上で右クリックして、Continuous Phase から On をクリック。

開いた Discrete Phase Model の画面（図 3.1.2-7）で粒子計算設定を任意に行い、Injections をクリックし、さらに開いた Injections の画面（図 3.1.2-8）の create をクリック。開いた Set Injection Properties でスプレイ水の粒子設定を任意に行う（変数定義などは FLUENT ユーザマニュアルを参照）。

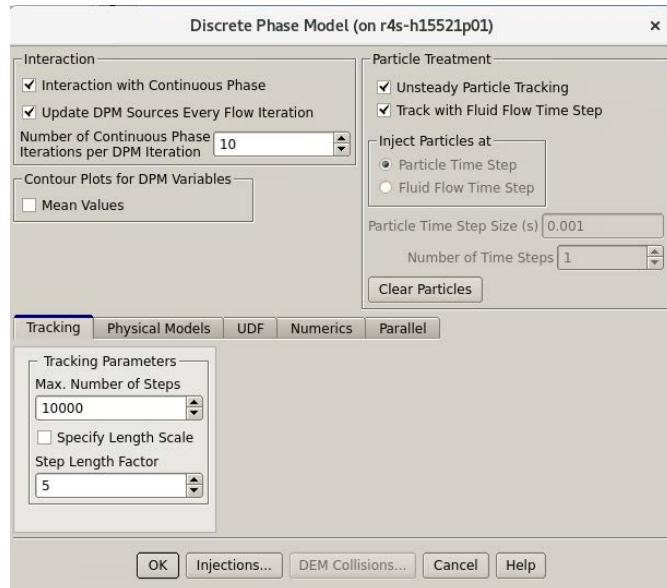


図 3.1.2-7 粒子計算設定画面

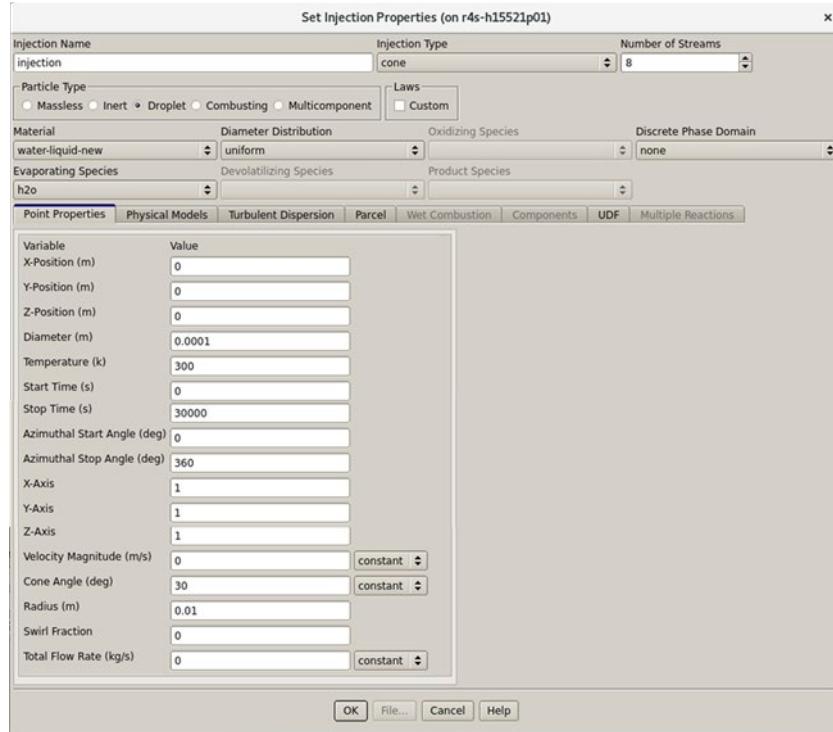


図 3.1.2-8 スプレイ水の粒子設定

(3) 壁面の伝熱に関する設定

壁面の伝熱に関する設定として、LP コードによる解析結果を反映する場合には、以下のように行う。

Setup の Boundary Condition の Wall から、伝熱条件を設定したい壁面を選択し、Thermal タブの左側にある Thermal Conditions で、Temperature や Heat Flux を任意に選択する（図 3.1.2-9）。選択後、数値を入力する、時間経過に伴う変動を Profile として入力するなどといった指定を行う。なお、5 章に記載した実機移流拡散解析事例では、LP コードによる解析結果を Profile として入力し解析を実施した。なお、Profile を読み込むには、Setup の Boundary Condition にある Profile ボタンを押して、読み込みたいファイルを指定する（図 3.1.2-10）。

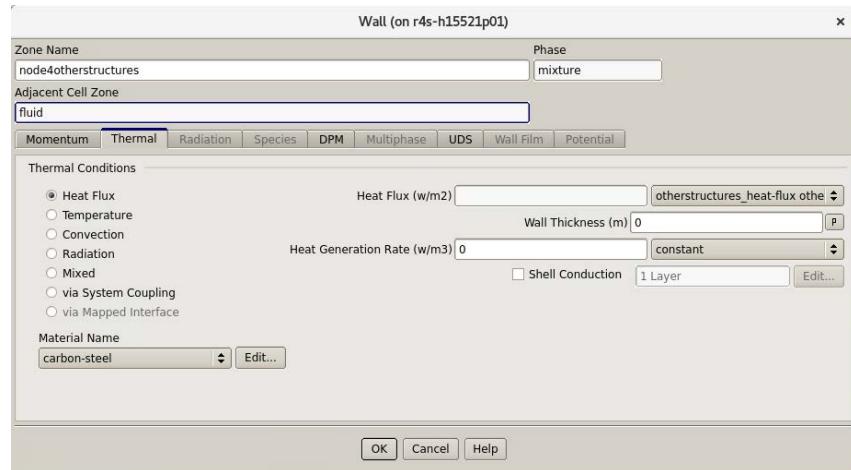


図 3.1.2-9 壁面の伝熱設定

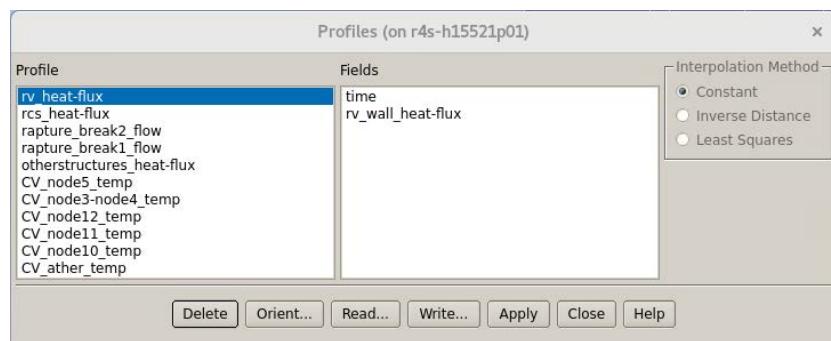


図 3.1.2-10 Profile の読み込み方

3.2 FLUENT による燃焼解析

燃焼解析に用いた基本式をはじめとして、新たに導入した燃焼モデルの方程式と、FLUENT での具体的な設定方法を記載した。

3.2.1 モデル及び解法

使用している基礎式と、そこで用いられている燃焼モデルについて以下に示す。

(1) 基礎式¹⁹⁾

FLUENT で格納容器内の水素燃焼挙動解析（燃焼解析）に用いる基礎式は、質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式、反応進行変数輸送方程式、乱流エネルギー輸送式、渦消散率輸送方程式で構成される。これに、反応進行変数輸送方程式のソース項に燃焼による反応が考慮される。

<質量保存式>

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.2-1)$$

ρ : 密度

t : 時間

\vec{v} : 速度ベクトル

<運動量保存式>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}_{eff} - \frac{2}{3} k I) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3.2-2)$$

$$\bar{\tau}_{eff} = (\mu + \mu_t) \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right]$$

p : 壓力

$\bar{\tau}_{eff}$: 乱流における応力テンソル

I : 単位テンソル

\vec{g} : 重力加速度

\vec{F} : 体積力

μ : 粘性係数

μ_t : 乱流粘性係数

<エネルギー保存式>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(\lambda_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_h \quad (3.2-3)$$

$$E = h - \frac{p}{\rho} + |\vec{v}|^2 \quad h = \sum_j Y_j h_j \quad h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j} dT$$

$$\lambda_{eff} = \lambda + \frac{C_p \mu_t}{Pr_t} \quad C_p = \sum_j Y_j C_{p,j} \quad \vec{J}_j = - \left(\rho D_m \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_j - D_T \frac{\nabla T}{T}$$

$$S_h = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v} \right) h_0 \quad h_0 = \sum_j Y_j h_{0,j}$$

 T : 温度 E : 内部エネルギー λ, λ_{eff} : 热伝導率 Y_j : 化学種 j の質量分率 h : エンタルピー h_j : 化学種 j のエンタルピー $C_{p,j}$: 化学種 j の定圧比熱 T_{ref} : 参照温度 Pr_t : 乱流プラントル数 \vec{J}_j : 化学種 j の拡散流束 D_m : 物質拡散係数 D_T : 热拡散係数 Sc_t : 乱流シュミット数 S_h : 化学反応生成熱 h_0 : 標準生成エンタルピー $h_{0,j}$: 化学種 j の生成エンタルピー

<乱流モデル (SST k-ω) >

乱流エネルギー k の輸送方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} k) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (3.2-4)$$

$$G_k = \mu_t S^2 \quad G_b = -\vec{g} \frac{\mu_t}{\rho Pr_t} \nabla \rho \quad Y_M = \frac{2\rho k \varepsilon}{\gamma RT}$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

k : 乱流エネルギー
 σ_k : k に関する乱流プラントル数
 G_k : 平均速度勾配による生成項
 G_b : 浮力による生成項
 \vec{g} : 重力ベクトル
 Y_M : 圧縮性乱流における膨張変動項
 S : ひずみ速度テンソルの強さ
 u_i, u_j : 速度ベクトルの各方向成分
 (S を解く方向に垂直な 2 成分)
 γ : 比熱比
 R : 気体定数
 ε : k の散逸率

乱流エネルギー散逸率 ε の輸送方程式

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\varepsilon) &= \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v\varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \rho C_{3\varepsilon} G_b \\
 C_1 &= \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad \eta = S \frac{k}{\varepsilon} \\
 C_{3\varepsilon} &= \tanh \left(\left| \frac{\vec{v} \cdot \vec{g}}{|\vec{v}|} \right| \hat{g} \right) / \left| \vec{v} - \frac{\vec{v} \cdot \vec{g}}{|\vec{v}|} \hat{g} \right|
 \end{aligned} \tag{3.2-5}$$

σ_ε : 乱流プラントル数
 $C_2, C_{1\varepsilon}$: 定数 ($C_2 = 1.9, C_{1\varepsilon} = 1.44$)

乱流エネルギー比散逸率 ω の輸送方程式

(壁面近傍では式(3.2-5)の代わりに式(3.2-6)を解く)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\omega) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right) + C_{\omega 1} \frac{\varepsilon}{k} G_k + C_{\omega 2} \rho \omega^2 \tag{3.2-6}$$

$\varepsilon = \beta_\infty k \omega$
 ω : k の比散逸率
 σ_ω : 乱流プラントル数
 β_∞ : 定数 (=0.09)

<混合分率方程式>

混合分率 f の輸送方程式 ($0 \leq f \leq 1$)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}f) = \nabla \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla f \right) \tag{3.2-7}$$

f : 混合分率

σ_t : 定数 (=0.85)

ここで、混合分率 f は未燃ガス組成 Y_j^u と以下の関係式で定義される。

$$f = \frac{Y_j^u - Y_{j,ox}}{Y_{j,fuel} - Y_{j,ox}} \quad (3.2-8)$$

($f = 0$ は燃料 H₂ 以外が 100%、 $f = 1$ は燃料 H₂ が 100%を意味する)

Y_j^u : 未燃ガスの化学種 j 質量分率

$Y_{j,ox}$: 燃料以外の混合気中の化学種 j の初期含有率
($j=O_2, N_2, H_2O$)

$Y_{j,fuel}$: 燃料中の化学種 j (H₂)の初期含有率
($j=O_2, N_2, H_2O$ に対してはゼロ)

なお、乱流における微小時間変動の影響を考慮するため、ガス組成 Y_j^u は混合分率 f による確率密度分布 $p(f)$ を持つものと想定し、その平均値をガス組成 Y_j^u とする。

<化学反応進行方程式>

c (反応進行変数) の輸送方程式 ($0 \leq c \leq 1$)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} c) = \nabla \left(\left(\frac{\lambda}{C_p} + \frac{\mu_t}{S c_t} \right) \nabla c \right) + \rho S_c \quad (3.2-9)$$

$$\rho S_c = \omega_{def} + \omega_{ign} \quad (3.2-10)$$

c : 反応進行変数

S_c : 反応進行ソース項

ω_{def} : 乱流燃焼速度の影響を表すソース項

ω_{ign} : 自着火の影響

ここで、

$$c = \frac{Y_j - Y_j^u}{Y_j^{eq} - Y_j^u} \quad (3.2-11)$$

Y_j : 燃焼時の化学種 j の質量分率

上添字

eq : 化学平衡

(参照温度 T_{ref}、参照圧力 P_{ref}、未燃ガス組成 Y^u の関数であり、事前に
テーブル化)

u : 未燃状態

なお、 ω_{def} 、 ω_{ign} は、次節参照。

燃焼ガス組成 Y_j は、 Y_j^u と c の関係式 (3.2.1-12) から求まる。

($c=0$ は未燃ガス、 $c=1$ は完全燃焼状態を意味する)

以上、上記の式(3.2-8)と式(3.2-11)より、燃焼時のガス組成 Y_j を次式で求めることで、式(3.1-3)中のエンタルピー h が求まる。

$$\begin{aligned} Y_j^u &= f(Y_{j,fuel} - Y_{j,ox}) + Y_{j,ox} \\ Y_j &= c(Y_j^{eq} - Y_j^u) + Y_j^u \end{aligned} \quad (3.2-12)$$

(2) 燃焼解析モデル

式 (3.2-9) における乱流燃焼速度の影響を表すソース項 ω_{def} は次式で表される。

$$\omega_{def} = \rho_u s_T |\nabla c| G \quad (\text{ここでは、 } G = 1.0 \text{ とした}) \quad (3.2-13)$$

ここで、乱流燃焼速度 s_T は種々のモデルが提案されているが、主に計算の安定性が高く、適用燃焼速度範囲も広い Peters モデルを適用した。なお、ddtFoam にて爆轟遷移解析での良好事例のある Weller モデルも一部検討したため、Peters モデルと Weller モデルにおける乱流燃焼速度計算式を以下に示す。両モデルとともに、乱流燃焼速度 (S_T) は層流燃焼速度 (S_L) に加速項 (σ_t または ξ) をかける形式で表される。

(a) Peters モデル¹⁹⁾

乱流燃焼速度は式(3.2-14)と式(3.2-15)にてモデル化される。

$$s_T = s_L (1 + \sigma_t) \quad (3.2-14)$$

$$\sigma_t = -\frac{a_4 b_3^2}{4b_1} \frac{l_f}{\delta} l_*^q + \left[\left(\frac{a_4 b_3^2}{4b_1} \frac{l_f}{\delta} l_*^q \right)^2 + \frac{C_s b_3^2}{2} \frac{u' l_f^2}{s_L \delta l_t} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.2-15)$$

$$\delta = \left(\frac{\lambda/c_p}{\rho s_L} \right)_{unburned} \quad l_*^q = l_f / l_{alg} \quad l_{alg} = \sqrt{\frac{2C_\mu}{C_s S c_t}} l_t$$

$$l_t = C_D \frac{u'^3}{\varepsilon} \quad a_4 = \sqrt{\frac{3C_\mu C_s}{S c_t}} \quad l_f = \sqrt{\frac{l_t \mu_{eff}}{u' \rho S c_t}}$$

$$b_1 = 2.0 \quad b_3 = 1.0 \quad q = 0.66 \quad C_s = 2.0 \quad S c_t = 0.7 \quad C_\mu = 0.09$$

$$C_D = 0.37$$

s_T : 乱流燃焼速度

s_L : 層流燃焼速度

l_*^q : Ewald 修正項 (ここでは 1 とした。)

u' : 二乗平均平方根 (RMS) 速度

(b) Weller モデル²³⁾

乱流燃焼モデルは、式(3.2-16)と式(3.2-17)でモデル化される。

$$s_T = \xi s_L \quad (3.2-16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\xi) = \nabla(\rho D_{eff}\nabla\xi) + \rho P_\xi\xi - \rho R_\xi\xi^2 \quad (3.2-17)$$

ξ : 火炎面密度

$$\begin{aligned} P_\xi &= 0.28 \sqrt{C_{u'}^3 \frac{\varepsilon}{v_u}} & R_\xi &= \frac{P_\xi}{\xi_{eq}} \\ Re_\eta &= \frac{u'}{(C_{u'} v_u \varepsilon)^{1/4}} \\ \xi_{eq} &= 1 + C_\xi(1 + 2C_s(c - 0.5)) \sqrt{\frac{u'}{s_L} Re_\eta} \\ C_{u'} &= 1.0, C_\xi = 0.62, C_s = 1.0 \end{aligned}$$

(c) 温度、圧力補正

上記 (a) と (b) 中の式(3.2-14)及び式(3.2-16)で表される通り、乱流燃焼 S_T は層流燃焼速度 S_L をもとに算出している。ここで、層流燃焼速度 S_L は温度 T と圧力 P の影響を受けて変化するため、温度 T_0 、圧力 P_0 における層流燃焼速度 S_{L0} を用いて、以下の計算式で求めている。

$$S_L = S_{L0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^a \left(\frac{P}{P_0} \right)^b \quad (3.2-18)$$

ここで、 S_{L0} は Koroll らの要素試験データ²⁴⁾との整合性から選定した反応メカニズムを用いた詳細反応計算により求めているものを使用した。また、a、b については Turns らの値を適用し、 $a=1.75$ 、 $b=-0.2$ とした²⁵⁾。

(3) 自着火モデル²⁶⁾

式(3.2-13)中の自着火の影響を表すソース項 ω_{ign} は次式で表される。

$$\omega_{ign} = \rho \frac{1-c}{\Delta t} H(\tau - 1) \quad (3.2-19)$$

ここで、

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases} \quad (3.2-20)$$

自着火進行変数の τ が 1 となったときに該当セルの未燃ガスがすべて反応する。

また、自着火進行変数 τ は輸送方程式により計算され、各時刻における混合気組成、温度、圧力に応じた自着火の進行がソース項 ρ/t_{ign} として与えられる（式(3.2-21)）。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tau) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\tau u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_{eff} \frac{\partial \tau}{\partial x_j}\right) + \frac{\rho}{t_{ign}} \quad (3.2-21)$$

ここで、ソース項 ρ/t_{ign} の t_{ign} には事前に混合気組成及び温度、圧力に応じて計算された着火遅れテーブルから線形内挿により求められる。

そこで、実際の計算にあたっては、ガス組成（空気、水素、水蒸気の濃度）及び温度、圧力を考慮して、あらかじめ化学反応解析ソフトウェア Cantera を使って水素燃焼時の反応機構モデルを用いた詳細反応計算により自着火遅れ時間 t_{ign} を求めてテーブル化したデータベースから、各計算セルの組成・温度・圧力に応じた値を線形内挿して求めている。

(4) 解適合格子 AMR について

燃焼解析では特に火炎面を如何に細かく解像するかが重要となるため、AMR (Adaptive Mesh Refinement) 手法を適用することで、計算負荷を上げずに火炎面の解像度を向上させている。AMR が適用される領域は、表 3.2.1-1 の条件を満足する領域が対象となる。

なお、AMR の考え方の詳細は、別途、「OpenFOAM による燃焼解析」（3.4 節）に記載する。

表 3.2.1-1 AMR 適用条件

現象	対応する物理量	AMR 適用基準	
火炎面での反応	反応進行変数	$0.001 < c < 0.999 \dots \textcircled{1}$	
火炎面前方での乱流生成	流速勾配	未燃領域において $\frac{ \nabla U }{ \nabla U _{max}} + \frac{ \nabla \rho_u }{ \nabla \rho_u _{max}} > 0.1 \dots \textcircled{2}$	AMR は $\textcircled{1}$ もしくは $\textcircled{2}$ を満たす領域に適用される
圧力波	密度勾配	$ \nabla U $: 流速勾配絶対値 $ \nabla \rho_u $: ガス密度勾配絶対値 添字 max : 未燃領域における最大値	

3.2.2 使用方法

FLUENT の各種設定は、基本的に FLUENT ユーザマニュアル²²⁾に基づき、乱流モデル、燃焼モデル、境界条件などの設定を行う。自着火モデルを組み込んだ解析における特有の条件設定として、以下の点について注意する必要がある。

(1) 自着火モデルの設定

以下の手順にてモデル設定を行う。

(a) UDF のコンパイル

計算実行ディレクトリに UDF ファイルを保存し、倍精度にてコンパイルを行った後にロードする。また、各種テーブルデータ (aH2_table_data.txt, aH2O_table_data.txt, fH_table_data.txt, fluid_ID_data.txt, log_tIgn_data.txt, P_table_data.txt, sl0_table_data.txt, T_table_data.txt) も同じディレクトリに保存する。fluid_ID_data.txt については、計算する cas の fluid-id を fluid の数だけ入力する必要がある。

(b) UDM 及び UDS の設定

User-Defined タブから、Memory...をクリックし、UDM の数を図 3.2.2-1 のように 40 に設定する。図 3.2.2-2 にそれぞれの UDM の一覧を示す（一部使用していない数値もある）。同様に、User-Defined タブから、Scalars...をクリックし、図 3.2.2-3 のように UDS の数を 1 に、またオプションについても図と同じように設定する。

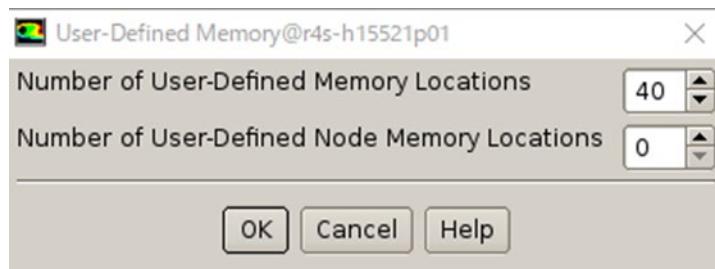


図 3.2.2-1 UDM の設定

図 3.2.2-2 UDM 一覧

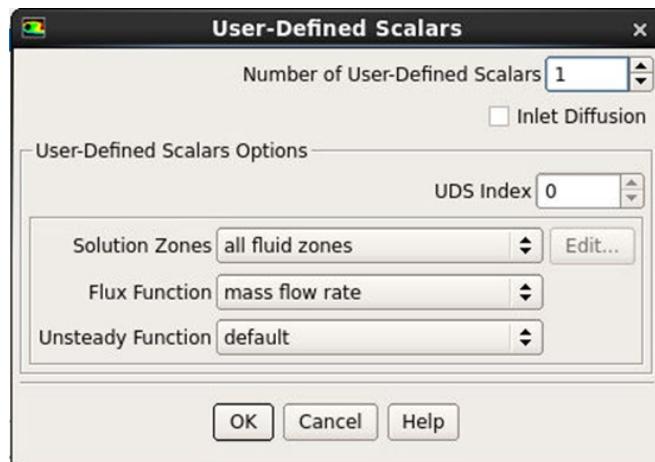


図 3.2.2-3 UDS の設定

(c) Adjust 及び Execute at End へのフック

User-Defined タブの Function Hooks...をクリックし、Adjust に“cal_source”、Execute at End に“amr_switch”をフックする（図 3.2.2-4）。

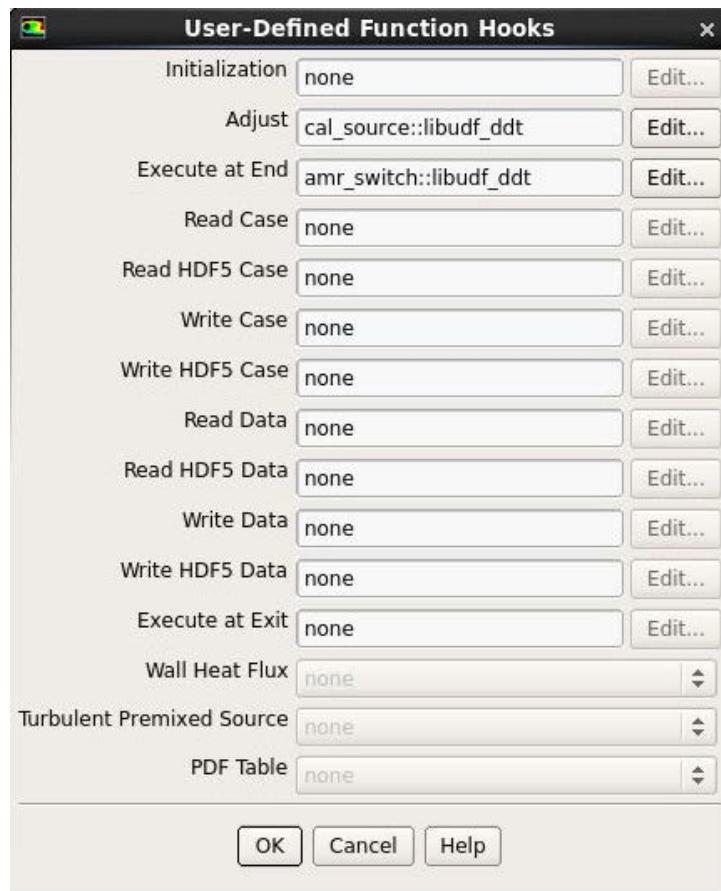


図 3.2.2-4 Function Hooks 設定

(d) Laminar_flame_speed のフック

Setup > Materials > Mixture > pdf-mixture の Laminar Flame Speed に図 3.2.2-5 のよう に“laminar_flame_speed”をフックする。

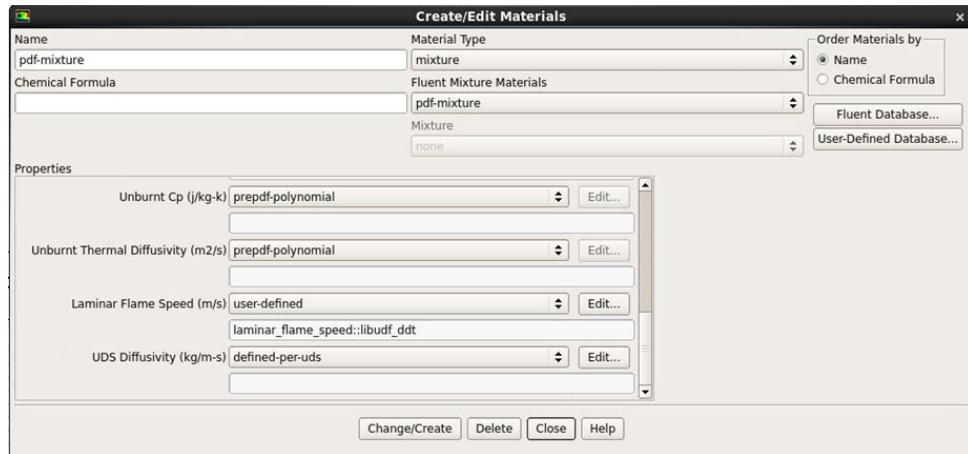


図 3.2.2-5 Materials 設定

(e) `c_source_ign`、`tau_source` のフック

Setup > Cell Zone Conditions > Fluid から、設定する領域名をダブルクリックする。設定画面が開いたら、Source Terms のチェックボックスに☑を入れて、Source Terms タブの Progress Variable から Edit... をクリックし、図 3.2.2-6 のように “`c_source_ign`” をフックする。同様に、User Scalar 0 にも図 3.2.2-7 のように “`tau_source`” をフックする。

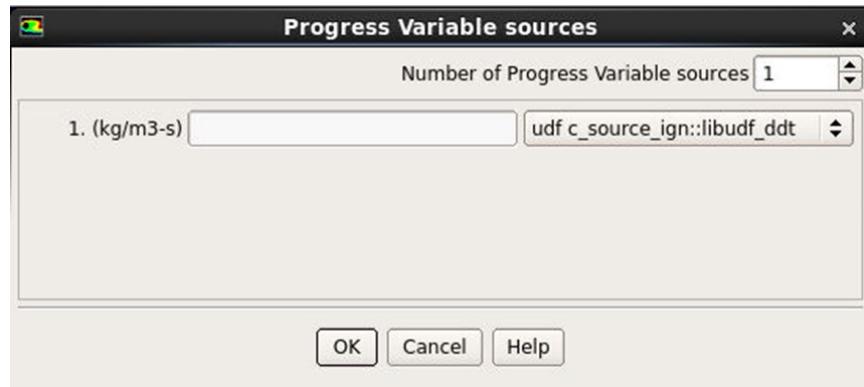


図 3.2.2-6 Progress Variable sources 設定

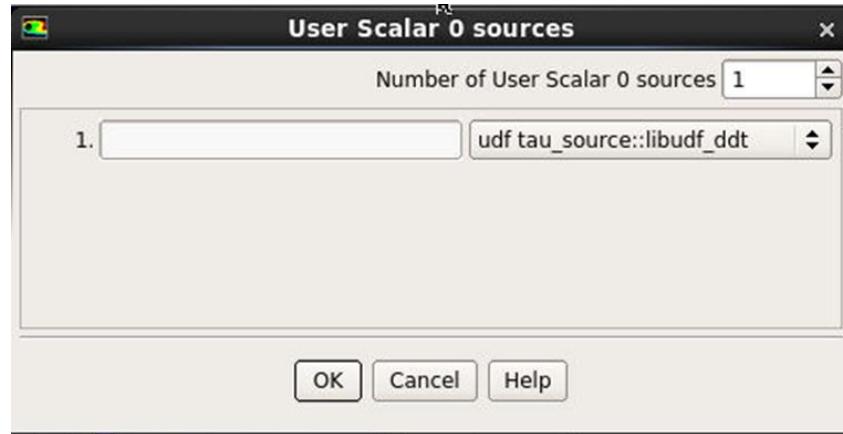


図 3.2.2-7 User Scalar 0 sources 設定

(f) cas データを保存する

以降の設定は計算用ノードで実行する。

(i) インプット値の設定

TUI にてインプット値を設定する。ジャーナルファイルでの設定も可能。図 3.2.2-8 に例・内容詳細を示す。

1 (rp-var-define 'influidt_input 1 'integer #f)	存在するFluidの数 応じてfluid_ID_data.txtの内容を変える必要あり
0 (rp-var-define 'inert_input 0 'integer #f)	水蒸気が存在するかどうか 1:有り、0:無し
1 (rp-var-define 'interval_input 1 'integer #f)	AMRの頻度
1 (rp-var-define 'orp_input 1 'integer #f)	密度勾配か圧力勾配か 1: 圧力勾配、0: 密度勾配
10 (rp-var-define 'non_ignition_pmax_input 10 'real #f)	圧力(静圧)[Pa] 数値以下では燃えない
900 (rp-var-define 'non_ignition_tmax_input 900 'real #f)	温度[K] 数値以下では燃えない
define user-defined exe "initialized_data_value_set:libudf"	
define user-defined exe "table_data_read:libudf"	

図 3.2.2-8 ジャーナル入力例（黄色の部分は(ii)の設定）

(ii) Initialized_data_value_set 及び table_data_read の実行

User-Defined タブの Execute on Demand をクリックし、図 3.2.2-9 のように “Initialized_data_value_set”及び“table_data_read”を実行する。なお、図 3.2.2-8 の黄色部分に示すコマンドをジャーナルファイルに書き込むことでジャーナルでも実行できる。実行した際に、図 3.2.2-10 に示すようなメッセージが表示されるので、確認すること。また、初期場における層流燃焼速度等も確認できる。

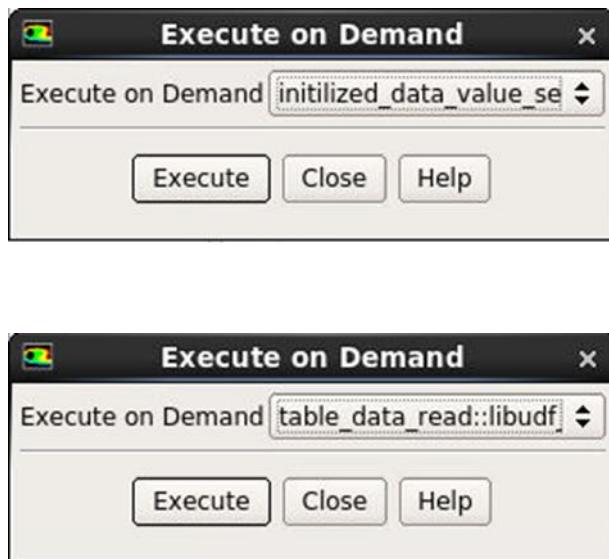


図 3.2.2-9 Execute on Demand

```
> define user-defined exe "initialized_data_value_set::libudf_ddt" ii fluid_id 0 1
ii fluid_id 1 9
iH2 iO2 iH2O iN2 inert iH2OI 0 2 4 1 1 4
iH2 iO2 iH2O iN2 inert iH2OI 0 2 4 1 1 4
non_ignition(Pmax,Tmax) 1.000000e+01 9.000000e+02

> define user-defined exe "table_data_read::libudf_ddt" naH2O_table 6
naH2_table 75
nfH_table 8
nP_table 12
nT_table 61
ntIgn_table 0
```

図 3.2.2-10 Execute on Demand 実行事例

(2) 自着火モデルに火炎面密度(ξ)輸送方程式を組み込む場合

火炎面密度(ξ)輸送方程式を組み込んだ UDF を使用する場合には、3.2.2(1)項に述べた設定に加えて、以下設定を行う必要がある。

(a) UDS の数を 1 から 2 に変更

UDS-1 を扱うため、図 3.2.2-11 のように UDS の数を 2 に設定する。

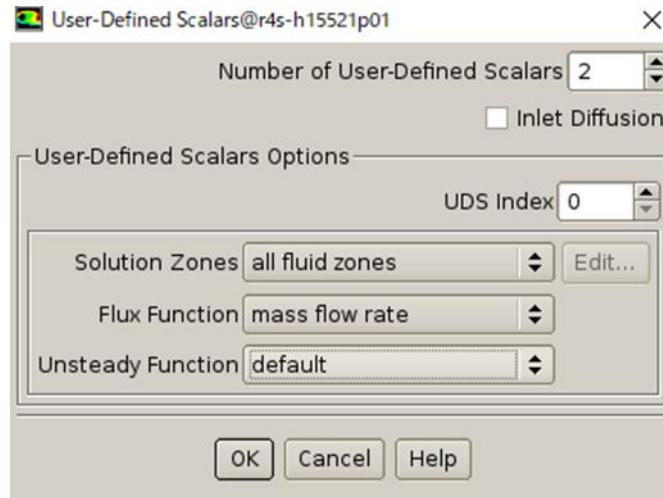


図 3.2.2-11 UDS の設定 (ξ 輸送方程式組み込み時)

(b) xi_source の UDS1 へのフック

Setup > Cell Zone Conditions > Fluid から、設定する領域名をダブルクリックする。Source Terms タブに、User Scalar 1 が追加されているので、Edit...をクリックし、Number of User Scalar 1 sources を 1 に変更し、図 3.2.2-12 のように“ xi_source ”をフックする。

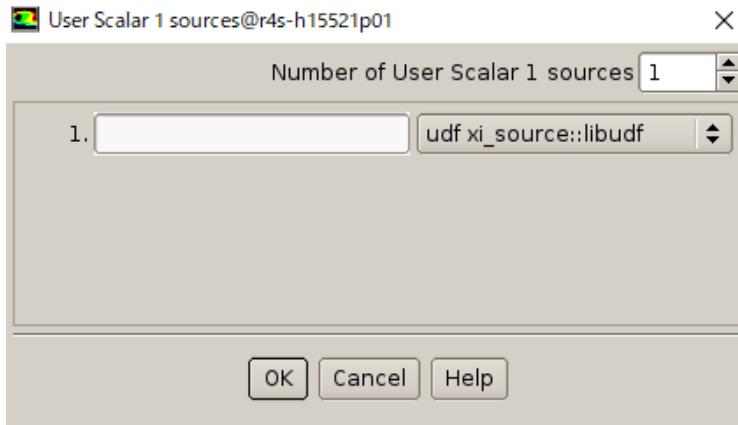


図 3.2.2-12 User Scalar 1 sources 設定

(c) Flame Speed Model の変更 (peters→zimont)

伸張係数 G を必要に応じて変更可能とするため、Flame Speed Model を変更する。

Setup > Models > Species を選択し、Premix タブの Flame Speed Model を図 3.2.2-13 のように “zimont” に変更する。

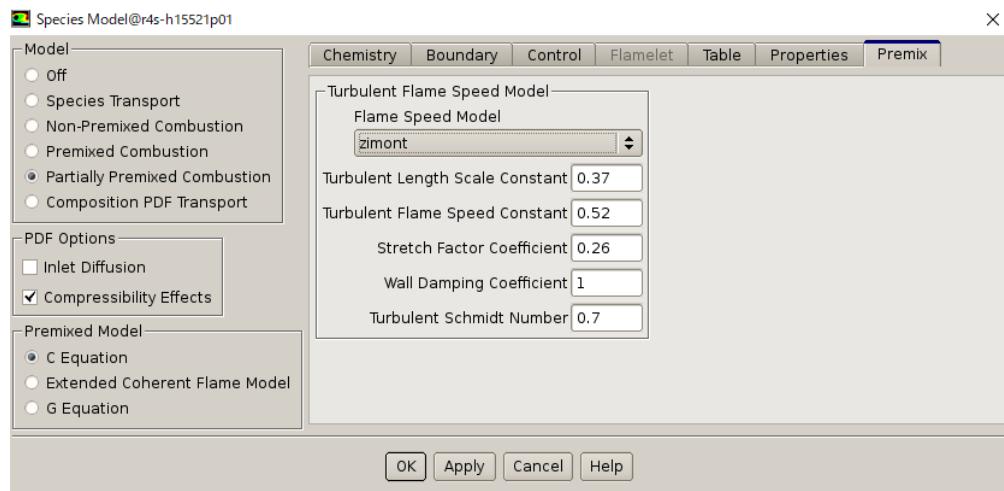


図 3.2.2-13 Flame Speed Model の変更

(3) AMR を考慮する場合

メッシュ数削減のため AMR (Adaptive Mesh Refinement) を有効にしたい場合は以下の設定を行う。なお、cas ファイルだけを読み込んだ状態では AMR の設定はできないため（流速・圧力のデータが必要）、設定前に dat ファイルを読み込んで（または初期化して）おく必要がある。

(a) UDF のコンパイル

3.2.2(1)(a) と同じ。

(b) UDM 及び UDS の設定 (AMR に関しては UDS は不要)

3.2.2(1)(b) と同じ。

(c) Gradient Adaption パネルの設定

Setting Up Domain タブ、Adapt 枠の Mark/Adapt Cells をクリックし、Gradient... を選ぶ。Gradient Adaption パネルが表示されるので、以下のように設定する（図 3.2.2-14）。

- Method : Iso-Value

- Gradients of : UDM30 番

- Refine Threshold : 0.99 (UDM30 が 1.0 以上の領域に AMR を適用される)

- Interval : 1 (各タイムステップで毎回 AMR の処理を行う)

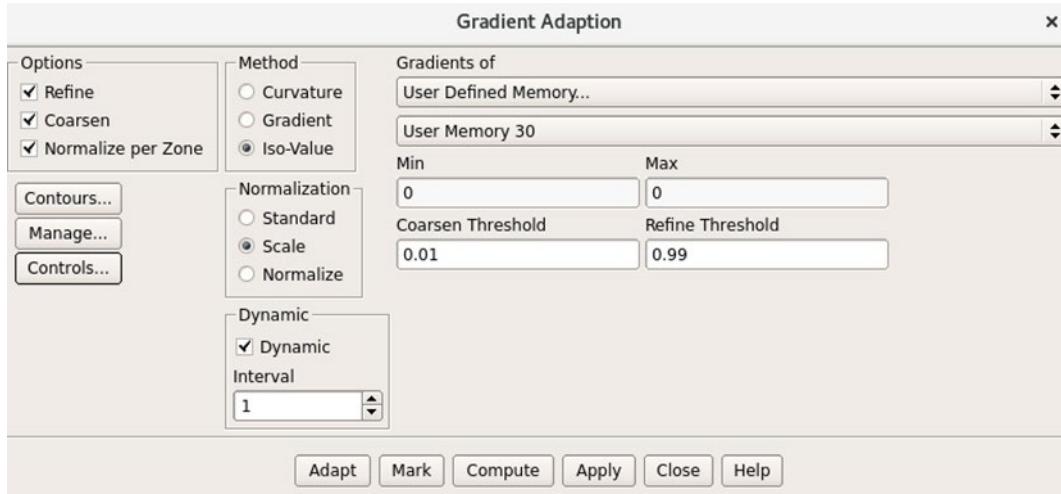


図 3.2.2-14 Gradient Adaption パネル設定

(d) Mesh Adaption Controls パネルの設定

Gradient Adaption パネルの Controls... ボタンを押す。Mesh Adaption Controls パネルが表示されるので、AMR レベルを 2 に設定する（図 3.2.2-15）。設定完了後、OK ボタンを押してパネルを閉じ、Gradient Adaption パネルで Apply ボタンを押してから Close ボタンでパネルを閉じる。

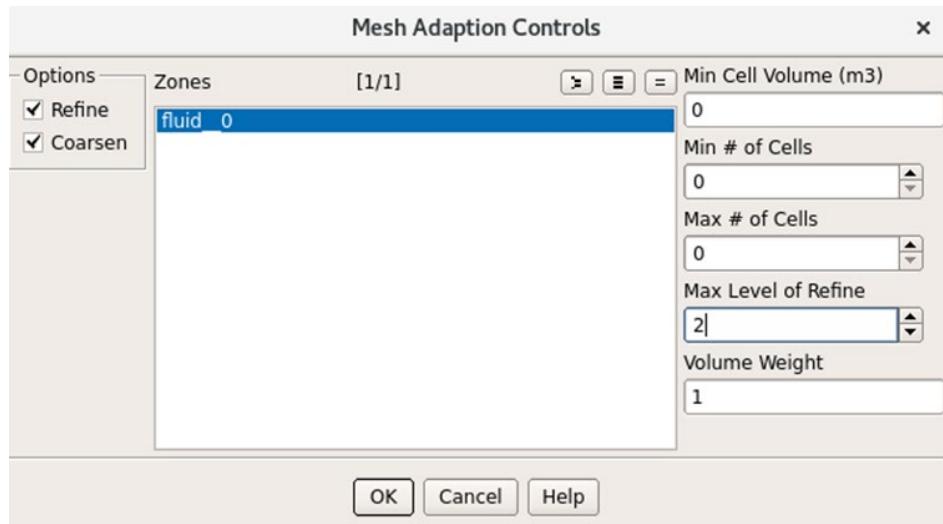


図 3.2.2-15 Mesh Adaption Controls パネル設定

(4) 計算実行方法

計算実行にあたっては、ユーザの計算機環境に基づき実行を行う。予混合燃焼解析では火炎の加速によって生じる流速が速い現象も解析対象となる可能性もあるため、一般的な数値流体解析と同様に、発散するまたは収束性が悪い場合は時間刻みを小さくする、差分スキームの次数を下げる、などの対策を講じて、安定した解析を行う。

3.3 OpenFOAM による移流拡散解析

水素の拡散・混合挙動を解析するため、OpenFOAM (ReactingParcelFilmFoam) コード²⁷⁾ に壁面での水蒸気凝縮モデル、スプレイ水の噴射挙動モデル及び壁面での水蒸気の液膜凝縮モデルの実装を行った。本章では、各モデルの理論説明と導入方法について記載する。

3.3.1 モデル及び解法

(1) 水蒸気の壁面凝縮モデル

壁面における水蒸気の凝縮を OpenFOAM コードで模擬するために、以下に示すモデルの改良を行った。壁面の液膜を解析上の変数として考慮せずに、壁面凝縮をモデル化している。壁面凝縮によるマスフラックス $\dot{m}[\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})]$ については、次式によりモデル化する。²⁰⁾

$$\dot{m} = Sh \frac{\rho D}{y} \ln \left(\frac{P - P_{sat}}{P - P_{H_2O}} \right) : (P_{H_2O} > P_{sat}) \quad (3.3-1)$$

$$\dot{m} = 0 : (P_{H_2O} < P_{sat})$$

ここで、 Sh はシャーワッド数、 D はガスの拡散係数 [m^2/s]、 y は壁面までの距離（壁面から壁面隣接セル中心への距離）[m]、 ρ は雰囲気 (=壁面隣接セル) ガス密度 [kg/m^3]、 P は雰囲気の全圧 [Pa]、 P_{H_2O} は雰囲気中の水蒸気の分圧 [Pa]、 P_{sat} は壁面温度 T_w [K]に対する水蒸気の飽和圧力 [Pa]を意味する。また、壁面の液膜を解析上の変数として考慮しないため、凝集した水はその場で消えていくことになる。分圧 P_{H_2O} は P と水蒸気のモル分率 X_{H_2O} の積で得られるが、ここから式変形をして、

$$P_{H_2O} = P X_{H_2O} = P \cdot \frac{Y_{H_2O}/W_{H_2O}}{\sum_i Y_i/W_i} \quad (3.3-2)$$

で計算する。ここで、 Y は質量分率、 W はモル質量 [kg/kmol]、添字 i はガスを構成する化学種である。一方、 P_{sat} をアントワーンの式により見積もった²⁸⁾。

$$P_{sat} = \exp \left(23.1512 - \frac{3788.02}{T_w - 47.9018} \right) \quad (3.3-3)$$

なお、ガスの拡散係数 D を、

$$D = 4.4784 \times 10^{-6} \cdot \frac{T^{2.334}}{P} \quad (3.3-4)$$

とした²⁰⁾。 Sh 数は、ヌッセルト数 Nu 、プラントル数 Pr 及びシュミット数 Sc から、

$$Sh = Nu \left(\frac{Sc}{Pr} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.3-5)$$

とした。ここで、 Pr 数と Sc 数をそれぞれ次式のように表す。

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k} \quad (3.3-6)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D} \quad (3.3-7)$$

μ は雰囲気ガスの粘性係数[Pa・s]、 C_p は雰囲気ガスの定圧比熱[J/kg]、 k は雰囲気ガスの熱伝導率[W/(m・K)]である。雰囲気ガスにおける定圧比熱 C_p 及び熱伝導率 k については、混合気の質量分率平均により求めた。

$$C_p = \sum_i Y_i C_{p,i} \quad (3.3-8)$$

$$k = \sum_i Y_i k_i \quad (3.3-9)$$

一方、粘性係数については、雰囲気及び凝縮壁面における粘性係数を算術平均した。

$$\mu = \left(\sum_i Y_i \mu_i + \sum_i Y_i \mu_{w,i} \right) / 2 \quad (3.3-10)$$

また、 Nu 数を

$$Nu = 0.13 \times (Gr \cdot Sc)^{\frac{1}{3}} \quad (3.3-11)$$

とした²⁰⁾。 Gr はグラスホフ数であるが、壁面までの距離 y を用いて、

$$Gr = \frac{\rho g |\rho - \rho_w| y^3}{\mu^2} \quad (3.3-12)$$

とした。 g は重力加速度で 9.81[m/s²]、 ρ_w は凝縮壁面のガス密度[kg/m³]である。 ρ_w は凝縮壁面上の飽和状態の水蒸気密度とそれ以外の非凝縮性ガスの密度の和とした。

$$\rho_w = \rho_{w,H_2O} + \rho_{w,NC} \quad (3.3-13)$$

$$\rho_{w,H_2O} = \frac{P_{sat}}{R_u T_w} W_{H_2O} \quad (3.3-14)$$

$$\rho_{w,NC} = P - \frac{P_{sat}}{R_u T_w} W_{NC} \quad (3.3-15)$$

ここで、 R_u は一般気体定数で 8314.34[J/(kmol · K)]であり、添字の NC は水蒸気以外の非凝縮性ガスを意味する。

壁面凝縮に伴うエネルギーflux \dot{h} [J/(m² · s)]については、

$$\dot{h} = \dot{m} \times h_{s,H_2O} \quad (3.3-16)$$

のようにマスflux \dot{m} と水蒸気の顕熱 h_{s,H_2O} [J/kg]の積で与えて、凝縮した水蒸気が持っていた顕熱をガスから取り除いた。凝縮時に放出される潜熱については、すべて液滴に蓄えられるものとするが、凝縮した水は即時体系から取り除かれるため、潜熱は体系内に放出されることはない。

(2) スプレイ水の噴射挙動モデル

スプレイ水の噴射時の周囲ガスとの熱物質バランスを OpenFOAM コードで模擬するために、以下に示すモデルの改良を行った。

スプレイ水と周囲ガス間の物質移動 \dot{m} は次式によりモデル化した²⁹⁾。

$$\dot{m} = \pi D^2 \times k_c \times W_{water} (C_\infty - C_s) \quad (3.3-17)$$

ここで D はスプレイ水を構成する液滴の直径、 W_{water} は水の分子量、 c は蒸気濃度を表す。添字の ∞ は周囲ガス、 s は液滴表面を意味する。したがって、

$$\begin{aligned} C_\infty < C_s &: \text{蒸発} \\ C_\infty > C_s &: \text{凝縮} \end{aligned} \quad (3.3-18)$$

ということになるが、reactingParcelFilmFoam では蒸発のみが考慮されるよう式に制限が付加されていた。そこで、このモデルを利用して、凝縮まで考慮できるように変更を行った。

式(3.3-17)における k_c は物質伝達係数であり、

$$k_c = Sh \times \frac{D_v}{D} \quad (3.3-19)$$

とした。式中の D_v は拡散係数である。式(3.3-19)中の Sh はシャーウッド数で、ここではレイノルズ数 Re とシュミット数 Sc を用いて

$$Sh = 2 + 0.6Re^{1/2}Sc^{1/3} \quad (3.3-20)$$

で計算した³⁰⁾。

スプレイと周囲ガスの間のエネルギー移動 \dot{h} については、

$$\dot{h} = \dot{m} \times \Delta h \quad (3.3-21)$$

のように液相と気相のエンタルピー差 Δh で与えた。

(3) 壁面での液膜凝縮モデル

壁面の液膜と周囲ガスの間の物質移動 \dot{m} [kg/(m²·s)]については、スプレイ水の噴射時の物質移動と同様に、以下のモデル式も使用できるように改良を行った³¹⁾。

$$\dot{m} = S \times h_m \times \rho_{vapor} \left(\frac{Y_\infty - Y_s}{1 - Y_s} \right) \quad (3.3-22)$$

ここで、 S は壁面の表面積、 ρ_{vapor} は液膜上の蒸気密度 [kg/m³]、 Y は質量分率を表す。添字の ∞ は周囲ガス、 s は液膜表面である。したがって、

$$\begin{aligned} Y_\infty < Y_s &: \text{蒸発} \\ Y_\infty > Y_s &: \text{凝縮} \end{aligned} \quad (3.3-23)$$

の関係があるが、OpenFOAM では蒸発しか考慮できないよう制限が付加されていた。

そこで、このモデルを利用して制限を解除し、凝縮まで考慮できるように変更を行うこととした。式(3.3-22)における h_m は物質伝達係数[m/s]であり、壁面の代表長さ L [m]を用いて、

$$h_m = Sh \times \frac{D_v}{L} \quad (3.3-24)$$

とした。式中の D_v は拡散係数[m²/s]である。式(3.3-24)中の Sh はシャーウッド数であり、ここではレイノルズ数 Re とシュミット数 Sc を用いて

$$\begin{aligned} Sh &= 0.664Re^{1/2}Sc^{1/3} & (Re < 5 \times 10^5) \\ Sh &= 0.037Re^{0.8}Sc^{1/3} & (Re \geq 5 \times 10^5) \end{aligned} \quad (3.3-25)$$

で計算した³²⁾。ただし、壁面凝縮においては周囲ガスが静止している場合があり、上記の式では凝縮 = 0 となってしまうため、 $0 \leq Re < 1$ の場合は次の式

$$Sh = 0.664Sc^{1/3} \quad (0 \leq Re < 1) \quad (3.3-26)$$

で計算した。

なお、reactingParcelFilmFoamにおける液膜モデル surfaceFilmModels では、図 3.3.1-1 のように壁面に沿い、ある一定厚さの仮想領域を設定し、そこでの液膜厚さ（×液体密度）の保存式、速度、エネルギーの保存式を解き、結果をソース項として流体セル領域へ反映させる手法を探っている。そして、液膜厚さ及びエネルギーの保存では、相変化、伝熱（周囲ガス ⇌ 液膜：ガス状態から熱伝導係数を計算、液膜 ⇌ 固体壁：固定値）が考慮可能となっている。

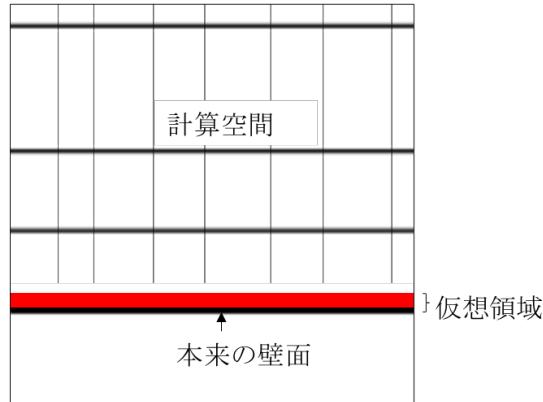


図 3.3.1-1 reactngParcelFilmFoamにおける液膜モデルの考え方

3.3.2 使用方法

移流拡散解析を行う場合は OpenFOAM-2.3.0 を導入する。

(1) 壁面の水蒸気凝縮モデル

計算実施前に、以下の手順で改良コードのコンパイルを行う。オリジナルコードを改良コードに置き換えるディレクトリに移動する。

```
cd $FOAM_SRC/regionModels/surfaceFilmModels/noFilm/
```

改良コードをこのディレクトリに格納する前に、オリジナルコードをリネームする。

```
mv noFilm.H noFilm.H.org
```

```
mv noFilm.C noFilm.C.org
```

改良コードをこのディレクトリにコピーする。

```
cp [改良ソースコードディレクトリ]/noFilm.H ./noFilm.H
```

```
cp [改良ソースコードディレクトリ]/noFilm.C ./noFilm.C
```

2つ上の lagragian ディレクトリに移動し、コンパイルする。

```
./Allwmake
```

(2) スプレイ水の噴射挙動モデル

計算実施前に、以下の手順で改良コードのコンパイルを行う。オリジナルコードを改良コードに置き換えるディレクトリに移動する。

```
cd $FOAM_SRC/lagrangian/intermediate/submodels/Reacting/PhaseChangeModel/
```

```
LiquidEvaporation/
```

改良コードをこのディレクトリに格納する前に、オリジナルコードをリネームする。

```
mv LiquidEvaporation.C LiquidEvaporation.C.org
```

改良コードをこのディレクトリにコピーする。

```
cp [改良ソースコードディレクトリ]/LiquidEvaporation.C ./LiquidEvaporation.C
```

5つ上の lagragian ディレクトリに移動し、コンパイルする。

```
./Allwmake
```

(3) 壁面での液膜凝縮モデル

計算実施前に、以下の手順で改良コードのコンパイルを行う。オリジナルコードを改良コードに置き換えるディレクトリに移動する。

```
cd  
$FOAM_SRC/regionModels/surfaceFilmModels/submodels/thermo/phaseChangeModel/standar  
dPhaseChange
```

改良コードをこのディレクトリに格納する前に、オリジナルコードをリネームする。

```
mv StandardPhaseChange.C StandardPhaseChange.C.org
```

改良コードをこのディレクトリにコピーする。

```
cp [改良ソースコードディレクトリ]/StandardPhaseChange.C ./StandardPhaseChange.C
```

```
cd $FOAM_SRC/src/regionModels/surfaceFilmModels/kinematicSingleLayer
```

改良コードをこのディレクトリに格納する前に、オリジナルコードをリネームする。

```
mv kinematicSingleLayer.C kinematicSingleLayer.C.org
```

```
mv kinematicSingleLayer.H kinematicSingleLayer.H.org
```

改良コードをこのディレクトリにコピーする。

```
cp [改良ソースコードディレクトリ]/kinematicSingleLayer.C ./kinematicSingleLayer.C  
cp [改良ソースコードディレクトリ]/kinematicSingleLayer.H ./kinematicSingleLayer.H
```

2つ上の `regionModels` ディレクトリに移動し、コンパイルする。

```
./Allwmake
```

(4) 改良コードのコンパイル

モデルの改良を行ったのちに、計算実施前に以下の手順でコンパイルを行う。

```
cd [OpenFOAM-2.3.0 のディレクトリ]
```

OpenFOAM-2.3.0 のディレクトリ内に移動し、コンパイルする。

```
./Allwmake
```

その後、`reactingParcelFilmFoam` ソルバによる計算を実行することで、改良モデルを適用することができる。

3.4 OpenFOAM による燃焼解析

水素一空気混合気における爆燃-爆轟遷移 DDT (Deflagration-to-Detonation Transition) を解析する OpenFOAM コード ddtFoam^{26), 33)}をベースに、実機 PWR 格納容器モデルの燃焼 CFD 解析を行うことが可能な解析コードに改修し、DDT 発生限界を評価し、実機シビアアクシデント時の水素挙動統合解析システムへの適用を図った。本章では、具体的な改修内容とともに、解析コードの導入方法と解析手順を記載する。なお、解析コードの改修項目は、以下に示した 3 項目である。

- ① Central upwind の採用
- ② 解適格子 AMR (Adaptive Mesh Refinement) の採用
- ③ 水蒸気含有への対応

また、著者らは、ddtFoam の機能に②、③のみの改修を行った解析コードも作成し、照合試験解析によるコード間検証を行っている³⁴⁾。

3.4.1 モデル及び解法

実機サイズの解析は、下に示すように、ミュンヘン工科大学にて開発された ddtFoam で行われている^{35), 36)}。その際に採用したメッシュサイズは以下の通りであるが、メッシュサイズ拡大により局所流れ構造が欠落し、火炎加速に影響を及ぼしていると考えられる。

- ミュンヘン工科大が実施した実機解析のメッシュサイズ

Konvoi type PWR: 1300-1400MW class

- Volume : 74,800 m³ (直径: 約 56m)
- 解析セル : タイプ; hexahedra、平均セルサイズ; 22cm、セル数; 7,015,188
- 解析環境: parallel ; 1024、解析時間 約 1 日

実機サイズの解析を行うには、ミュンヘン工科大学の解析を参考にメッシュサイズを算定すると、計算コストの観点より、初期のメッシュサイズを 300 万程度に設定する必要があるが、局所流れ構造を維持して現象の再現性も両立することが求められる。そこで、解析の進行とともに必要な領域のメッシュサイズを小さくするとともに、物理量に変化の少ない領域はメッシュサイズを大きくする AMR (Adaptive Mesh Refinement) を適用した。まず、AMR (Adaptive Mesh Refinement) を ddtFoam 適用するため以下に調査を行った。

- > OpenFOAM の AMR: `mesh.update();`
 - refinement region の選定
 - 反応領域：反応進行度 ($0.001 < c < 0.999$)
 - 速度勾配 : $\text{grad}Uc$ ($c < 0.001$)
 - Level により局所のメッシュサイズを制御 (図 3.4.1-1)

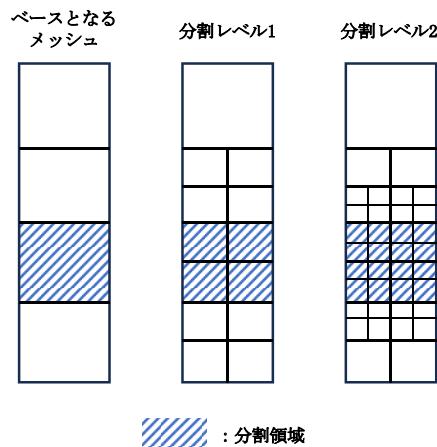
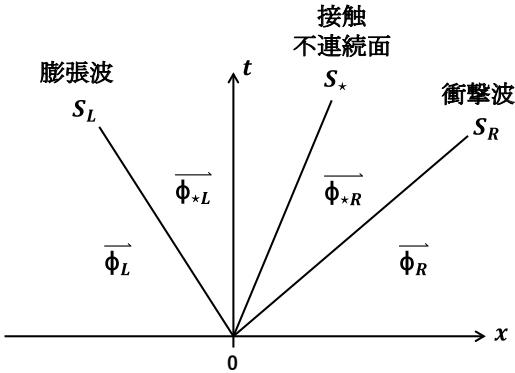
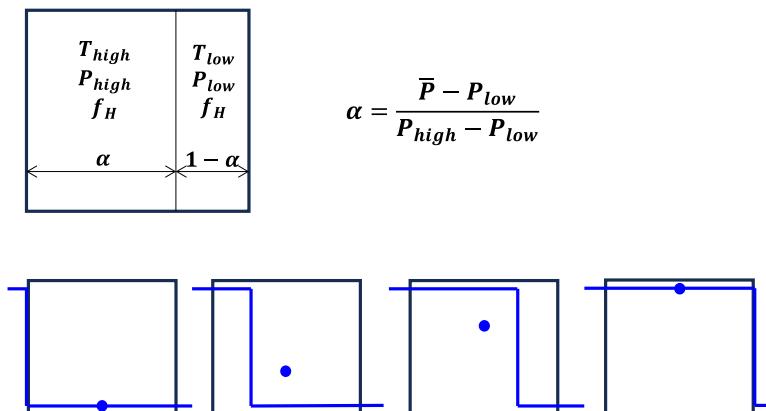


図 3.4.1-1 OpenFOAM における AMR の手順

しかしながら、図 3.4.1-2 に示す Riemann solver (HLLC) 及び reconstructionStage のため default の状態で AMR が適用できないことが明らかとなった。そこで、Riemann solver 及び reconstructionStage を用いない解法が必要となる。



Riemann solver: HLLCスキームの概念図



$$\frac{P_{high}}{P_{low}} = 1 + \frac{2\gamma(Ma^2 - 1)}{\gamma + 1} \quad \tilde{T} = \alpha T_{high} + (1 - \alpha) T_{low}$$

$$\frac{T_{high}}{T_{low}} = \left(1 + \frac{2\gamma(Ma^2 - 1)}{\gamma + 1} \right) \left(1 - \frac{2(1 - Ma^{-2})}{\gamma + 1} \right)$$

reconstructionStageの概念図

図 3.4.1-2 ddtFoam への AMR 適用の課題

また、ddtFoam は、密度ベースのソルバで、衝撃波をより正確に捕獲するための近似 Riemann solver を用いるが、解析初期の流速が低い条件では、近似 Riemann solver が適用できないため、解析初期に圧力ベースのソルバ pddtFoam を用いて、ソルバの切り替えが必要となるという欠点がある。そこで、全流速の範囲で衝撃波を正確に捕獲できる Central-upwind with KNP method³⁷⁾ を用い、さらに、解適合格子 AMR を組み込んだ ddtrhoCDyMFoam に改修した。さらに、SddtrhoCDyMFoam では、水蒸気条件での解析を可能にするため、水蒸気の移流方程式及び水蒸気を含む化学素反応を用いて、層流燃焼速度及び着火遅れのルックアップテーブルの改修を行った。表 3.4.1-1 に、解析コード改修の概要を示す。

表 3.4.1-1 燃焼解析用 OpenFOAM の主な改修の概要

	ddtFoam	ddtrhoCDyMFoam	SddtrhoCDyMFoam
衝撃波捕獲	Riemann solver: HLLC	Riemann solver free: Central-upwind with KNP method	
解適格子 AMR	なし	あり	あり
燃焼モデル	- 反応進行度 c 移流方程式 - 乱流燃焼によるソース項 - 自着火によるソース項 - 火炎伸長項の移流方程式	$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{c}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}D_{eff}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j}\right) + \overline{\omega_{c,def}} + \overline{\omega_{c,ign}}$ $\overline{\omega_{c,def}} = \overline{\rho_u}s_T \nabla \tilde{c} G, s_T = \xi_L$ $\overline{\omega_{c,ign}} = \frac{1-\tilde{c}}{\Delta t} H(\tilde{\tau}-1)$ $\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\tilde{c}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_{eff}\frac{\partial \xi}{\partial x_j}\right) + \rho P_\xi \xi - \rho R_\xi \xi^2$	
化学反応	- 層流燃焼速度 • 実験式（多項式近似） $s_L = s_{L,0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P}{P_0} \right)^\beta$	- 自着火遅れ • Cantera-Python-> Lookup Table	- 層流燃焼速度(含む水蒸気) • Cantera-Python ->Lookup Table
水蒸気	考慮できない		- 自着火遅れ(含む水蒸気) • Cantera-Python ->Lookup Table

(1) 衝撃波捕獲 : Central-upwind with KNP method

図 3.4.1-3 に、HLLC(Riemann)と Central upwind の解析コードの違いの例を示す。

ddtFoam:HLLC

```
volScalarField divrhoHFlux =
fvc::div(Riemann.rhoScalarFlux(fHIndex)); // transported scalar
solve
(
    + divrhoHFlux
    - fvm::laplacian((laminar)*turbulence->muEff())/ScT, fH)
    );
fH.max(0.0);
rhoH = rho*fH;
```

Fluxes

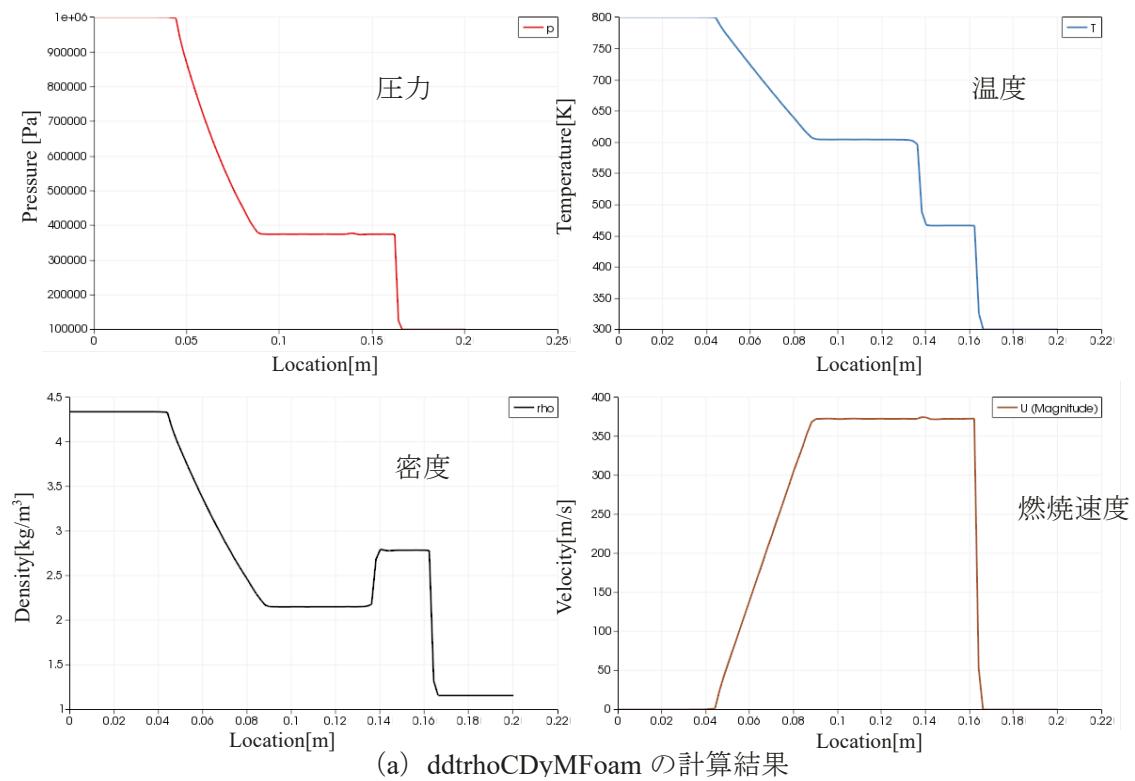
- AUSMplusALEFlux
- AUSMplusUpALEFlux
- hllCALEFlux
- InInclude
- Make
- rusanovALEFlux
- RiemannFluxes.C
- RiemannFluxes.H

ddtrhoCDyMFoam:Central upwind

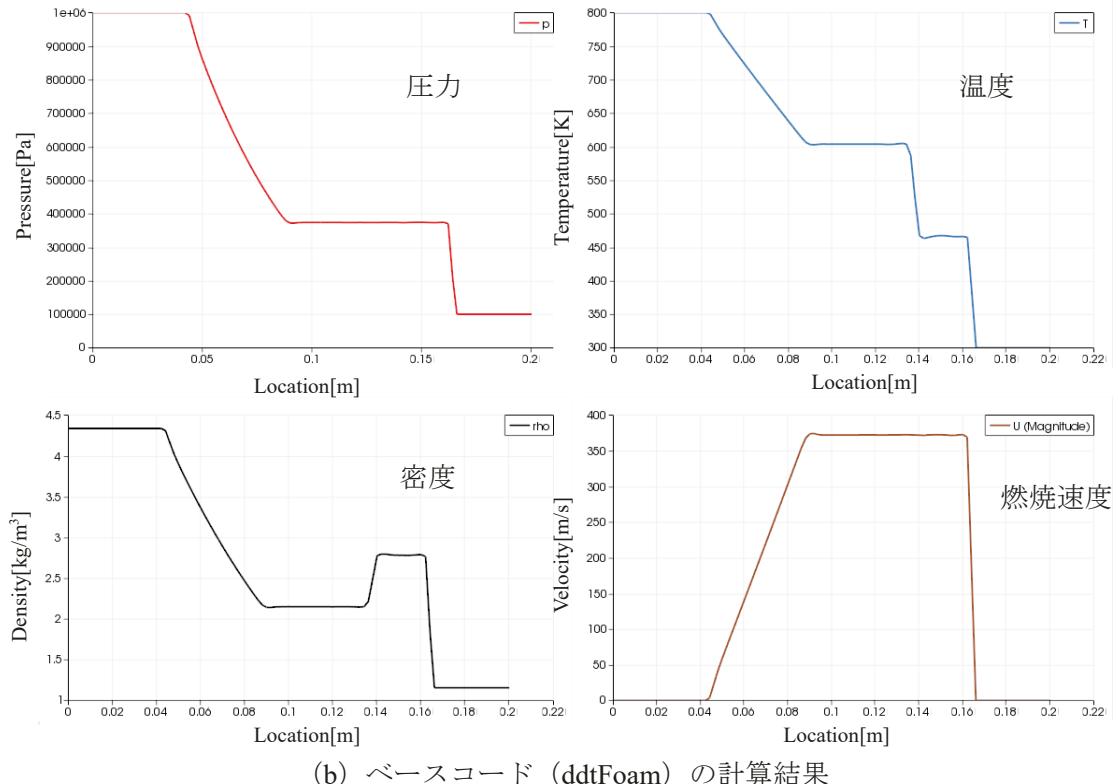
```
// mixture fraction *****
// #include "fEqn.H"
//species equation predictor
solve
(
    fvm::ddt(rhoH)
    + fvc::div(phiH)
);
fH=rhoH/rho;
fH.correctBoundaryConditions();
fH.max(0.0);

rhoH.boundaryField()=rho.boundaryField()*fH.boundaryField();
// Solve the viscous corrector for fH
solve
(
    fvm::ddt(rho,fH)-fvc::ddt(rho,fH)
    + fvm::div(phi,fH)-fvc::div(phi,fH)
    - fvm::laplacian((laminar)*turbulence->muEff())/ScT, fH)
    );
fH.correctBoundaryConditions();
fH.max(0.0);
fH.min(1.0);
rhoH = rho*fH; //store rhoH for predictor equation of the next time step
```

図 3.4.1-3 HLLC(Riemann)と Central upwind の比較



(a) ddtrhoCDyMFoam の計算結果



(b) ベースコード (ddtFoam) の計算結果

図 3.4.1-4 ddtFoam と改修した ddtrhoCDyMFoam を用いた shock tube 計算結果の比較
(圧力、温度、密度、ガス流速 shock tube 軸方向分布)

図 3.4.1-4 に、shock tube の問題について、従来の ddtFoam と ddtrhoCDyMFoam を適用し、比較した結果を示す。rhoCentral up-wind+AMR の適用により、ddtFoam と概ね同等な結果が得られた。

(2) 水蒸気の輸送方程式及び熱物性の追加

図 3.4.1-5 に水蒸気の輸送方程式の組込みを示す。また、図 3.4.1-6 に組み込んだ水蒸気の熱物性を示す。

```
// mixture fraction *****
//      #include "fEqn.H"
      solve
      (
          fvm::ddt(rho,fH)
          + fvc::div(phifH)
          - fvm::laplacian((!inviscid)*turbulence->muEff()/ScT, fH)
      );
      fH.max(0.0);

      rhofH = rho*fH;
*****
//      #include "fEqn.H2O"
      solve
      (
          fvm::ddt(rho,fH2O)
          + fvc::div(phifH2O)
          - fvm::laplacian((!inviscid)*turbulence->muEff()/ScT, fH2O)
      );
      fH2O.max(0.0);

      rhofH2O = rho*fH2O;
```

図 3.4.1-5 水蒸気輸送方程式の組込み

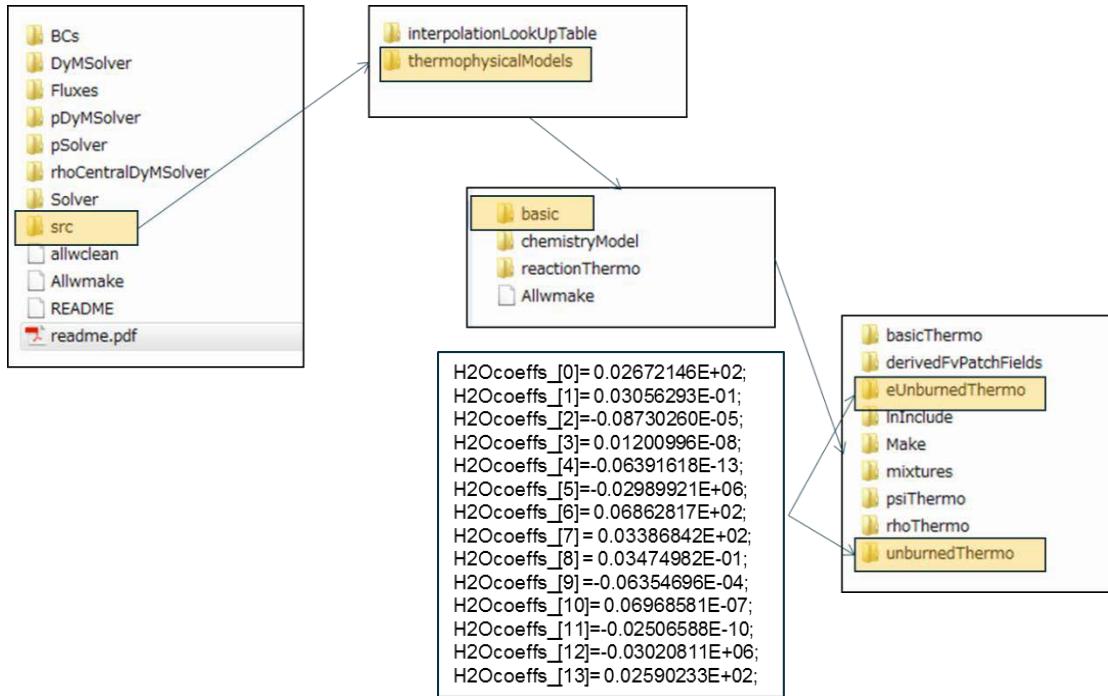


図 3.4.1-6 水蒸気熱物性の組込み

(3) 燃焼特性 Look-up テーブル

層流燃焼速度は、空気中に含まれる水蒸気の含有量を約 50%程度まで考慮する必要があるため、図 3.4.1-7 に示す実験結果をベースに以下の手順で Look-up テーブルを作成する。

- Step-1

水素濃度 (=H₂/H₂+air) の広範囲の層流燃焼速度の実験による計測は非常に技術的に難しい。そのため、図 3.4.1-7 に示すように実験結果^{38, 39, 40, 41}は限られた水素濃度範囲のデータしかないので、これを用いてテーブル作成することはできない。そこで、各種の素反応データを用いた燃焼速度解析を行い、実験結果に最もフィットする解析結果をベースに、広範囲の層流燃焼速度を予測した結果を用いて Look-up テーブルを作成する。

- Step-2

層流燃焼速度の解析のツールとしては、Cantera-Python-2.3.0¹⁶⁾を用いた。

5 種類の素反応式を用いて解析した結果を図 3.4.1-7 に示す。各素反応式による最大燃焼速度の予測値と実験値の誤差は以下の通りである。

- ⓐ O'Conaire (ddtFoam に適用されている)³⁸⁾
- ドライ (水蒸気 0%) ~水蒸気 22vol%条件で、実験値に比べ-6%~-22%
- ⓑ Li³⁹⁾
- ドライ条件で約-6%
- ⓒ Burke⁴⁰⁾
- ドライ~水蒸気 12vol%条件で、-10%
- ⓓ USC_H₂-O₂⁴¹⁾
- ドライ~水蒸気 50vol%条件で、約 5%~-38%
- ⓔ USC_H₂-O₂_r12_r19⁴¹⁾
- ドライ~水蒸気 43vol%条件で、約 5%~0%

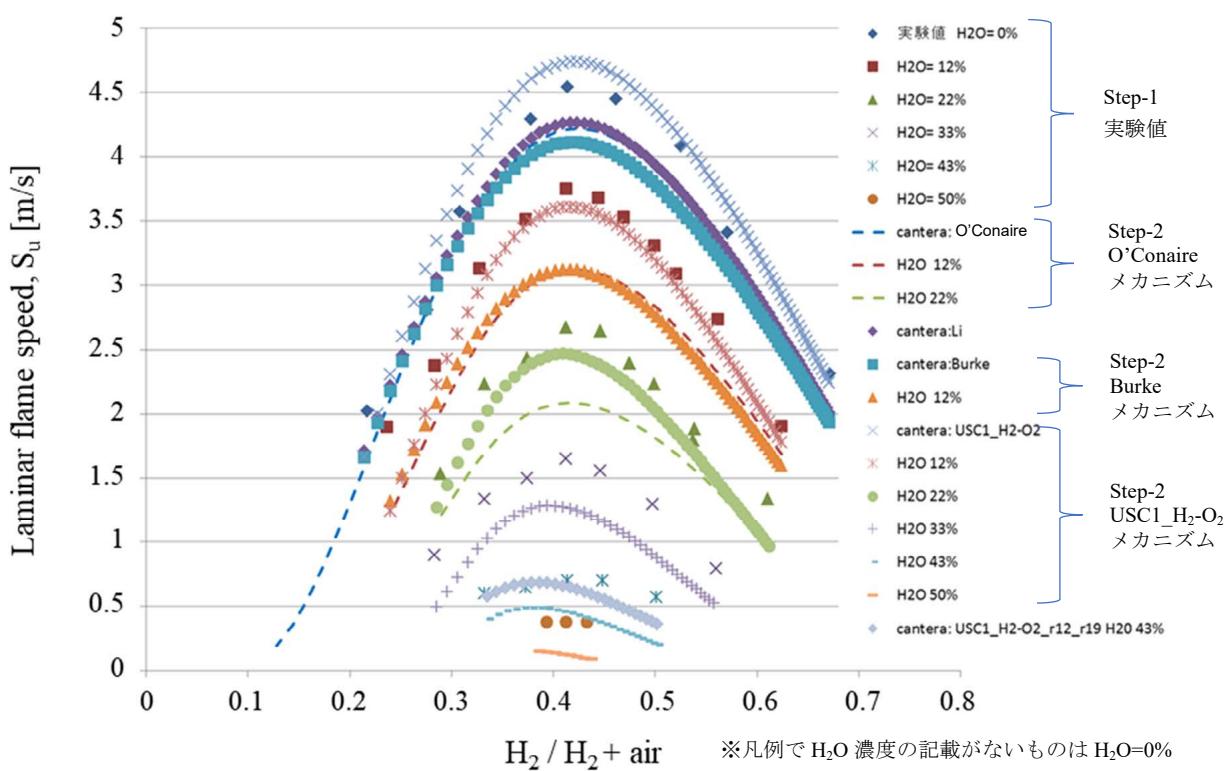


図 3.4.1-7 層流燃焼速度：実験、解析結果

以上のように、②の素反応式が水蒸気 43vol%の条件で他の素反応式に比べ、最も実験結果とよく一致したため、これを用いて層流燃焼速度の解析を行った。図 3.4.1-8 に、②の素反応を用いて、水蒸気条件での層流燃焼速度を解析した結果を示す。ドライ条件から水蒸気 50vol%の範囲で解析値と実験値はよく一致している。

また、図中の×で示す点は、表 3.4.1-2 に示した Look-up テーブルの各パラメータに対応した層流燃焼速度を示す。解析結果を用いることにより、実験結果のない領域での層流燃焼速度を精度よく与えることが可能となった。

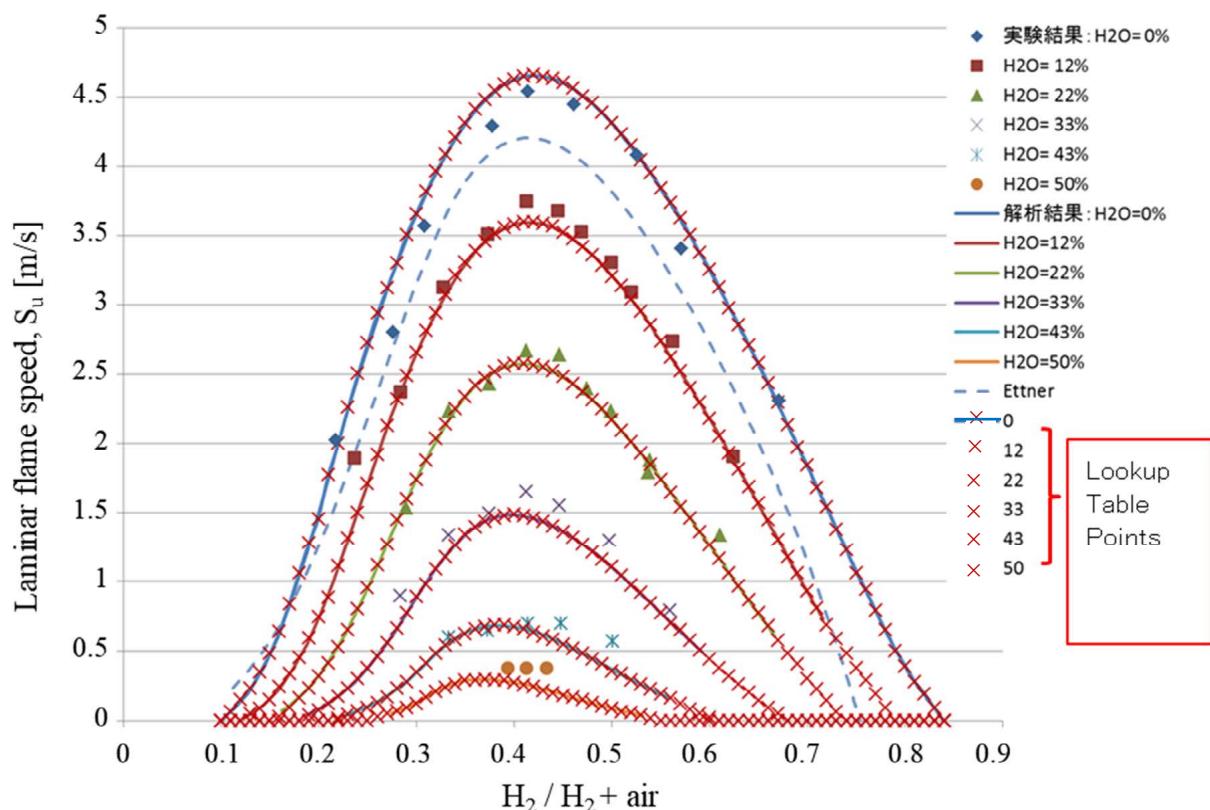


図 3.4.1-8 層流燃焼速度解析結果

表 3.4.1-2 層流燃焼速度 Look-up テーブルパラメータ

```

nSTpoints = 6
nyH2=75
AH2O = [0.0 , 0.12, 0.22, 0.33, 0.43, 0.5]
xH2 =[ 0.1, 0.11, 0.12, 0.13, 0.14, 0.15, 0.16, 0.17, 0.18, 0.19, 0.2,
0.21, 0.22, 0.23, 0.24, 0.25, 0.26, 0.27, 0.28, 0.29, 0.30, 0.31, 0.32, 0.33,
0.34, 0.35, 0.36, 0.37, 0.38, 0.39, 0.40, 0.41, 0.42, 0.43, 0.44, 0.45, 0.46,
0.47, 0.48, 0.49, 0.50, 0.51, 0.52, 0.53, 0.54, 0.55, 0.56, 0.57, 0.58, 0.59,
0.60, 0.61, 0.62, 0.63, 0.64, 0.65, 0.66, 0.67, 0.68, 0.69, 0.70, 0.71, 0.72, 0.73,
0.74, 0.75 ]

```

自着火遅れの Look-up テーブルは、上記の②の素反応式を用いた一次元の反応計算を Cantera-Python-2.3.0 で行い、表 3.4.1-3 に示す Look-up テーブルパラメータに基づいて作成した。ここで、各パラメータは、以下の通りである。

- ・空気中の水蒸气体積割合 : $AH_2O = H_2O/(H_2O+air)$
- ・空気中の水素体積割合 : $xH_2 = H_2/(H_2+air)$
- ・雰囲気条件 : 圧力 ; $p[\text{Pa}]$ 、 温度 ; $T [\text{K}]$

自着火遅れ t_{ign} の解析例を図 3.4.1-9 に示す。ここで、 $T=800\text{K}$ 以下では、自着火は起こらないため、テーブルでは、 $t_{\text{ign}}=10\text{sec}$ を入力している。そのため、解析時間の最大は、現状では、10sec となっている。

表 3.4.1-3 自着火遅れ Look-up テーブルパラメータ

```

nSTpoints = 6
mTpoints = 61
kPpoints = 12
ifHpoints = 8
AH2O = [0.0 , 0.12, 0.22, 0.33, 0.43, 0.5]
T = [800,820,840,860,880,900,920,940,960,980,1000,1020,1040,1060,1080,1100,
1120,1140,1160,1180,1200,1220,1240,1260,1280,1300,1320,1340,1360,1380,1400,
1420,1440,1460,1480,1500,1520,1540,1560,1580,1600,1620,1640,1660,1680,1700,
1720,1740,1760,1780,1800,1820,1840,1860,1880,1900,1920,1940,1960,1980,2000]
P = [ 1.0e4, 9.0e4, 1.1e5, 2e5, 5.0e5, 1.0e6, 2.0e6, 3.0e6, 5.0e6, 6.0e6,
7.5e6, 1.0e7 ]
fH =[0.00071,0.003661,0.00771,0.01717,0.02908,0.04451,0.06531,0.09487]

```

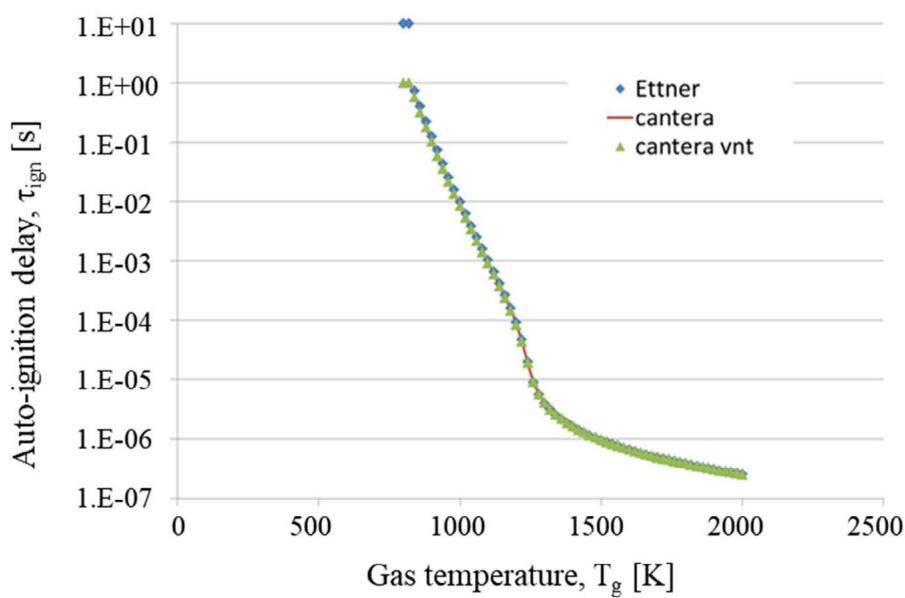


図 3.4.1-9 自着火遅れの解析例

燃焼ガスの組成は、ほぼ平衡組成となっており素反応式の影響が小さいため、ddtFoam と同様に前述の④ O'Conaire の素反応式³⁸⁾を用いて、定圧条件での化学平衡計算を Cantera-Python で行い、表 3.4.1-4 に示す燃焼ガス Look-up テーブルパラメータについてテーブルを作成した。

各セルの燃焼ガス組成は、以下の式で算出する。

$$Y_i = (1 - c) * Y_{i,u} + c * Y_{i,b} \quad (3.4-1)$$

ここで、 Y_i : 化各種 i の組成割合

c : 反応進行度

$Y_{i,u}$: 未燃混合気の化学種 i の組成割合

$Y_{i,b}$: 燃焼ガスの化学種 i の組成割合

表 3.4.1-4 燃焼ガス組成 Look-up テーブルパラメータ

```

nSTpoints = 6
mTpoints = 68
kPpoints = 14
ifHpoints = 46
AH2O = [0.0 , 0.12, 0.22, 0.33, 0.43, 0.5]
T = [ 250.0, 270.0, 290, 310, 330, 350, 370, 390, 410, 430, 450, 470, 490,
      510, 530, 550, 570, 590, 610, 630, 650, 670, 690, 710, 730, 750, 770, 790,
      810, 830, 850, 870, 890, 910, 930, 950, 970, 990, 1010, 1030, 1050,
      1070, 1090, 1110, 1130, 1150, 1170, 1190, 1210, 1230, 1250, 1270,
      1290, 1310, 1330, 1350, 1370, 1390, 1410, 1430, 1450, 1470, 1490,
      1510, 1530, 1550, 1570, 1590 ]
P = [ 1.0e4, 9.0e4, 1.1e5, 2e5, 5.0e5, 1.0e6, 2.0e6, 3.0e6, 4.0e6, 6.0e6,
      8.0e6, 1.0e7, 1.25e7, 1.5e7 ]
fH=[ 0.0004, 0.00071, 0.00142, 0.00216, 0.0029, 0.00366, 0.00444, 0.00523,
      0.00604, 0.00686, 0.0077, 0.00856, 0.00944, 0.01033, 0.01125, 0.01218,
      0.01313, 0.01411, 0.01511, 0.01613, 0.01717, 0.01824, 0.01933, 0.02044,
      0.02159, 0.02276, 0.02396, 0.02519, 0.02645, 0.02775, 0.02908, 0.03183,
      0.03747, 0.03782, 0.04107, 0.04451, 0.04816, 0.05204, 0.05618, 0.06059,
      0.06531, 0.07037, 0.07581, 0.08167, 0.088, 0.09487 ]

```

(4) 解析スキームの変更

解析スキームは、反応進行度 c 及び無次元自着火変数 τ の発散スキーム (divScheme) を図 3.4.1-10 に示すように、二次精度中心差分から乱流モデルの変数 k 及び ω と同じ一次精度風上差分に変更し、補間精度を統一した。無次元自着火変数 τ は、火炎面前方の衝撃波背

後の高温高圧領域での自着火発生の指標であり、以下の通り定義する。

$$\tau = t / t_{ign} \quad (3.4-2)$$

ここで、 t : 解析セル内滞留時間

t_{ign} : 解析セル自着火遅れ時間

$\tau = 1$: 自着火発生

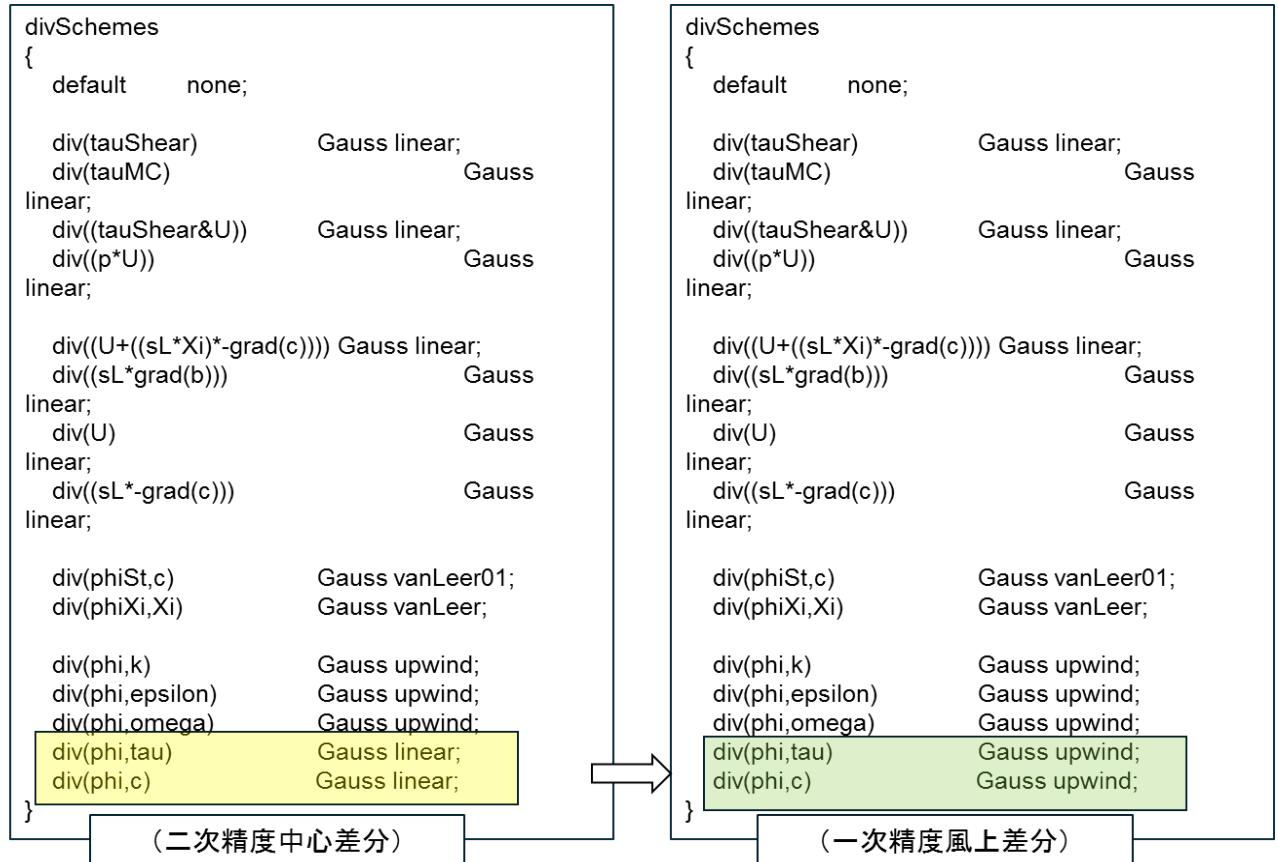


図 3.4.1-10 解析スキームの変更

3.4.2 使用方法

OpenFOAM による燃焼解析に関し、導入した SddtrhoCDyMFoam の起動手順を以下に記載する。

- (1) OpenFOAM ver 2.1.1 をインストール
- (2) name-2.1.1 フォルダーを作成
- (3) ddtfoam_steam.tgz を name-2.1.1 に置き、解凍
- (4) 解凍したフォルダードットfoam_steam 内の SrhoCDyMSolver を開く。
- (5) wmake を行い、'SddtrhoCDyMFoam'を作る。
- (6) 確認は、'SddtrhoCDyMFoam -help'で行う。
- (7) サンプルデータ sample01.tgz を用いて、以下の手順で作動を確認
 - ① sample01.tgz を解凍、フォルダーを開く。
 - ② cp -r initialvalues 0.000000000
 - ③ setFields
 - ④ decomposePar
 - ⑤ mpirun -np 10 SddtrhoCDyMFoam -parallel
 - ⑥ 解析終了
 - ⑦ chmod 777 reconstructAMR
 - ⑧ ./reconstructAMR
 - ⑨ foamToVTK
 - ⑩ paraview にて可視化

3.5 拡散解析から燃焼解析の引き継ぎ (FLUENT→OpenFOAM)

FLUENT で拡散・混合解析を行い、その結果を OpenFOAM で引き継いで燃焼解析を実施するために、流体領域におけるセル値を抽出するツールを作成した。本章では、ツールとその使用方法について説明する。

3.5.1 インターフェースツールの仕様

FLUENT の DAT ファイル (ASCII 形式) から流体領域の物理量 (セル値) を抽出するために Fortran90 のコード (fluentDataToOF.f90) を用いる。

3.5.2 使用方法

ここでは、fluentDataToOF.f90 の使用方法と FLUENT のデータを OpenFOAM で読み込む方法に関して説明する。手順は大きく分けて 2 つである。まず、1 つ目は FLUENT で使用したメッシュを OpenFOAM 用に変換することであり、もう 1 つは FLUENT の DAT ファイル (ASCII 形式) から流体領域の物理量 (セル値) を抽出し、OpenFOAM の初期値に反映することである。以下に手順を説明する。

(1) メッシュの変換方法

まず、FLUENT で使用したメッシュを OpenFOAM 用に変換する方法について述べる。FLUENT のデータを OpenFOAM で読み込むためには、FLUENT の解析で用いたメッシュを OpenFOAM 用に変換する必要がある。これは OpenFOAM 内でメッシュとデータの定義順序を対応させるために必要な操作である。以下に具体的な操作方法を示す。

- ① FLUENT を Meshing mode で起動し、CAS ファイル (*.cas) からメッシュファイル (*.msh) を ASCII 形式で保存する。
- ② ①で作成したメッシュファイルの中で以下に示すような行がある場合は削除する。
(削除理由は OpenFOAM でのエラー回避のためである。)


```
(1 "ANSYS(R) TGrid(TM) 3D, serial 17.1.0") ←1 行目
(0 "Cortex variables:") ←この行含むこれ以降の行をすべて削除
```
- ③ OpenFOAM のケースディレクトリにメッシュファイルを準備し、以下のコマンドを実行
`fluent3DMeshToFoam [メッシュファイル名]`

上述の操作により、constant/polyMesh ディレクトリ内に OpenFOAM 用に変換されたメッシュファイルが作成される。

(2) データの抽出方法

次に、FLUENT のデータから流体領域の物理量（セル値）を抽出する fluentDataToOF.f90 の利用方法について述べる。ツールを使用する前に以下に示す準備を行う。

- ① ANSYS FLUENT の DAT ファイルを ASCII 形式で作成する。なお、本ツールは GZIP 圧縮に対応していないので、圧縮しない状態(*.dat)で保存する。
- ② メッシュファイルと DAT ファイルにおけるセル定義順序が対応していることを確認する。Reorder 等の処理によってセル定義順序が変更されると、DAT ファイルとの整合がとれない。
- ③ Operating Pressure のデフォルト値は 101325 である。値を変更する場合は、以下に示すコードの初めて定義されている p_operating の値を変更する。
- ④ 混相流計算において、出力する速度場は PhaseID で変更できる。図 3.5.2-1 の赤枠で示す ID を参考に出力したい速度場の相の ID を設定する。ここで、1 を設定すると mixture の速度場が出力される。
- ⑤ 読み込む DAT ファイル名のデフォルト名は“results.dat”である。名前を変更する場合は以下に示すコードの初めて定義されている fileName の名前を変更する。
- ⑥ 出力する桁数を変更する場合は、以下に示すコードの初めて定義されている fmt_* の値を変更する。

● fluentDataToOF.f90
<pre> ● module tools ● implicit none ● real(8), parameter :: p_operating = 101325.d0 ! [Pa] ←(3) Operating Pressure ● character(LEN=4) :: phaseID = "1" ←phaseID ● character(LEN=64) :: fileName = "results.dat" ←FLUENT の DAT ファイル名 を設定 ● character(LEN=32) :: fmt_p = "(F12.5)" ←出力桁数を設定(以降も 同様) ● character(LEN=32) :: fmt_T = "(F12.7)" ● character(LEN=32) :: fmt_k = "(F12.7)" ● character(LEN=32) :: fmt_e = "(F12.5)" ● character(LEN=32) :: fmt_o = "(F12.5)" ● character(LEN=32) :: fmt_U = "(3F15.9,A)" ● character(LEN=32) :: fmt_Y = "(F12.7)" 以下略 ● </pre>

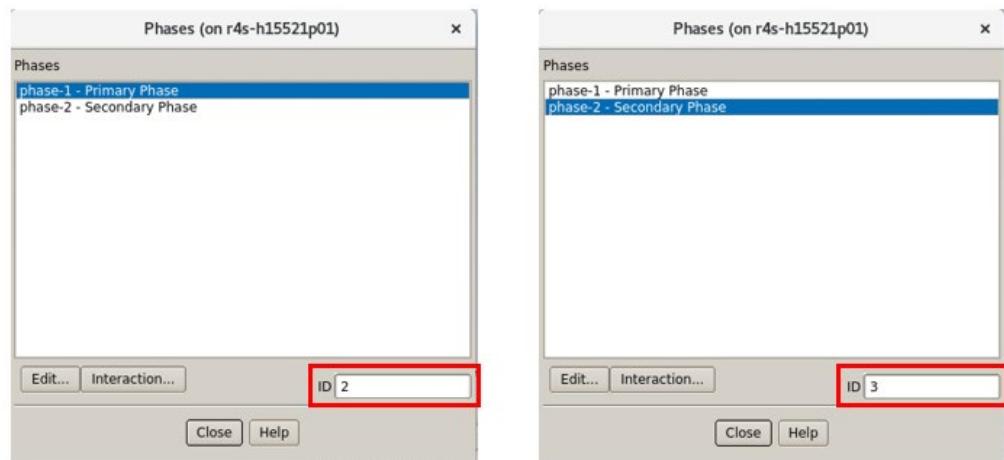


図 3.5.2-1 FLUENT の混相流計算における Phase ごとの ID の見方

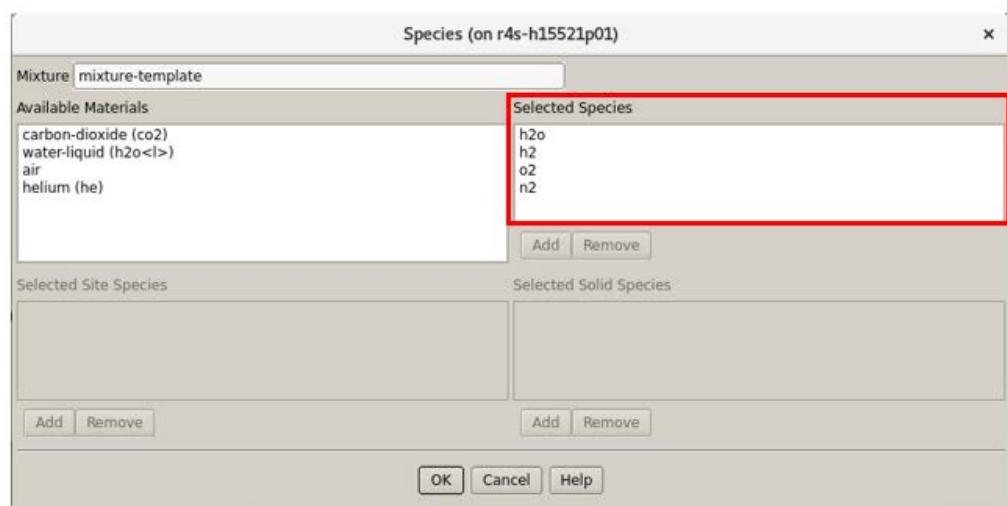


図 3.5.2-2 FLUENT における化学種の定義順序

準備ができたら、`fluentDataToOF.f90` をコンパイルし、実行ファイルを作成する。DAT ファイルを実行ファイルと同じディレクトリに準備して、実行ファイルを実行すると、以下のファイルが作成される。

- internalField_p 壓力
- internalField_T 温度
- internalField_k 乱流運動エネルギー
- internalField_epsilon 乱流エネルギー散逸
- internalField_omega 乱流エネルギー比散逸率
- internalField_U 速度
- internalField_YMi 化学種の質量分率 (i は 1 から化学種の数)

ここで、*epsilon* と *omega* は FLUENT の計算で使用した乱流モデルに応じてどちらかが出力される。また化学種の質量分率は図 3.5.2-2 の赤枠で示すように FLUENT の Setup→Models→Species で設定された化学種の順番に従って出力される。

各変数が正しく出力されたことを確認し、例えば“include”という名前のフォルダーを作成して出力結果をすべて格納し、0 ディレクトリ内に移動させる。その後、OpenFOAM のファイルインクルード機能を使用し、出力ファイルを取り込む。以下に圧力の設定例（図 3.5.2-3）を示す。

図 3.5.2-3 圧力の設定例

3.6 燃焼解析から構造強度解析の引き継ぎ（OpenFOAM→AUTODYN）

OpenFOAM（燃焼系）と AUTODYN のコード間インターフェースの作成を実施した。本章では、概要と使用手順を記載する。

3.6.1 インターフェースツールの仕様

インターフェース概要と主な流れを図 3.6.1-1 に示す。

- ・OpenFOAM を使用して構造物内の水素一空気混合ガスの燃焼解析を実施する。
- ・計算で得られた各時刻の圧力データをファイル出力する。
- ・AUTODYN に組み込んだインターフェースを使用して、各時刻の圧力データを読み込み、構造物の応答解析を実施する。ここで、AUTODYN のバージョンは 17.2 を使用した。

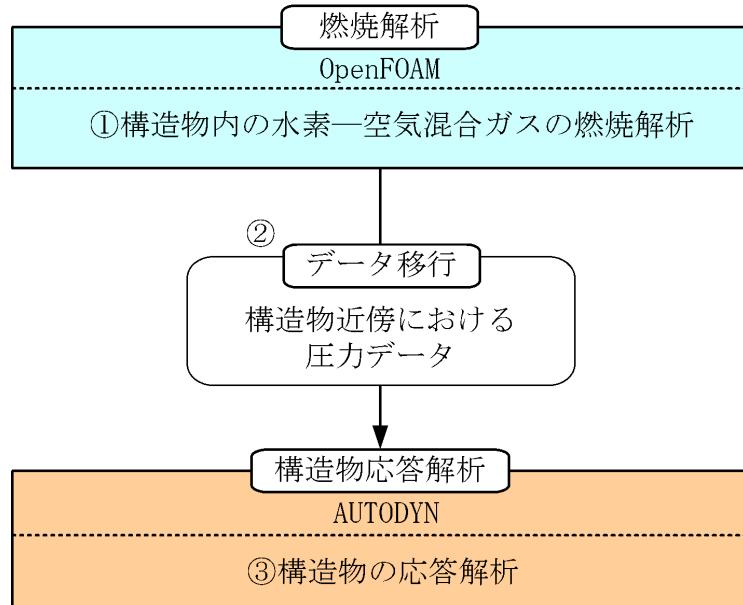


図 3.6.1-1 インターフェース概要

3.6.2 インターフェース使用方法及び手順

(1) 入力ファイル一覧

本インターフェースで使用する入力ファイルを表 3.6.2-1 に示す。

表 3.6.2-1 入力ファイルリスト

No.	ファイルの内容	ファイル名の例	備考
1	OpenFOAM の 圧力データ	「t=0.csv」～「t=300.csv」 (任意)	図 3.6.2-1 参照 CSV 形式とする。1 ファイルに 1 つの 時刻における圧力データが出力され ていること。0ms～300ms まで 1ms ご とに出力した場合、ファイル数は 301 個となる。
2	時刻－圧力情報 ファイル	「OpenFOAM_file_list.csv」 (任意)	図 3.6.2-2 参照。 OpenFOAM の圧力データと時間の関 係を CSV 形式で記載する。
3	インターフェー ス条件ファイル	「pwr_rv_opf_3a_cond.txt」 ([Ident]_cond.txt とする)	図 3.6.2-3 及び表 3.6.2-2 参照。 インターフェースにおける各種条件 を記載する。 ファイル名の下線部は AUTODYN デ ータの Ident と一致させること。

(2) 入力ファイルの設定

OpenFOAM の圧力データを任意のフォルダーに保存する。OpenFOAM の圧力データの内
容を図 3.6.2-1 に示す。保存するフォルダ名（途中の階層も含む）には日本語（全角文字）
が含まれないようにする。ここでは例として以下のファイル階層に保存するものとする。

「C:¥AUTODYN¥v170¥OpenFOAM_data」

時刻－圧力情報ファイルを作成し、(1)と同一のフォルダーに保存する。時刻－圧力情報
ファイルの内容を図 3.6.2-2 に示す。ここでは例としてファイル名を「OpenFOAM_file_list.csv」
とする。

インターフェース条件ファイルを作成する。インターフェース条件ファイルの内容を図
3.6.2-3 及び表 3.6.2-2 に示す。ファイル名は AUTODYN データの Ident を先頭として
「[Ident]_cond.txt」とし、キーワードと値を記載する。特に以下の 2 つのキーワードについ

ては手順（1）（2）に基づいて設定する。

OPFFLD 手順（1）のフォルダー階層を記載する。

OPFLST 手順（2）で作成したファイル名を記載する。

インターフェース条件ファイルを AUTODYN 作業フォルダー（AUTODYN データファイルを保存するフォルダー）に保存する。

※ MCLMNP=1 MCLMNX=3 MCLMNY=4 MXCLMN=5
 壓力 X 座標 Y 座標 Z 座標
 データ列 データ列 データ列
 (Pa) (meter) (meter) (meter)

p	T	Points:0	Points:1	Points:2
101325	300	6.2797	-9.61579	1.24351
101325	300	6.2797	-9.61579	1.03359
101325	300	6.2797	-9.41955	1.03359
101325	300	6.2797	-9.41955	1.24351
101325	300	6.2797	-9.61579	1.66336
101325	300	6.2797	-9.61579	1.45344
101325	300	6.2797	-9.41955	1.45344
101325	300	6.2797	-9.41955	1.66336
101325	300	6.2797	-9.61579	2.08321
101325	300	6.2797	-9.61579	1.87328
101325	300	6.2797	-9.41955	1.87328
101325	300	6.2797	-9.41955	2.08321
101325	300	6.2797	-9.61579	2.50305
101325	300	6.2797	-9.61579	2.29313

データ点数
分の行

図 3.6.2-1 OpenFOAM の圧力データファイルの例 (Excel で表示)
 (ファイル名の例 : t=40.csv)

◆OpenFOAM の圧力データファイルの仕様

CSV 形式とする。

ファイル名は任意でよい（図3.6.2-2の「時刻-圧力情報ファイル」内に記載する）。

1行目はヘッダー行とする。データ読み込み時は無視される。

1 ファイルに 1 つの時刻における全圧力データ点での圧力（絶対圧、単位：Pa）、座標（XYZ の値、単位：meter）を記載する。

図 3.6.2-3 の「インターフェース条件ファイル」において圧力の列番号、座標の列番号、データ列の総数を指定する（上図の※）。したがって、圧力、位置以外のデータ列が存在してもよく、これらの列はデータ読み込み時には無視される。

Time (ms)	File name
0	t=0.csv
1	t=1.csv
2	t=2.csv
3	t=3.csv
4	t=4.csv
5	t=5.csv
6	t=6.csv
7	t=7.csv
8	t=8.csv
9	t=9.csv
10	t=10.csv
11	t=11.csv
12	t=12.csv
13	t=13.csv
14	t=14.csv
15	t=15.csv

図 3.6.2-2 時刻一圧力情報ファイル (Excel で表示)

(ファイル名の例：「OpenFOAM_file_list.csv」)

◆時刻一圧力情報ファイルの仕様

- CSV 形式とする。
- ファイル名は任意でよい (インターフェース条件ファイル内に記載する)。
- 出力した時刻と OpenFOAM の圧力データファイル名をすべて記載する。
- 時刻の単位はAUTODYN データで定義した時刻の単位に合わせる (ここで ms とする)。

```

OPFFLD
C:\AUTODYN\v170\OpenFOAM_data
OPFLST
OpenFOAM_file_list.csv
MXCLMN
5
NCLMNP
1
NCLMNX ←(キーワード行)
3      ←(上のキーワード行に対応する入力値)
NCLMNY
4
NCLMNZ
5
      ←(空行は無視される)
IPMODE
1
DSTSRT
500.

NXSDN
40
NYSDN
40
NZSDN
75

INFOUT
0

END ←(「END」で読み込み終了)

```

図 3.6.2-3 インターフェース条件ファイル
(ファイル名の例：「pwr_rv_opf_1a_cond.txt」)

◆インターフェース条件ファイルの仕様

- テキストファイル形式とする。
- ファイル名は「[Ident]_cond.txt」とする。Ident は AUTODYN データと同一とする。
- キーワードとそれに対応する文字列または値をそれぞれ 1 行に記載する。キーワードの意味を表 3.6.2-2 に示す。必須項目を記載しないとエラーで読み込みが停止する。
- 空行は無視される。ファイルの最後に「END」を記載する。

表 3.6.2-2 キーワードの種類

キーワード	内容	必須
OPFFLD	OpenFOAM の圧力データファイルと時刻一圧力情報ファイルを格納したフォルダー階層。	○
OPFLST	時刻一圧力情報ファイルの csv ファイル名。	○
MXCLMN	圧力データファイルの最大データ列数。図 3.6.2-1 の場合は圧力 ×1 列、温度×1 列、座標×3 列で最大 5 列となる。	○
NCLMNP	圧力データファイル中の圧力データの列番号。図 3.6.2-1 の場合、圧力データ列は 1 行目となる。	○
NCLMNX NCLMNY NCLMNZ	圧力データファイル中の X、Y、Z 座標データの列番号。図 3.6.2-1 の場合、X 座標データは 3 行目、Y 座標データは 4 行目、Z 座標データは 5 行目となる。	○
MAXROW	圧力データファイルの最大データ行数。指定しない場合はデフォルト値の 1000 万行となる。	—
NXSDN NYSDN NZSDN	サブドメインの X、Y、Z 方向分割数（図 3.6.2-4 参照）。シェル要素近傍の圧力データ点を効率良く検索するためのサブドメイン（分割領域）を作成する。目安はサブドメイン幅がシェル要素の要素サイズの 1~10 倍程度になるように分割する。	○
DSTSRT	圧力データ点検索のためのシェル要素からの有効距離（図 3.6.2-5、図 3.6.2-6）。距離の単位は AUTODYN データで定義した長さの単位に合わせる（本報告書では mm とする）。対象となるシェル要素から圧力データ点までの距離がこの有効距離内に存在する場合、圧力データ点は負荷圧力算出方法の対象となる。目安はシェル要素の要素サイズの半分程度とする。	○
IPMODE	シェル負荷圧力算出方法 =1 : シェル表面近傍の最大圧を設定（図 3.6.2-5） =2 : シェル表面近傍の圧力データの簡易平均値を設定（図 3.6.2-5 及び図 3.6.2-7） =3 : シェル中心に最も近い圧力を設定（図 3.6.2-6）	○
INFOUT	INFOUT=1 に設定すると、サブドメイン、シェル要素近傍のデータ点数などがログファイル（[Ident]_log.txt）に出力される。これを参考にして有効距離（DSTSRT）やサブドメインの分割数（NXSDN）を調整する。出力するとログファイルのサイズが非常に大きくなるため注意する。本キーワードを記載しない、または、INFOUT=0 とすると、ログファイルに上記の追加情報は出力されない。	—

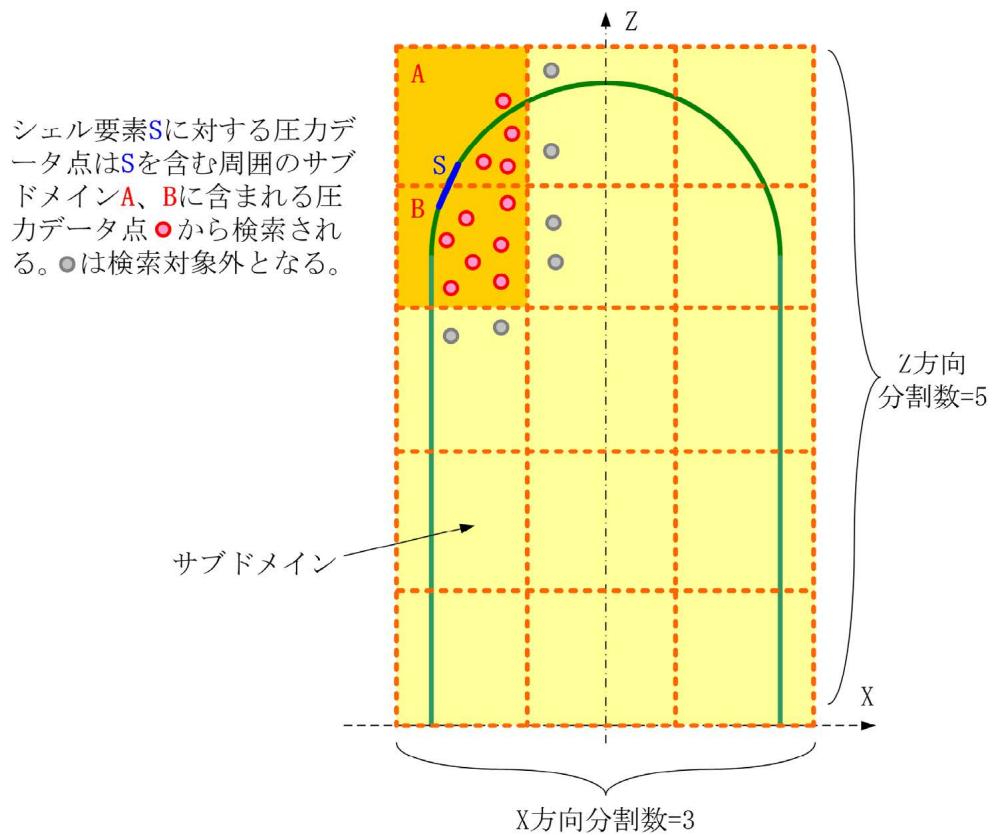
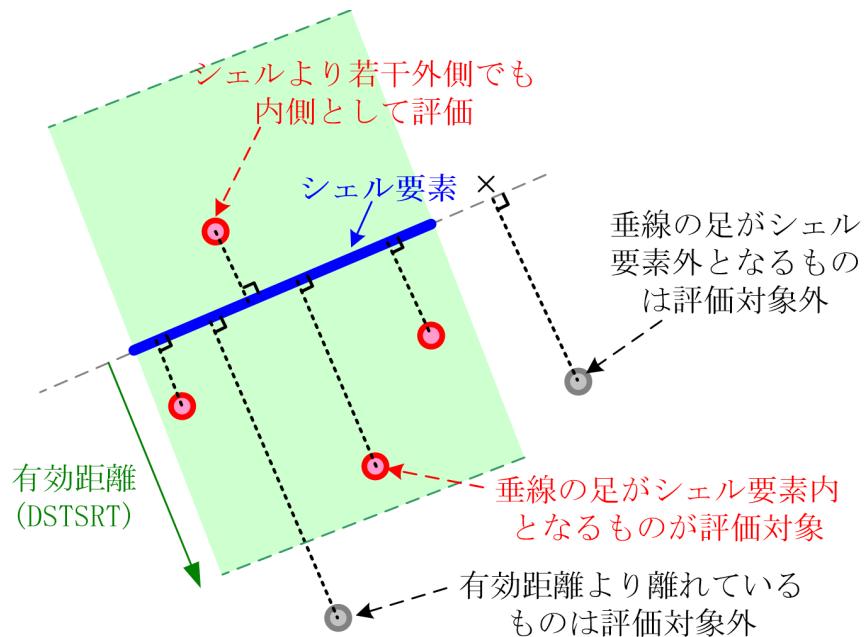


図 3.6.2-4 サブドメインの概要図



最大圧 (IPMODE=1) : 評価対象データ点の中の最大圧を採用
 簡易平均 (IPMODE=2) : 評価対象データ点すべてを使用した簡易平均 (図 3.6.2-7)

図 3.6.2-5 最大圧 (IPMODE=1) 及び簡易平均 (IPMODE=2) の負荷圧力算出方法

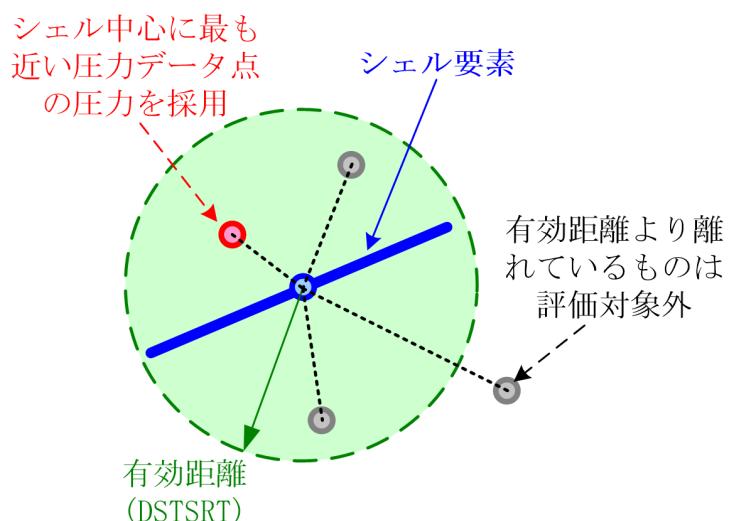


図 3.6.2-6 シェル中心最短 (IPMODE=3) の負荷圧力算出方法

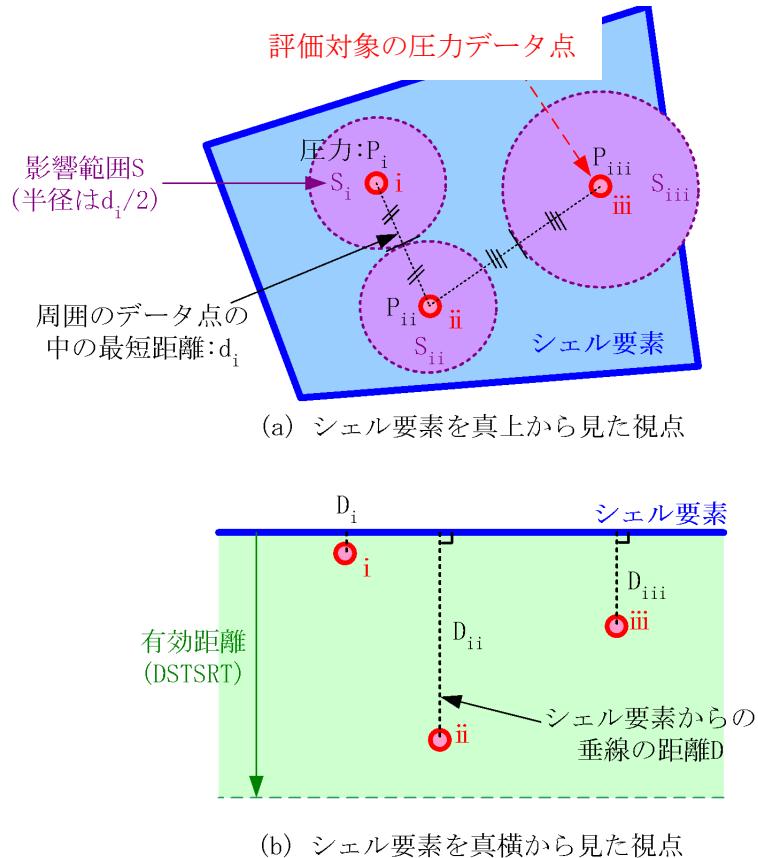


図 3.6.2-7 負荷圧力の簡易平均の方法

簡易平均の考え方としては以下のようなになる。

- シェル要素を真上から見た場合、圧力データ点が密集しているほどシェル要素への影響範囲 S は小さくなる。影響範囲 S は周囲のデータ点との最小距離 d の半分を半径と考える。したがって、 $S = \pi \times (d/2)^2$ と表せる。
- データ点を中心とした半径 D_{max} の球と、距離 D 離れた平面（シェル要素）との重なり（円状）を考えると、データ点がシェル要素から離れる（ D が長くなる）につれて平面上の円の面積は小さくなり、 D_{max} まで離れると円の面積はゼロになる。シェル要素を真横から見た場合、圧力データ点がシェル要素から離れる（シェル要素からの垂線の距離 D が長い）ほど影響範囲 S は小さくなる。さらに、有効距離 $DSTSRT$ を超えると、影響範囲はゼロになる。
- 上記 2 点を踏まえ、圧力データ点 i での影響範囲 S_i は以下のように定義する。

$$S_i = \pi \times (d_i/2)^2 \times (1 - (D_i/DSTSRT)^2)$$
- 負荷圧力の簡易平均値 $PAVE$ は、圧力データ点 i の圧力 P_i と上記の影響範囲 S_i を使用して、以下のように定義する。

$$PAVE = \sum(P_i \times S_i) / \sum S_i$$

(3) 解析モデル作成手順

インターフェースを組み込んだ AUTODYN を起動する。

鋼製容器を作成する。もしくは鋼製容器を作成したデータを読み込む。インターフェースを使用する際の注意事項は以下の通りである。

鋼製容器の解析モデルは OpenFOAM で設定した鋼製容器の形状及び位置を必ず一致させる。要素サイズを一致させる必要はない。

シェル要素でモデル化する。複数のパーツを使用して作成してもよい。

シェル要素の受圧面側が内側になるように JK インデックスの方向を設定する。なお、もし受圧面の表裏を逆に作成してしまった場合でも、後に述べる圧力境界条件の設定において受圧面を逆向きに修正することができる（図 3.6.2-8）。

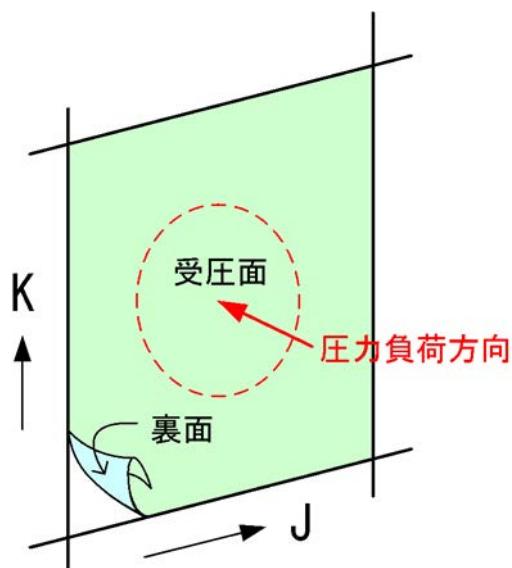


図 3.6.2-8 圧力負荷方向の設定

ナビゲーションバーの[Boundaries]を選択、[New]ボタンを押して、以下の境界条件を設定する（図 3.6.2-9）。

Name : 任意（ここでは「PRES」と入力）

Type: [Stress]

Sub option: [Stress (User-EXSTR3)]

Parameter RBC(1): 大気圧の値

シェル表面圧力データが絶対圧の場合、ここに入力した大気圧分を差し引いた差圧がシェル表面に負荷される。

Parameter RBC(2): シェル要素の受圧面が想定とは逆になる場合に使用。

負の値を入力すると受圧面が反転する。

Parameter RBC(3-5): 使用しない

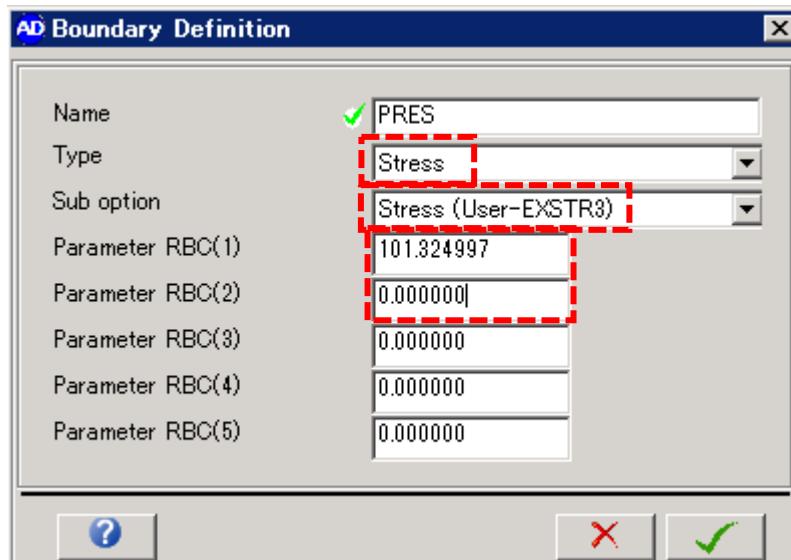


図 3.6.2-9 境界条件の設定

ナビゲーションバーの[Parts]-（鋼製容器パーティを選択）-[Boundary]-[Block]ボタンを押して、作成した境界条件を鋼製容器の全領域に設定する。パーティが複数存在する場合は本手順を繰り返す。

ナビゲーションバーの[User var.]を選択、[Add]ボタンを押して、ユーザ変数 VAR01 を設定する（図 3.6.2-10）。

Select user variable : [VAR01]

[Activate]にチェック

User variable name: 任意（ここではデフォルトの「VAR01」）

[Restart]にチェック

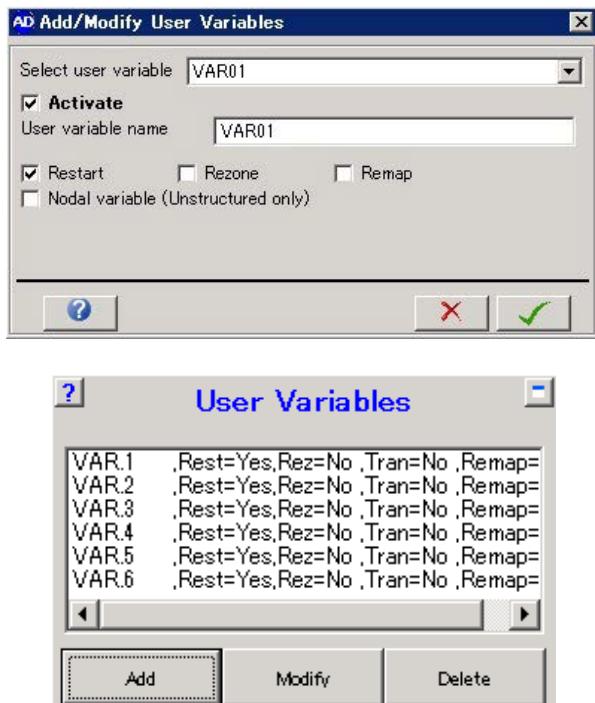


図 3.6.2-10 ユーザ変数の設定（1）

上の手順を繰り返して、VAR01～VAR06 までを設定する。ユーザ変数 VAR01～VAR06 に格納される変数の内容を表 3.6.2-3 にまとめた。

表 3.6.2-3 各ユーザ変数の内容

ユーザ変数	シェル要素の 負荷圧力算出方法	内容
VAR01	IPMODE=1 (最大圧)	シェル要素への負荷圧力
VAR02		最大圧の圧力データ点からシェル要素への垂線距離
VAR03	IPMODE=2 (簡易平均)	シェル要素への負荷圧力
VAR04		簡易平均に使用した圧力データ点のうち最も距離 が近いデータ点からシェル要素への垂線距離
VAR05	IPMODE=3 (シェル中心最短)	シェル要素への負荷圧力
VAR06		シェル中心に最も距離が近い圧力データ点からシ ェル中心までの距離（垂線ではない）

※これらの変数はユーザが選択した負荷圧力算出方法の種類にかかわらず常に出力される。ただし、実際にシェル要素に負荷される圧力はユーザが選択した種類のものだけである。例えば、ユーザが IPMODE=1 を選択したとしても、VAR01、VAR02 だけでなく、他の方法 (IPMODE=2or3) の VAR03～VAR06 も計算される。しかし、シェル要素に実際に負荷される圧力は VAR01 となる。どれかの負荷圧力算出方法を計算するだけで 3 種類の負荷圧力を比較することが可能である。

ナビゲーションバーの[Output]を選択し、[Save]の欄に以下を入力する。

Times を選択

Start time : 「0」

End time : 「1e20 (大きな数値)」

Increment : 「10」 (ms)

ナビゲーションバーの[Output]を選択し、[History]左の[+]を開く。[Select Gauge Variables]ボタンを押し、表示されたパネルの「VAR.1」～「VAR.6」までをチェックする。(図 3.6.2-11) この操作によりユーザ変数 VAR01～VAR06 の値が出力点に出力される。この設定を怠ると、時刻歴データにユーザ変数 VAR01～VAR06 が保存されていないため、グラフ表示でできない。

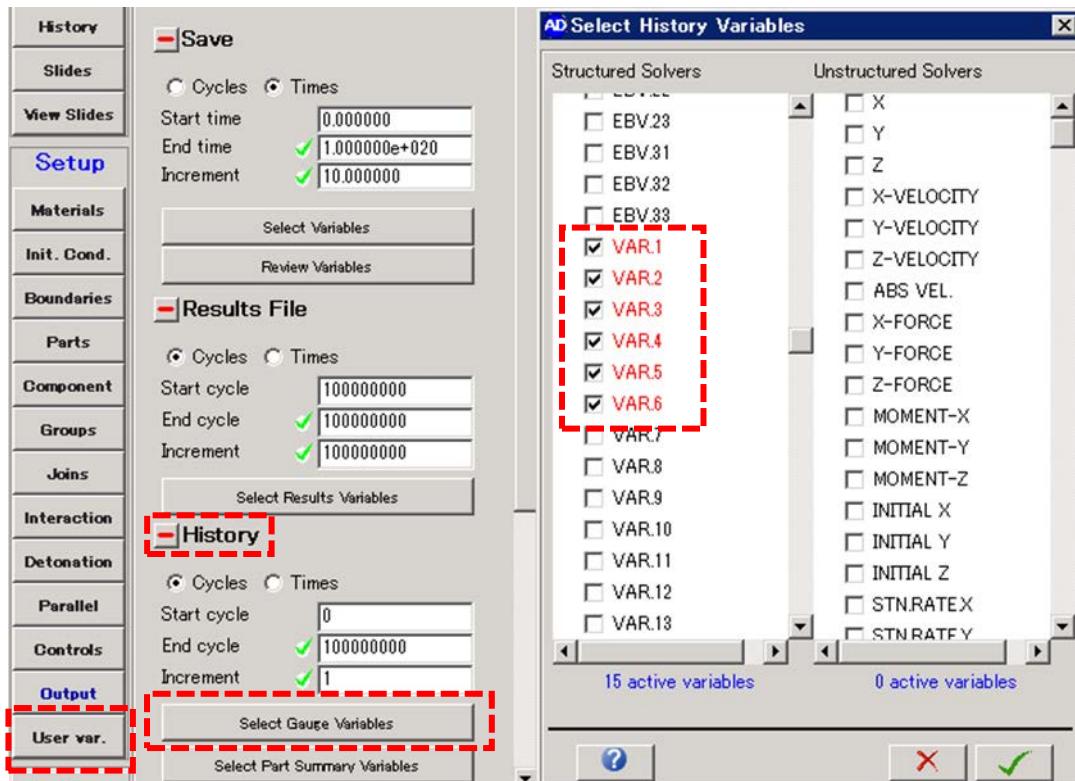


図 3.6.2-11 ユーザ変数の設定 (2)

そのほか、必要に応じて以下の変数にもチェックを入れておくとよい。

速度成分 「X/Y/Z-VELOCITY」

相当塑性ひずみ 「EFF.PL.STN」

ミーゼス応力 「MIS.STRESS」

ナビゲーションバーの[Output]を選択し、[Call EXEDIT]左の[+]を開き、EXEDIT が毎サイクル呼び出されるように以下の設定を行う（図 3.6.2-12）。

Cycles を選択

Start cycle: 「0」

End cycle : 「1e8 (大きな数値)」

Increment : 「1」

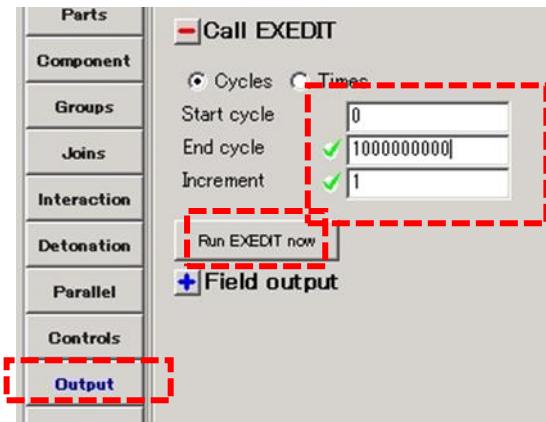


図 3.6.2-12 ユーザ変数の設定 (3)

ナビゲーションバーの[Controls]を選択し、[Wrapup Criteria]において計算完了時間及びサイクルの設定を行う。基本的に計算完了時間は OpenFOAM の圧力データの出力時間より前に設定する。

本解析では以下のように設定する。

[Cycle limit]: 1e8 (大きな数値)

[Time limit]: 300 (ms)

[Energy fraction]: 0.05 (デフォルトのままで OK)

[Energy ref. cycle]: 1e8 (大きな数値)

メニューバーの[File]-[Save]を押して AUTODYN データを保存する。保存するフォルダー内にインターフェース条件ファイル（ファイル名の先頭に同一の Ident が使用している）が存在することを確認する。

[Run]ボタンを押して計算を開始する。インターフェースにより OpenFOAM の圧力データが時系列に読み込まれ、鋼製容器に負荷される。

インターフェース条件ファイルにおいて「INFOOUT=1」を設定している場合、サブドメイン、シェル要素近傍のデータ点数などがログファイル([Ident].log.txt)に出力される（図 3.6.2-13）。

```

--- 条件ファイル読込開始 ---
OpenFOAM圧力データファイルの格納フォルダ階層:
C:/AUTODYN/v170/abe/usrsub_JAEA_2019_interface/openfoam_data
OpenFOAM圧力データファイルリストのcsvファイル名:
openfoam_file_list.csv
圧力データファイルの最大データ列数=      5
圧力,X,Y,Zデータの列番号=    1   3   4   5
シェル負荷圧力設定方法 = 1
圧力データ点検索のためのシェル要素からの有効距離 = 5.00000E+02
サブドメインのX/Y/Z方向分割数= 40 40 75
サブドメイン、シェル要素近傍のデータ点数の出力(0=OFF,1=OUTPUT)= 1
--- 条件ファイル読込完了 ---

```

```

OpenFOAM圧力データファイル数=      301
時刻, ファイル名= 0.000E+00, t=0.csv
時刻 ファイル名= 1 000F+00 t=1 ~sv

```

～中略～

```

△取込1回,△取込1回= -2.0000E+03 / .10000E+04

```

```

OpenFOAM圧力データ読み込み: NCYCLE, TIME = 0 0.0000E+00

```

[前] 時刻, ファイル名= 0.0000E+00, t=0.csv	0	0.0000E+00	
圧力 最小値/最大値 = -1.01325E+02 1.01325E+02			※1
X座標 最小値/最大値 = -2.00165E+04 2.00165E+04			
Y座標 最小値/最大値 = -2.00165E+04 2.00165E+04			
Z座標 最小値/最大値 = -6.73359E+03 7.17779E+04			
全圧力データ点数 = 697097			
サブドメイン中の圧力データ点数 = 674897			
サブドメイン データ最大点数 = 353			※2
サブドメイン データ最小点数(0を除く) = 1			
サブドメイン データ平均点数(0を除く) = 26			
各シェル要素近傍の圧力データ点数、シェル要素と圧力データ点の最小距離 最大圧力			※3
PART#,J,K= 1 2 2 :点数,最小距離,最大圧= 50 1.256E+02 1.013E+02			
PART#,J,K= 1 2 3 :点数,最小距離,最大圧= 42 1.333E+02 1.013E+02			
PART#,J,K= 1 2 4 :点数,最小距離,最大圧= 42 1.333E+02 1.013E+02			
PART#,J,K= 1 2 5 :点数,最小距離,最大圧= 55 1.256E+02 1.013E+02			
PART#,J,K= 1 2 6 :点数,最小距離,最大圧= 51 1.256E+02 1.013E+02			
PART#,J,K= 1 2 7 :点数,最小距離,最大圧= 49 1.256E+02 1.013E+02			
PART#,J,K= 1 2 8 :点数,最小距離,最大圧= 49 1.256E+02 1.013E+02			
PART#,J,K= 1 2 9 :点数,最小距離,最大圧= 49 1.256E+02 1.013E+02			

(※1) 圧力データ点の圧力、座標の最大・最小値。座標の最大・最小値が全領域であり、

これを分割してサブドメインを作成する。

(※2) 40×40×75 個のサブドメインのうち、圧力データ点を最も含むサブドメインは 353

点のデータ点を持つ。最小は 1 点、平均は 26 点。サブドメイン中の圧力データ点
が少なすぎる or 多すぎる場合はサブドメイン分割数を変更する。

(※3) パーツ番号 1、J=2、K=3 のシェル要素において、圧力データ点からシェル要素
への垂線の足がシェル要素上となるデータ点数は 42 点、そのうち垂線の最短距
離は 133mm、最大圧力は 101.3kPa となる。各シェル要素に対する圧力データ点
数が少なすぎる or 多すぎる場合は有効距離 (DSTSRT) を変更する。

図 3.6.2-13 ログファイルの例

4. 計算事例

4.1 CFD 解析の精度検証のための試験照合解析事例³⁾

CFD を用いた PWR 実機における水素拡散・爆発燃焼解析の妥当性確認に資する試験として、表 4.1-1 に水素爆発燃焼に係る試験を、表 4.1-2 に水素拡散に係る試験をまとめた。水素の爆発燃焼現象で重要なものは、乱流燃焼及び火炎面前方での圧力波の重畠による衝撃波の生成と衝撃波背後での自動着火と、軸体形状であり、各項目に対応する試験を表 4.1-1 に整理した。また、水素の拡散現象で重要なものは、移流と浮力の大小（混合／成層化）、壁面・気中の水蒸気凝縮、及びスプレイによる除熱であり、同様に表 4.1-2 に整理した。解析で使用する解析モデルの妥当性確認として試験照合解析を実施する場合には、目的に応じて適切な試験を選定することが重要である。

表 4.1-1 燃焼試験の照合解析マトリクス

低乱流燃焼		乱流燃焼 (火炎加速)	火炎面前方での 圧力波の重畠		該当する燃焼試験	
上方伝播のみ	上方・下方伝播		衝撃波 の生成	衝撃波背後 での自動着 火 (DDT)	単一区画 (小規模～大規 模)	多区画・ 複雑体系
○	—	—	—	—	NUPEC 小規模 NTS	
—	○	—	—	—	NUPEC 小規模 NTS、THAI	
—	○	○	—	—	NEDO 箱型形状 (テント、半球) ENACCEF	NUPEC 大規模 BMC、 HDR
—	○	○	○	—	RUT、 FLAME、 NEDO Tube、 HTCF ENACCEF	
—	○	○	○	○	RUT、 FLAME、 NEDO Tube、 HTCF	

表 4.1-2 水素の拡散・混合に関する試験の全体マトリクス

		混合・拡散特性		水蒸気 凝縮	スプレイ 凝縮
		良好な混合	成層化発生		
	日				
	米	HEDL EPRI NRC O'hern			
要素試験	欧	KFK Battele フラン クフルト 他	成層破壊が主目的の試験のため、初期状態として成層化を設定。(軽密度気体を、上方から、かつ極めて低流速で放出して成層化を実現) <ul style="list-style-type: none">・ ISP47 (THAI)・ SETH、SETH2 (PANDA、MISTRA)・ HYMERES、HYMERES2 (PANDA、MISTRA)・ SARNET (TOSQAN)	ISP47 (TOSQAN, MISTRA)	SARNET (TOSQAN)
総合試験	日	NUPEC : ・ M-1 ～M-9 (M-8-1 を除く)	NUPEC: ・ M-8-1 のみ	NUPEC: ・ M-3 ・ M-4 (M-4-3)	NUPEC : ・ M-6 ・ M-7 (M-7-1) ・ M-8 ・ M-9

4.1.1 FLUENT による拡散試験照合解析事例

本章では、表 4.1-2 に示す水素拡散・混合に関する試験のうち、水蒸気凝縮の要素試験である TOSQAN (ISP-47) と総合効果試験である NUPEC 拡散試験の照合解析を FLUENT で行った事例を示す。

(1) TOSQAN 試験³⁾

本試験は、約 7m³ の密閉の円筒容器内に水蒸気を放出し、一定温度に制御された壁面での水蒸気凝縮挙動を確認するための試験であり、容器内圧力が計測されている。TOSQAN 試験体系を図 4.1.1-1 に示す。

本試験照合解析では、水蒸気凝縮に着目し、容器内圧力の時間変化を試験結果と比較することで、水蒸気凝縮モデルの妥当性を確認する。照合解析の対象は、ISP-47 とした。

表 4.1.1-1 に示す解析条件、図 4.1.1-2 に示すメッシュモデルを用いて解析を行った。なお、混合気の流入質量流量及び温度変化については、表 4.1.1-2 に示し、図 4.1.1-3 に図示した。得られた照合解析結果（容器内圧力の経時変化）を図 4.1.1-4 に示す。ヘリウム・水蒸気放出による圧力上昇、及び水蒸気凝縮に伴う圧力低下等の圧力挙動を解析にて、概ね再現することを確認した。なお、再現性向上のために以下の工夫を実施した。

- 水蒸気凝縮として、壁面凝縮を考慮した。
- 実効拡散係数として、多成分系拡散を考慮した。

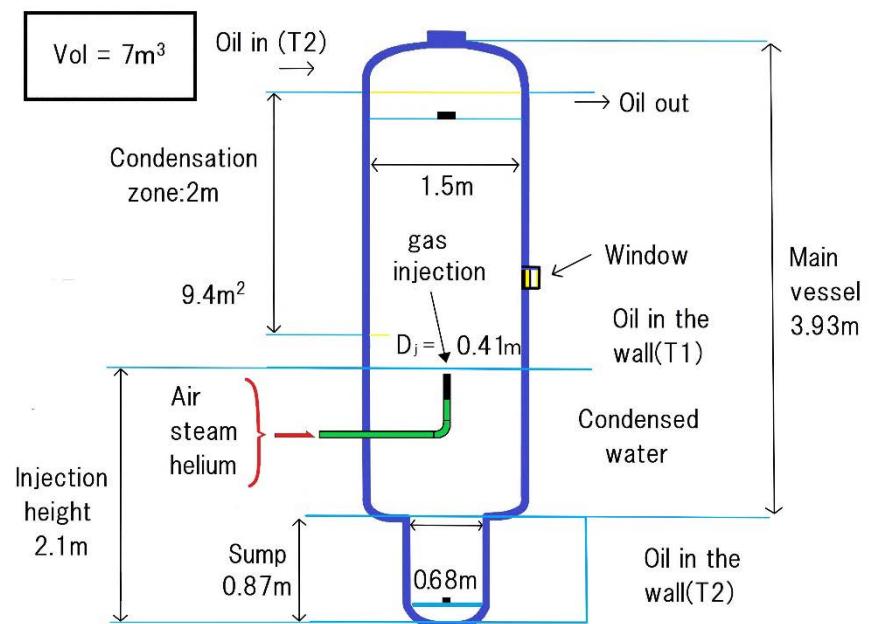
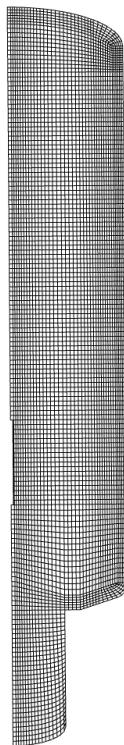
図 4.1.1-1 TOSQAN 試験体系⁴²⁾

図 4.1.1-2 メッシュ図

表 4.1.1-1 解析条件 (TOSQAN 試験 ISP-47 FLUENT 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考
メッシュ モデル	メッシュ数	約 6.3 万	1/8 セクターモデル
	メッシュサイズ	最大約 34mm	
初期条件	格納容器温度 (°C)	115.4	試験条件と同じ
	格納容器圧力 (kPa)	101	試験条件と同じ
	気体組成	空気	試験条件と同じ
境界条件	混合気 (ヘリウム、酸素、水蒸気) 放出	流量 (kg/s)	図 4.1.1-3 表 4.1.1-2
		放出温度 (°C)	図 4.1.1-3 表 4.1.1-2
		放出位置	容器内中央近傍
	構造材	温度 (°C)	上部壁 122 下部壁 123.5 冷却壁 0-6500(s) : 101.8 6500-9500(s) : 107.8 9500(s)以降 : 101.8
その他	乱流モデル	Realizable k-ε	
	凝縮モデル	壁面凝縮	

表 4.1.1-2 解析条件（流入混合気の流入質量及び温度）

段階	概要	計算時間(s)	蒸気注入 質量流量 (g/s)	注入平均 温度 (°C)	平均質量 流量 (g/s)	平均凝縮 壁温度 (°C)
0	初期	0				101.3
1	加圧	0-1800	1.40	124		101.8
1a	加圧と境界	1800-5000	1.14	125		
1b	ガス注入	5000-5600	1.14	125	3.16	
2	定常状態 1	5600-6500	1.11	126		
3	加圧	6500-9500	12.27	132		107.8
4	定常状態 2					
5	減圧	9500-12000	1.11	131		101.8
6	定常状態 3	12000-13000	1.11	126		
6a	ガス注入	13000-13600	1.11	126	3.16	
6b	境界	13600-14000	1.11	126		
7	ヘリウム注 入	14000-14600	1.11-0.89 (線形的 に遷移)	126	1.03	
8	定常状態 4	14600-18000	0.89	138		

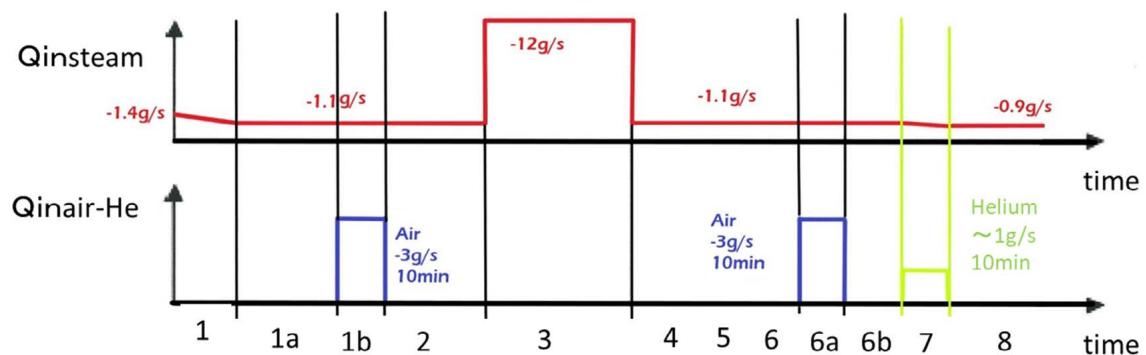


図 4.1.1-3 混合気の流入質量流量及び温度

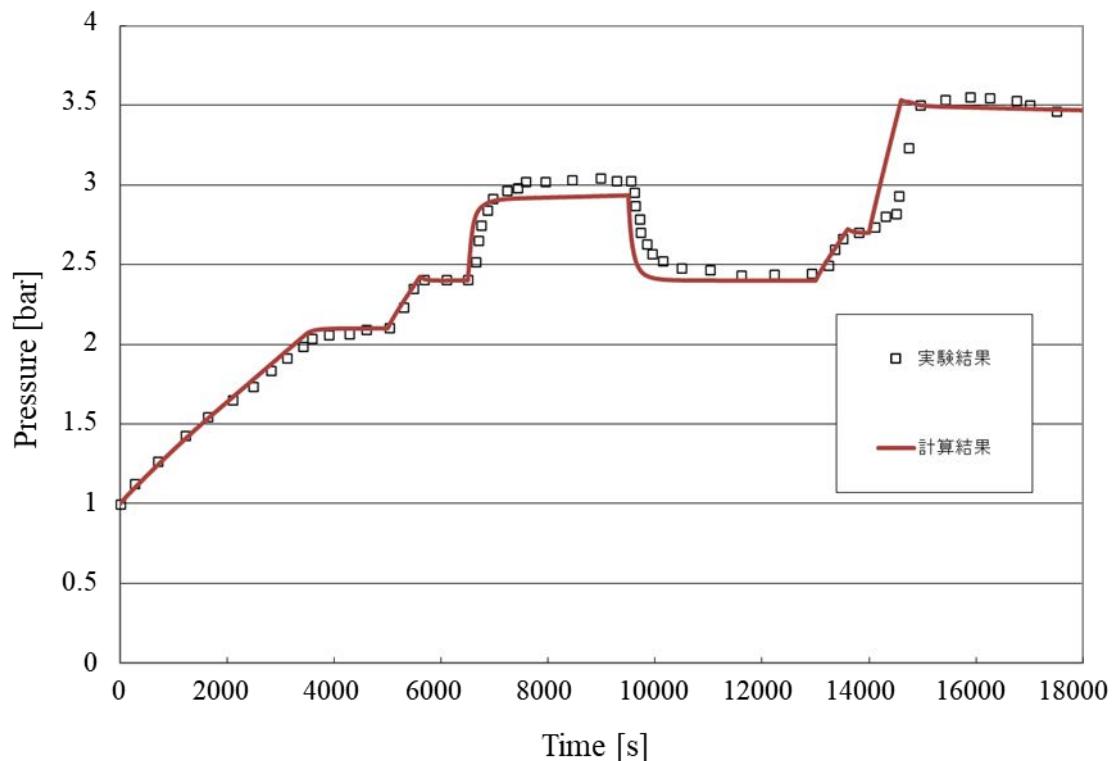


図 4.1.1-4 容器内圧力の経時変化

(2) NUPEC 拡散試験³⁾

本試験は、PWR 型の格納容器を約 1/4 スケールで模擬した装置を用いて原子力安全基盤機構（NUPEC）により実施された試験である。NUPEC 拡散試験では、水蒸気及び He を放出し、壁面凝縮、及びスプレイ凝縮による圧力・温度・He 濃度分布等が計測されている。NUPEC 拡散試験体系を図 4.1.1-5 に示す。

本試験照合解析では、水蒸気凝縮及びスプレイ凝縮に着目し、圧力、温度、He 濃度を試験結果と比較することで、凝縮モデルの妥当性を確認する。照合解析の対象は、下部から He 及び水蒸気を放出し、壁面と空間によって水蒸気が凝縮しながら循環する M-4-3 試験、及びそれに加えてスプレイを散布する M-7-1 試験を選定した。一方、加圧器室相当の区画から He 及び水蒸気を放出させ、He が上部に成層化した M-8-1 試験を照合解析の対象として選定した。

表 4.1.1-3～表 4.1.1-5 に示す解析条件、図 4.1.1-6 に示すメッシュモデルを用いて解析を実施しており、その際必要な凝縮モデル（UDF）を選択し設定している。得られた照合解析結果を図 4.1.1-7～図 4.1.1-9 に示す。

<M-7-1 試験：混合良好となった試験>

照合解析結果を図 4.1.1-7 に示す。実験の特徴として放出開始から 10 分あたりまではガスは放出されているものの、スプレイの効果によって凝縮が促進されるため圧力は低下し、その後緩やかに圧力は上昇している様子がわかる。解析でもその傾向はほぼ再現できており、ドーム部（区画 25）の圧力、温度、He 濃度は精度よく再現できていた。また、M-7-1 試験結果では 30 分後に各区画の濃度が約 10% となり均一化しているが、これはスプレイにより循環が促進されたためと考えられ、解析においてもこの傾向を再現できている。以上より、凝縮モデルとスプレイモデルの妥当性が確認できる。

<M-4-3 試験：混合良好となった試験>

照合解析結果を図 4.1.1-8 に示す。放出開始とともに、徐々に圧力が上がっていくが、同時に空間・壁面で凝縮が起こるため、圧力は緩やかなカーブとなる。解析結果でも概ね圧力の変化傾向を再現できており、ドーム部分（区画 25）での温度変化、He 濃度変化も再現できている。放出位置からほぼ真上に位置する区画 15、20 の温度変化、He 濃度変化傾向も再現できており、放出されたガスの全体的な挙動は再現できた。計算結果の圧力は実験結果とほぼ一致していることから凝縮モデルの妥当性が確認できる。

<M-8-1 試験：上部にヘリウムの成層化が認められた試験>

照合解析結果を図 4.1.1-9 に示す。M-4-3 試験と同様に、放出開始とともに、徐々に圧力が上がっていくが、同時に空間・壁面で凝縮が起こるため、圧力は緩やかなカーブとなり、解析結果でも概ね圧力の変化傾向を再現できている。また、計算結果で各区画の温度、He 濃度をよく再現できていることから、凝縮モデルの適用性が検証できたといえる。容器上部の区画 25 で温度、He 濃度が上がり、区画 12、6 では温度、He 濃度はほとんど上がらない。これは破断口からの放出流が上部で滞留し、下部まで到達しないことが原因と考えられる。

乱流モデルには等方性の SST $k-\omega$ モデルを用いているが、成層化によって生じた容器下部と上部の濃度差を概ね再現できることを確認した。ただし、容器上部の最大ヘリウム濃度は、実験値を 5%程度、下回った。成層化による水素濃度の計算精度を向上させる手法としては、非等方性乱流モデルの適用が挙げられる。M-8-1 試験のような密度成層を形成すると、成層界面での擾乱に対して、乱れの鉛直方向成分が減衰し、相対的に水平方向成分が大きくなる（非等方性）ことから、その様相を簡易に模擬可能な非等方性乱流モデルの開発^{43,44)}が望まれる。また、流れと濃度の変動成分の相互作用の影響が大きいことから乱流シュミット数や乱流プラントル数に代表される乱流物質流束や乱流熱流束の輸送モデルの導入することでさらなる改善が期待される⁴⁵⁾。

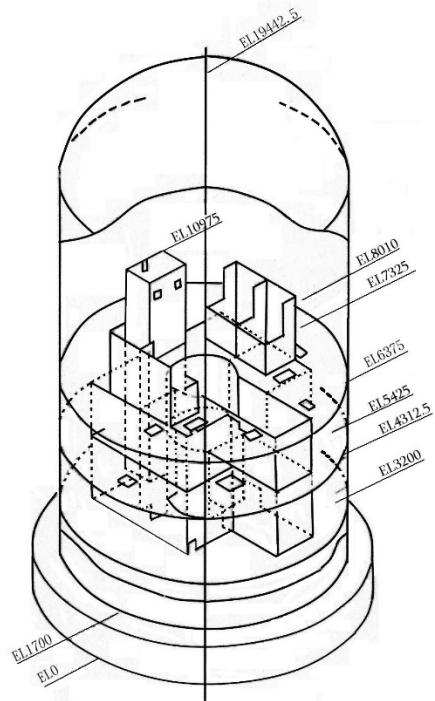


図 4.1.1-5 NUPPEC 拡散試験体系⁴⁶⁾

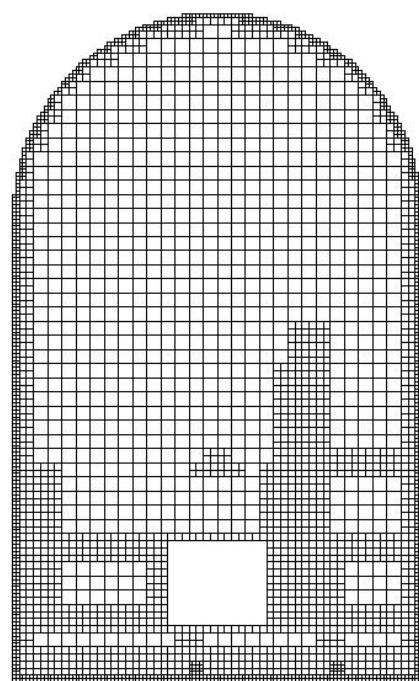


図 4.1.1-6 メッシュ図

表 4.1.1-3 解析条件 (NUPEC 拡散試験 M-7-1 FLUENT 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考
メッシュ モデル	メッシュ数	約 26 万	
	メッシュサイズ	最大約 40cm	
初期条件	格納容器温度 (°C)	66.4	試験条件と同じ
	格納容器圧力 (kPa)	139.7	試験条件と同じ
	気体組成	空気	試験条件と同じ
境界条件	He 放出	流量 (kg/s)	0→15 分 : 0→0.03 15→30 分 : 0.03→0
		放出時間 (分)	30
		放出温度 (°C)	14
		放出位置	S/G 下部基礎部
	蒸気 放出	流量 (kg/s)	0→30 分 : 0.08→0.03
		放出時間 (分)	30
		放出温度 (°C)	165
		放出位置	S/G 下部基礎部
	スプ レイ	流量 (kg/s)	19.4
		温度 (°C)	40
		放出時間 (分)	30
		粒径 (mm)	0.75
	構造 材	CV 壁内面 初期温度 (°C)	11
		CV 壁外面	断熱
		内部構造物 初期温度 (°C)	11
その他	乱流モデル	Realizable k-ε	
	凝縮モデル	壁面凝縮 空間凝縮 スプレイ凝縮	

表 4.1.1-4 解析条件 (NUPEC 拡散試験 M-4-3 FLUENT 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考	
メッシュ モデル	メッシュ数	約 26 万		
	メッシュサイズ	最大約 40cm		
初期条件	格納容器温度 (°C)	28	試験条件と同じ	
	格納容器圧力 (kPa)	101	試験条件と同じ	
	気体組成	空気	試験条件と同じ	
境界条件	He 放出	流量 (kg/s)	0.027	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	30	試験条件と同じ
		放出温度 (°C)	20	試験条件と同じ
		放出位置	S/G 下部基礎部	試験条件と同じ
	蒸気 放出	流量 (kg/s)	0.33	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	30	試験条件と同じ
		放出温度 (°C)	140	試験条件と同じ
		放出位置	S/G 下部基礎部	試験条件と同じ
	スブ レイ	流量 (kg/s)	なし	試験条件と同じ
		温度 (°C)	なし	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	なし	試験条件と同じ
		粒径 (mm)	なし	試験条件と同じ
	構造 材	CV 壁内面 初期温度 (°C)	30	
		CV 壁外面	断熱	
		内部構造物 初期温度 (°C)	30	
その他	乱流モデル	Realizable k-ε		
	凝縮モデル	壁面凝縮 空間凝縮		

表 4.1.1-5 解析条件 (NUPEC 拡散試験 M-8-1 FLUENT 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考	
メッシュ モデル	メッシュ数	約 26 万		
	メッシュサイズ	最大約 40cm		
初期条件	格納容器温度 (°C)	10	試験条件と同じ	
	格納容器圧力 (kPa)	101	試験条件と同じ	
	気体組成	空気	試験条件と同じ	
境界条件	He 放出	流量 (kg/s)	0.03	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	30	試験条件と同じ
		放出温度 (°C)	120	試験条件と同じ
		放出位置	加圧器室	試験条件と同じ
	蒸気 放出	流量 (kg/s)	0.33	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	30	試験条件と同じ
		放出温度 (°C)	140	試験条件と同じ
		放出位置	加圧器室	試験条件と同じ
	スプロ レイ	流量 (kg/s)	なし	試験条件と同じ
		温度 (°C)	なし	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	なし	試験条件と同じ
		粒径 (mm)	なし	試験条件と同じ
	構造 材	CV 壁内面 初期温度 (°C)	10	
		CV 壁外面	断熱	
		内部構造物 初期温度 (°C)	10	
その他	乱流モデル	SST k- ω		
	凝縮モデル	壁面凝縮 空間凝縮		

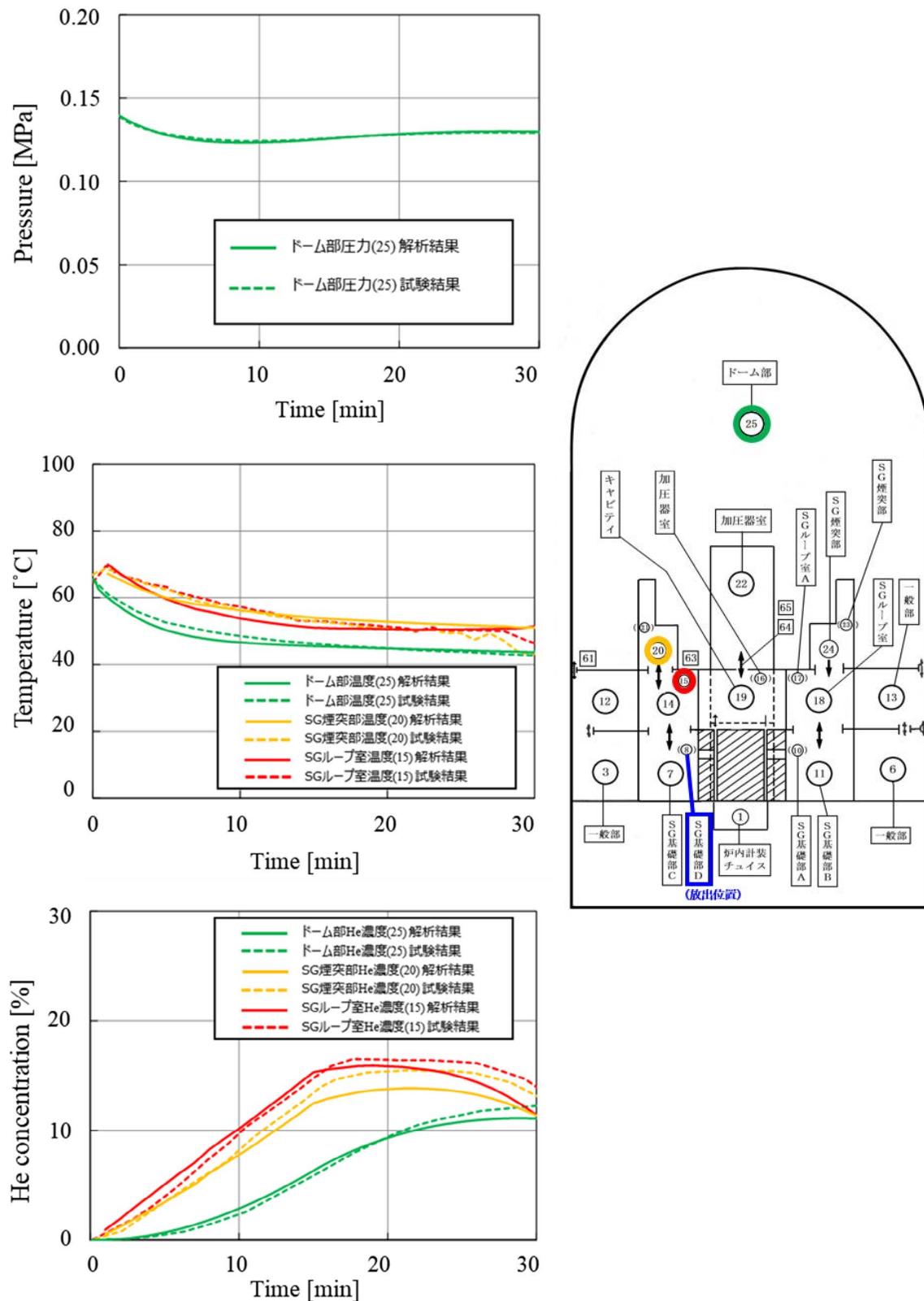


図 4.1.1-7 M-7-1 照合解析結果

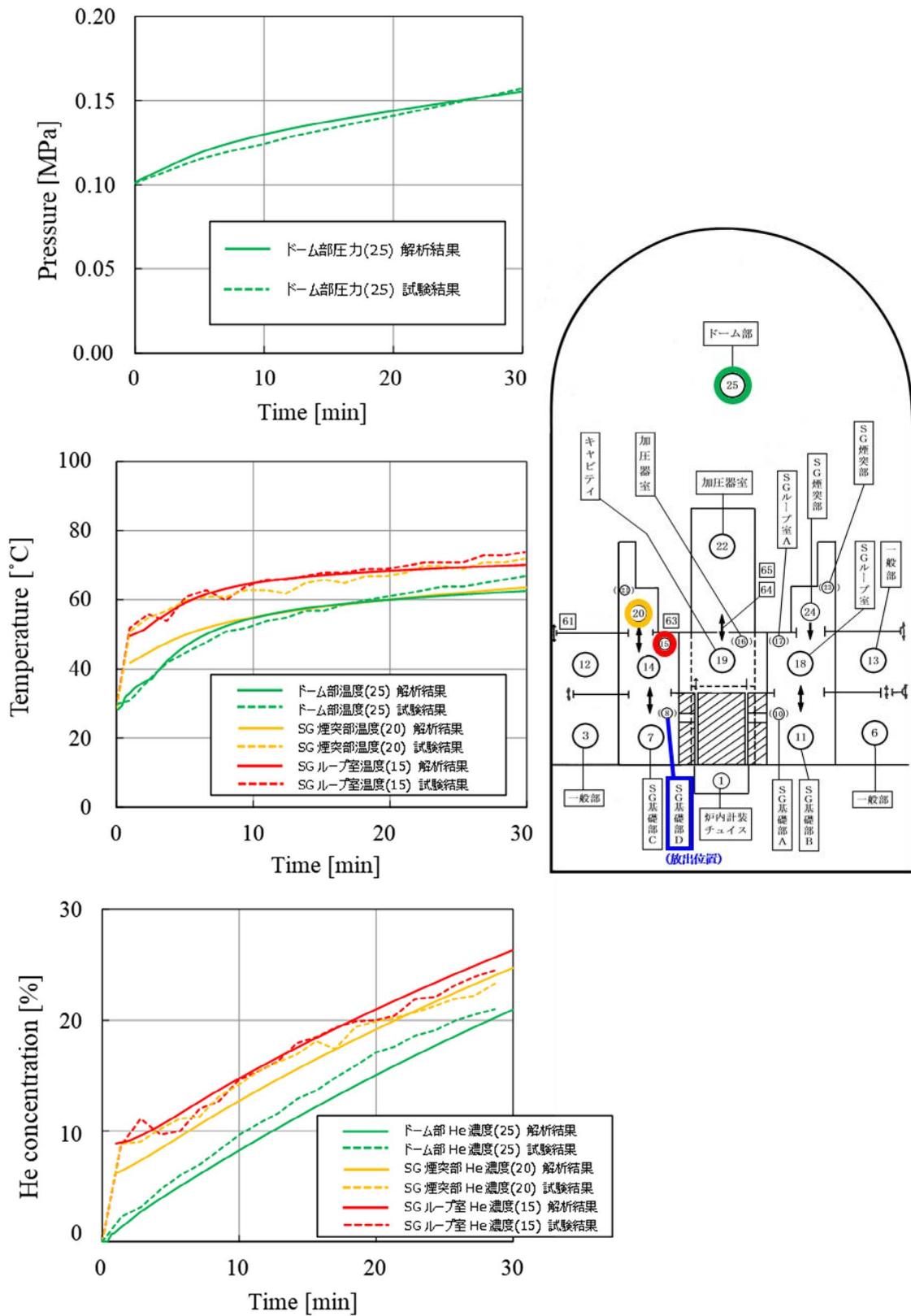


図 4.1.1-8 M-4-3 照合解析結果

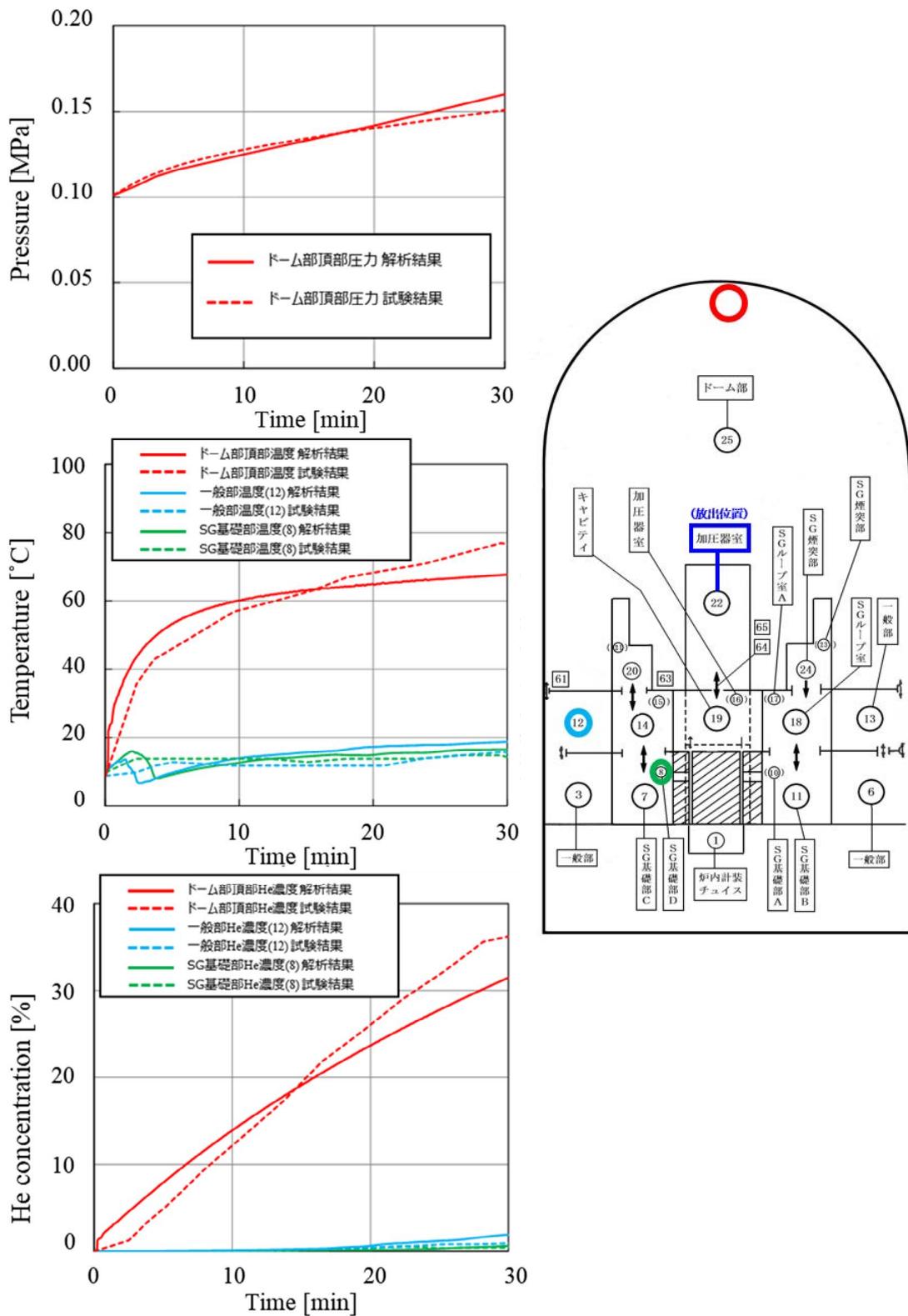


図 4.1.1-9 M-8-1 照合解析結果

4.1.2. OpenFOAM による拡散試験照合解析事例

本章では、表 4.1-2 に示す水素拡散・混合に関する試験のうち、水蒸気凝縮の要素試験である TOSQAN (ISP-47) と総合効果試験である NUPEC 拡散試験の照合解析を OpenFOAM で行った事例を示す。

(1) TOSQAN 試験 (ISP-47)³⁾

試験概要、着目点及び照合解析の対象は 4.1.1(1)で示す FLUENT による試験照合解析と同様である。

図 4.1.2-1 に示すメッシュモデル、表 4.1.2-1、図 4.1.2-2 に示す解析条件を用いて解析を実施しており、その際必要な凝縮モデルを選択し設定している。得られた照合解析結果を図 4.1.2-3 に示す。照合解析にて、試験結果におけるヘリウム・水蒸気放出による圧力上昇及び水蒸気凝縮に伴う圧力上昇の抑制等の挙動を適切に再現することを確認した。この照合解析により、主に水蒸気凝縮モデルの妥当性を確認している。

なお、再現性向上のために実施した工夫を以下に示す。

- ・水蒸気凝縮として、壁面凝縮を考慮した。
- ・壁面第 1 層のメッシュ高さにより凝縮量が変化する。本照合解析ではメッシュ高さを 12mm とすることで試験結果をよく再現した。

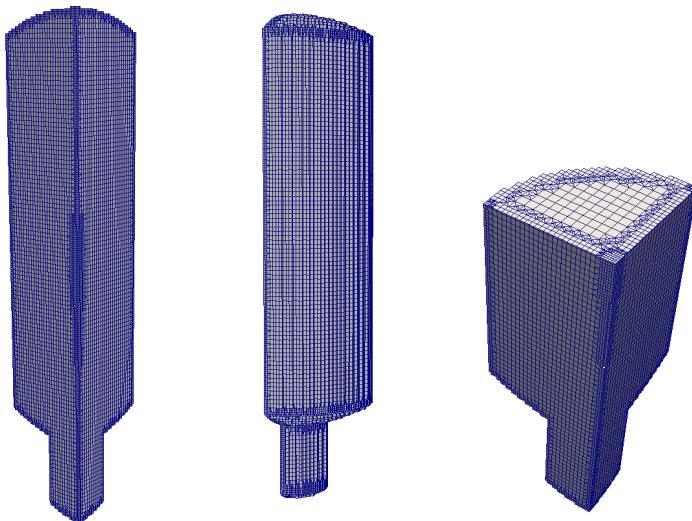
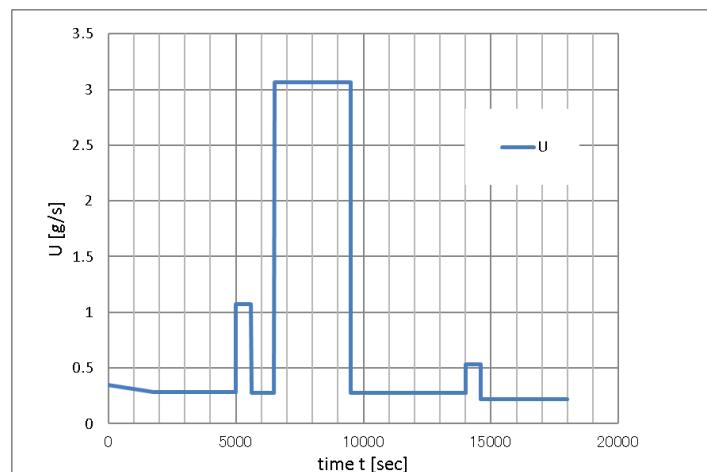


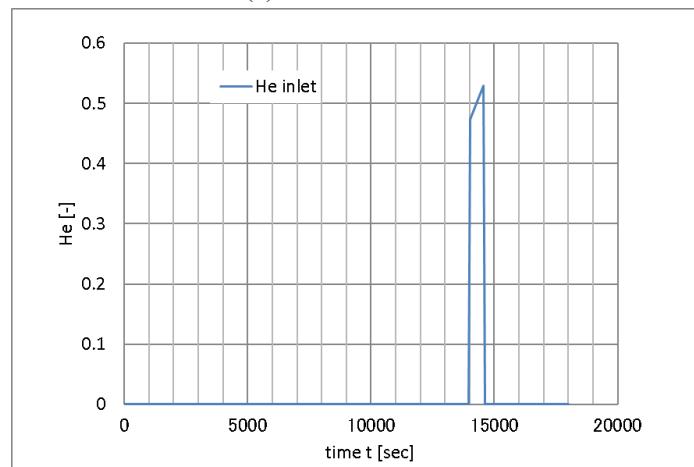
図 4.1.2-1 OpenFOAM による TOSQAN 試験 メッシュ図

表 4.1.2-1 解析条件 (OpenFOAM による TOSQAN 試験 (ISP-47) 照合解析)

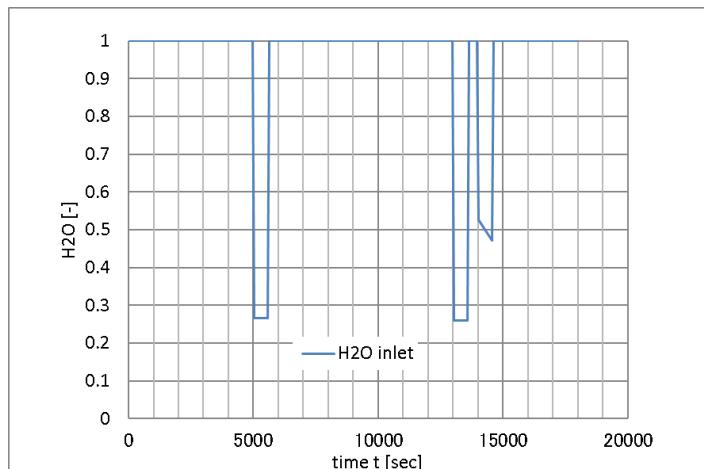
パラメータ		設定・入力値	備考
モデル メッシュ	メッシュ数	約 3 万	1/4 セクター モデル
	メッシュサイズ	最大約 50cm	
初期条件	格納容器温度 (°C)	115.4	試験条件と同じ
	格納容器圧力 (kPa)	101	試験条件と同じ
	気体組成	空気	試験条件と同じ
境界条件	混合気 (ヘリウム、酸素、水蒸気) 放出	質量流量 : 図 4.1.2-2(a) ヘリウム質量分率 : 図 4.1.2-2(b) 水蒸気質量分率 : 図 4.1.2-2(c) 酸素質量分率 : 図 4.1.2-2(d)	試験条件と同じ
		放出温度 (°C) : 図 4.1.2-2(e)	試験条件と同じ
		放出位置 : 容器内中央近傍	試験条件と同じ
	構造材	凝縮領域表面 : 図 4.1.2-2(f)	
その他	乱流モデル	SST k- ω	
	凝縮モデル	壁面凝縮	



(a)混合気質量流量

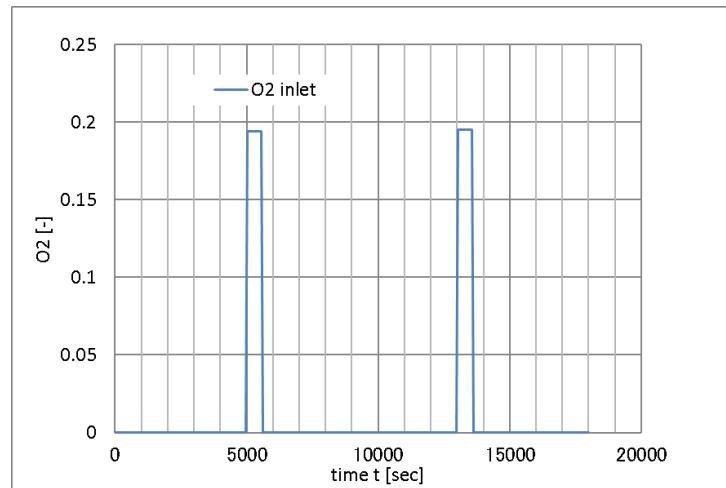


(b)混合気 ヘリウム質量分率

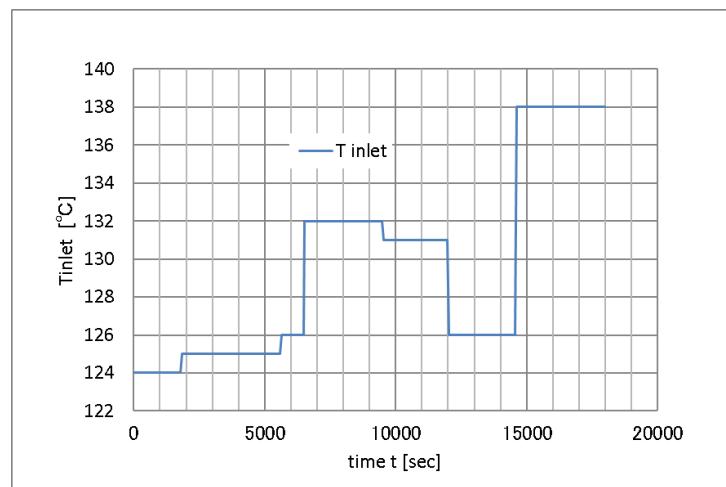


(c)混合気 水蒸気質量分率

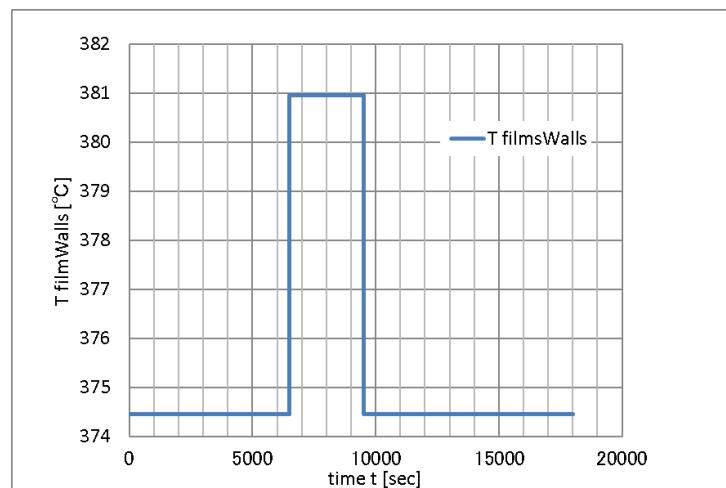
図 4.1.2-2 OpenFOAM による TOSQAN 試験 (ISP-47) 照合解析条件 (1/2)



(d)混合気 酸素質量分率



(e)混合気温度



(f)凝縮面温度

図 4.1.2-2 OpenFOAM による TOSQAN 試験 (ISP-47) 照合解析条件 (2/2)

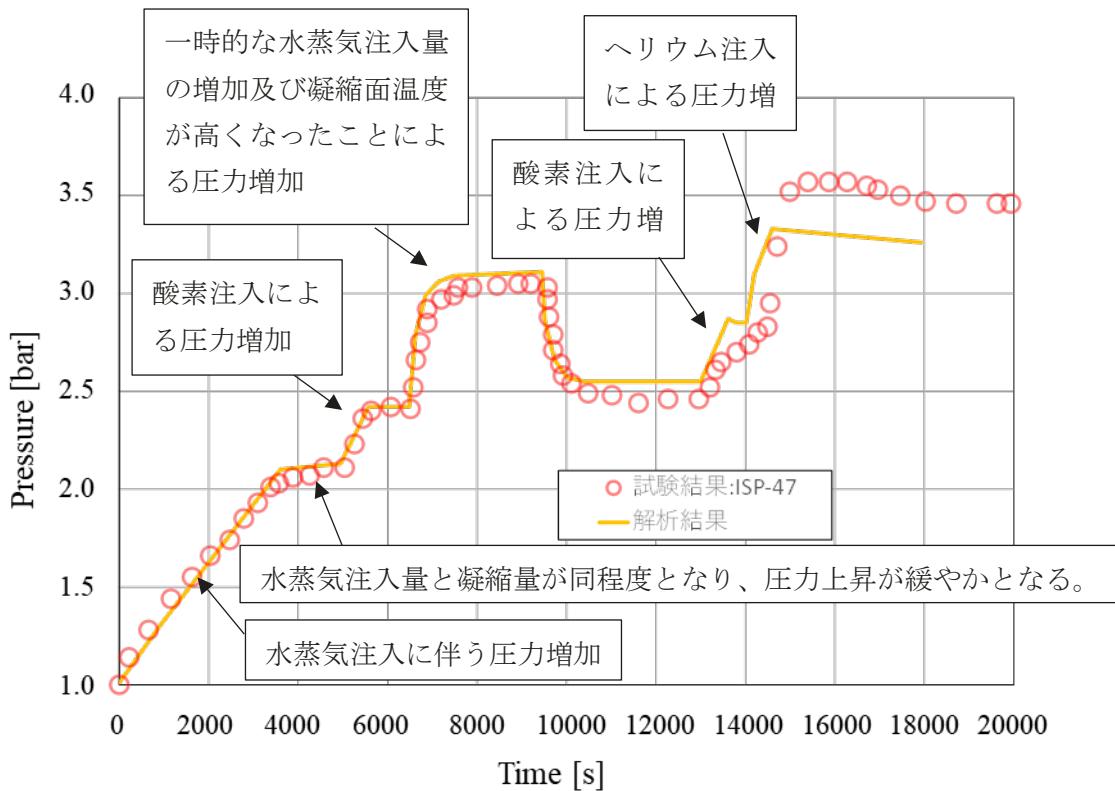


図 4.1.2-3 OpenFOAM による TOSQAN 試験 (ISP-47) 照合解析結果 (容器内圧力)

(2) NUPEC 拡散試験³⁾

試験概要、着目点は 4.1.1(a)で示す FLUENT による試験照合解析と同様であり、照合解析の対象は、加圧器室相当の区画から He 及び水蒸気を放出させ、He が上部に成層化が認められた M-8-1 試験とした。

表 4.1.2-2 に示す解析条件、図 4.1.2-4 に示すメッシュモデルを用いて解析を実施しており、その際必要な凝縮モデルを選択し設定している。得られた照合解析結果を図 4.1.2-5～図 4.1.2-7 に示す。照合解析にて、試験結果のドーム部の圧力、温度、He 濃度をよく再現し、また放出位置直上の区画の温度、He 濃度及び鉛直方向の He 濃度分布についても照合解析結果と試験結果と試験結果はよく一致した。この照合解析では、乱流モデル及び水蒸気凝縮モデルの妥当性を確認している。

なお、再現性向上のために実施した工夫を以下に示す。

- ・水蒸気凝縮として、壁面凝縮を考慮した。

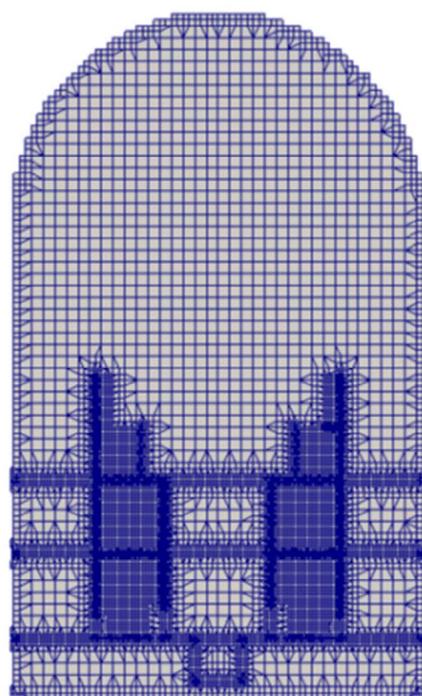


図 4.1.2-4 OpenFOAM による NUPEC 拡散試験照合解析 メッシュ図

表 4.1.2-2 解析条件 (OpenFOAM による NUP EC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考	
メッシュ モデル	メッシュ数	約 60 万		
	メッシュサイズ	最大約 30cm		
初期条件	格納容器温度 (°C)	10	試験条件と同じ	
	格納容器圧力 (kPa)	101.325	試験条件と同じ	
	気体組成	空気	試験条件と同じ	
境界条件	He 放出	流量 (kg/s)	0.027	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	30	試験条件と同じ
		放出温度 (°C)	115	試験条件と同じ
		放出位置	加圧器室	試験条件と同じ
	蒸気 放出	流量 (kg/s)	0.33	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	30	試験条件と同じ
		放出温度 (°C)	115	試験条件と同じ
		放出位置	加圧器室	試験条件と同じ
	スプ レイ	流量 (kg/s)	なし	試験条件と同じ
		温度 (°C)	なし	試験条件と同じ
		放出時間 (分)	なし	試験条件と同じ
		粒径 (mm)	なし	試験条件と同じ
	構造 材	CV 壁内面 初期温度 (°C)	10	
		CV 壁外面	断熱	
		内部構造物		
		初期温度 (°C)	10	
その他	乱流モデル	SST k- ω		
	凝縮モデル	壁面凝縮 (CV 壁ドーム部のみ)		

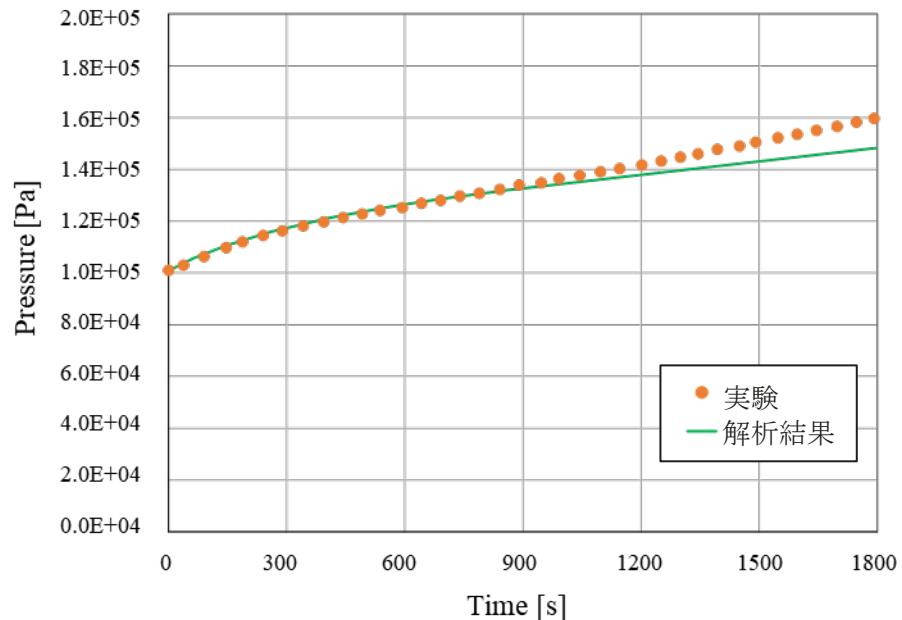
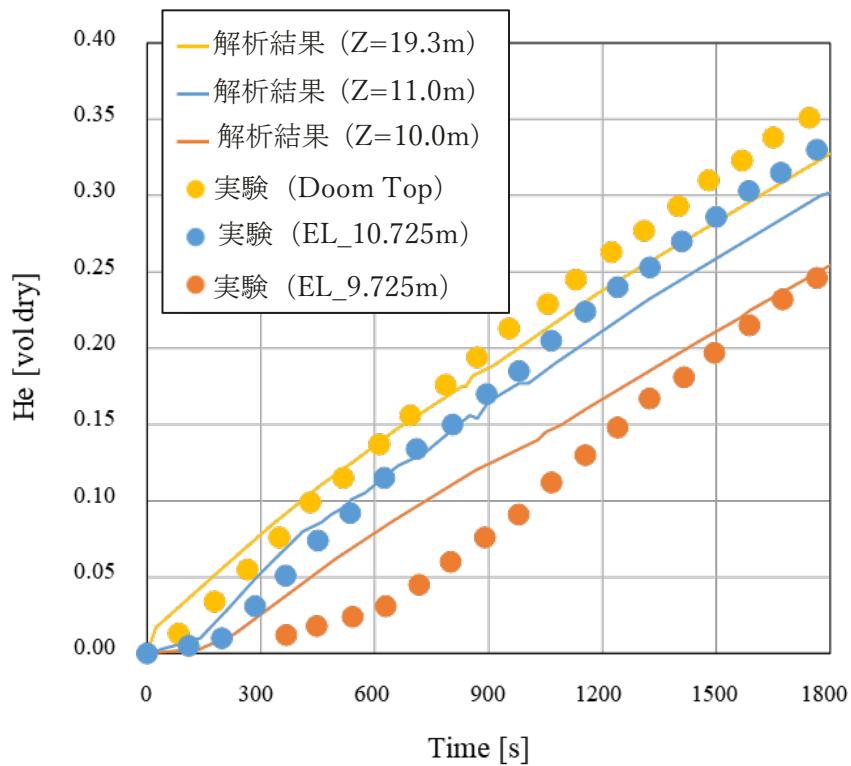


図 4.1.2-5 OpenFOAM による NUPC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析結果 (圧力)

図 4.1.2-6 OpenFOAM による NUPC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析結果
(ヘリウム濃度分布)

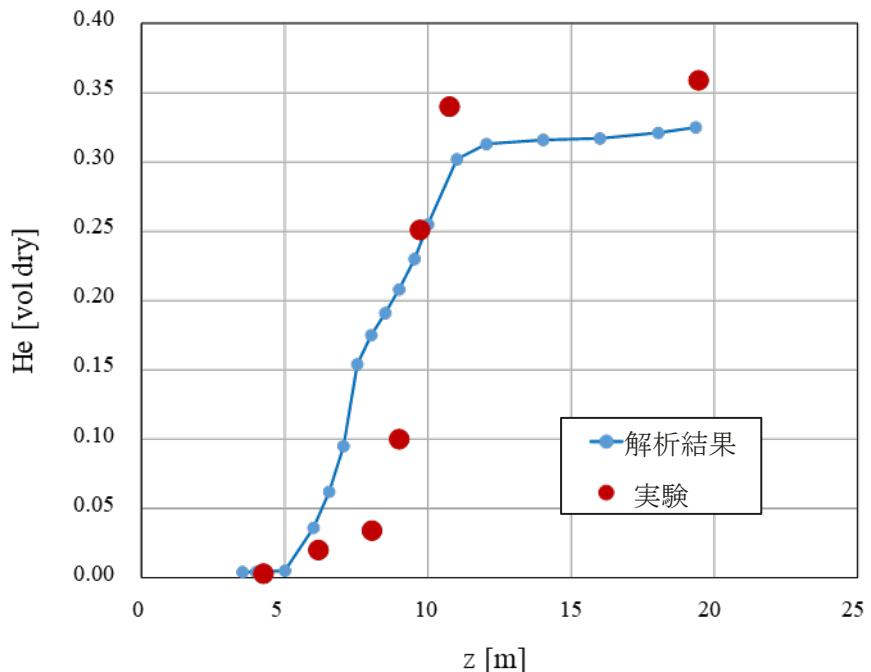


図 4.1.2-7 OpenFOAM による NUPEC 拡散試験 (M-8-1) 照合解析結果
(高さ方向のヘリウム濃度分布 (1800s))

4.1.3 FLUENT による燃焼試験照合解析事例

本章では、表 4.1-1 に示す水素燃焼試験のうち、ともに大型体系で行われ、火炎加速から爆轟遷移（DDT）まで発生した RUT 試験と、DDT や早い爆発燃焼は発生せず穏やかな燃焼に留まった NTS 試験の照合解析を FLUENT で行った事例を示す。

(1) RUT 試験³⁾

本試験は、実機 PWR 格納容器のサイズに近く、DDT 限界確認のためにロシアのクルチャトフ研究所で実施された試験である。本試験では、水素・空気・水蒸気の予混合雰囲気を着火させた場合の火炎面位置等が計測されている。RUT 試験体系を図 4.1.3-1 に示す。

本試験照合解析では、火炎伝播挙動に着目し、火炎面位置及び DDT 発生有無を試験結果と比較することで、乱流燃焼速度モデル、自着火モデル及び衝撃波の形成に関する解析手法の妥当性を確認する。FLUENT では図 4.1.3-2 に示す通り水蒸気の含有による効果で DDT に至らなかった sth6 試験、sth9 試験、及び水蒸気を含んでも水素濃度が高いため 1st チャンネルで DDT に至った sth8 試験の照合を実施しており、DDT 発生有無は再現できている。このうち、sth8 について詳細を示す。

表 4.1.3-1 に示す解析条件、図 4.1.3-3 に示すメッシュモデルを用いて解析を実施しており、その際、乱流燃焼速度モデル、自着火モデルを設定している。得られた照合解析結果を表 4.1.3-2、図 4.1.3-4 及び図 4.1.3-5 に示す。照合解析にて、火炎先端位置の試験結果をよく再現し、試験結果と同様に 1st チャンネルでの DDT 発生を照合解析にて確認できた。

この照合解析により、乱流燃焼モデル、火炎面前方への圧力波の放出と重畠による衝撃波の生成に関する評価手法及び衝撃波背後の自動着火に係る化学素反応モデルの妥当性が確認されている。

なお、再現性向上のために実施した工夫を以下に示す。

- ・水蒸気添加による火炎減速効果を考慮するため、H₂O 濃度に対する層流燃焼速度及び着火遅れ時間の感度を推算可能な Look-up テーブルを構築した。

着火位置

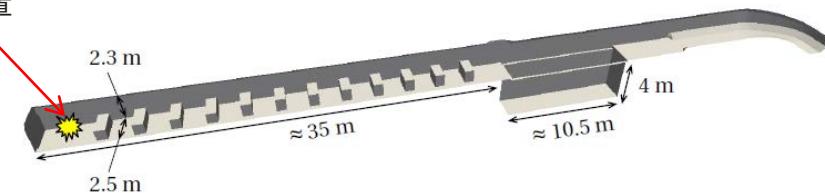
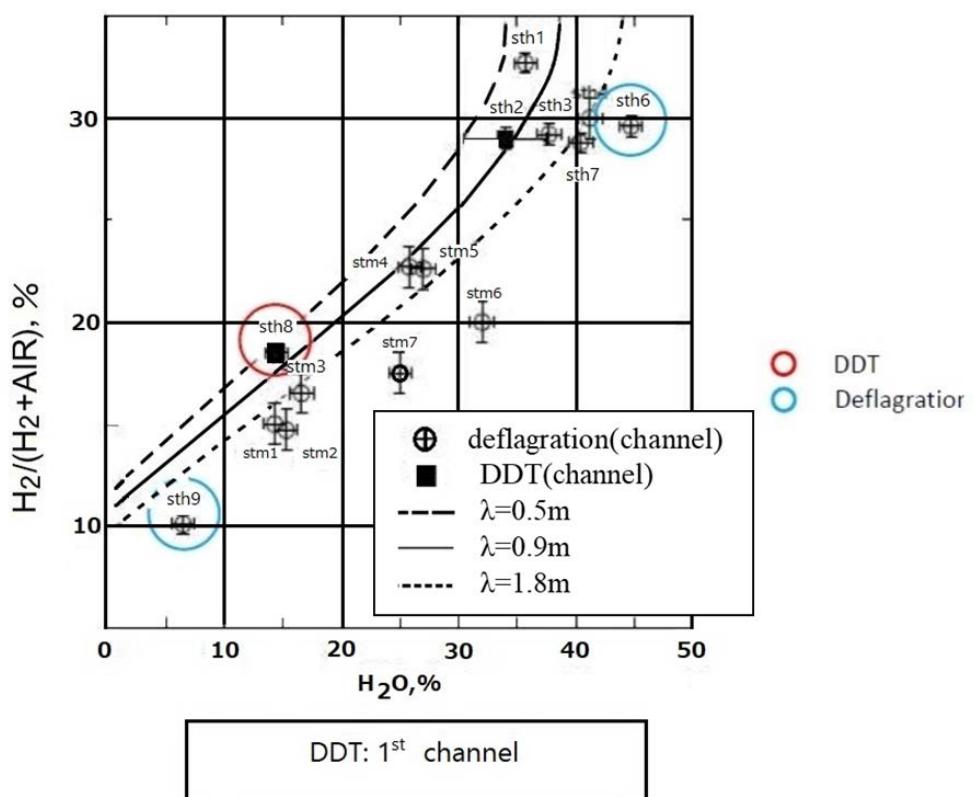


図 4.1.3-1 RUT 試験体系

図 4.1.3-2 FLUENT による RUT 試験照合解析ケース (sth8)⁴⁷⁾

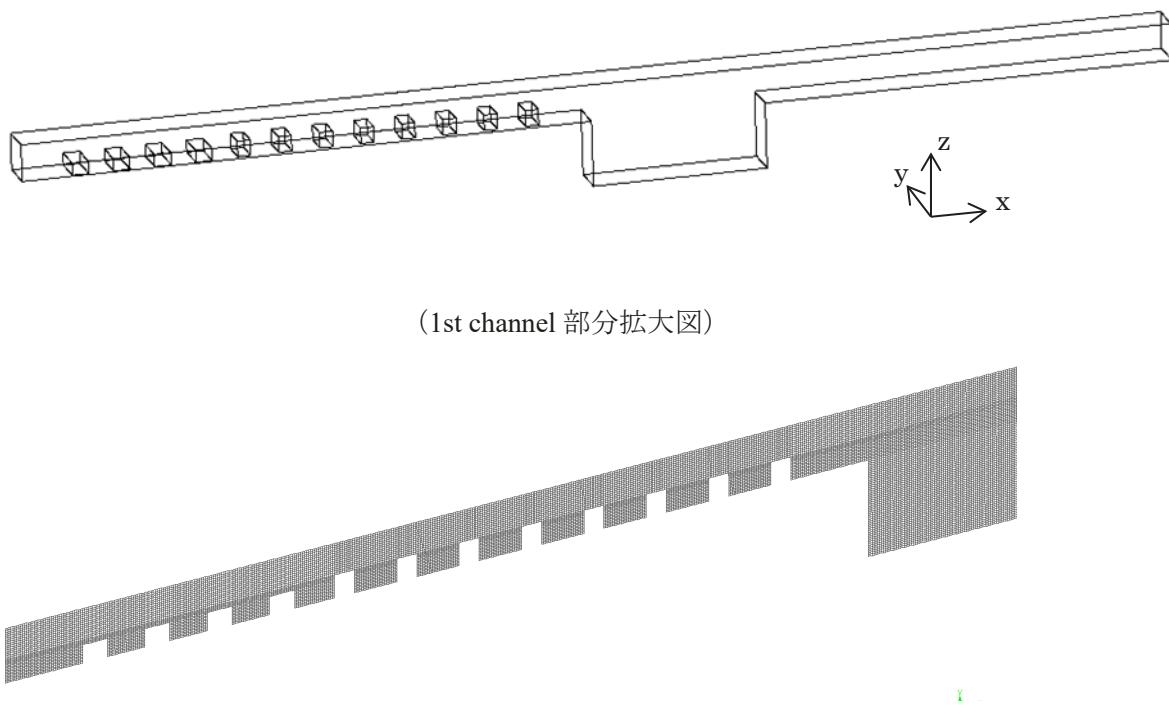


図 4.1.3-3 FLUENT による RUT 試験照合解析 メッシュ図

表 4.1.3-1 解析条件 (FLUENT による RUT 試験 (sth8) 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考
モデル	メッシュ数	約 144 万メッシュ	
	メッシュサイズ	平均約 7cm	
	Adaptive Mesh Refinement	なし	
初期条件	格納容器温度 (°C)	375	試験条件と同じ
	格納容器圧力 (kPa)	101	試験条件と同じ
	気体組成	水素 18.5vol% (dry) 水蒸気 15.5vol% (wet)	試験条件と同じ
境界条件	着火位置	入口部	試験条件と同じ
	構造材	断熱	
その他	乱流モデル	SST k- ω	
	燃焼モデル	C-Equation Model (ソース項：乱流燃焼 + 自着火)	
	乱流燃焼モデル	Peters Model	
	Pressure-Velocity Coupling	PISO	

表 4.1.3-2 FLUENT による RUT 照合解析結果 (DDT 発生有無の比較)

Run #	H ₂ (dry) vol %	Steam vol %	Exp	Calc
sth8	18.5	15.5	DDT (in 1st channel)	DDT (near end of 1st channel)

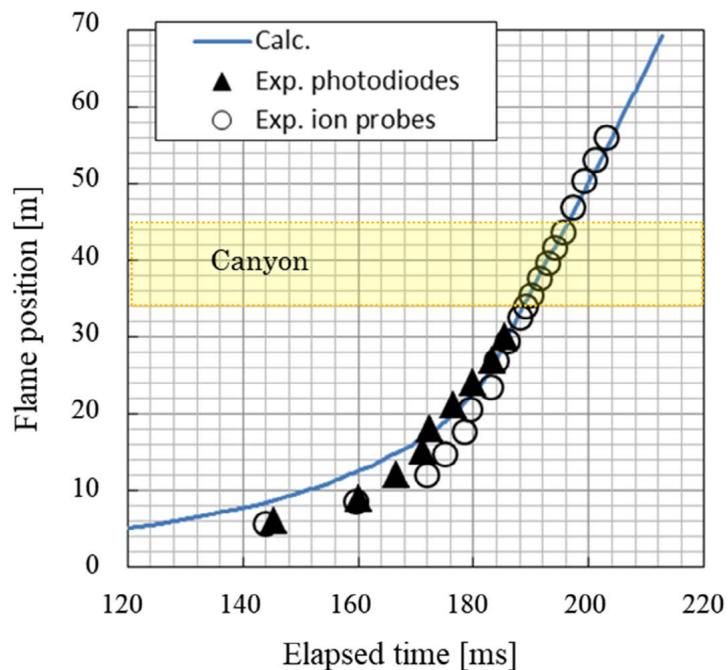


図 4.1.3-4 FLUENT による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果 (火炎位置)

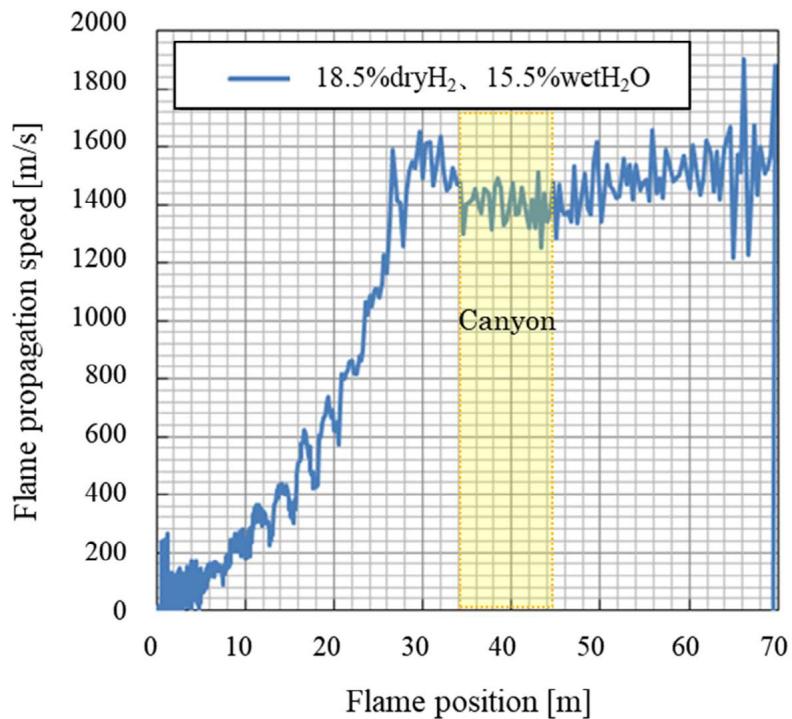


図 4.1.3-5 FLUENT による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果（火炎伝播速度）

(2) NTS 試験³⁾

本試験は、直径 16m の大型球形容器を用いた燃焼試験であり、試験体系内に、水蒸気、水素と空気の混合気を満たし、着火させた場合の圧力上昇、火炎伝播速度等が計測されている。NTS 試験体系を図 4.1.3-6 に示す。

本試験照合解析では、火炎伝播挙動に着目し、燃焼後の圧力上昇値及び火炎伝播速度を試験結果と比較することで、低レイノルズ数流れにおける燃焼モデルの妥当性を確認する。照合解析の対象は、水蒸気・水素・空気予混合条件である P-15 試験とした。

NTS 試験では、予混合気組成が水蒸気含有で水素濃度も RUT 試験と比べて高くないこと、大型ではあるが球形状で内部に障害物も少なく火炎加速が生じにくい体系となっていることもあり、穏やかな燃焼に留まっている。

表 4.1.3-3 に示す解析条件、図 4.1.3-7 に示すメッシュモデルを用いて解析を行い、その際、乱流燃焼速度モデル、自着火モデルを設定している。

得られた照合解析結果を図 4.1.3-8 (圧力)、図 4.1.3-9 (鉛直方向火炎伝播速度) に示す。規格化された圧力上昇速度はおおよそ実験結果と一致し、鉛直方向火炎伝播速度は試験結果の 4.3m/s に対し、計算結果は 2~8m/s であり同等となった。

本照合解析により、主に燃焼モデル（層流、乱流）及び乱流モデルの妥当性を確認している。

なお、再現性向上のために実施した工夫を以下に示す。

- ・希薄水素条件など層流燃焼速度の文献データがない条件に適用可能とするため、既存の文献データをもとに外挿で推算可能な Look-up テーブルを導入した。

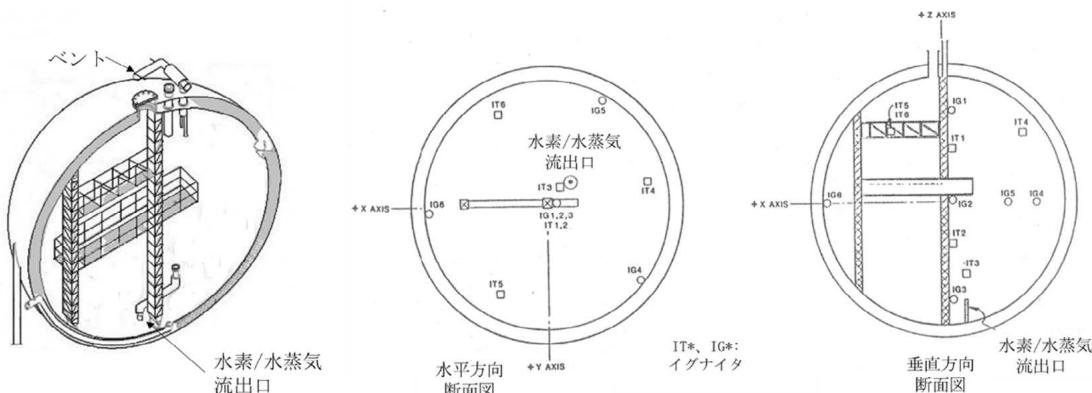


図 4.1.3-6 NTS 試験体系⁴⁸⁾

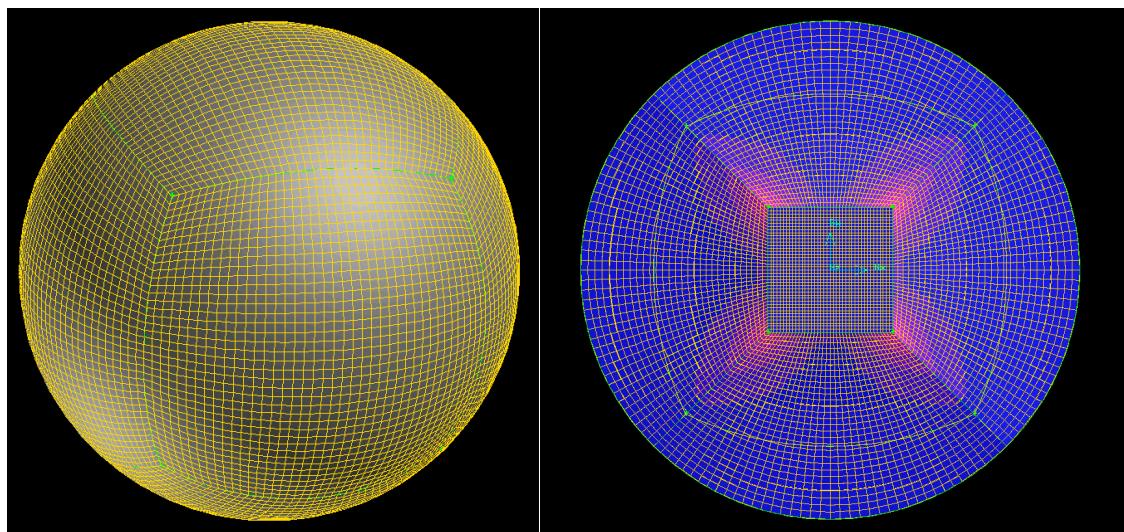


図 4.1.3-7 FLUENT による NTS 試験照合解析 メッシュ図

表 4.1.3-3 解析条件 (FLUENT による NTS 試験 (P-15) 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考
メッシュ モデル	メッシュ数	約 35 万メッシュ	
	メッシュサイズ	平均約 5cm	
	Adaptive Mesh Refinement	なし	
初期条件	格納容器温度 (°C)	30.4	試験条件と同じ
	格納容器圧力 (kPa)	101	試験条件と同じ
	気体組成	水素 9.9vol% (wet) 水蒸気 4.2vol% (wet)	試験条件と同じ
境界条件	着火位置	容器下部	試験条件と同じ
	構造材	断熱	
その他	乱流モデル	SST k- ω	
	燃焼モデル	C-Equation Model (ソース項：乱流燃焼 + 自着火)	
	乱流燃焼速度モデル	Peters Model	
	Pressure-Velocity Coupling	PISO	

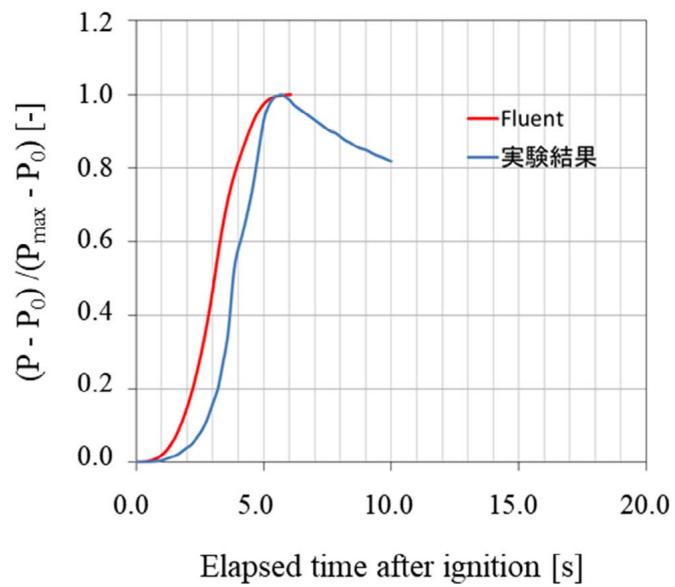


図 4.1.3-8 FLUENT による NTS 試験 (P-15) 照合解析結果 (容器内圧力)

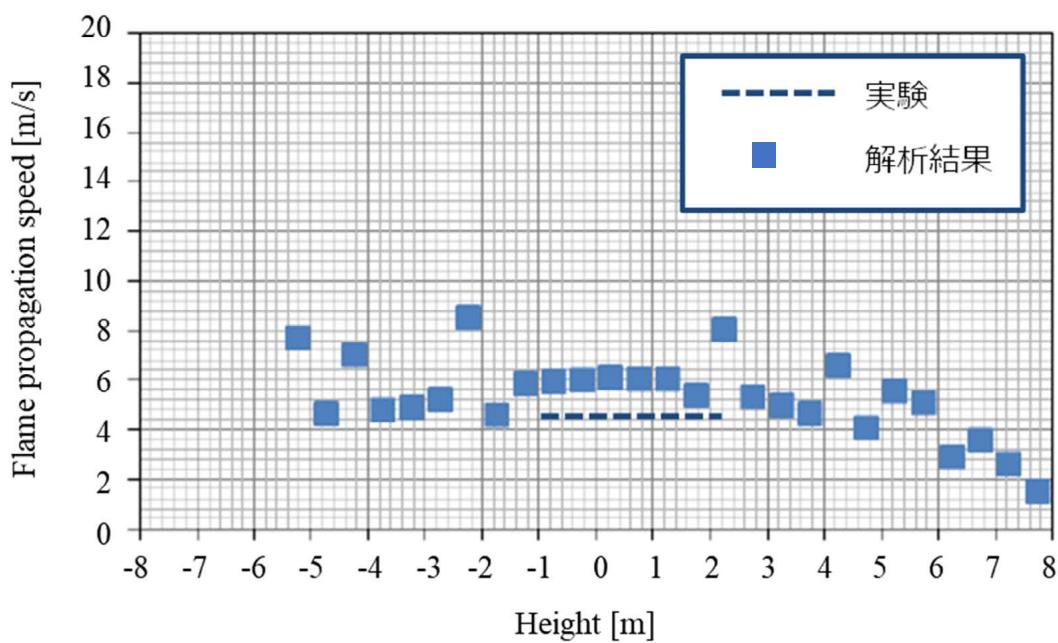


図 4.1.3-9 FLUENT による NTS 試験 (P-15) 照合解析 (鉛直方向火炎伝播速度)

4.1.4 OpenFOAM による燃焼試験照合解析事例

本章では、表 4.1-1 に示す水素燃焼試験のうち、ともに大型体系で行われ、火炎加速から DDT まで発生した RUT 試験と、DDT や早い爆発燃焼は発生せず穏やかな燃焼に留まった NTS 試験、NUPEC 大規模燃焼試験に対する照合解析を OpenFOAM で行った事例を示す。

(1) RUT 試験³⁾

試験概要、着目点は 4.1.3 節で示す FLUENT による試験照合解析と同様である。照合解析の対象は、FLUENT による試験照合解析の対象である sth8 試験に加え、RUT22 試験を対象とした。

表 4.1.4-1 及び表 4.1.4-2 に示す解析条件、図 4.1.4-1 に示すメッシュモデルを用いて解析を実施しており、その際、乱流燃焼速度モデル、自着火モデルを設定している。

得られた照合解析結果を表 4.1.4-3、図 4.1.4-2～図 4.1.4-5 に示す。照合解析にて、sth8 試験、RUT22 試験とともに火炎先端位置の試験結果をよく再現し、試験結果と同様に 1st チャンネルでの DDT 発生を照合解析にて確認できた。

この照合解析により、乱流燃焼モデル、火炎面前方への圧力波の放出と重畠による衝撃波の生成に関する評価手法及び衝撃波背後の自動着火に係る化学素反応モデルの妥当性が確認されている。

なお、再現性向上のために実施した工夫を以下に示す。

- ・水蒸気添加による火炎減速効果を考慮するため、H₂O 濃度に対する層流燃焼速度及び着火遅れ時間の感度を推算可能な Look-up テーブルを構築した。

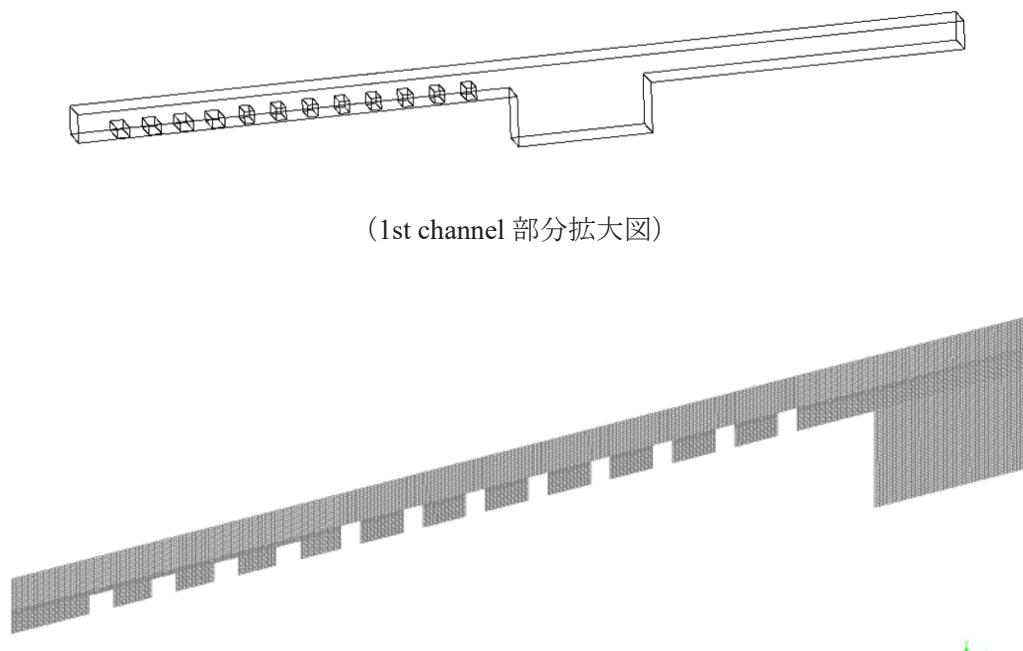


図 4.1.4-1 OpenFOAM による RUT 試験照合解析 メッシュ図

表 4.1.4-1 解析条件 (OpenFOAM による RUT 試験 (sth8) 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考
モデル	メッシュ数	約 2.3 万メッシュ	
	メッシュサイズ	平均 35cm	
	Adaptive Mesh Refinement	レベル 2	
初期条件	温度 (°C)	370	試験条件と同じ
	圧力 (kPa)	101.325	試験条件と同じ
	気体組成	水素 18.5vol% (dry) 水蒸気 15.5vol% (wet)	試験条件と同じ
境界条件	着火位置	入口部	試験条件と同じ
	構造材	断熱	
その他	乱流モデル	SST k- ω	
	燃焼モデル	C-Equation Model (ソース項：乱流燃焼 + 自着火)	
	乱流燃焼モデル	Weller combustion model	
	Pressure-Velocity Coupling	Density base-code	

表 4.1.4-2 解析条件（OpenFOAM による RUT 試験（RUT22）照合解析）

パラメータ		設定・入力値	備考
メッシュ モデル	メッシュ数	約 100 万メッシュ	
	メッシュサイズ	平均 7cm	
	Adaptive Mesh Refinement	なし	
初期条件	温度 (°C)	370	試験条件と同じ
	圧力 (kPa)	101.325	試験条件と同じ
	気体組成	水素 14vol% (dry) 水蒸気 0vol%	試験条件と同じ
境界条件	着火位置	入口部	試験条件と同じ
	構造材	断熱	
その他	乱流モデル	SST k- ω	
	燃焼モデル	C-Equation Model (ソース項: 乱流燃焼 + 自着火)	
	乱流燃焼モデル	Weller combustion model	
	Pressure-Velocity Coupling	Density base-code	

表 4.1.4-3 OpenFOAM による RUT 照合解析結果（DDT 発生有無の比較）

Run #	H2(dry) vol %	Steam vol %	Exp	Calc
sth8	18.5	15.5	DDT (in 1st channel)	DDT (in 1st channel)
RUT22	14.0	0	DDT (in 1st channel)	DDT (in 1st channel)

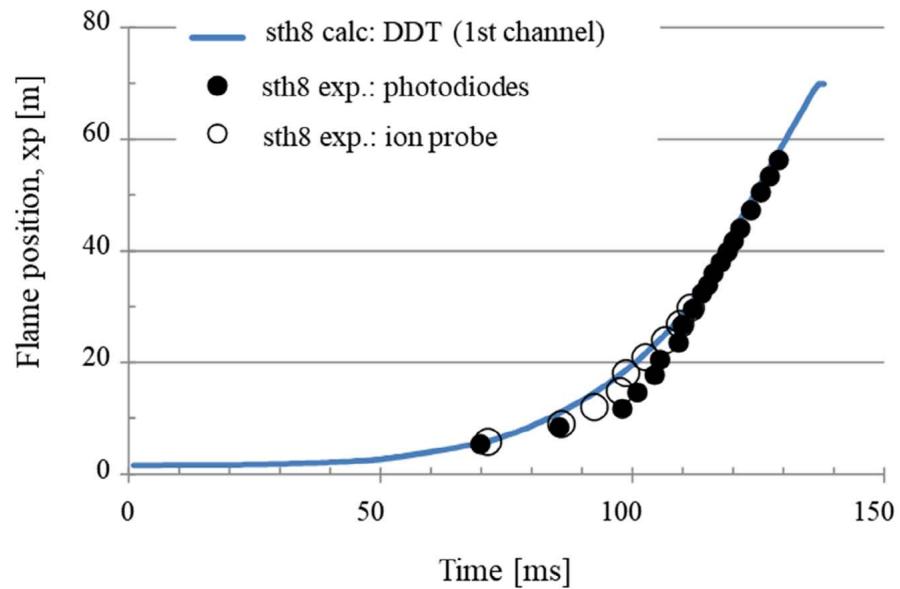


図 4.1.4-2 OpenFOAM による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果 (火炎位置)

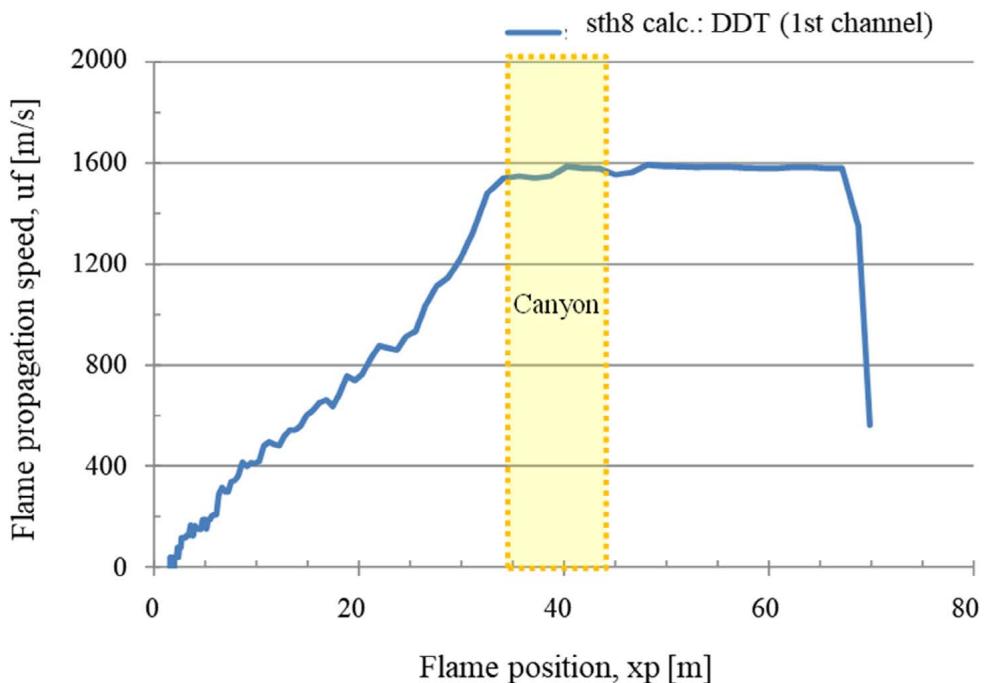


図 4.1.4-3 OpenFOAM による RUT 試験 (sth8) 照合解析結果 (火炎伝播速度)

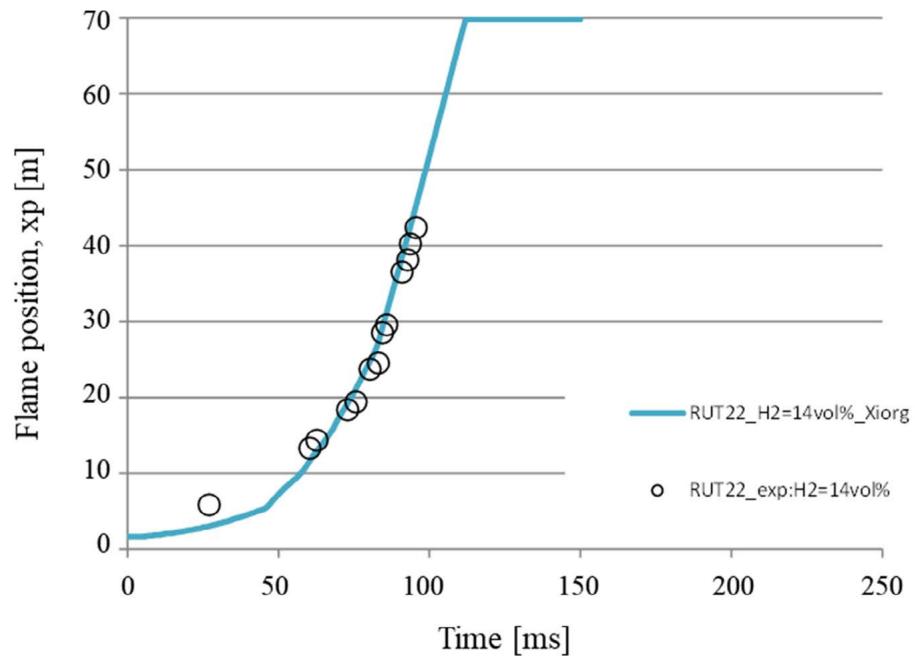


図 4.1.4-4 OpenFOAM による RUT 試験 (RUT22) 照合解析結果 (火炎位置)

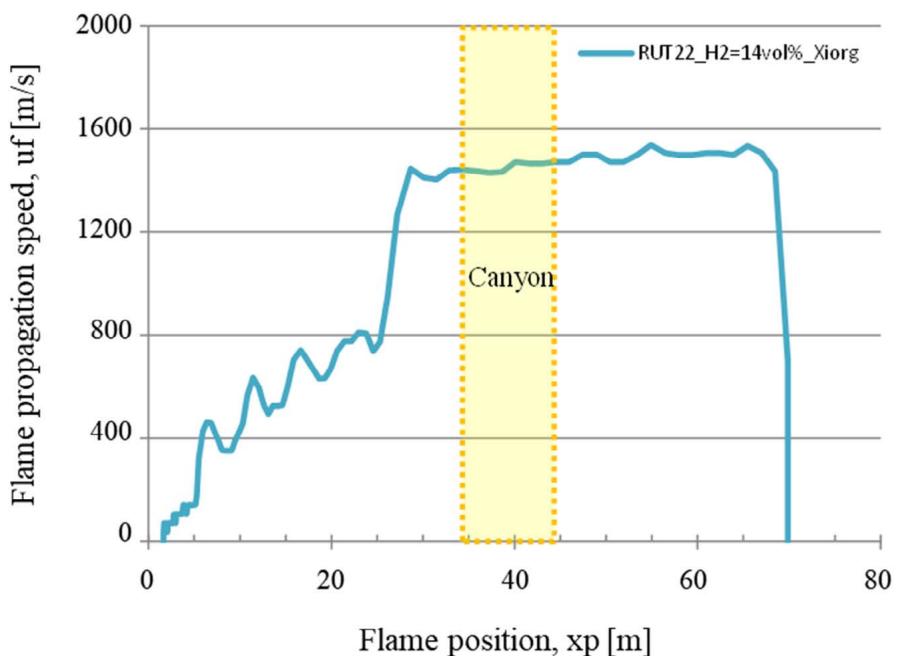


図 4.1.4-5 OpenFOAM による RUT 試験 (RUT22) 照合解析結果 (火炎伝播速度)

(2) NUPEC 大規模燃焼試験³⁾

本試験は、PWR 実機区画を模擬するように直径 8m の球形容器を区画分けした試験装置を用いた水素燃焼試験であり、火炎伝播速度や圧力等が計測されている。NUPEC 大規模燃焼試験体系を図 4.1.4-6 に示す。

本試験照合解析では、火炎伝播挙動に着目し、火炎伝播速度を試験結果と比較する。照合解析の対象は、水素・空気のみのドライ条件である B-4-5 試験、B-4-6 試験及び水蒸気・水素・空気予混合条件である B-7-1 試験、B-7-2 試験とした。NUPEC 大規模燃焼試験では、体系は球形状の容器内に原子炉格納容器内の下部区画の外周部を模擬したドーナツ形状や SG 区画を模擬した円筒状の形状が内包されており、火炎加速が生じにくい体系と生じやすい体系とが混在しているが、15% ドライ水素濃度までの組成で実施された試験結果では、いずれも DDT は生じない結果となっている。

表 4.1.4-4 に示す解析条件、図 4.1.4-7 に示すメッシュモデルを用いて解析を実施しており、その際、乱流燃焼速度モデル、自着火モデルを設定している。

得られた照合解析結果を図 4.1.4-8（火炎伝播速度最大値）、図 4.1.4-9（B-4-5 の圧力（一般部下部））及び図 4.1.4-10（B-4-6 の圧力（一般部下部））に示す。水素燃焼による火炎伝播の速度の最大値は試験結果とよい一致を示し、圧力については、初期のピーク圧力の発生及びその後緩やかに一定の圧力に漸近する変化を再現することを確認した。なお、漸近する圧力値についてみられる乖離は、水蒸気の輻射エネルギーの伝達計算を考慮し、容器構造物への熱損失の影響を反映する必要がある。本照合解析により、主に燃焼モデル（層流、乱流）及び乱流モデルの妥当性を確認している。

なお、再現性向上のために実施した工夫を以下に示す。

- ・メッシュ作成の際、火炎加速の要因となりうる容器下部の障害物を詳細に再現した（蒸気発生部上部にある足場等は省略した）。

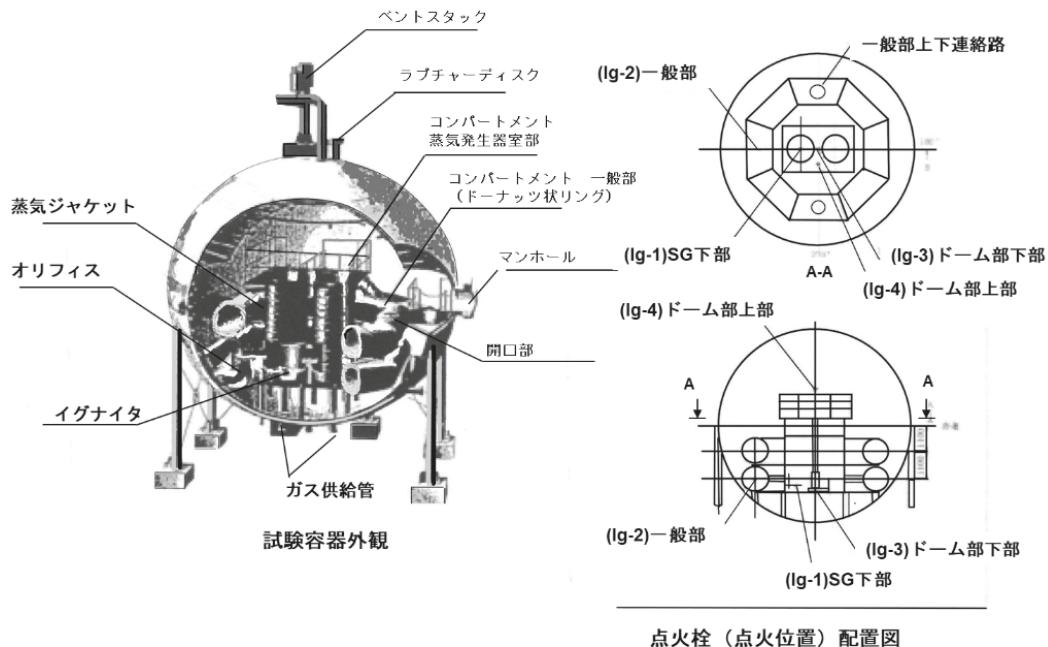
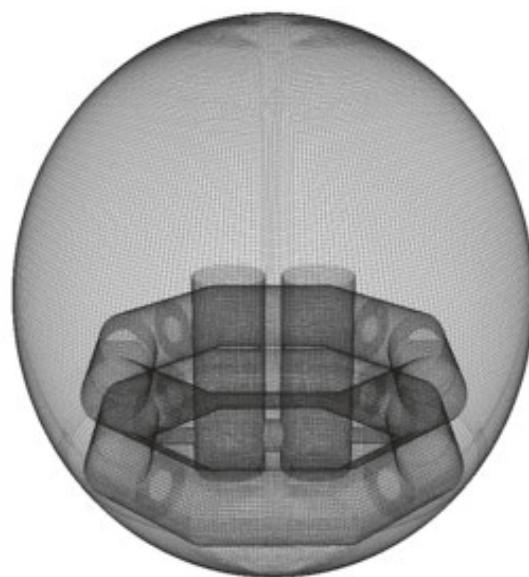
図 4.1.4-6 NUPPEC 大規模燃焼試験体系⁴⁹⁾

図 4.1.4-7 OpenFOAM による NUPPEC 大規模燃焼試験照合解析 メッシュ図

表 4.1.4-4 解析条件 (OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験
(B-4-5, B-4-6, B-7-1, B-7-2) 照合解析)

パラメータ		設定・入力値	備考
モデル メッシュ モデル	メッシュ数	約 300 万メッシュ	
	メッシュサイズ	平均 5cm	
Adaptive Mesh Refinement		なし	
初期条件	温度 (°C)	B-4-5 試験 : 300K B-4-6 試験 : 300K B-7-1 試験 : 327K B-7-2 試験 : 327K	試験条件と同じ
	圧力 (kPa)	101.3	試験条件と同じ
気体組成		B-4-5 試験 水素 12vol% (dry) 水蒸気 0vol% B-4-6 試験 水素 15vol% (dry) 水蒸気 0vol% B-7-1 試験 水素 12vol% (dry) 水蒸気 15vol% (wet) B-7-2 試験 水素 12vol% (dry) 水蒸気 15vol% (wet)	試験条件と同じ
境界条件	着火位置	一般部下部	試験条件と同じ
	構造材	断熱	
その他	乱流モデル	SST k- ω	
	燃焼モデル	C-Equation Model (ソース項 : 乱流燃焼 + 自着火)	
	乱流燃焼モデル	Peters combustion model	
	Pressure-Velocity Coupling	PISO	

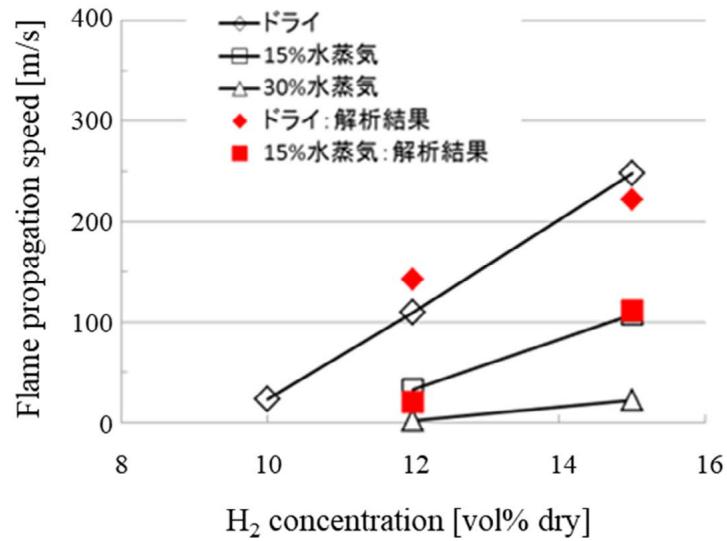


図 4.1.4-8 OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験照合解析結果
(火炎伝播速度 (最大値))

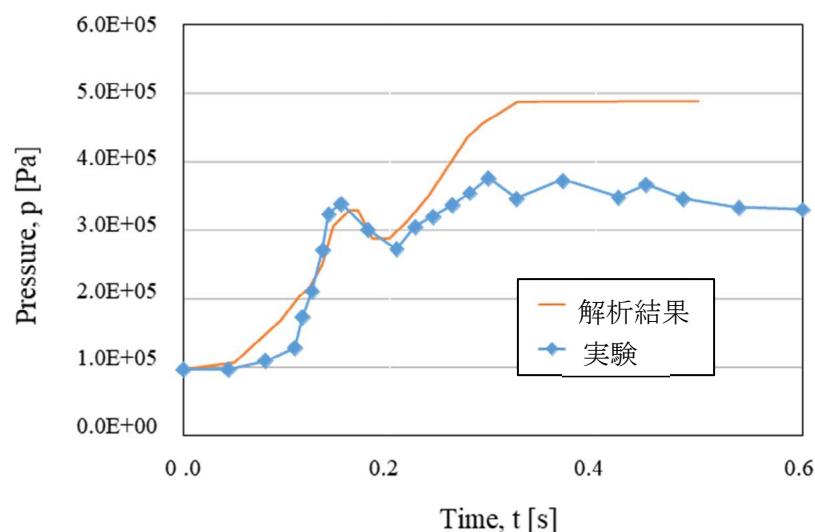


図 4.1.4-9 OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験 (B-4-5) 照合解析結果
(圧力 (一般部下部))

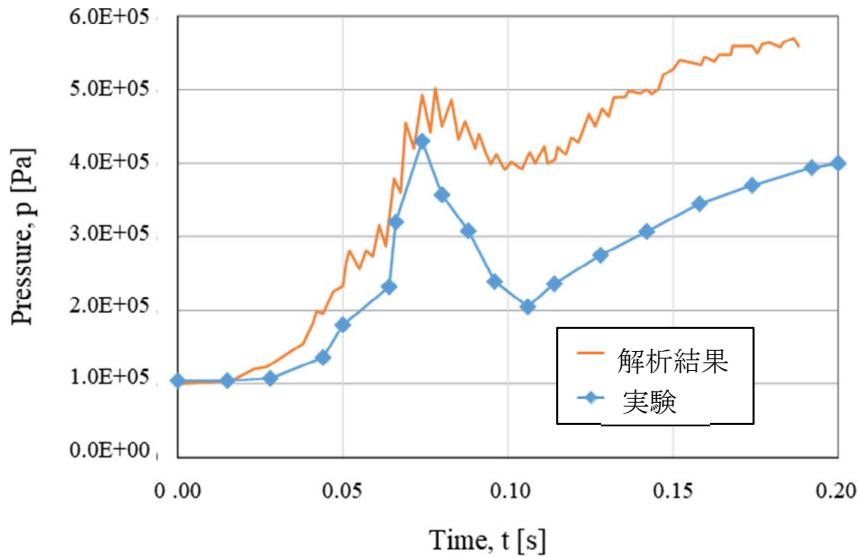


図 4.1.4-10 OpenFOAM による NUPEC 大規模燃焼試験 (B-4-6) 照合解析結果
(圧力 (一般部下部))

(3) 留意事項

照合解析実施における留意事項を以下に示す。

- ・緩やかな燃焼試験での温度の予測性について

CFD を用いた PWR 実機における水素拡散・爆発燃焼解析の主目的は DDT や早い爆燃のような極短時間の燃焼を再現させることであり、燃焼中の機器等との熱授受・熱損失は考慮されない。このため、非断熱の影響が現れる緩慢な燃焼試験では、ガスの温度上昇等について過大予測となる傾向となる。緩慢な燃焼による温度圧力評価は、CFD 解析で火炎加速が生じないと判断された場合には、保守的な AICC を想定した圧力評価、及び 計算負荷が小さい LP コード等による非断熱燃焼解析を推奨する。

- ・DDT 発生の照合解析の対象試験について

大型の管路・ダクト体系（障害物あり・なし）による燃焼試験で DDT 発生が確認されており、これらが対象として適切である。ただし、RUT 試験のキャニオン（ルーム）部においては、火炎面の前方の衝撃波背後の着火に関して、反射波との干渉による効果、コーナ部等での局所的な爆発による圧力波の効果（SWCER）が加わる等、複雑な現象の重畠によって DDT が発生した可能性が考えられる。SWCER の効果は現時点でも明確に統一された理論は定まっておらず、CFD による再現性も途上の段階であるため、照合解析として RUT 試験でキャニオン部での DDT 発生のケースを照合解析の対象として選ぶのは推奨しない。

4.2 実機 PWR 格納容器内水素挙動の計算事例

4.2.1 PWR 格納容器内の移流拡散解析

(1) 解析上の留意点

CFD による格納容器内の水素移流拡散解析は、LP コードでは確認できない詳細な水素挙動等を確認することを目的とするため、初期条件や境界条件は LP コードの入力条件、結果に基づいて設定する。設定の考え方や留意点について、以下の通り整理した。

(a) メッシュサイズ

メッシュサイズは、一般的に着目する現象を解像するのに必要なサイズとするため、流れ場の相似則である Re 数をもとに、解像する乱れのサイズを事前検討した上で、感度解析によってメッシュサイズを検討することが必要となる。特に実機解析においては比較する実験結果がないため、解析の妥当性を示すためには感度解析にパラメータの影響確認が必要である。例えば、本章の実機解析例は破断面から噴流が発生する現象であり、CV 全体の支配的な流れも噴流周りの流れに起因する。したがって、噴流を精度よく再現することが現象を把握する上で最も重要である。噴流周りは Re 数が高く、乱流が発達するため、メッシュ解像度を上げる必要があるが、噴流は相似現象であり、基本的に現象の再現性はメッシュの絶対値ではなく解像度に依存する。例えば、図 4.2.1-1 の簡易モデルを用いた感度解析により、噴流の代表長さ (D) に対して 2 分割以上 ($D/\Delta \geq 2$) であれば、噴流現象を再現（図 4.2.1-1 (b) の点線に解析結果の実線が沿う）できることがわかる。

本章には、拡散・混合試験照合解析（4.1.1 FLUENT による拡散試験照合解析事例及び 4.1.2 OpenFOAM による拡散試験照合解析事例）にて、試験と良好な再現性が確認されたメッシュサイズをもとに、実機での代表長さの設定例を記載している。

(b) メッシュ形状

メッシュには、平面要素の四角形メッシュや三角形メッシュ、ソリッド要素の六面体（ヘキサ）メッシュ、四面体（テトラ）メッシュなどいくつかの種類がある。これのメッシュ形状にて、解析対象を分割し、解析用に再現する。一般的には、対象の形状が比較的単純な場合は六面体メッシュ、複雑な場合は四面体メッシュを作成する。なお、対象の再現精度を上げるには、メッシュを小さくしていくこととなるが、それに伴って解析コストの増加につながってしまう可能性があることに注意が必要である。

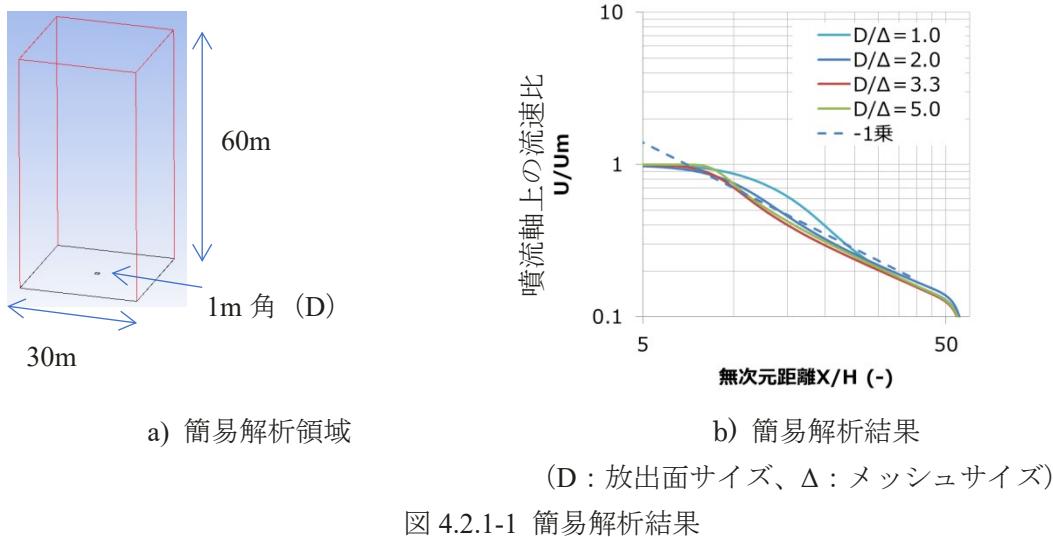


図 4.2.1-1 簡易解析結果

(c) 時間刻み

一般論として、流速、メッシュサイズ、時間刻みの関係から求められるクーラン数 CL を、 $CL \leq 1$ を満たすように設定する必要がある。陰解法の場合はクーラン数による制限を緩和することができるが、解析の安定性などを考慮して設定していくことが必要である。メッシュサイズと時間刻みは相互に関係しており、メッシュサイズが小さく、時間刻みが小さいと再現性は向上するものの、解析に多くの時間を要することとなるため、上述した適切なメッシュサイズの選定とともに事前検討を行うことが重要である。

(d) ソーススター

水素・水蒸気放出、発熱等、解析領域内への境界条件は、LP コードの解析結果を使用する。解析領域内に、物質を放出するモデルとして、熱、質量、運動量、乱流、化学種などといったスカラー量をソースとして定義し計算する。本章では、格納容器内の水素や水蒸気といった解析対象についての熱、運動量などを設定し、解析を行っている。

(e) 凝縮

実機格納容器内の水素移流拡散現象においては、放出されるガスは水蒸気と水素が混ざっており、高温の水蒸気は壁面などで冷却されて凝縮が発生するため、凝縮を考慮することは非常に重要である。凝縮を考慮できない場合、容器内圧力が過度に高くなるため、実現象と乖離した解析結果となる可能性がある。主な凝縮箇所としては、壁面による冷却、スプレイとの熱交換を含めた空間での凝縮である。各凝縮モデルを UDF（ユーザ定義関数）等で考慮する。

(f) 乱流モデル

乱流モデルは計算精度や解析速度の観点から Realizable k- ϵ を用いることを推奨する。Realizable k- ϵ は、散逸項が特異点をもたない (k が負の値をとらない) ようにする等、幅広い流体解析に適用されている 2 方程式系の標準 k- ϵ の幾つかの問題点を改善している。またモデル係数を平均速度勾配、乱流エネルギー、散逸率、渦度テンソルの変数として系の特性量による影響を考慮することで、多くの流れ場（剥離、旋回、噴流など）で適合性の向上がみられる乱流モデルと考えられている。壁近傍を精度よく解析する場合には、標準 k- ω や SST k- ω を用いることも有効である。一方、計算コストの観点で壁面近傍のメッシュを細かくできない場合は、放出された水素や水蒸気の挙動は標準 k- ϵ のモデルと大きな差は生じない。

(g) 解析精度

解析精度については、複数の NUPEC 水素拡散・混合試験照合解析にて各種計算条件の違いが解析結果に及ぼす影響を検証した。

(h) 燃焼解析への引き継ぎ

燃焼解析へと引き継ぐタイミングとしては、任意のポイント（もしくは領域）における水素混合ガス（水蒸気含む）が可燃範囲となった状態や、事象発生から任意の経過時間における過渡状態などといったことが想定される。その引き継ぎのタイミングでの拡散解析結果（水素、水蒸気、空気の濃度分布データ他）を格納したデータファイルを、燃焼解析用のメッシュに展開し、初期状態（濃度分布他）を再現できているか確認できた後、燃焼解析を始めることとなる。

(2) FLUENTによる実機移流拡散解析事例

実機解析事例として、「大破断 LOCA 時に低圧注入機能、高圧注入機能及び格納容器スプレイ注入機能が喪失する事故」の拡散解析を示す。解析における各種設定を表 4.2.1-1 と図 4.2.1-2 に示す。なお、これらの設定値はあくまで参考値であり、放出条件や境界条件によって設定条件は適宜変更する必要がある。

解析領域は CV 空間から下部水没領域を除外した領域とし、下部水没領域は炉心損傷時の水位に基づいている。また、水素・水蒸気の放出位置は 1 次系冷却材配管、RV キャビティ水面、円周部水面の 3箇所を設定した。またスプレイ条件については、各プラントで設置されているスプレイ仕様に基づいた設定を行った。

放出位置である一次系冷却材配管の破断面では噴流が形成され、放出面積は 0.83m^2 である。放出位置は 0.19m メッシュで分割しており、十分解像度が高く、基準となるメッシュササイズとした。

4.1.1 (2) 項の NUPEC 拡散試験との比較においては、放出源（ソース項）を 2 次元的に 80 以上に分割しており、1 セルのサイズは約 0.18m メッシュであったが、実機条件においても同程度とした（実機は流入面の面積が小さいため、分割数が少なくなるが、簡易モデルの検討からも分割数は十分である）。

表 4.2.1-1 FLUENT による実機移流拡散解析の設定値例（「大破断 LOCA 時に低圧注入機能、高压注入機能及び格納容器スプレイ注入機能が喪失する事故」）

項目	設定値		備考
メッシュ条件	総メッシュ数：約 250 万 メッシュサイズ：約 20～80 cm		
初期条件	CV 内温度 (°C)	LP コード解析結果	水素放出時の LP コード結果 を引き継ぐ
	CV 内压力 (MPaG)	LP コード解析結果	
	組成	LP コード解析結果	
水素・水蒸気 放出条件	放出位置	1 次系冷却材配管（破断口） 原子炉下部キャビティ下水面 円周部水面	
	放出率 (kg/s)	LP コード解析使用値	
壁面熱条件	CV 内壁表面温度	LP コード解析結果	
	内部構造壁表面温度	LP コード解析結果	
	RCS からの放熱	LP コード解析結果	
スプレイ条 件	壁面での取り扱い	Escape	
凝縮の取り扱い		空間・壁面・スプレイ	
乱流モデル		Realizable k-ε	

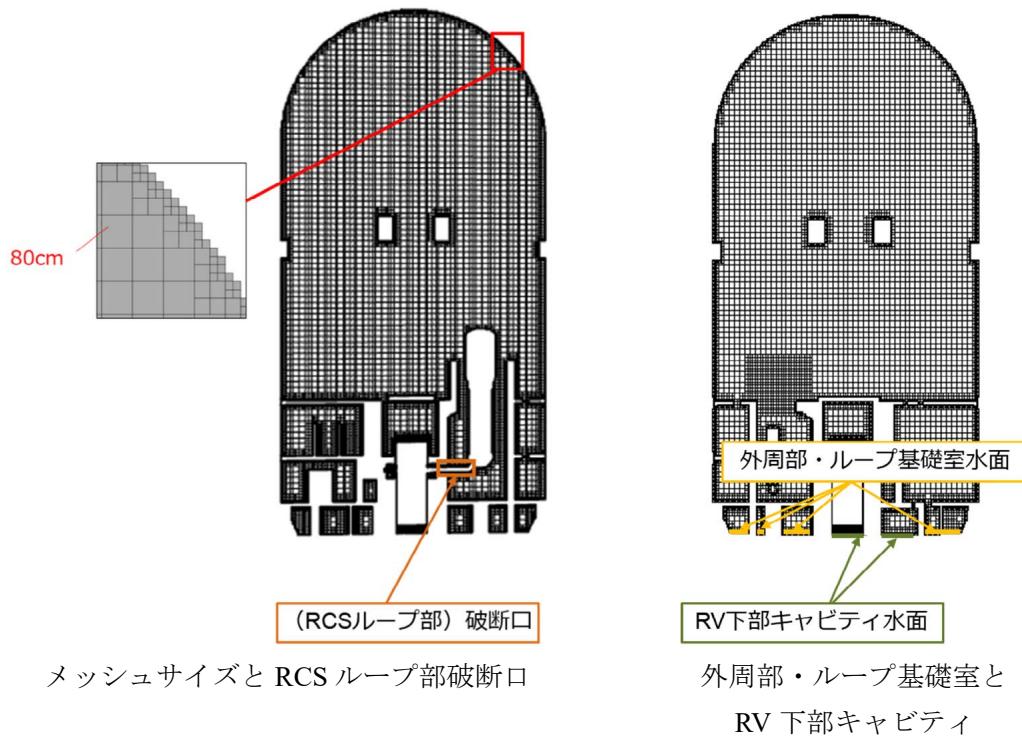


図 4.2.1-2 解析領域、解析メッシュ図及び放出位置

次に解析結果を図 4.2.1-3 に示す。図 4.2.1-3 a)、b)は 500 秒時点の拡散解析結果を示しており、1 次系冷却材配管からの噴流がドーム部の方に拡散していく様子と、下部水面部から水蒸気が出ていく様子が確認できた。拡散計算に続き燃焼計算を行う場合には、着火タイミングの設定には図 4.2.1-3 c)に示すように、三元図により水素・酸素・水蒸気濃度が水素可燃領域内に入る時刻や、イグナイタの着火条件を満たす時刻の拡散計算結果を燃焼計算の初期条件にする方法が考えられる。

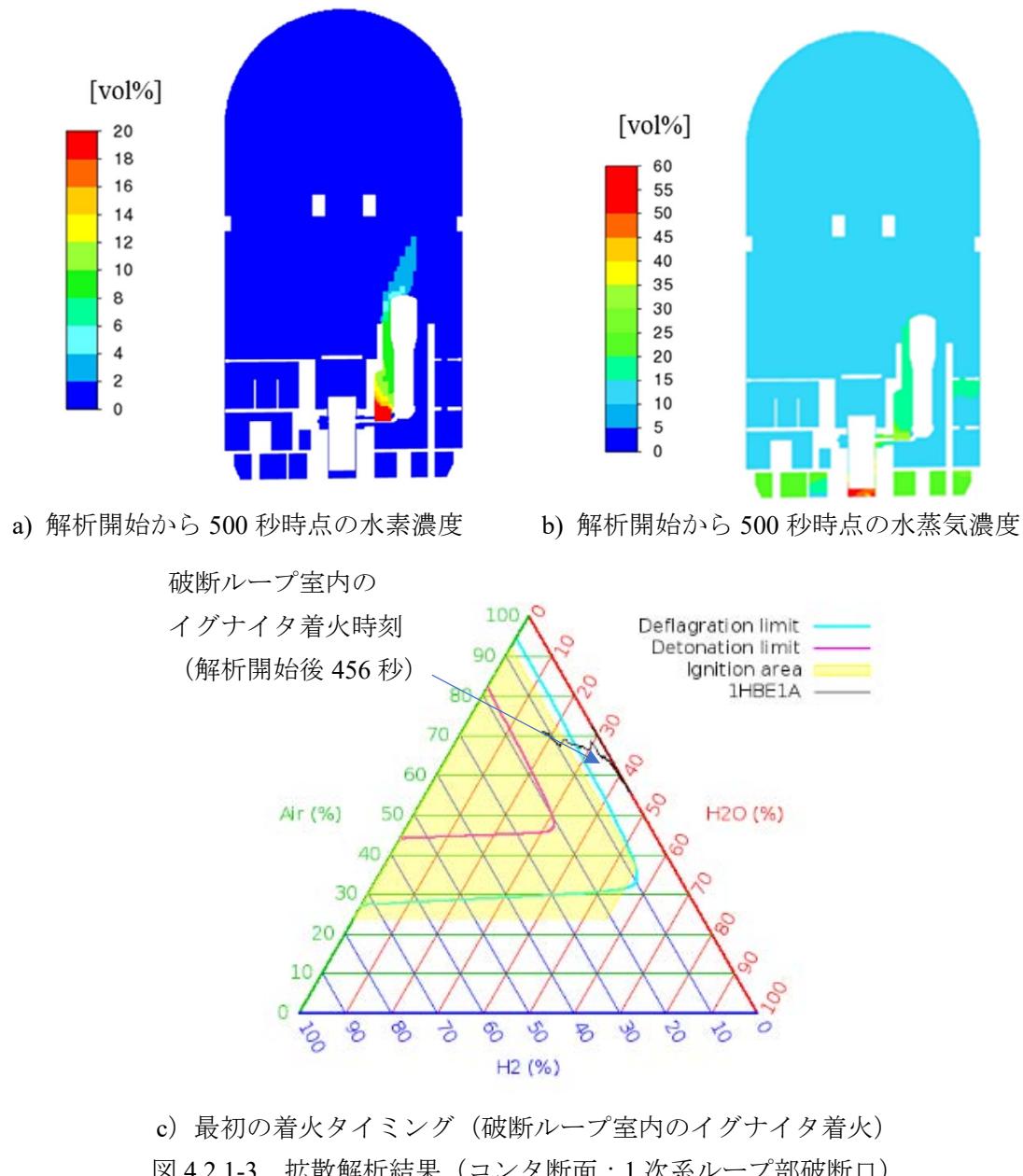


図 4.2.1-3 拡散解析結果（コンタ断面：1 次系ループ部破断口）

(3) OpenFOAM による実機移流拡散解析事例

実機解析事例として、「加圧器気相部破断後に炉心損傷に至り、格納容器スプレイ注入機能が喪失する事故」の拡散解析を示す。解析における各種設定及びメッシュ図を表 4.2.1-2 と図 4.2.1-4 に示す。なお、これらの設定値はあくまで参考値であり、放出条件や境界条件によって設定条件は適宜変更する必要がある。

解析領域は CV 空間から下部水没領域を除外した領域とし、下部水没領域は炉心損傷時の水位に基づいている。また、水素・水蒸気の放出位置は加圧器気相部破断位置に設定し、スプレイは考慮しない。

表 4.2.1-2 OpenFOAM による実機移流拡散解析の設定値例（「加圧器気相部破断後に炉心損傷に至り、格納容器スプレイ注入機能が喪失する事故」）

項目	設定値		備考
メッシュ条件	総メッシュ数：約 180 万 メッシュサイズ：約 20～80 cm		
初期条件	CV 内温度 (°C)	LP コード解析結果	水素放出時の LP コード結果を引き継ぐ
	CV 内圧力 (MPaG)	LP コード解析結果	
	組成	LP コード解析結果	
水素・水蒸気放出条件	放出位置	加圧器気相部破断位置	
	放出率 (kg/s)	LP コード解析使用値	
壁面熱条件	CV 内壁表面温度	LP コード解析結果	
	内部構造壁表面温度	断熱	
	RCS からの放熱	なし	
凝縮の取り扱い	空間・壁面・スプレイ		
乱流モデル	Realizable k-ε		

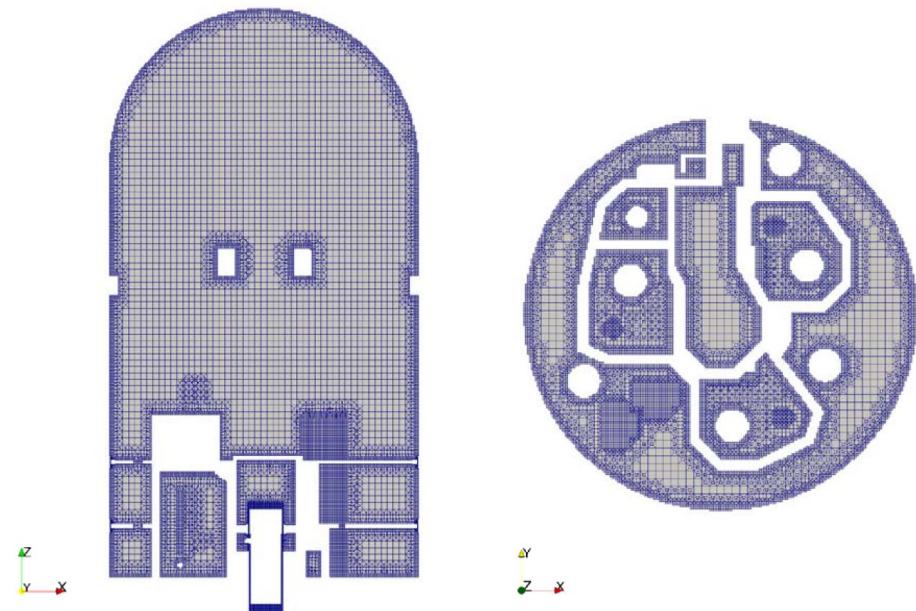


図 4.2.1-4 実機解析メッシュの全体図と断面図

600 秒、1200 秒、2400 秒、3600 秒時点での水素濃度分布図を図 4.2.1-5 に、速度ベクトル分布図を、図 4.2.1-6 に示す。600 秒の時点で、側面への噴出気体によって壁面に沿った大きな循環流ができていることが確認できる。この循環流により、放出口より下部まで水素が拡散し、CV 内全体が均一濃度になったと考えられる。

本解析ケースは、NUPEC 試験 (M-8-1) と同様に加圧器上部から水素を放出した解析である。NUPEC 試験では上部に成層化し、実機解析では全体に均一に拡散したことについては、放出口からの水素の放出量の影響と考えられる。NUPEC 試験での水素の放出量は 0.027kg/s であるのに対して、実機解析では加圧器気相部破断 + 炉心損傷時に想定される水素放出量として最大で 1.2kg/s の水素を放出させているために、放出時の流速が大きく、NUPEC 試験ではみられなかった容器全体での循環流が発生したと考えられる。

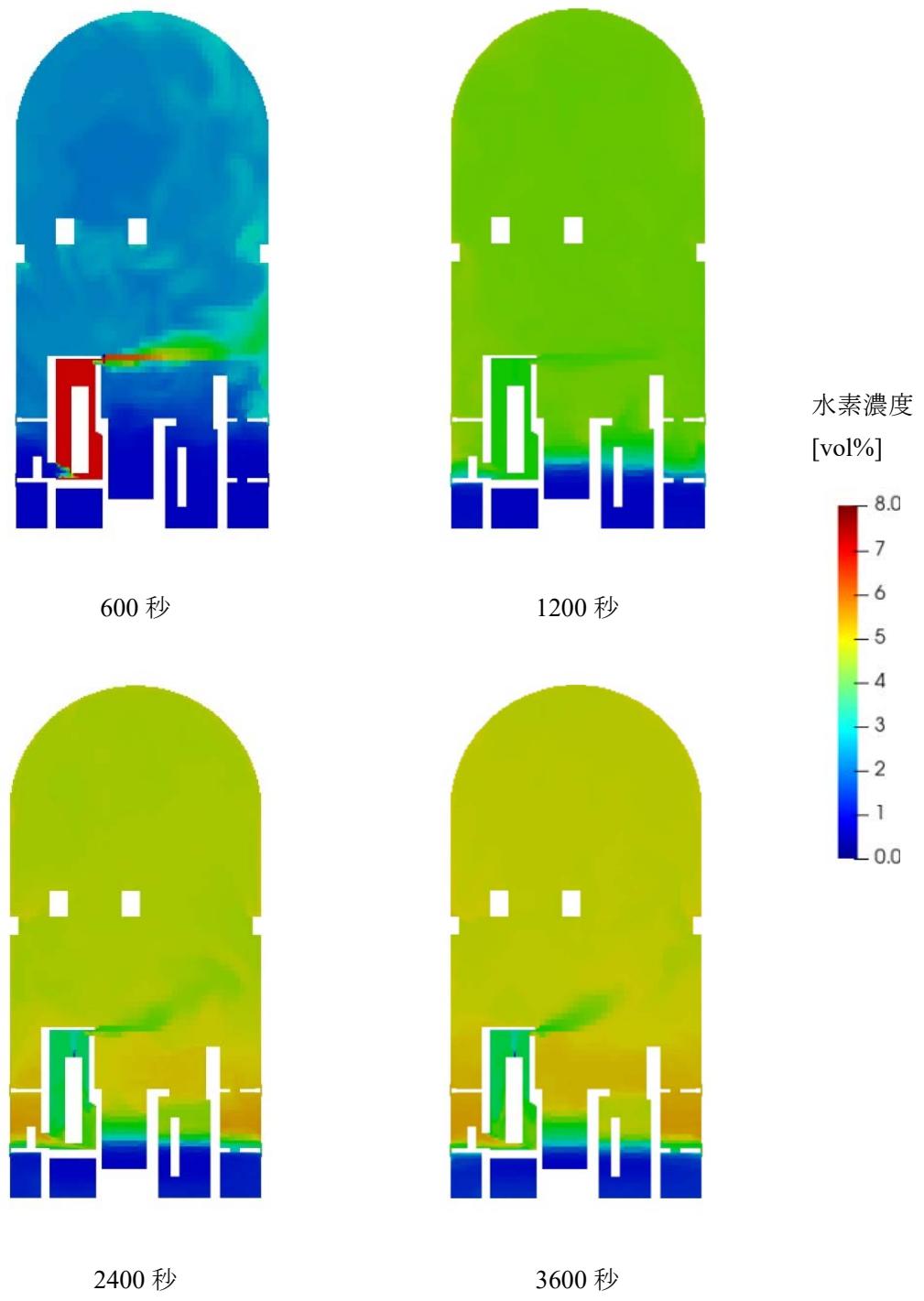


図 4.2.1-5 拡散解析結果（水素濃度分布）

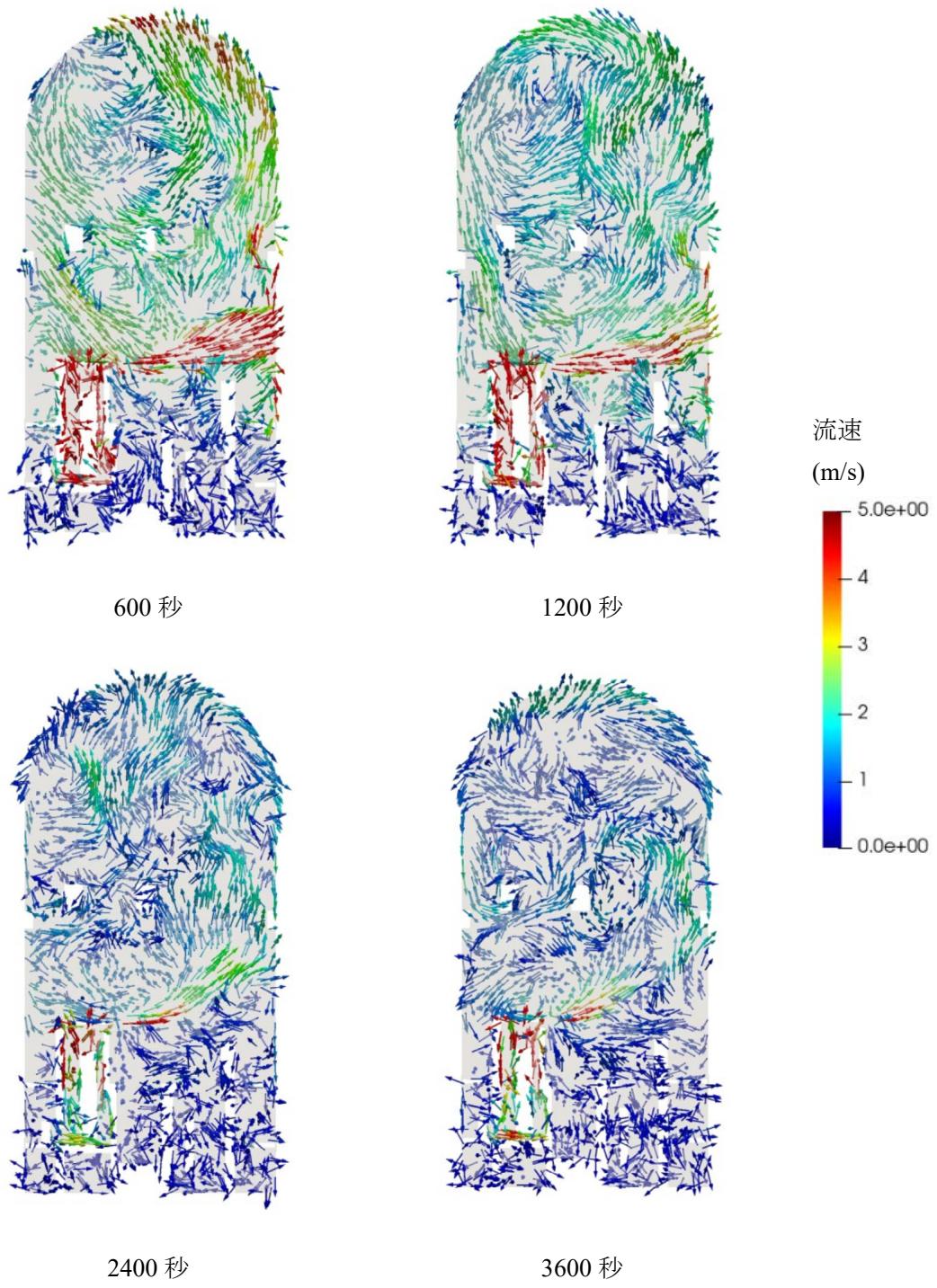


図 4.2.1-6 拡散解析結果（速度ベクトル図）

4.2.2 PWR 格納容器内の燃焼解析

(1) 解析上の留意点

CFD による格納容器内の水素混合燃焼解析は、CFD 拡散解析結果を引き継いで初期条件とするか、予混合等ユーザが初期条件を設定する方法がある。各設定項目における設定の考え方や留意点について、以下の通り整理した。

(a) メッシュサイズ

実機スケールに該当する RUT 試験の照合解析で火炎加速（FA : Flame Acceleration）及び爆轟遷移（DDT : Deflagration to Detonation Transition）を再現したメッシュサイズ解析結果に基づき、30cm 程度のメッシュサイズに AMR レベル 2 を使用した。計算前のメッシュを粗くして AMR を適用することで、メッシュ数を低減して計算高速化しつつ、FA 及び DDT の捕捉に必要な部分のみメッシュ解像度を上げて計算精度を維持した。

(b) メッシュ形状

拡散解析と同様、一般的には六面体形状が推奨される。ただし、曲面の再現がどうしても必要な場合には、曲面を再現しやすい形状（四面体形状等）を組み合わせて作成した。

(c) 時間刻み

要求されるタイムステップの細かさは計算スキーム（陰解法/陽解法）によって異なるが、一般的には、初回はタイムステップを十分細かくし、計算収束性が悪化しない範囲で、Courant 数に留意しつつ粗くしていった。

(d) 着火

初期着火領域は実機における水素処理装置（イグナイタ・PAR 等）稼働時の影響を反映して与えた。水素処理装置から離れた場所に影響しないよう、はじめは初期着火領域を十分狭く（例：水素処理装置がメッシュサイズより小さい場合は 1 メッシュ相当、など）設定するが、解析において燃焼が継続されない場合は領域を少しづつ広げていった。

(e) 圧縮性

数値解析において輸送方程式を解くソルバーとしては、大きく「圧力ベース」（低マッハ数流れ）と「密度ベース」（高速圧縮流）の 2 つがあり、衝撃波は高速圧縮流であるので、一般的には密度ベースソルバーを選択する。一方で、密度ベースソルバーは、計算コストが著しく増大するため、本章では、FLUENT の圧力ベースソルバーの適用性も検証した。メッシュサイズ及び収束アルゴリズム（例：PISO）を適正に選定し、

爆轟波の生成を捕捉可能な物理モデル（例：自着火モデル）を考慮することで、現象の再現性を得ることができた。

(f) 層流燃焼速度

標準状態における層流燃焼速度はガス組成に依存するため、当量比・水蒸気比率に対応する要素試験データと整合するよう与えた(Fluent 及び OpenFOAM を用いた解析では、要素試験データと整合するような層流燃焼速度の Look-up テーブルを構築した)。

(g) 乱流燃焼速度

層流燃焼速度をもとに、乱流起因の加速を考慮した乱流燃焼速度が計算される（加速を考慮するモデルの例：Weller, Peters）。

大規模燃焼試験における FA 状態の火炎伝播速度及び DDT 発生有無に対する再現精度の観点から適正な乱流燃焼速度モデルを選定した。

(h) 乱流モデル

適用する乱流モデルについては、先行研究²⁶⁾を参考にして SST k- ω を使用した。

(i) 解析精度

解析精度については、前項に示す通り、複数の燃焼試験照合解析にて検証した。

(j) 構造強度解析への引き継ぎ

水素燃焼による構造への影響を構造解析にて確認するために、燃焼解析から得られる圧力分布の時刻歴変化を格納したデータファイルを、メッシュ形状の異なる構造強度解析用モデルの境界条件に変換して、圧力分布の再現性を確認した後、構造解析を開始した。

(2) FLUENTによる実機燃焼解析事例

実機解析例として、FLUENTによる「大破断 LOCA 時に低圧注入機能、高圧注入機能及び格納容器スプレイ注入機能が喪失する事故」の拡散解析結果(4.2.1(2)節)を引き継いだ燃焼解析を以下に示す。また、解析における各種設定を表 4.2.2-1 と図 4.2.2-1 に、FLUENTによる拡散解析結果の水素濃度分布と FLUENTによる燃焼解析に入力した水素濃度分布の比較を図 4.2.2-2 に示す。なお、これらの設定値はあくまで参考値であり、条件によって設定条件は適宜変更する必要がある。

解析領域は拡散解析に合わせ、CV 空間から下部水没領域を除外した領域とし、下部水没領域は炉心損傷時の水位に基づいている。

表 4.2.2-1 CV 内燃焼解析条件 (FLUENT)

項目	設定
計算対象	格納容器 (3 ループプラント)
乱流モデル	SST k- ω
燃焼モデル	C-Equation Model (ソース項：乱流燃焼、自着火)
乱流燃焼モデル	Peters
Pressure-Velocity Coupling	PISO
Δt	0.25ms
メッシュ数	約 240 万メッシュ (初期)
メッシュサイズ	平均約 30cm (初期)
Adaptive Mesh Refinement	あり
AMR Level	2
初期温度	拡散計算結果の引き継ぎ
初期圧力	拡散計算結果の引き継ぎ
初期水蒸気濃度 (vol%)	拡散計算結果の引き継ぎ
初期水素濃度 (vol%-dry)	拡散計算結果の引き継ぎ
着火位置	ループ室内

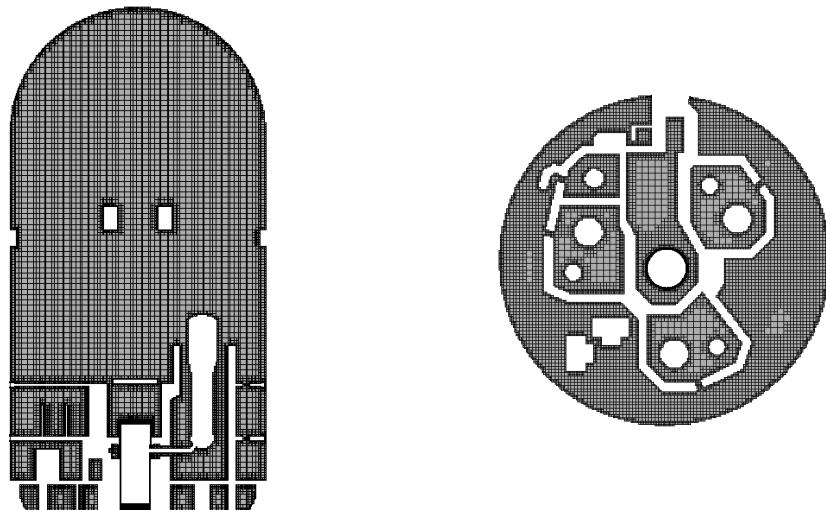


図 4.2.2-1 実機解析メッシュの全体図と断面図

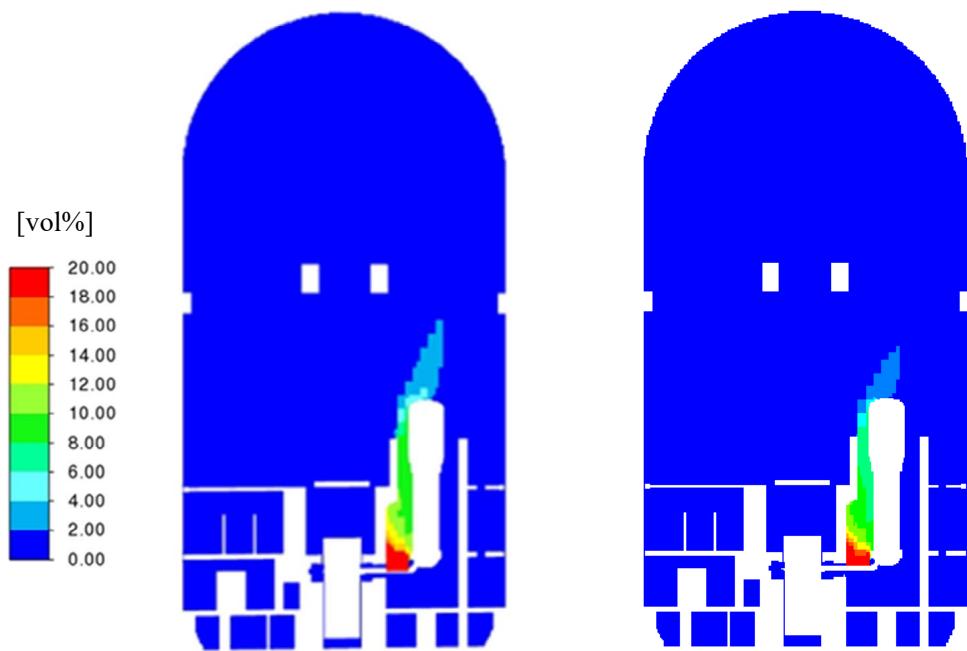


図 4.2.2-2 FLUENT 拡散解析結果の水素濃度分布と FLUENT 燃焼解析の初期水素濃度分布の比較

火炎面の進展についての解析結果を図 4.2.2-3 に示す。着火後約 2.0 秒でループ室内の火炎伝播が完了し、上部の区画に向かって火炎が進展するが、上部区画では火炎の進展は抑えられ、目立った火炎伝播は見られず、DDT の発生は確認されなかった。

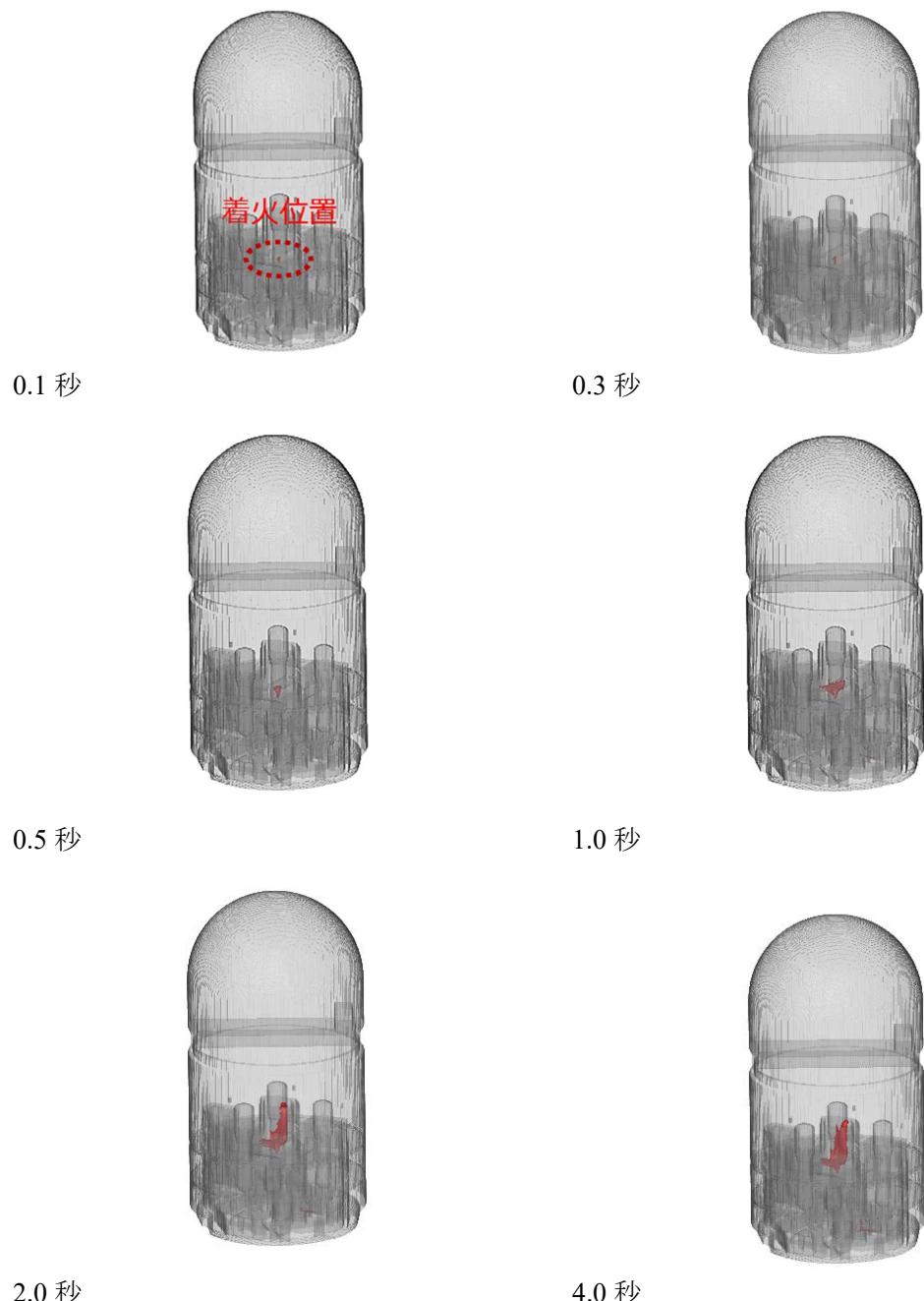


図 4.2.2-3 火炎面の進展状況 (AEI : 拡散計算約 456 秒時点から引き継ぎ)

(3) OpenFOAM による実機燃焼解析事例

実機解析事例として、CV 内が水素濃度 13vol% ドライの予混合状態における燃焼解析を以下に示す。解析における各種設定を表 4.2.2-2 と図 4.2.2-4 に示す。なお、これらの設定値はあくまで参考値であり、条件によって設定条件は適宜変更する必要がある。

解析領域は CV 空間全域としており、CV 内水位はないものとしている。

表 4.2.2-2 CV 内燃焼解析条件 (OpenFOAM)

項目	設定
計算対象	格納容器 (4 ループプラント)
乱流モデル	SST k- ω
燃焼モデル	C-Equation Model (ソース項 : 乱流燃焼 + 自着火)
乱流燃焼モデル	Weller
Pressure-Velocity Coupling	Density base-code
Δt	Dynamic adjustment according to CFL
メッシュ数	約 250 万メッシュ (初期)
メッシュサイズ	平均約 35cm (初期)
Adaptive Mesh Refinement	あり
AMR Level	2
初期温度	300K
初期圧力	0.101325MPa
初期水蒸気濃度 (vol%)	0 vol%
初期水素濃度 (vol%-dry)	13 vol%
着火位置	外周部

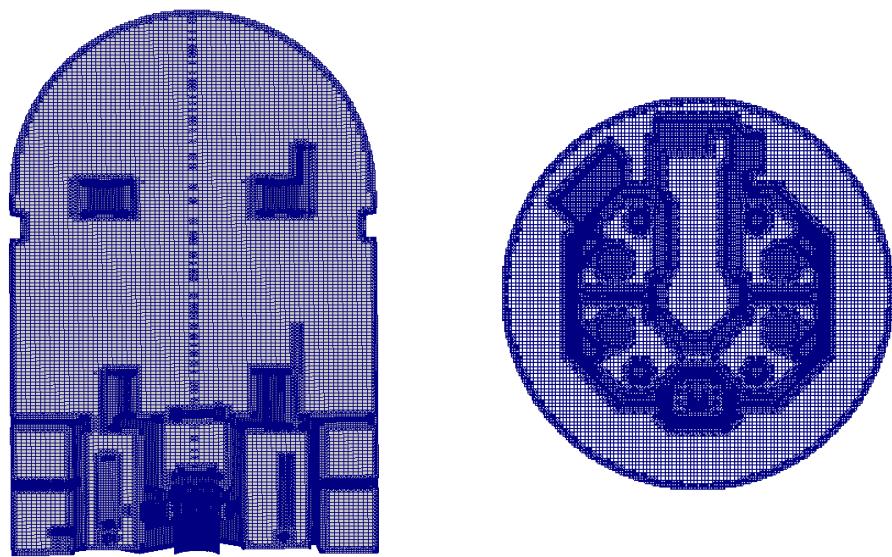


図 4.2.2-4 実機解析メッシュの全体図と断面図

火炎面の進展についての解析結果を図 4.2.2-5 に示す。下部区画の各フロアの火炎面の広がりは、比較的緩やかであり、ドーム部頂部での火炎の広がりはさらに緩やかである。DDT 発生時に生じる滑らかな爆轟波面（火炎と衝撃波のカップリング）は確認されないことから、DDT は発生していない。



図 4.2.2-5 解析結果: 火炎面時間変化

4.2.3 PWR 格納容器構造解析

(1) 解析上の留意点

格納容器内の構造解析は、水素爆発に対する原子炉格納容器の構造健全性を確認すること目的とした。実機格納容器の構造解析では、CFD による燃焼解析から得られた格納容器内壁の圧力時刻歴結果を引き継いで応答解析を実施する。

PWR の格納容器は鋼製 CV と PCCV に分類され、構造解析モデルはそれぞれ異なる。それぞれの推奨入力について以下に示す。

<鋼製 CV>

鋼板をシェル要素でモデル化する。破損状況を確認するためと非線形特性を考慮した材料モデルを設定する。また、鋼製 CV 構造モデルでは、鋼板のひずみ速度依存性も考慮する。

鋼板材料モデルは、破断ひずみとひずみ速度依存性を模擬できる Piecewise JC 材料モデル⁵⁰⁾を用いる。Piecewise JC モデルでは、降伏後の応力ひずみ関係を多直線で近似し、ひずみ速度依存性を以下の式でモデル化する。

$$\sigma = \sigma_0 (1 + C * \ln(\dot{\epsilon} / \dot{\epsilon}_0)) \quad (4.2-1)$$

ここで、 σ_0 ：静的降伏応力、C：ひずみ速度係数、 $\dot{\epsilon}$ ：ひずみ速度、 $\dot{\epsilon}_0$ ：準静的ひずみ速度である。

鋼板の応力ひずみ関係は、材質に合わせて JSME 材料規格や JIS などから設定する。

<PCCV>

コンクリート、鉄筋、ライナーをモデル化する。テンドンは直接はモデル化せず、テンドンによるコンクリート圧縮応力と等価な効果となるようにコンクリート外表面に圧力を設定する。

構造解析においては、格納容器のコンクリート、鉄筋、ライナー各部の破損状況を確認するため、限界ひずみと非線形特性を考慮した材料モデルを設定する。

コンクリート材料モデルは、コンクリートの破壊を表現できる RHT コンクリートモデル⁵¹⁾を用いることを推奨する。RHT コンクリートモデルは衝撃荷重を与えられたコンクリート構造物の解析向けに開発された材料モデルであり、AUTODYN の材料ライブラリには圧縮強度 Fc35MPa と 140MPa のパラメータセットが用意されている。コンクリートの限界ひずみについては JSME ガイドライン等の規定がないため、爆破試験や衝突試験の再現解析により材料モデルの妥当性を確認する必要がある。

鉄筋は JSME ガイドライン⁵¹⁾に降伏応力、引張強さ及び伸びが規定されていることから、弾塑性特性と限界ひずみによる要素破損を表現できる Bilinear Hardening などのバイリニア材料構成則⁵²⁾を推奨する。

また、ライナーも鉄筋同様に弾塑性特性と限界ひずみを設定できる Bilinear Hardening などのバイリニア材料構成則を推奨する。ライナーは JSME ガイドラインには規定がないため、JSME 材料規格や JIS などから応力-ひずみ関係を設定する。

解析モデルの要素設定は、コンクリートはソリッド要素、鉄筋はビーム要素、ライナーはシェル要素でモデル化する。鉄筋は円筒部と半球部（頂部を除く）の周方向鉄筋と逆 U 字鉄筋を内側 2 段、外側 2 段でそれぞれモデル化する。ライナーはコンクリート内表面に節点共有で接続し、鉄筋はコンクリート内部に作成し、カップリング機能を用いて結合する。

解析設定としては、最初にテンションによる等価圧力を付与するための外表面圧力によるつり合い状態を作成後、燃焼解析結果の圧力時刻歴入力による応答解析を実施する。

(2) AUTODYN による実機構造解析事例

(a) 鋼製 CV 構造解析

実機解析事例としては、これまでに、AUTODYN を用いた解析事例⁵³⁾が報告されている。本報では、OpenFOAM による燃焼解析結果を引き継いだ鋼製 CV の実機構造解析事例を以下に示す。また、解析における各種設定を表 4.2.3-1、図 4.2.3-1 に、OpenFOAM による燃焼解析結果の圧力分布と AUTODYN による構造解析に入力した圧力分布の比較を図 4.2.3-2 に示す。なお、これらの設定値はあくまで参考値であり、材料定数や境界条件によって適宜変更する必要がある。なお、本解析例では保守的にひずみ速度依存性は考慮していない。また、温度条件については、非常に短時間の瞬間的な圧力上昇の事象を扱うため、格納容器内の通常時設計温度で一定とする。

表 4.2.3-1 AUTODYN による鋼製 CV 構造解析の設定値例

項目	設定値	備考
モデル化範囲	鋼板	
温度	通常運転時温度一定	
メッシュ数	約 60,000 要素	
ライナー	要素	シェル要素
	材料モデル	Piecewise JC
	ヤング率	2.10×10^5 (MPa)
	材質	SGV480
	降伏応力	410 (MPa)
	破断ひずみ	15.7 (%)
	準静的ひずみ速度	0.001 (1/s)
		参考文献 ⁵³⁾

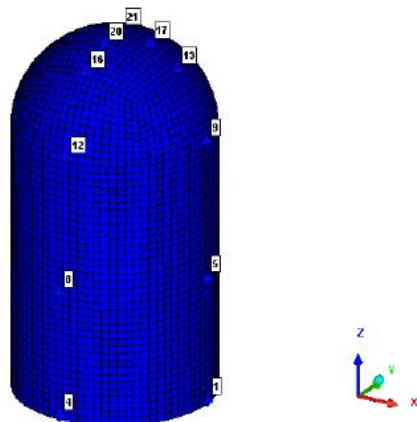
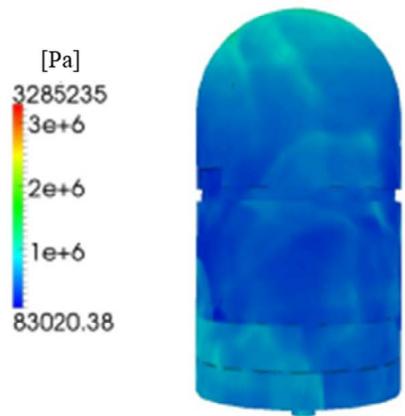
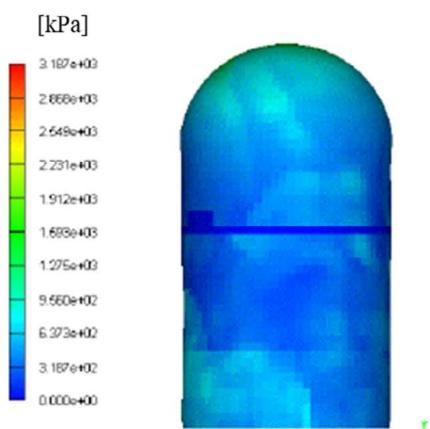


図 4.2.3-1 AUTODYN による鋼製構造解析の解析モデル図



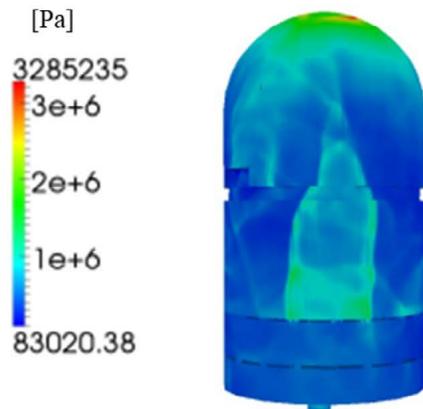
(a) OpenFOAM (絶対圧)



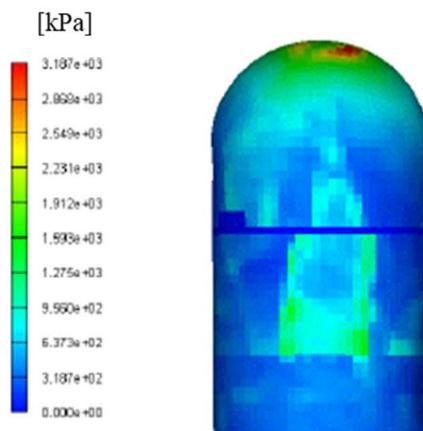
(b) AUTODYN (ゲージ圧)

(i) 正面からの視点

図 4.2.3-2 OpenFOAM 燃焼解析の圧力結果と AUTODYN に入力した圧力条件の比較 (1/3)



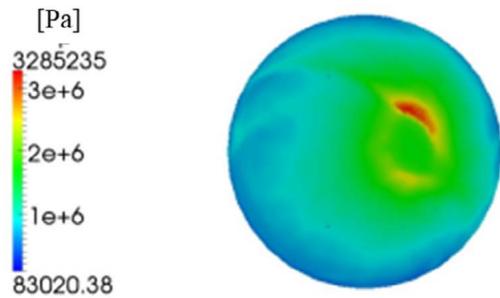
(a) OpenFOAM (絶対圧)



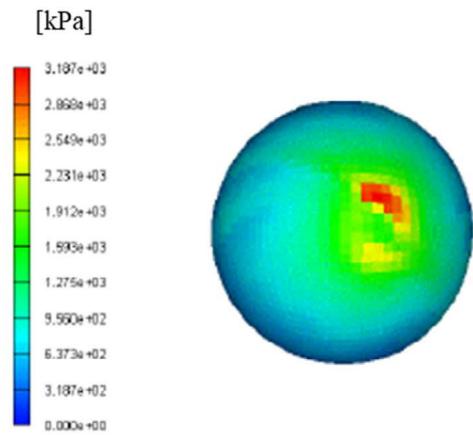
(b) AUTODYN (ゲージ圧)

(ii) 側面からの視点

図 4.2.3-2 OpenFOAM 燃焼解析の圧力結果と AUTODYN に入力した圧力条件の比較 (2/3)



(a) OpenFOAM (絶対圧)



(b) AUTODYN (ゲージ圧)

(iii) 上部からの視点

図 4.2.3-2 OpenFOAM 燃焼解析の圧力結果と AUTODYN に入力した圧力条件の比較 (3/3)

次に、鋼製 CV 構造解析結果例を図 4.2.3-3 に示す。鋼製 CV においては、鋼板の相当塑性ひずみが限界ひずみに達していないことで構造健全性を評価する。

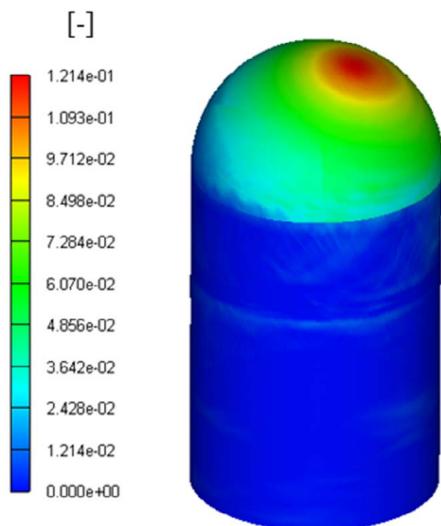


図 4.2.3-3 AUTODYN による鋼製 CV 構造解析の解析結果例（鋼板の相当塑性ひずみ）

(b) PCCV 構造解析

PCCV の実機構構造解析を示す。解析における各種設定を表 4.2.3-2、図 4.2.3-4 に示す。なお、これらの設定値はあくまで参考値であり、材料定数や境界条件によって適宜変更する必要がある。なお、本解析例では保守的にひずみ速度依存性は考慮していない。また、温度条件については、非常に短時間の瞬間的な圧力上昇の事象を扱うため、格納容器内の通常時設計温度で一定とする。

表 4.2.3-2 AUTODYN による PCCV 構造解析の設定値例

項目	設定値	備考	
モデル化範囲	コンクリート、鉄筋、ライナー		
プレストレス	コンクリート外表面に一律圧力を設定	テンドンは直接モデル化せず、等価圧縮力となるように設定	
温度	通常運転時温度一定		
メッシュ数（トータル）	約 620,000 要素		
コンクリート	要素	ソリッド要素	
	メッシュ数	約 240,000 要素	
	材料モデル	RHT コンクリートモデル	
	圧縮強度	設計値	
鉄筋	要素	ビーム要素	
	メッシュ数	約 320,000 要素	
	材料モデル	Bilinear Hardening	
	鉄筋種別	SD390	
	ヤング率	2.05×10^5 (MPa)	JSME S NX3-2015
	降伏応力	390 (MPa)	JSME S NX3-2015
	引張強さ	560 (MPa)	JSME S NX3-2015
	破断ひずみ	17 (%)	JSME S NX3-2015 D25 以上
ライナー	要素	シェル要素	
	メッシュ数	約 60,000 要素	
	材料モデル	Bilinear Hardening	
	ヤング率	2.00×10^5 (MPa)	JSME S NJ1-2012
	材質	SGV410	
	降伏応力	218 (MPa)	JSME S NJ1-2012
	引張強さ	485 (MPa)	JSME S NJ1-2012
	破断ひずみ	19 (%)	JIS G 3118
	準静的ひずみ速度	0.001 (1/s)	参考文献 53)から算出

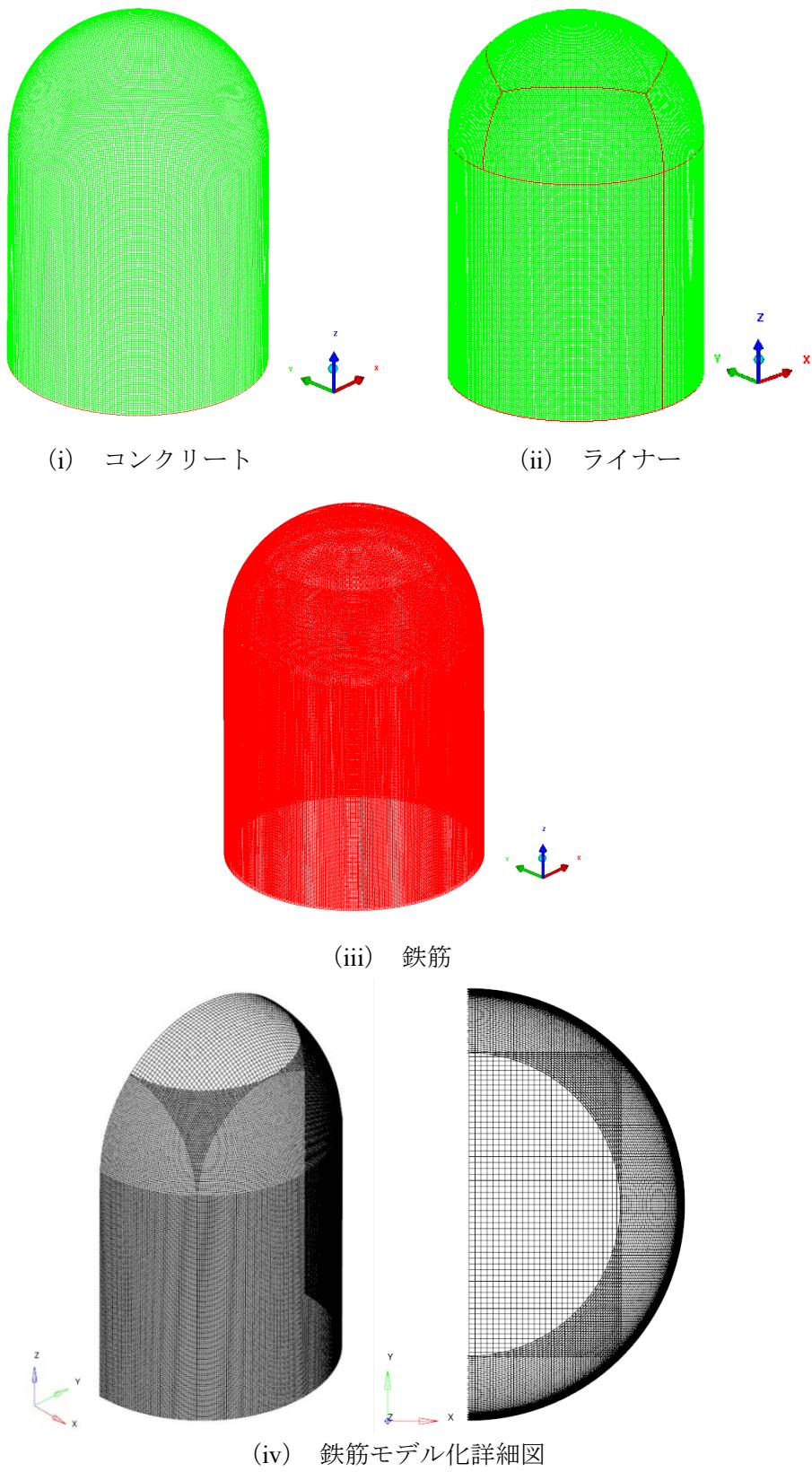


図 4.2.3-4 AUTODYN による PCCV 構造解析の解析モデル図

次に、PCCV 構造解析結果例を図 4.2.3-5 に示す。CV 構造健全性は、コンクリートは損傷度、鉄筋及びライナーは相当塑性ひずみが限界ひずみに達していないことで評価する。図 4.2.3-5 (i) コンクリートの損傷度は損傷度 1 に達するとコンクリートが破損していることを示している。また、図 4.2.3-5 (ii) コンクリートの最小主ひずみは圧縮によるひずみを表しており、コンクリート損傷度が大きい位置と同様の位置に大きな圧縮ひずみが発生していることが確認できる。本解析結果例では鉄筋及びライナーは塑性まで達しなかったため、相当塑性ひずみの代わりに図 4.2.3-5 (iii), (iv) に鉄筋軸ひずみ、図 4.2.3-5 (v), (vi) にライナー一面内ひずみを示す。鉄筋軸ひずみ、ライナー一面内ひずみでは各成分ごとのひずみを表しており、入力圧力に対する鉄筋、ライナーのひずみ発生挙動が確認できる。

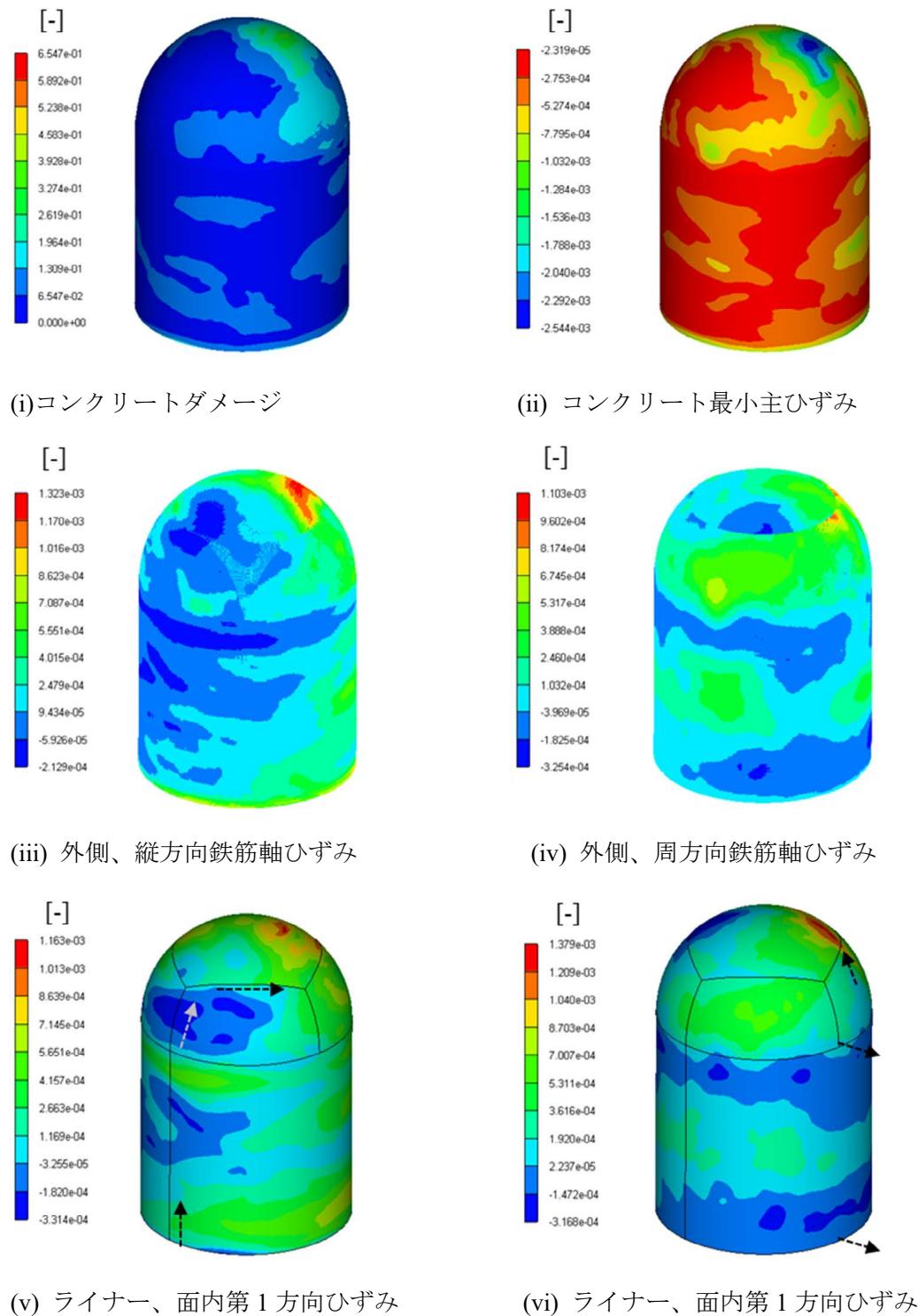


図 4.2.3-5 AUTODYN による PCCV 構造解析の解析結果例

5.まとめ

福島第一原子力発電所事故の経験や、事故から得られた教訓を踏まえ、原子炉のみならず廃止措置、廃棄物管理における水素安全評価・対策に適切に対応するための基盤技術の高度化を図ることを目的として、水素の発生から拡散、燃焼・爆発に至る挙動を予測する解析システムを開発した。システムは、汎用熱流動解析コード FLUENT、OpenFOAM（水素漏洩拡散、燃焼解析用）、動的非線形解析コード AUTODYN（爆風圧、爆轟による構造物への衝撃解析用）と、これらのコード間のデータ受け渡しを行うインターフェースプログラムから構成される。特に、PWR 原子力発電施設を対象に、実用的な観点から考慮すべき現象（火炎伝播加速現象の評価技術、格納容器規模の現象への適用性）に対処するためのシステムの拡充を行った。

本報は、水素挙動統合解析システムの概要と構成する各コードや各コードを連成させるために開発したインターフェースを用いた計算例を活用上の留意点とともにまとめた使用手引書である。

原子力施設事故時の水素燃焼リスクについては、未解明な点も多く、実験や理論解析による検証を含めたデータ知見の蓄積による物理モデルの高度化が必要となる。今後は、凝縮・蒸発等の相変化、浮力に起因する乱流、広範囲の可燃範囲領域での水素燃焼等の各物理現象モデルの精度の向上に加え、原子力施設の安全性向上に向けて、LP コードと連携したシステムの高度化を着実に進めていく予定である。

謝 辞

本報は、経済産業省資源エネルギー庁からの受託事業として、日本原子力研究開発機構が実施した「原子力の安全性向上に資する技術開発事業（水素安全対策高度化）」における成果の一部である。また、日本原子力研究開発機構 J-PARC センターの粉川広行研究副主幹には、本報告書をまとめるにあたり御助言を頂きました。ここに記して謝意を表します。

参考文献

- 1) OECD/NEA, Status Report on Hydrogen management and Related Computer Codes, Tech, Rep., NEA/CSNI/R(2014)8, 2014.
- 2) 三菱重工業, PWR 重大事故等対策の有効性評価に係るシビアアクシデント解析コードについて, MHI-NES-1064 改 1 平成 28 年 4 月.
- 3) 寺田敦彦, トエトエアウン, 日野竜太郎, 原子力における水素安全対策高度化ハンドブック (第 2 版) , JAEA-Review-2024-049, 2024, 400p.
- 4) MELCOR : <https://www.sandia.gov/MELCOR/> (参照 : 令和 7 年 10 月 21 日) .
- 5) MAAP : <https://www.fauske.com/blog/severe-accident-simulators-and-maap-implementation-nuclear-safety> (参照 : 令和 7 年 10 月 21 日) .
- 6) GOTHIC : <https://www.numerical.com/software/gothic/> (参照 : 令和 7 年 10 月 21 日) .
- 7) TECDOC I,2011. Mitigation of Hydrogen Hazards in Severe Accidents in Nuclear Power Plants, Tech, Rep.IAEA-TECDOC-1661.IAEA
- 8) Ahmed Bentaib, Nicolas Meynet and Alexandre Bleyer, “Overview of hydrogen risk research and development activities: methodology and open issues”, Nuclear Engineering and technology, 47, 2015, pp.26-32.
- 9) FLUENT : <https://www.ansys.com/ja-jp/products/fluids/ansys-fluent> (参照 : 令和 7 年 10 月 21 日) .
- 10) AUTODYN : <https://www.ansys.com/ja-JP/Products/Structures/ANSYS-Autodyn> (参照 : 令和 7 年 10 月 21 日) .
- 11) OpenFOAM : <https://www.openfoam.com/> (参照 : 令和 7 年 10 月 21 日) .
- 12) OECD/NEA International Standard Problem: ISP-47 on Containment Thermal Hydraulics - Final Report, Tech, Rep., NEA/CSNI/R(2007)10, 2007.
- 13) OECD/NEA, OECD/SETH-2 Project PANDA and MISTRA Experiments Final Summary Report, Tech, Rep. NEA/CSNI/R(2012)5, 2012.
- 14) OECD/NEA, ISP-49 on Hydrogen Combustion, Tech. Rep.NEA/CSNI/R(2011)9, 2012.
- 15) OECD/NEA Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety, NEA/CSNI/R(2000)7, 2000.
- 16) CANTERA: <https://cantera.org/index.html> (参照 : 令和 7 年 10 月 21 日) .
- 17) 防衛施設学会, 高速衝突を受けるコンクリート構造物の局部破壊に対する設計ガイドライン (案) , 2014.3.
- 18) 吉田正典, ディン スアン チェン, 熊木 竜也, 石倉 修一, “爆風による構造破壊の数値シミュレーション”, 安全工学, Vol.55, No.6, 2016, pp.435-440.
- 19) Ansys, ANSYS/FLUENT Ver17.2 Theory Manual, 2017.
- 20) 原子力安全基盤機構, アクシデントマネジメント知識ベース整備に関する報告書=格納容器内多次元流動解析手法の検証と自然対流冷却 AM 策への適用= (平成 19 年 6 月) .

- 21) J.M. Martín-Valdepeñas, M.A. Jiménez, F. Martín-Fuertes and J.A. Fernández., “Improvements in a CFD code for analysis of hydrogen behavior within containments”, Nuclear Engineering and Design 237, 2007, pp.627-647.
- 22) Ansys, ANSYS FLUENT Ver17.2 User’ Manual, 2017.
- 23) H.G. Weller, G. Tabor 1, A.D. Gosman and C. Fureby, “Application of a flame-wrinkling LES combustion model to a turbulent mixing layer” Symposium on Combustion, vol.27, 1998, pp.899-907.
- 24) KOROLL, G. W. and MULPURU, S. R., “The effect of dilution with steam on the burning velocity and structure of premixed hydrogen flames”, In: Symposium (International) on Combustion. Elsevier, 1988, pp.1811-1819.
- 25) S. R. Turns, An Introduction to Combustion, McGraw-Hill, 2000.
- 26) Florian Ettner, “Numerical Simulation of the Deflagration-to-Detonation Transition in Inhomogeneous Mixtures”, Journal of Combustion, Vol.2014, 2014.
- 27) ReactingParcelFilmFoam: <https://openfoam.org/> (参照：令和 7 年 10 月 21 日) .
- 28) 化学工学会, 化学工学便覧第 7 版, 2011.
- 29) Sayaka Okada, Shuji Ohsaki, Hideya Nakamura and Satoru Watano, “Numerical Study on Spray Drying Process: Effect of Nonuniform Temperature Field and Interaction between Droplets and Evaporation Rates of Individual Droplets”, Chem. Pharm. Bull.,69, 2021, pp.203-210.
- 30) Ranz, W. E. and Marshall, W. R., “Evaporation from Drops”, Chem. Eng. Prog, Vol.48, No.22, 1952. pp.141-146.
- 31) M. Houkema, N.B. Siccam, J.A. Lycklama à Nijeholt and E.M.J. Komen., “Validation of the CFX4 CFD code for containment thermal-hydraulics”, Nuclear Engineering and Design”, Vol.238, 2008, pp.590-599.
- 32) T.K. Sherwood., Mass Transfer., MacGraw-Hill, 1975.
- 33) ETTNER, Florian Anton. “Efficient numerical simulation of the deflagration-to-detonation transition”, 2013.
- 34) Fumiya Sato, “Development of hydrogen behavior simulation code system”, SAMMI-2020-1039, OECD/NEA Specialist Workshop on Advanced Measurement Method and Instrumentation for enhancing Severe Accident Management in an NPP addressing Emergency, Stabilization and Long-term Recovery Phase, 2020.
- 35) HABLBERGER, Josef. “Numerical Simulation of Deflagration-to-Detonation Transition on Industry Scale”, PhD Thesis. Technische Universität München, 2017.
- 36) Josef Hasslberger, Peter Katzy, Lorenz Boeck and Thomas Sattelmayer, “Massively Parallelized Simulation of Deflagration-to-Detonation Transition in a Konvoi-Type Pressurized Water Reactor”, In: 2016 24th International Conference on Nuclear Engineering. American Society of Mechanical Engineers, 2016. p.V005T15A002.
- 37) Greenshields C., Weller H., Gasparini L., and Reese J. “Implementation of semi-discrete,

- nonstaggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for highspeed viscous flows”, International journal for numerical methods in fluids, Vol.63, No.1, 2010, pp.1–21.
- 38) MARCUS ' O CONAIRE, HENRY J. CURRAN, JOHN M. SIMMIE, WILLIAM J. PITZ, CHARLES K. WESTBROOK, “A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. International journal of chemical kinetics”, Vol.36, No.11, 2004, pp.603-622.
 - 39) Juan Li, Zhenwei Zhao, Andrei Kazakov and Frederick L. Dryer, “An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion. International journal of chemical kinetics”, Vol.36, No.10, 2004, pp.566-575.
 - 40) Michael P. Burke, Marcos Chaos, Yiguang Ju, Frederick L. Dryer and Stephen J. Klippenstein, “Comprehensive H₂/O₂ kinetic model for high - pressure combustion”, International Journal of Chemical Kinetics, Vol.44, No.7, 2012, pp.444-474.
 - 41) DAVIS, S. G.; LAW, C. K. and WANG, H., “Propene pyrolysis and oxidation kinetics in a flow reactor and laminar flames”, Combustion and Flame, Vol.119, No.4, 1999, pp.375-399.
 - 42) H. J. Allelein, K. Fischer, J. Vendel, J. Malet, E. Studer, S. Schwarz, M. Houkema, H. Paillère and A. Bentaib, INTERNATIONAL STANDARD PROBLEM ISP-47 ON CONTAINMENT THERMAL HYDRAULICS FINAL REPORT, NEA/CSNI/R(2007)10, Organization for Economic Co-operation and Development, 2007.
 - 43) 近本智行, 村上周三, 加藤信介, “浮力ダンピング下の低 Re 数流れに対応可能な新しい k-ε モデル 温度成層した室内気流の数値解析に関する研究 (その 2) ”, 日本建築学会計画論文集 第 481 号, pp.67-74, 1996 年 3 月.
 - 44) 佐々木岳, 米田次郎, 成層形成場における非等方乱流モデルを用いた拡散解析, 第 63 回大気環境学会年会, 2022.
 - 45) Satoshi Abe, Etienne Studer, Masahiro Ishigaki, Yasuteru Sibamoto, Taisuke Yonomoto, “Density stratification breakup by a vertical jet: Experimental and numerical investigation on the effect of dynamic change of turbulent schmidt number”, Nuclear Engineering and Design , Vol.368, 2020, p.110785
 - 46) 原子力発電技術機構, “重要構造物安全評価（原子炉格納容器信頼性実証事業）に関する総括報告書”, 平成 15 年 3 月.
 - 47) LARGE-SCALE EXPERIMENTS ANA SCALINGOF DDT CONDITIONS IN HYDROGEN-AIR-STEAM MIXTURES AN OVERVIEW SARJ Workshop Yokohama Japan, October 1987.
 - 48) Large-Scale Hydrogen Combustion Experiments Volume 1: Methodology and Results, EPRI NP-3878 Volume 1 Project 1932-11 Final Report, October 1988.
 - 49) Saroha D R, Kumar D and SinghYP, 2011 International Ballistics Society 1392-400.
 - 50) W. Riedel, K. Thoma, S. Hiermaier and E. Schmolinske, “Penetration of reinforced concrete by BETA-B-500, numerical analysis using a new macroscopic concrete model for hydrocodes”, In: SKA (ed), Proceedings of the 9th International Symposium on Interaction of the Effects of

- Munitions with Structures, Berlin, 1999, pp. 315-322.
- 51) JSME S NX3-2015 発電用原子力設備規格 シビアアクシデント時の構造健全性評価ガイドライン (PWR プレストレストコンクリート製格納容器編) .
 - 52) J.C.Simo and T.J.R.Huges, Computational Inelasticity, Springer, 1998.
 - 53) Osamu KAWABATA, Takuji NAGAYOSHI, Mitsuhiro KAJIMOTO, and Nobuo TANAKA, "HYDROGEN DETONATION AND DYNAMIC STRUCTUAL RESPONSE ANALYSES FOR LARGE DRY CONTAINMENT VESSELS OF STEEL AND PRE-STRESSED CONCRETE TYPES", Proceedings of ICONE 8, 8th International Conference on Nuclear Engineering, April 2-6, 2000, Baltimore, MD USA.

This is a blank page.

