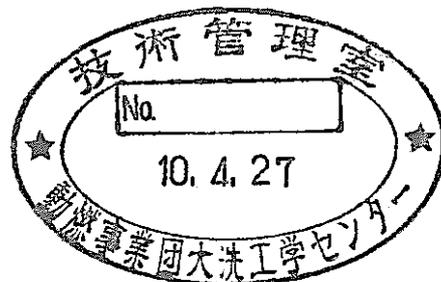


# ナトリウム-水反応ジェットコード の高速化作業

1998年3月



株式会社 日立製作所

複製又はこの資料の入手については、下記にお問い合わせください。

〒311-13 茨城県東茨城郡大洗町成田町4002

動力炉・核燃料開発事業団

大洗工学センター システム開発推進部・技術管理室

Enquires about copyright and reproduction should be addressed to: Technology Management Section O-arai Engineering Center, Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation 4002 Narita-cho, O-arai-machi, Higashi-Ibaraki, Ibaraki-ken, 311-13, Japan

動力炉・核燃料開発事業団 (Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation)

## ナトリウム-水反応ジェットコードの高速化作業

齋藤義則(\*), 床井博見(\*), 糸岡聡(\*\*)

岡部綾夫(\*\*\*), 桜井智生(\*\*\*), 藤又和博(\*\*\*)

### 要 旨

次期高速炉蒸気発生器(SG)伝熱管の合理的設計基準水リーク率(DBL)の設定にあたって、高温ラプチャ評価に重要なナトリウム側温度分布を適切に評価できる手法の開発が必要である。

本作業においては、これまでに開発した上記計算コードを対象として、計算速度の向上を目的とした計算コードの改良及び機能確認のための試計算を実施した。高速化対策は、(1)時間積分方法の改良と、(2)化学反応モデル(物性値計算)の簡略化に関するコード改良である。

計算速度(負荷)や計算結果への影響について、計算コードの改良前後における解析結果を比較評価した。試計算条件は、高速増殖炉「もんじゅ」(以下「もんじゅ」という)の蒸発器体系のケース1(100%出力条件、通常運転時のSG圧力、ナトリウム流動無し)の条件である。

改良コードにおける解析結果により、ボイド率や温度分布等の反応ジェット現象の定性的傾向についての妥当性が確認された。

改良コードでは、計算高速化のオプション選択が可能である。陰解法や物性値計算の簡略化のオプションを選択した場合、本コードでは従来コードよりも高速に解析できることが確認された。

-----  
本報告書は、(株)日立製作所が動力炉・核燃料開発事業団との契約により実施した業務の成果である。

契約番号：09C3874

事業団担当部課室及び担当者：大洗工学センター安全工学部プラント安全工学室 浜田広次

\* : 電力・電機開発本部原子力第1部

\*\* : 日立工場原子力開発技術センター

\*\*\* : 日立エンジニアリング(株)コンサルティングエンジニアリング第1部

MARCH,1998

Speed up improvement on basic code for sodium-water reaction jet

Yoshinori Saito(\*), Hiromi Tokoi(\*), Satoshi Itooka(\*\*)

Ayao Okabe(\*\*\*), Tomoo Sakurai(\*\*\*), Kazuhiro Fujimata(\*\*\*)

Abstract

In selecting the reasonable DBL on steam generator, it is necessary to improve analytical method of estimating the sodium-water temperature for the evaluation of failure propagation due to overheating.

Using basic code for sodium-water reaction (SWR) jet, the code improvement for calculation speed up and practical analyses for functional check were carried out. The speed up methods are (1) the code improvement of time integral calculus ( application of implicit method of SIMPLE ) and (2) simplification of chemical reaction model ( the materials properties estimation ).

As for calculating speed and affection on the results, the results of the improved code on the practical analyses were compared with that of the previous code. The analytical conditions was based on the case 1 ( 100% load conditions, normal SG pressure and non sodium flow ). It is confirmed that the behavior of SWR jet on the results; distributions of void fraction and temperature is reasonable.

On this improved code, the speed up options are also available. It is confirmed that the improved code is able to be speeded up in the implicit method or simplification of the properties calculation.

---

Work performed by Hitachi,Ltd. under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation.

PNC Liaison: Hirotsugu Hamada, FBR Plant Safety Section,  
Safety Engineering Division, Oarai Engineering Center

\* :Nuclear Power Systems Dep., Power & Industrial Systems R & D Division.

\*\* :Advanced Reactor Engineering Center, Hitachi Works.

\*\*\* :Consulting Engineering Dept. , Hitachi Engineering Co. ,Ltd.

## 目次

1.	目的・概要 .....	1-1
2.	コード改良の概要 .....	2-1
3.	時間積分方法の改良に関する検討 .....	3.1-1
3. 1	概要 .....	3.1-1
3. 2	解析モデルの設計 .....	3.2-1
3. 2. 1	既存の二相流解析手法の調査・分析 .....	3.2-1
3. 2. 2	時間積分モデルの概要 .....	3.2-1
3. 3	計算方法の設計 .....	3.3-1
3. 3. 1	SIMPLE法による陰解法 .....	3.3-1
3. 3. 2	圧力補正式の行列解法 .....	3.3-4
3. 4	プログラム(改造)の設計 .....	3.4-1
3. 4. 1	モデルの構成 .....	3.4-1
3. 4. 2	具体的な計算手順 .....	3.4-2
3. 5	圧力補正の計算方法 .....	3.5-1
3. 5. 1	流体の体積変化に伴う圧力補正量 .....	3.5-1
3. 5. 2	圧力補正式の解法 .....	3.5-2
4.	化学反応モデルの簡略化に関する検討 .....	4.1-1
4. 1	概要 .....	4.1-1
4. 2	プログラム(改造)の設計 .....	4.2-1
4. 2. 1	モデルの構成 .....	4.2-1
4. 2. 2	具体的な計算手順 .....	4.2-2
5.	反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.20)の説明 .....	5.1-1
5. 1	反応基本コードの構成 .....	5.1-1
5. 1. 1	概略 .....	5.1-1
5. 1. 2	基本コードのおもな変更点 .....	5.1-7

5. 2	解析条件入力ファイルの説明 .....	5.2-1
5. 3	計算セルのメッシュ分割規約 .....	5.3-1
5. 4	出力方法 .....	5.4-1
5. 5	変数の説明 .....	5.5-1
6.	機能確認のための試計算 .....	6.1-1
6. 1	概要 .....	6.1-1
6. 2	解析体系（「もんじゅ」蒸発器体系）.....	6.2-1
6. 2. 1	解析体系のモデル化 .....	6.2-1
6. 2. 2	解析条件の設定 .....	6.2-2
6. 3	解析結果の比較：時間積分方法の改良の場合 .....	6.3-1
6. 3. 1	試計算の条件 .....	6.3-1
6. 3. 2	解析結果の比較 .....	6.3-3
6. 4	解析結果の比較：化学反応モデルの簡略化の場合 ..	6.4-1
6. 4. 1	試計算の条件 .....	6.4-1
6. 4. 2	解析結果の比較 .....	6.4-2
6. 5	まとめ .....	6.5-1
7.	まとめ .....	7-1
8.	あとがき .....	8-1
9.	謝辞 .....	9-1
10.	参考文献 .....	10-1

[付録]

付録A. 計算入力ファイルのサンプル.....	A-1
付録B. 解析結果ファイルのサンプル.....	B-1
付録C. 入力ファイル作成用 シェルスクリプトのサンプル.....	C-1
付録D. パラメータサーベイ用 実行シェルスクリプトのサンプル.....	D-1
付録E. コード使用時の注意.....	E-1

## 表一覧表

表3.2-1	時間積分モデルの比較	3.2-3
表6.2-1	「もんじゅ」蒸発器体系の解析条件	6.2-2
表6.3-1	時間積分方法の改良における予備計算	6.3-1
表6.3-2	試計算条件：時間積分方法の改良	6.3-2
表6.3-3	時間積分方法の改良条件に対する計算速度の比較	6.3-3
表6.3-4	時間積分方法の改良条件に対する温度比較	6.3-6
表6.3-5	時間積分方法の改良条件に対する温度比較(10秒までの解析)	6.3-31
表6.4-1	試計算条件：化学反応モデルの簡略化	6.4-1
表6.4-2	化学反応モデルの簡略化条件に対する計算速度の比較	6.4-2
表6.4-3	化学反応モデルの簡略化条件に対する温度比較	6.4-5

## 図一覧表

図3.3-1 離散化した流体基礎式の概略	3.3-1
図3.4-1 反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.10) の基本構成	3.4-1
図3.4-2 陰解法を導入した反応基本コードの基本構成	3.4-3
図4.2-1 物性値計算の簡略化オプションを導入したコードの基本構成	4.2-3
図5.1-1 反応ジェット基本コードの構成(制御部分)	5.1-4
図5.1-2 反応ジェット基本コードの構成(陽解法部分)	5.1-5
図5.1-3 反応ジェット基本コードの構成(陰解法部分)	5.1-6
図5.3-1 粗メッシュ分割規約	5.3-2
図5.3-2 細メッシュ分割規約	5.3-2
図5.3-3 メッシュ情報	5.3-3
図5.3-4 コード内部での境界条件設定	5.3-4
図6.2-1 「もんじゅ」蒸発器体系に対する解析体系	6.2-4
図6.3-1 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 1 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.3-7
図6.3-2 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 2 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.3-8
図6.3-3 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.3-9
図6.3-4 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 4 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.3-10
図6.3-5 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 5 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.3-11
図6.3-6 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 6 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.3-12
図6.3-7 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 1 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.3-13

図6.3-8	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 2 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.3-14
図6.3-9	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.3-15
図6.3-10	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 4 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.3-16
図6.3-11	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 5 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.3-17
図6.3-12	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 6 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.3-18
図6.3-13	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 1 (気液相温度：0.5秒後)	6.3-19
図6.3-14	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 2 (気液相温度：0.5秒後)	6.3-20
図6.3-15	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3 (気液相温度：0.5秒後)	6.3-21
図6.3-16	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 4 (気液相温度：0.5秒後)	6.3-22
図6.3-17	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 5 (気液相温度：0.5秒後)	6.3-23
図6.3-18	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 6 (気液相温度：0.5秒後)	6.3-24
図6.3-19	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 1 (気液相温度：1.0秒後)	6.3-25
図6.3-20	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 2 (気液相温度：1.0秒後)	6.3-26
図6.3-21	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3 (気液相温度：1.0秒後)	6.3-27
図6.3-22	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 4 (気液相温度：1.0秒後)	6.3-28

図6.3-23	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 5 (気液相温度：1.0秒後)	6.3-29
図6.3-24	実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 6 (気液相温度：1.0秒後)	6.3-30
図6.3-25	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (ボイド率／相平均温度：2秒後)	6.3-33
図6.3-26	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (ボイド率／相平均温度：4秒後)	6.3-34
図6.3-27	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (ボイド率／相平均温度：6秒後)	6.3-35
図6.3-28	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (ボイド率／相平均温度：8秒後)	6.3-36
図6.3-29	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (ボイド率／相平均温度：10秒後)	6.3-37
図6.3-30	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (気液相温度：2秒後)	6.3-38
図6.3-31	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (気液相温度：4秒後)	6.3-39
図6.3-32	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (気液相温度：6秒後)	6.3-40
図6.3-33	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (気液相温度：8秒後)	6.3-41
図6.3-34	実機体系での試計算結果：陽解法の場合 (気液相温度：10秒後)	6.3-42
図6.3-35	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (ボイド率／相平均温度：2秒後)	6.3-43
図6.3-36	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (ボイド率／相平均温度：4秒後)	6.3-44
図6.3-37	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (ボイド率／相平均温度：6秒後)	6.3-45

図6.3-38	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (ボイド率／相平均温度：8秒後)	6.3-46
図6.3-39	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (ボイド率／相平均温度：10秒後)	6.3-47
図6.3-40	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (気液相温度：2秒後)	6.3-48
図6.3-41	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (気液相温度：4秒後)	6.3-49
図6.3-42	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (気液相温度：6秒後)	6.3-50
図6.3-43	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (気液相温度：8秒後)	6.3-51
図6.3-44	実機体系での試計算結果：陰解法の場合 (気液相温度：10秒後)	6.3-52
図6.4-1	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 1 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.4-6
図6.4-2	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 2 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.4-7
図6.4-3	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 3 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.4-8
図6.4-4	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 4 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.4-9
図6.4-5	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 5 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.4-10
図6.4-6	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 6 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.4-11
図6.4-7	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 7 (ボイド率／相平均温度：0.5秒後)	6.4-12
図6.4-8	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 1 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.4-13

図6.4-9	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 2 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.4-14
図6.4-10	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 3 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.4-15
図6.4-11	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 4 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.4-16
図6.4-12	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 5 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.4-17
図6.4-13	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 6 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.4-18
図6.4-14	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 7 (ボイド率／相平均温度：1.0秒後)	6.4-19
図6.4-15	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 1 (気液相温度：0.5秒後)	6.4-20
図6.4-16	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 2 (気液相温度：0.5秒後)	6.4-21
図6.4-17	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 3 (気液相温度：0.5秒後)	6.4-22
図6.4-18	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 4 (気液相温度：0.5秒後)	6.4-23
図6.4-19	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 5 (気液相温度：0.5秒後)	6.4-24
図6.4-20	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 6 (気液相温度：0.5秒後)	6.4-25
図6.4-21	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 7 (気液相温度：0.5秒後)	6.4-26
図6.4-22	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 1 (気液相温度：1.0秒後)	6.4-27
図6.4-23	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 2 (気液相温度：1.0秒後)	6.4-28

図6.4-24	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 3 (気液相温度：1.0秒後)	6.4-29
図6.4-25	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 4 (気液相温度：1.0秒後)	6.4-30
図6.4-26	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 5 (気液相温度：1.0秒後)	6.4-31
図6.4-27	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 6 (気液相温度：1.0秒後)	6.4-32
図6.4-28	実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 7 (気液相温度：1.0秒後)	6.4-33

## 式一覧表

式3.3-1	一般化保存量 $\phi$ に対する離散化方程式	3.3-1
式3.3-2	x / y 方向の運動量保存式	3.3-2
式3.3-3	推測値と補正量で表された圧力・速度の式	3.3-2
式3.3-4	補正量で表された x / y 方向の運動量保存式	3.3-2
式3.3-5	x / y 方向の速度補正式	3.3-2
式3.3-6	コントロール・ボリュームに対する質量保存式	3.3-3
式3.3-7	変形された質量保存式	3.3-3
式3.3-8	圧力補正式	3.3-3
式3.3-9	Gauss-Seidel法における漸化式	3.3-4
式3.3-10	Gauss-Seidel法における解の残差の式	3.3-4
式3.5-1	隣接するCV間の圧力差によって生じる流れの加速度	3.5-1
式3.5-2	注目しているCVの(圧力勾配による)体積変化 $\delta V$	3.5-1
式3.5-3	書き換えられた体積変化 $\delta V$	3.5-1
式3.5-4	体積変化 $\delta V$ で表された圧力 p	3.5-1
式3.5-5	圧力補正式	3.5-2
式3.5-6	CVの一連番号で書き換えられた圧力補正式	3.5-2
式3.5-7	各CVの圧力に関する連立1次方程式	3.5-3
式5.1-1	一般化された気液二相流の基本式(保存式)	5.1-1

## 記号表

A :	(断)面積(m <sup>2</sup> )
d :	差分
F :	水素／水モル転換比(-)
K :	反応速度定数(m/s/mol)
p :	圧力(Pa)
T :	温度(K)
t :	時間(s)
u, v :	流速(m/s)
X :	モル分率(-)
x :	質量分率(-)
x, y :	デカルト空間座標(m)

$\alpha$ :	体積率(-)
$\Delta$ :	差分
$\theta$ :	気相伝熱比(-)
$\rho$ :	質量密度(kg/m <sup>3</sup> )
$\phi$ :	一般化保存量

## 添字

i :	x 方向の解析セル番号／注目セルに隣接する面の番号
j :	y 方向の解析セル番号／二相流の相の番号
k :	一連に付けられた解析セルの番号
n :	新たな値
o :	基準

なお、本表に記載以外の変数は、各節のみで使用され、それぞれ各節にて説明される。

化学種名 (本解析コードにおける相分類)

Na :	ナトリウム (液相=l、気相=g)
H <sub>2</sub> O :	水 (液相：水=l、気相：水蒸気=g)
H <sub>2</sub> :	水素 (気相)
NaOH :	水酸化ナトリウム (液相)
Na <sub>2</sub> O :	酸化ナトリウム (液相)

## 1. 目的・概要

高速炉SG(蒸気発生器)のDBL(設計基準水リーク)の妥当性を確認するには、実機SGでのナトリウム-水反応現象をより現実的に評価する必要がある<sup>(1)</sup>。ナトリウム-水反応現象の解析的な評価手法を開発するために、平成7年度から8年度にかけて、2次元2相流(2流体)モデルをベースとした流動計算コードにナトリウム-水化学反応モデルを新たに付加した基本計算コード：LEAP-JET(Ver. 1.00)の開発を進めてきた<sup>(2),(3)</sup>。

その後、平成10年1月までの作業においては、伝熱管群モデルの追加や境界条件モデルを改良したLEAP-JET(Ver. 1.10)を開発して、SWAT-3実験データによる検証や「もんじゅ」蒸発器体系による実機評価を行った<sup>(4)</sup>。

本作業においては、これまでに開発した上記計算コードを対象として、計算速度の向上を目的とした計算コードの改良を実施した。高速化対策は、(1)時間積分方法の改良と、(2)化学反応モデル(物性値計算)の簡略化に関するコード改良である。また、機能確認のための試計算を実施し、前記対策に関する解析速度と解析結果における影響を確認した。

## 2. コード改良の概要

平成7年度から10年1月までの作業においては、2次元2相流(2流体)モデルをベースとした流動計算コードにナトリウム(Na)-水化学反応モデルを新たに付加した基本計算コード：LEAP-JET(Ver. 1.00)およびLEAP-JET(Ver. 1.10)の開発を進めてきた<sup>(3),(4)</sup>。また、上記作業期間中、この開発コードを用いてSWAT-3実験データによる検証や実機評価を行った。

これまでの解析の検証・評価作業においては、反応ジェット挙動解析には、安定した長時間の計算が不可欠であることが分かった。前述の計算コードでは、開発の容易さ及び計算負荷の軽減のために陽解法を導入している。しかし、伝熱管群の考慮などに伴いメッシュサイズを小さくする場合には、計算安定化のためタイムステップも小さくする必要が生じて計算負荷が増大し、長時間計算が難しくなる。この問題を克服するために、平成10年1月までの整備・解析作業では、本計算コードにおける計算負荷の軽減や計算速度の向上方法を検討した<sup>(4)</sup>。

本作業では、上記の検討結果に基づいて以下に述べる計算コードへの計算高速化対策を実施し、LEAP-JET(Ver. 1.10)を下記のように改造した。なお、改良コードはLEAP-JET(Ver. 1.20)とする。

### (1) 時間積分方法の改良

計算コードは、陽解法を採用しているため計算安定条件(Courant条件)の制約を受ける。この場合、タイムステップは解析体系のメッシュサイズに依存する。このため、著しくメッシュサイズの小さい場合では計算負荷が大きくなるという課題がある。この課題を解決するためには、計算安定条件の制約を緩和できる半陰解法(流体保存式のうち、圧力のみを陰的に解き、速度は陽的に解く方法)や、完全陰解法(流体保存式を全て陰的に解く方法)を計算コードに導入することが必要である。

両者の手法は、いずれも流体方程式に基づく流体諸量の収束計算を伴い、陽解法と比較して1タイムステップ当たりの計算量は多くなる。このことから、計算安定条件の制約がより小さい完全陰解法の方が、長時間解析における計算負荷の低減効果が大きいと考えられる。

本作業では、完全陰解法の1種であるSIMPLE法を計算コードに導入した。  
二流体モデルにおけるSIMPLE法の手順は、次の通りである。

- a) 気液二相流の流体諸量(圧力・流速・エネルギー等)を算出する。
- b) 気液相間の質量・運動量・エネルギーの移動量を計算する。
- c) 圧力分布に対する気液二相流の流速を求める。
- d) 気液相の質量・運動量・エネルギーの各保存式により各保存量の輸送量を計算する。
- e) 連続の式に基づく圧力補正量を算出する。
- f) 運動量の式に基づく速度補正量を算出する。
- g) e), f)の補正量が収束しない場合にはb)へ戻る。
- h) 収束すれば次の時刻に進み、最終時刻までa)～を繰り返す。

## (2) 化学反応モデルの簡略化

本計算コードでは、化学反応に関わる次の現象をモデル化している。

- a) 発熱量の大きい反応系に關与する5化学種  
(水・Na・水素・NaOH・Na<sub>2</sub>O)を考慮。
- b) 気液二相流のNa-水反応を別々に考慮。
- c) 水・Naの気液二相間の相変化を考慮。
- d) 物性値の温度・圧力依存性を考慮。
- e) 気液二相流の物性値における各化学種の含有割合(質量分率比)を考慮。

このうち、後者の2つについては、いずれも物性値関数の計算に伴う計算負荷が大きいと考えられる。このことから、次のような物性値計算法の簡略化により、計算負荷を低減を行う。

- A) 気液二相流の温度探索と物性値を算出する各モジュールを簡略化。
- B) 物性値の近似関数を簡略化。

上記の簡略化された化学反応モデルは、計算コードに採用済みの簡略化しない現モデル(詳細モデル)と比較して、解析精度が低下する場合もあり得る。そのため、簡略化モデルは、詳細モデルに対するオプションとして基本コードへ導入した。

### 3. 時間積分方法の改良に関する検討

#### 3. 1 概要

本章および次の章において、計算速度と作業効率の向上を図るための、基本コードへの計算高速化対策の検討を実施する。

反応ジェットの解析を実施するためには、安定した長時間の計算が不可欠である。従来の基本コードでは、開発の容易さ及び計算負荷の軽減のために陽解法を導入した。しかし、伝熱管群の考慮などに伴いメッシュサイズを小さくする場合には、計算安定化のためタイムステップも小さくする必要性が生じる。このことから、長時間計算が難しくなる可能性がある。

本章では、この問題を克服するために、タイムメッシュの体系依存度が小さい半陰解法や、完全陰解法の導入を検討する。さらに、計算負荷の軽減や計算速度の向上の程度及びコード改造に伴う作業の容易性等の観点から、本基本コードに最適な計算方法を検討する。

上記の検討では、高速化のためのモデル(完全陰解法等)の検討、解析方法、手順・計算フローの設計等、コード化に必要な具体的作業を実施した。

### 3. 2 解析モデルの設計

本節では、計算負荷を下げつつ長時間解析を安定に実施するため、基本コードで採用した陽解法以外の、陰解法による数値積分法の導入を検討する。この数値積分法の導入に当たって、つぎの調査・検討を実施する。まず、既存の二相流解析手法における数値積分法、手法の詳細情報やアルゴリズムを調査する。つぎに基本コードの改造に向けた計算方法を検討し、設計する。

この検討における項目は、(a)計算負荷の軽減や計算速度の向上の程度、(b)コード改造に伴う作業の容易性、(c)本基本コードに最適な計算方法の検討、の3点である。

#### 3. 2. 1 既存の二相流解析手法の調査・分析

二相流に特有な数値解析手法は無く、单相流解析と同様の時間積分法が二相流解析に導入されている。二相流解析手法は、一般的に次のような特徴がある。单相流解析に比べて解くべき方程式・変数の数が多くなるため、計算量を低減・簡略化した工夫が施されていることが多い。また、单相流解析に比べて方程式の非線形性は大きいため、解析における数値的不安定が助長されやすいことから、安定性の高い解法が用いられることが多い<sup>(5)</sup>。

時間積分については、陽解法であるRELAP3やSIMA、半陰解法であるTRACやRELAP5、MAC法を応用したもの、SIMPLE法を応用したPHOENICS、MISTRALやSMORC、完全陰解法であるMINCSなどが開発されている<sup>(6)</sup>。

#### 3. 2. 2 時間積分モデルの概要

時間積分モデルについて、簡単に説明する。

離散化された気液二相流の流体保存式(方程式)では、圧力、ボイド率、気体および液体の速度、気体および液体の内部エネルギー(温度)の保存量が、独立変数となる。

離散化された方程式を半陰解法によって解く場合、次のような手順となる。新しい時刻の速度は、運動量の保存式から新しい時刻の圧力の関数として表される。一方、新しい時刻のボイド率と気液の内部エネルギーは、質量とエネルギーの保存式から新しい時刻の速度、圧力ならびに古い時刻の変数の関数とし

て表される。ここで、新しい時刻のボイド率と内部エネルギーを仮定すれば、新しい時刻の圧力に関する連立方程式が得られ、反復法を用いた行列解法の計算(内部反復計算)により、新しい時刻の圧力が計算されることになる。この圧力を使って、新しい時刻の速度、ボイド率、内部エネルギーが計算される。これらの値が収束するまで反復計算(外部反復計算)を行い、解を求める。

一方、離散化された方程式を完全陰解法によって解く場合、次のような手順となる。新しい時刻のボイド率、内部エネルギー、および速度を仮定して、流体保存式(基礎式)に基づく新しい時刻の圧力に関する連立方程式(圧力補正式)が得られる。この圧力補正式に基づいて、反復法による行列解法を用いて、これらの値が収束するまで反復計算(内部反復計算)を行い、圧力解を求める。新しい時刻の圧力が計算されると、同時に新しい時刻の他の物理量：ボイド率、内部エネルギー、および速度が求められる。これらの値が収束するまで反復計算(外部反復計算)を行い、解を求める。

上記は、次のようにまとめられる。半陰解法は、流体保存式のうち圧力のみ陰的に解き、速度を陽的に解く方法で、MAC法の系列解法(MAC・SMAC・HSMAC)のアルゴリズムが該当する。一方、完全陰解法は、流体保存式を全て陰的に解く方法で、SIMPLE法の系列解法(SIMPLE・SIMPLER・SIMPLEST)のアルゴリズムが該当する。

これら2つのアルゴリズムは、元々、単相・非圧縮性粘性流の解析に対応したものである。しかし、前述の既存コードのいずれの解法も、これら2つのアルゴリズムを二相流解析に導入して、二相流解析の計算負荷低減を図っている。二流体モデルの二相流解析手法でも、そのアルゴリズムは同様である。ただし、気液各相の連続の式と体積率保存を同時に満たすように、アルゴリズムの変更が必要である。

表3.2-1に、時間積分モデルの比較を示す。

半陰解法と完全陰解法は、ともに仮定速度場を元に圧力分布を解く作業がある。半陰解法では圧力以外の流体基本式の対流・生成項の変化を陽的に解いているため、解析安定条件(Courant条件)は緩和される。よって、半陰解法では、解析不安定性によるタイムステップ条件は緩和されるが、高速化の程度は小さい。一方、完全陰解法では、流体基本式の全ての項を陰的に解くために、解析

安定条件は理論上無い。ただし、二流体モデル二相流解析には、解析困難性：不適切性の問題があるため、全く解析安定条件が無くなる訳でない<sup>(5)</sup>。よって、完全陰解法では、タイムステップ条件緩和の程度は半陰解法より大きい。従って、半陰解法と比較してより大きな高速化が期待できる。

また、完全陰解法については、反応基本コードの元になったSIMAコードと類似の二流体モデル二相流解析コードSMORCへの導入実績がある<sup>(7)</sup>。このことから、反応基本コードへの完全陰解法の導入は容易と考えられる。

以上のことから、反応基本コードを高速化する解法として、完全陰解法が適切と判断される。

表3.2-1 時間積分モデルの比較

	半陰解法	完全陰解法
特徴	圧力のみを陰的に解く	流体保存式を全て陰的に解く
1 ケース当たりの計算負荷	中	中→小
1 ケース当たりの計算速度	中	中→大
反応基本コードへの導入の容易性	やや困難 (導入実績無いため)	容易 (導入実績有るため)

### 3.3 計算方法の設計

前節で検討した結果を基に、基本コードの改造に向けた計算方法を設計する。

#### 3.3.1 SIMPLE法による陰解法<sup>(8),(9)</sup>

これより、SIMPLE(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations)法のアルゴリズムについて説明する。

図3.3-1に、コントロール・ボリュームで離散化した流体基礎式の概略図を示す。基礎式(質量・運動量・エネルギー保存式)をコントロール・ボリュームにわたり積分し、基礎式の離散化方程式を求めると、つぎの一般化保存量  $\phi$  (質量・x および y 方向運動量・内部エネルギー)に対する離散化方程式となる。係数  $a$  の添字(P,N,S,E,W)は、相対的な位置関係を示す。

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \dots\dots\dots(3.3-1)$$

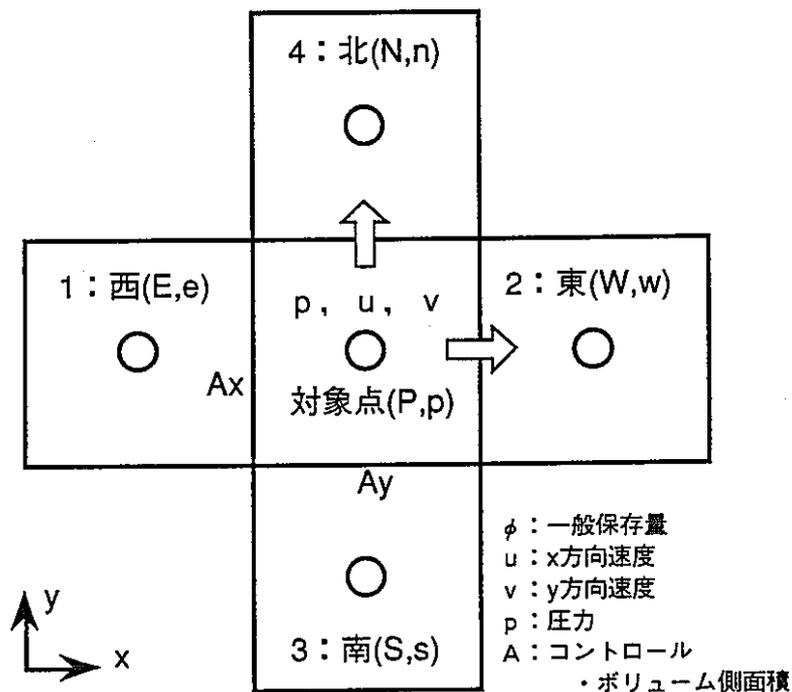


図3.3-1 離散化した流体基礎式の概略

x および y 方向の運動量保存式(x 方向速度  $u$ 、y 方向速度  $v$ )は、次のように表される。なお、後述するように特別な配慮を要するため、圧力項は他の生成項とは切り離して取り扱う。

$$a_p u_p = a_e u_e + a_w u_w + a_n u_n + a_s u_s + Ax \cdot (p_w - p_e) + b \dots\dots\dots(3.3-2a)$$

$$a_p v_p = a_e v_e + a_w v_w + a_n v_n + a_s v_s + Ay \cdot (p_s - p_n) + b \dots\dots\dots(3.3-2b)$$

上式の係数 a、b の添字(p,n,s,e,w)は相対的な位置関係を示すため、同じ記号で書かれた係数 a、b 間でも値が異なる。

圧力 p、速度 u、v を次のように表す。添字\*はもとの推測値、' は補正量、添字無しは新しい値(より真に近い値)である。

$$p = p^* + p' \dots\dots\dots(3.3-3a)$$

$$u = u^* + u' \dots\dots\dots(3.3-3b)$$

$$v = v^* + v' \dots\dots\dots(3.3-3c)$$

式(3.3-3)を式(3.3-2)に代入し、予測値 u\*、v\* と p\* のセットが(質量保存式を満たすとは限らないが)、u、v の運動量保存式を満たす点に留意し、u\*、v\* と p\* に付随する項を消去する。

$$a_p u'_p = Ax \cdot (p'_w - p'_e) + [a_e u'_e + a_w u'_w + a_n u'_n + a_s u'_s] \dots\dots\dots(3.3-4a)$$

$$a_p v'_p = Ay \cdot (p'_s - p'_n) + [a_e v'_e + a_w v'_w + a_n v'_n + a_s v'_s] \dots\dots\dots(3.3-4b)$$

ここで、右辺では第一項目の圧力補正の項が支配的と考え、第二項を無視する(このようなあいまいな操作が許されるのは、対象としているのが補正量であり、繰り返し計算の過程においていずれすべての補正量が0に収束すると考えられるからである)。

$$u'_p = dx \cdot (p'_w - p'_e) \dots\dots\dots(3.3-5a)$$

$$v'_p = dy \cdot (p'_s - p'_n) \dots\dots\dots(3.3-5b)$$

ここで、

$$dx = Ax / a_p \dots\dots\dots(3.3-5c)$$

$$dy = Ay / a_p \dots\dots\dots(3.3-5d)$$

(3.3-5)式は速度補正式と呼ばれ、速度補正量 u'、v' は圧力補正量 p' のみによって求められる。

つぎに、コントロール・ボリュームに対する質量保存式(3.3-6)を変形する。

$$Ax \cdot u_e - Ax \cdot u_w + Ay \cdot v_n - Ay \cdot v_s = 0 \dots\dots\dots(3.3-6)$$

ここでさきほどと同様に、 $u$ 、 $v$ を推定値と補正值に分解し書き直すと、次のようになる。

$$\begin{aligned} & Ax \cdot u'_e - Ax \cdot u'_w + Ay \cdot v'_n - Ay \cdot v'_s \\ & = Ax \cdot u^*_w - Ax \cdot u^*_e + Ay \cdot u^*_s - Ay \cdot u^*_n \dots\dots\dots(3.3-7) \end{aligned}$$

左辺の $u'_e$ および $u'_w$ に速度補正式(3.3-5a)を、 $v'_n$ および $v'_s$ に速度補正式(3.3-5b)を代入する。こうして一般形保存式の離散化方程式(3.3-1)と同じ形の式(3.3-8)を導くことが出来る。

$$a_p p'_p = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b \dots\dots(3.3-8a)$$

ここで、

$$a_E = Ax \cdot dx_e \dots\dots\dots(3.3-8b)$$

$$a_W = Ax \cdot dx_w \dots\dots\dots(3.3-8c)$$

$$a_N = Ay \cdot dy_n \dots\dots\dots(3.3-8c)$$

$$a_S = Ay \cdot dy_s \dots\dots\dots(3.3-8d)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S \dots\dots\dots(3.3-8e)$$

$$b = Ax \cdot u^*_w - Ax \cdot u^*_e + Ay \cdot u^*_s - Ay \cdot u^*_n \dots\dots\dots(3.3-8f)$$

(3.3-8)式は圧力補正式と呼ばれる。圧力補正式の境界条件は簡単であり、これがSIMPLE法の特徴(利点)の一つになっている。境界で圧力が既知の場合は、そこでの補正值 $p'$ を0に設定する。また、境界で速度が既知の場合には、速度補正值が0であるから、(3.3-5)式に従って境界面に垂直な $p'$ の勾配を0に設定する(コード上では、 $dx$ または $dy$ を0に設定)。

以上の境界条件のもとで圧力補正式(3.3-8)を解いて $p'$ 分布を求め、式(3.3-3)、(3.3-5)を用いて速度場および圧力場を修正する。

SIMPLE法のアルゴリズムは次の通りである。

- (A)新しい時刻における流体諸量を計算する。
- (B)圧力推定値 $p^*$ を与え、圧力補正值 $p' = 0$ とする。
- (C) $p^*$ を用いて運動量保存式を解き、仮の速度 $u^*$ 、 $v^*$ を求める。
- (D)圧力補正式(3.3-8)を解き、圧力補正量 $p'$ を求める。

(E)推測した圧力  $p = p^* + p'$  と修正する。

(F)速度補正式(3.3-5)により  $u, v$  を修正する。

(G)修正圧力  $p$  を新しく推定した  $p^*$  に置き換え(B)に戻り、収束解が得られるまで(B)~(G)を繰り返す。

(H)収束解が得られたら(A)に戻り、最終時刻まで(A)~(H)を繰り返す。

### 3. 3. 2 圧力補正式の行列解法

圧力補正式(3.3-8)は、注目するコントロール・ボリューム(CV)に対する圧力の未知数  $p'_P, p'_E, p'_W, p'_N, p'_S$  を含む。これを全てのCVに対して書き下すと、 $p'$  の連立一次方程式が得られる。この方程式の係数行列は、(CVの数) $\times$ (CVの数)の大きさを持つ  $a$  の要素で構成される。

この連立方程式の解法として、係数行列の逆行列を求める直接法と、推定解を修正しながら収束させる反復法(間接法)が数多く知られている。

直接法はかなり大きな記憶容量と計算時間を要するため、二相流解析には不向きであると考えられる。そこで、最も単純な反復法としてのGauss-Seidel(ガウス・ザイデル=GS)法<sup>(8),(10)</sup>を、圧力補正式の解法として採用する。

GS法のアルゴリズムは、次の通りである。

(a)次の漸化式を計算する。

$$F_n = F_o + \beta \times (F_n - F_o) \dots \dots \dots (3.3-9)$$

$F_o$  : 推定値(前の解)、 $F_n$  : 新たな推定値

$\beta$  : 加速パラメータ

・  $\beta = 1$  : GS法、 $F_n = F_o$

・  $2 > \beta > 1$  : SOR法(Successive Over-Relaxation method)

(b)次の解の残差を計算する。

$$r_{n_i} = \sum_i (c_i \cdot F_{n_i}) - d_i \dots \dots \dots (3.3-10)$$

$c_i$  : 連立1次方程式(=圧力補正式)の解  $F_{n_i}$  の係数

$d_i$  : 連立1次方程式(=圧力補正式)の解  $F_{n_i}$  の定数項

添字  $i$  は各CVの番号

(c)解の残差がゼロに近づくまで、(a)~(b)を反復する。

ここでは、次の2つの理由によりGS法を採用し、SOR法を使用しない。(i)基本式の非線形性が強いため、SORを用いた場合、行列解法的高速化(加速)は期待できないと推測される。(ii)二相流解析では、必要な変数と計算量(配列変数の確保と代入操作)が大きい。このため、SOR法を採用した場合、さらに計算負荷が増大する。

### 3. 4 プログラム(改造)の設計

前述のように設計した計算方法を基に、基本コードの改造に向けた具体的な計算手順及び計算フローについて設計する。設計項目は次の通りである。具体的な計算手順については、コードの改造・追加モジュールを摘出し、導入手法のコード化方法を検討する。計算フローについては、モジュール構成を設計する。

#### 3. 4. 1 モデルの構成

図3.4-1に、従来の反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.10) の基本構成を示す。

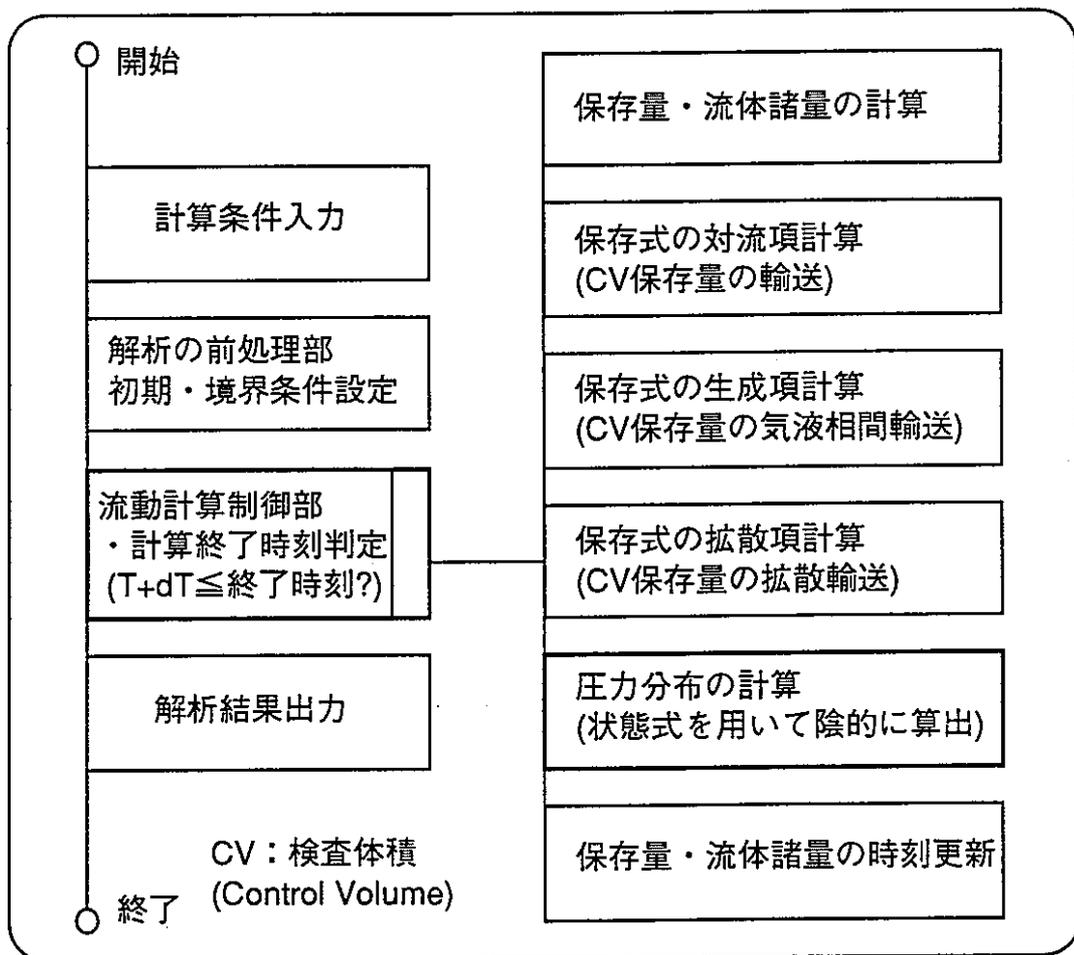


図3.4-1 反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.10) の基本構成

今回の作業において改良すべき、従来の反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.10) は、陽解法である。基本コードの各タイムステップにおける時間積分は、離散化した流体基礎式の対流・圧力・生成・拡散の各項全てを陽的に実施している。各時刻における各計算セルの圧力は、気液密度の状態式と気液相の体積率条件を満たすように陰的に算出される。

このような基本コードに完全陰解法を導入すると、(A)圧力収束計算アルゴリズムと、(B)流体保存量の収束判定機能の付加等の修正が必要である。

具体的には次の通りである。(A)については、前述のSIMPLE法の圧力補正式に基づく圧力補正計算アルゴリズムを付加する。(B)については、流動計算部の制御モジュールに保存量、SIMPLE法の場合には圧力補正量の収束判定ループを付加すればよい。

### 3.4.2 具体的な計算手順

図3.4-2に、陰解法を導入した反応基本コードの基本構成を示す。図3.4-1と比較して次の部分が異なる。まず、流動計算部分に(B)の流体保存量の収束判定機能が付加される。また、圧力分布の計算部分に、(A)の圧力収束計算アルゴリズムに対応したSIMPLE法の圧力補正式の行列計算が付加される。

上記に基づく基本コード改良に当たっては、具体的には次のように修正・改良する。圧力分布の計算部分は、(a)圧力補正式に基づいて行列の各係数を計算するモジュール、(b)GS法の反復法により圧力補正式の解を求めるモジュール、(c)各セルの新しい圧力推定値( $p^*$ )と圧力補正值( $p'$ )を計算するモジュール、の3つのモジュールを付加する。一方、流動計算部分における流体保存量の収束判定機能として、(d)推定・補正值より圧力を収束判定するモジュールを付加する。なお、この(d)のモジュールは、(A)の圧力補正式の収束判定と(B)の収束判定機能を兼ねることも可能である。

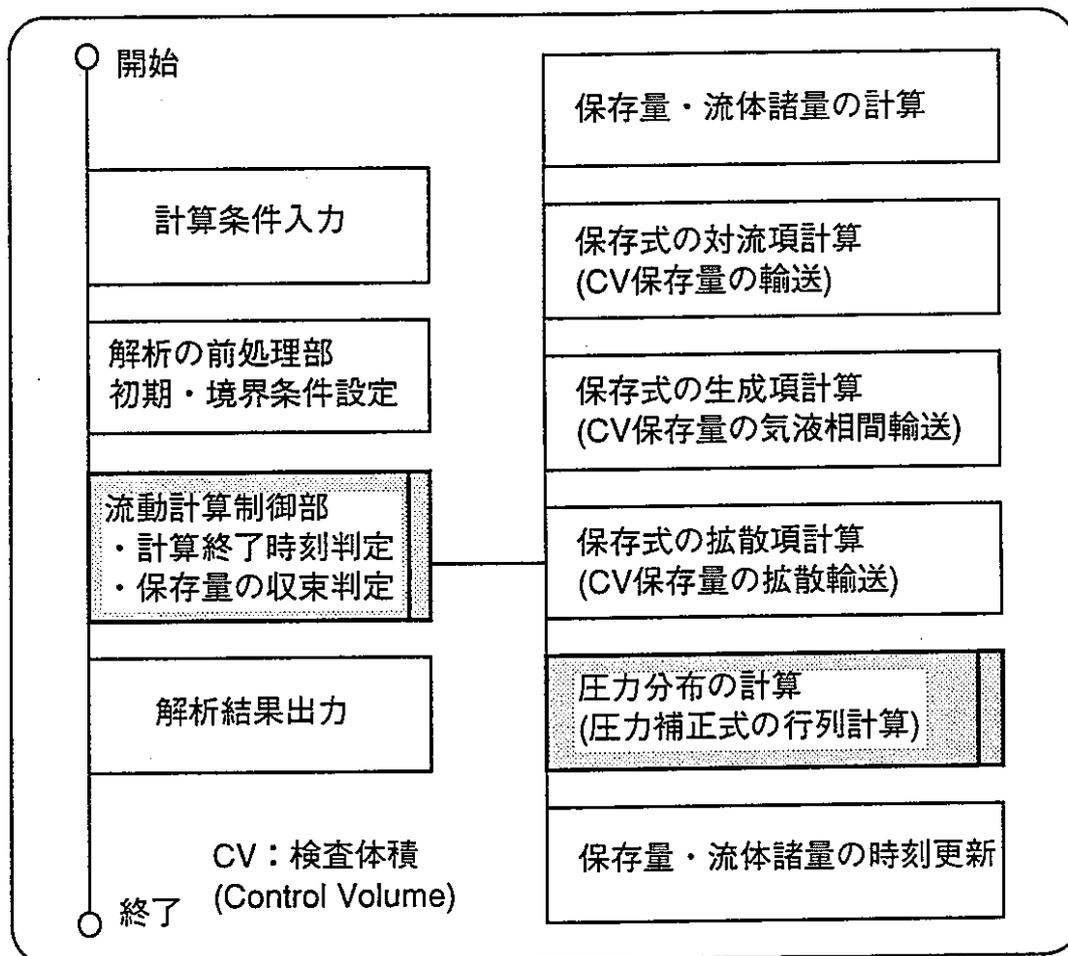


図3.4-2 陰解法を導入した反応基本コードの基本構成  
(灰色部分：コードの改良部分)

### 3. 5 圧力補正の計算方法

前節までに説明したSIMPLE法では、古い圧力場から新しい圧力場を求める際に、圧力の補正量が必要となる。この求め方については種々考えられるが、ここではコントロール・ボリューム(CV)間の質量とエネルギーの輸送に伴うCV内の流体の体積変化から圧力変化を算出する。

本節では、この圧力補正の計算方法について、以下に説明する。

#### 3. 5. 1 流体の体積変化に伴う圧力補正量

いま、注目しているCVの番号を0、これに隣接する東西南北4つのCVの番号を*i* (*i* = 1 ~ 4)で表す。隣接するCV間の圧力差( $d p_i / d x_i$ )によって生じる流れの加速度 $\beta_i$ は、式(3.5-1)のように表せる。ここで $\rho_i$ は流体の質量密度である。

$$\beta_i = (1 / \rho_i) \cdot (d p_i / d x_i) \dots \dots \dots (3.5-1)$$

これより時間幅 $\Delta t$ 間の流体の移動距離は、 $1 / 2 \cdot \beta_i \cdot (\Delta t)^2$ で表される。流路断面積を $A_i$ として、隣接する4方向の和を取ると、注目しているCVの(圧力勾配による)体積変化 $\delta V$ は、式(3.5-2)のように得られる。ここに、添字*j*は流体の相を表す番号である。

$$\delta V = 1 / 2 \cdot \sum_i \sum_j \beta_{ij} \cdot A_i (\Delta t)^2 \dots \dots \dots (3.5-2)$$

密度 $\rho$ を、番号0のCVの値で代表すると、式(3.5-2)は、式(3.5-3)のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} \delta V &= 1 / 2 \cdot \sum_i \{ \sum_j (\alpha_j / \rho) \cdot (d p_i / d x_i) \cdot A_i \} \cdot (\Delta t)^2 \\ &= 1 / 2 \cdot \sum_i \{ (\alpha_l / \rho_l + \alpha_g / \rho_g) \\ &\quad \cdot (d p_i / d x_i) \cdot A_i \} \cdot (\Delta t)^2 \dots \dots \dots (3.5-3) \end{aligned}$$

微分を差分で書き直して式(3.5-3)を変形すると、式(3.5-4)のようになる。

$$\begin{aligned} &(2 \delta V / (\Delta t)^2) \\ &= (\alpha_l / \rho_l + \alpha_g / \rho_g) \cdot \sum_i \{ (p - p_i) / \Delta x_i \} \cdot A_i \dots \dots \dots (3.5-4) \end{aligned}$$

式(3.5-4)を*p*について解くと、次のように表せる。

$$(2 \delta V / (\Delta t)^2) / (\alpha_l / \rho_l + \alpha_g / \rho_g) \\ = \sum_i (A_i / \Delta x_i) \cdot p - \sum_i (A_i / \Delta x_i) \cdot p_i$$

さらに上式を整理すれば、次の式(3.5-5)が得られる。ここで、 $p$ と $\Delta p$ の次元は、それぞれ[Pa]、[Pa·m]である。

$$p = \{ \sum_i (A_i / \Delta x_i) \cdot p_i + \Delta p \} / \{ \sum_i (A_i / \Delta x_i) \} \dots\dots(3.5-5a)$$

$$\Delta p = \{ 2 \delta V \} / \{ (\alpha_l / \rho_l + \alpha_g / \rho_g) \cdot (\Delta t)^2 \} \dots\dots(3.5-5b)$$

式(3.5-5)で求められた $p$ を新しい圧力場 $p$ として用いる。

なお、SIMPLE法の手順中の圧力補正值 $p'$ には、式(3.5-5b)右辺分子の $\Delta p$ の項(正確には後述の $\Delta p / B$ )が対応する。

### 3. 5. 2 圧力補正式の解法

式(3.5-5)の圧力補正式は、注目するCVに対する圧力の未知数として、 $p$ 及び $p_i$  ( $i = 1 \sim 4$ )を含む。これを、すべてのCVに対して求め、各CVに付けられた一連番号で添字を書き換える。

いま、2次元に分割されたCVの一連番号 $k$ を、各CVに順に割り付け、計算領域内のCV数を $m \times n$  ( $x$ 方向に $m$ 、 $y$ 方向に $n$ 分割)とする。このとき、注目するCVの番号 $k$ に対して、これに隣接するCVの一連番号は東西南北順に $k+n$ 、 $k-n$ 、 $k-1$ 、 $k+1$ となる。

この一連番号に基づき書き換えれば、式(3.5-5)は式(3.5-6)のように表せる。

$$p_k - a_{k-n} \cdot p_{k-n} - a_{k+n} \cdot p_{k+n} - a_{k-1} \cdot p_{k-1} - a_{k+1} \cdot p_{k+1} \\ = \Delta p_k \quad (= \Delta p / B) \dots\dots\dots(3.5-6a)$$

ここで、

$$a_i = \{ A_i / \Delta x_i \} / B \quad (i = k-n, k+n, k-1, k+1) \dots\dots\dots(3.5-6b)$$

$$B = \sum_i (A_i / \Delta x_i) \\ = A_{k-n} / \Delta x_{k-n} + A_{k+n} / \Delta x_{k+n} \\ + A_{k-1} / \Delta x_{k-1} + A_{k+1} / \Delta x_{k+1} \dots\dots\dots(3.5-6c)$$

式(3.5-6)を整理すると、2次元に分割された各CVの圧力に関する、次の連立1次方程式(3.5-7)が得られる。

$$[E] \cdot [P_i] = [P] \dots\dots\dots(3.5-7)$$

ここに  $[E]$  は、 $a_i$ を要素とする大きさが  $m \times n \times m \times n$  の係数行列で、対角要素  $e_{k,k}$  と、 $e_{k-n,k-n}$ 、 $e_{k+n,k+n}$ 、 $e_{k-1,k-1}$ 、 $e_{k+1,k+1}$  はゼロでなく、それ以外の要素は全てゼロの疎行列(Sparse-Matrix)、また帯行列(Band-Matrix)となる。この連立方程式(3.5-7)の解法として、前述のGauss-Seidel(ガウス・ザイデル=GS)法を用いる。

## 4. 化学反応モデルの簡略化に関する検討

### 4. 1 概要

本計算コードでは、Na-水反応系に關与する5化学種・7成分(水・水蒸気・液体Na・気体Na・ $H_2$ ・NaOH・ $Na_2O$ )と、各物性値の温度・圧力依存性を考慮している。さらに、気液二相流の物性値における各化学種の含有割合(モル比)を考慮している。このように、反応系の解析では物性値を求める際の計算負荷が大きいと考えられる。

本章では、この問題を克服するために、上記の化学反応モデルに關連した物性値計算モジュールや物性値関数を簡略化、すなわち物性値計算法の簡略化による計算負荷の低減方法を検討する。

上記の検討では、物性値計算モジュールや物性値関数を簡略化のための手順・計算フローの設計等、コード化に必要な具体的作業を実施した。

## 4. 2 プログラム(改造)の設計

物性値計算モジュールや物性値関数を簡略化するための、具体的な計算手順及び計算フローについて設計する。設計項目は次の通りである。具体的な計算手順については、コードの改造・追加モジュールを抽出し、導入手法のコード化方法を検討する。計算フローについては、モジュール構成を設計する。

### 4. 2. 1 モデルの構成

図3.4-1に示した反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.10) では、保存量・流体諸量の計算/時間更新部分と、状態式を用いて陰的に圧力を算出する陽解法での圧力分布計算部分において物性値計算を必要とする。

そこで、2. に説明した化学反応モデルの簡略化として、次の簡略化モデルが考えられる。

(a)気液二相流の温度探索と物性値を算出する各モジュールの簡略化。

(a-1)圧力分布計算モジュールの実行回数の簡略化。

(a-2)物性値計算モジュールの実行回数の簡略化。

(b)物性値関数の簡略化：各化学種・成分の物性値の簡単化=固定値化。

このうち、(a-1)については陽解法のみにも有効なモデルであり、基本コード LEAP-JET (Ver. 1.10) でも既に対応・改良されている。

一方、(a-2)と(b)については陽解法と陰解法の両方に有効なモデルであり、該当する物性値計算モジュールの修正が必要である。

#### 4. 2. 2 具体的な計算手順

図4.2-1に、物性値計算の簡略化オプションを導入した反応基本コードの基本構成を示す。図3.4-1と比較して次の部分(図中の灰色部分)が異なる。

まず、圧力分布計算モジュールPRESSDにおいて実行回数の制御を可能にするように、コードを改良する。これにより、解析時間中の全てのタイムステップで、PRESSDを実行するのではなく、入力ファイルの設定回数に合わせて数回おきに実行するように、実行回数を制御する。

PRESSD同様に、物性値計算モジュールSTATE2において実行回数の制御を可能にするように、コードを改良する。これにより、解析時間中の全てのタイムステップで、STATE2を実行するのではなく、入力ファイルの設定回数に合わせて数回おきに実行するように、実行回数を制御する。このことで、解析負荷の大きい温度探索モジュールEVTMODの呼び出しや、各物性値の近似関数の呼び出しを簡略化出来る。

また、圧力・温度に依存しない固定値を返すように、各化学種・成分の物性値関数にオプションを加え、入力ファイルの設定に合わせてオプションを選択制御できるように、コードを改良する。ただし、定圧比熱・定積比熱と熱エンタルピとの整合性に留意することが必要である。本改良コードでは、各化学種・成分の固定された物性値として、蒸気発生器の代表圧力0.3MPa、代表温度550Kでの物性値を与える。

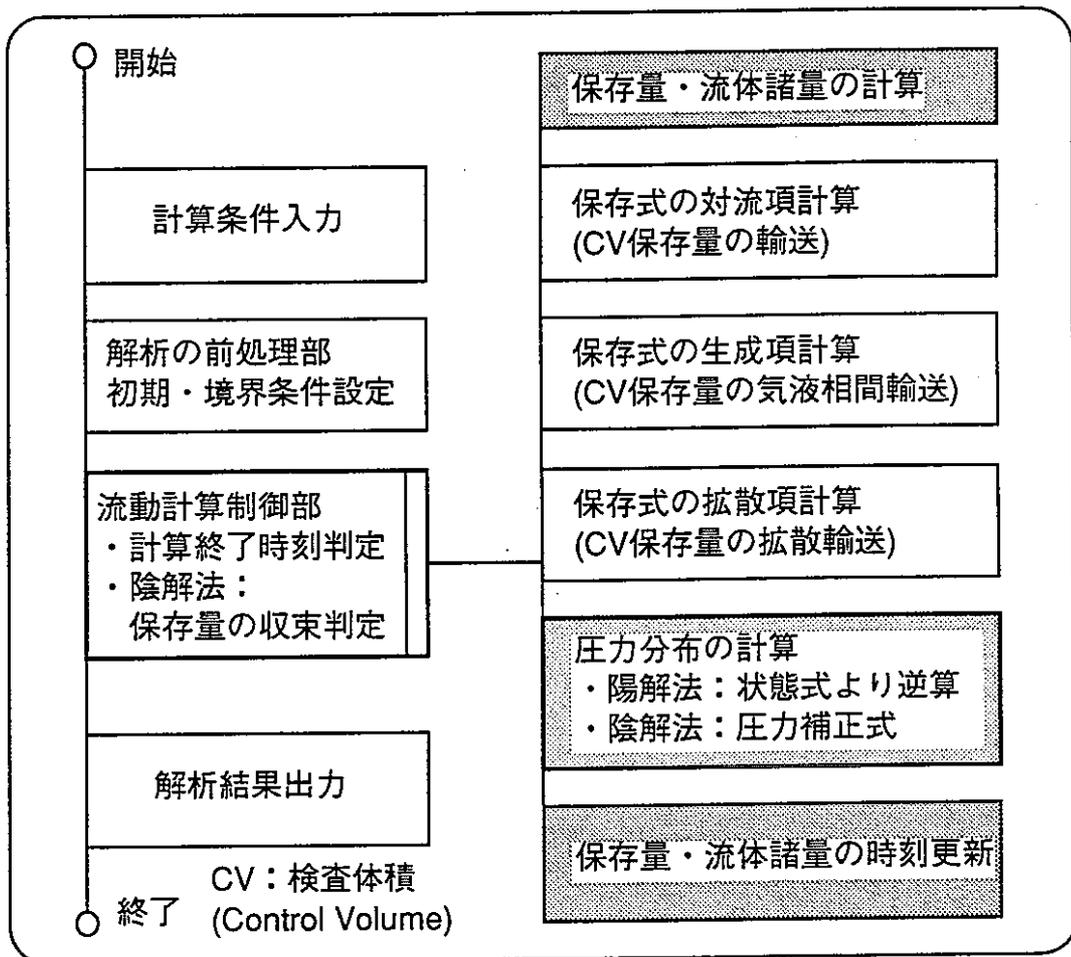


図4.2-1 物性値計算の簡略化オプションを導入したコードの基本構成  
(灰色部分: コードの改良部分)

## 5. 反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.20)の説明

### 5. 1 反応基本コードの構成

#### 5. 1. 1 概略

これより、今回作業において改良した反応ジェット基本コード LEAP-JET (Ver. 1.20) (以降、基本コードと呼ぶ)の概要を説明する。基本概要は、反応ジェット基本コード LEAP-JET (Ver. 1.10)と同様である。しかし、基本コード LEAP-JET (Ver. 1.20)では、前章に説明した陰解法の導入部分が異なる。

図5.1-1～3に反応ジェット基本コードの構成を示す。図5.1-1はコードの制御部分、図5.1-2は陽解法部分、図5.1-3は陰解法部分である。本基本コードは、二流体モデルを用いた二相流解析コードSIMAを基本として、化学反応モデルによる化学種の質量変化と発熱を考慮するように、昨年度の開発作業において改良したものである。

基本コードでは、前章に示した気液二相流の基本式(保存式)の対流項・拡散項・生成項を、それぞれ別々のサブルーチン(モジュール)にて算出する特徴がある。流体保存量Aに対する一般化された基本式(微分方程式)は、下記の通りである。ここでtは時間、xは空間座標、uは対流(輸送)速度、Bは拡散係数、Cは生成量である。

$$dA/dt + u \cdot dA/dx = B \cdot d^2A/dx^2 + C \dots \dots \dots (5.1-1)$$

$$\text{(時間項)} + \text{(対流項)} = \text{(拡散項)} + \text{(生成項)}$$

上式に基づき、各計算セルにおける次の保存量を評価する。

- ・気液相の質量(密度  $\rho$ )・流速u、内部エネルギー(温度T)。
- ・化学種の質量(密度)。

また保存量の評価に伴い、次の流体諸量も各種の構成式により評価する。

- ・圧力pと気相体積率(ボイド率) $\alpha$ 。
- ・気液相間の質量・運動量・エネルギー移動量。
- ・化学反応に伴う反応生成物の質量増減量と発熱量。

基本コードの二相流流動計算部CHANGEにおける、計算セル(前述のコントロールボリュームCV)内の保存式に基づく保存量は、各モジュールにおいて次の

通り補正されている。各モジュールで必要となる構成式(構成方程式・物性値)については、随時呼び出されている。

今回の作業にて改良した基本コードでは、従来のEuler陽解法とSIMPLE法に基づく陰解法の、2つの時間積分法を選択することが可能である。この場合、入力設定に基づいて、二相流流動計算部CHANGEにおいて時間積分法を切り替える。

(1) 流体諸量の算出・更新

- ・(初回のみ)流体諸量の算出 : STATE2-EVTMOD-EVT-PROF2
- ・計算開始時に保存量の偏差量を更新 : RESETC

(2) 対流項の評価

- ・(気液相の対流)速度分布(運動方程式) : VELOC→MOVE
- ・気液相の質量保存式の対流項 : MASTRS
- ・気液相の運動量保存式の対流項 : MOMTRS
- ・気液相のエネルギー保存式の対流項 : ENGTRS
- ・化学種の質量保存式の対流項 : CMSTRS

(3) 生成項の評価

- ・相変化による気液相の質量生成項 : PHCHG
- ・化学反応に基づく化学種の生成量・発熱量の算出 : CMSACT
- ・質量・運動量・エネルギー輸送量の算出 : PHTRS
- ・気液相間の熱伝達量の算出 : HTFLUX

(4) 拡散項の評価

- ・粘性による運動量拡散項 : MIXING
- ・熱伝導によるエネルギー拡散項 : CONDUCT

(5) 速度分布による圧力の算出

陽解法の場合 : PRESSD(-PRS-VTP-EVTMOD-EVT-PROF) → PRESSF

陰解法の場合 : VOLUME(-VTP-EVTMOD-EVT-PROF)

-PRESSE-SOLMAT-PCONV → PRESSF

- (6) 計算終了時の保存量更新(偏差量を加算) : NEXTST

(7) 流体諸量の算出・更新

- ・流体諸量の算出 : STATE2-EVTMOD-EVT-PROF2
- ・境界条件設定・更新 : STATE1

その他、メインモジュールにおいて次のモジュールが必要に応じて呼び出される。

(8) 解析条件の入出力

- ・入力 : INPUT
- ・整形出力 : PRTINT

(9) 解析結果の出力

- ・各タイムステップの情報(領域境界流量)計算 : FLUX
- ・解析結果の整形出力 : PLOT/PRINT
- ・解析リスタートファイルの入出力 : RSTIN/RSTOUT

陰解法の反復計算においては、古い時刻の保存量を記憶・読み出しを、次のモジュールで実施する。

(10) 古い時刻の保存量の記憶・読み出し

- ・記憶 : MEMORY
- ・読み出し(次回反復のため、保存量を元に戻す) : RECALL

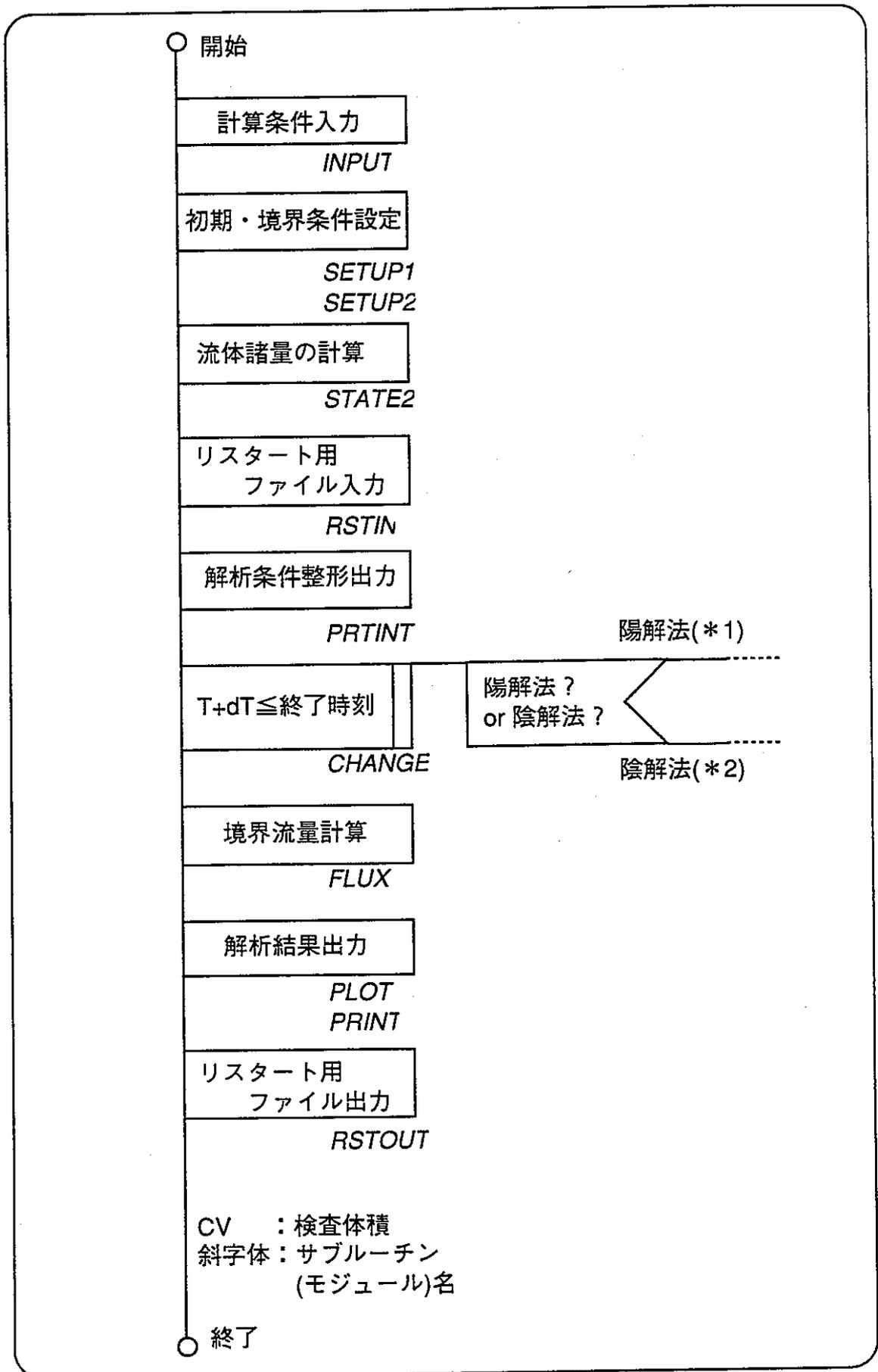


図5.1-1 反応ジェット基本コードの構成 (制御部分)

陽解法(*1)	保存量の偏差量を更新(リセット)	RESETC
	CV内の流速変化量の計算	VELOC
	CV境界を通過する 移動量(フラックス)計算	MOVE
	風上差分、Godunov法による 圧力勾配補正を考慮した質量輸送計算 体積力、壁面・相間摩擦力の評価 ←構成式	
	CV内の保存量変化量の計算 ・気液相の質量 ・各化学種の質量 ・気液相の運動量 ・気液相の内部エネルギー	MASTRS CMSTRS MOMTRS ENGTRS
	CV内の気液相変化量の計算	PHCHG
	化学種の生成量・発熱量の計算 (気液相の質量生成・伝熱量)	CMSACT
	CV内の気液相変化量に伴う 質量・運動量・エネルギー移動量の計算	PHTRS
	気液相間の熱伝達量の計算	HTFLUX
	気液相変化量などの評価 ←構成式	
	・粘性拡散による運動量変化量 ・熱伝導によるエネルギー変化量 の計算	MIXING CONDCT
	各CV内の圧力分布計算	PRESSD PRESSF
	保存量を更新(偏差量を加算)	NEXTST
	各CV内の流体諸量の計算	STATE2
	境界条件設定・時刻更新	STATE1

図5.1-2 反応ジェット基本コードの構成 (陽解法部分)

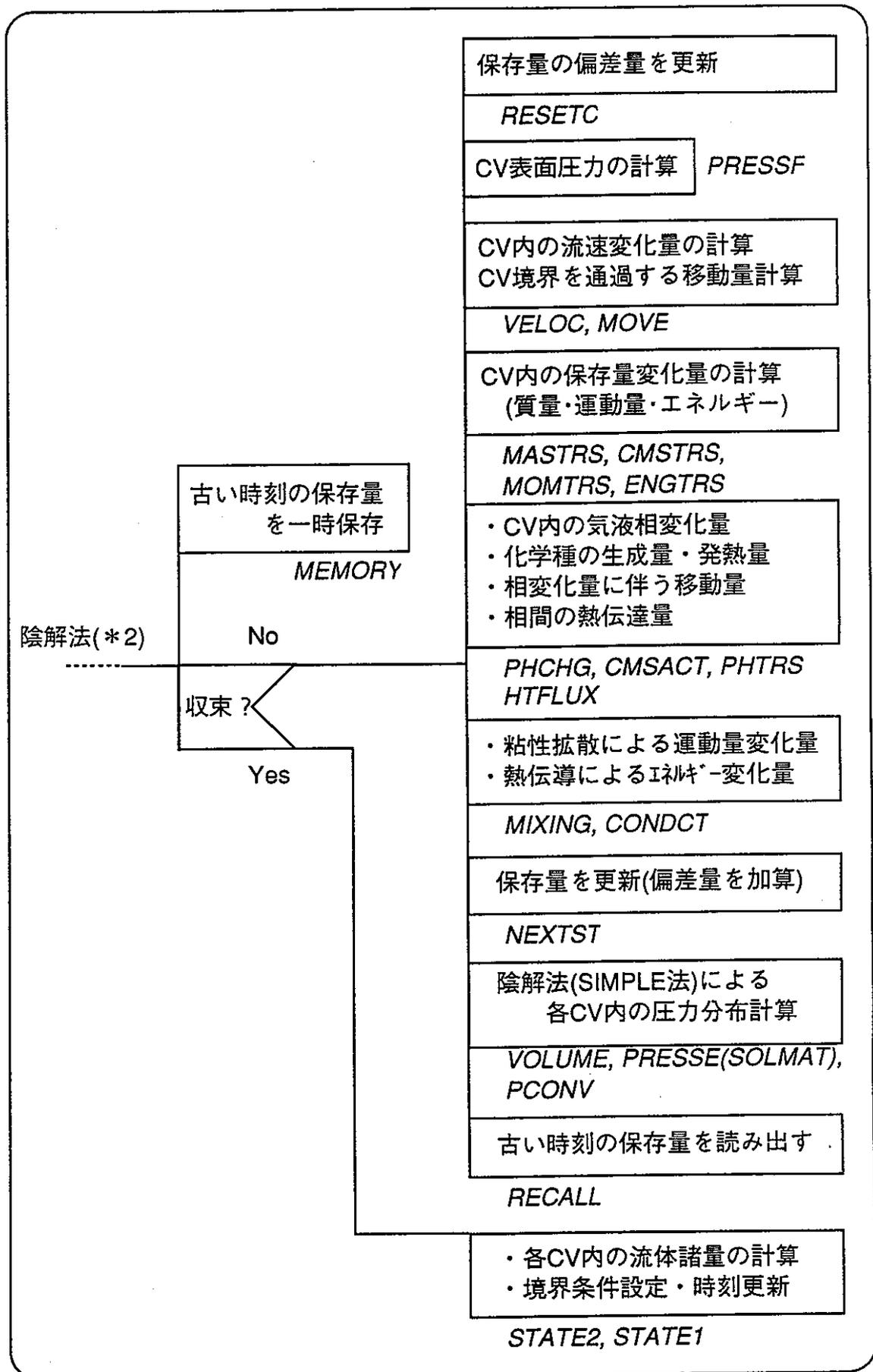


図5.1-3 反応ジェット基本コードの構成（陰解法部分）

## 5. 1. 2 基本コードのおもな変更点

本作業では反応基本コードの計算高速化対策として、LEAP-JET( Ver. 1.10 )を下記のように改良して、LEAP-JET( Ver. 1.20 )とした。

### (1) 時間積分方法の改良

二相流流動計算モジュールCHANGEに、従来の陽解法に加えて陰解法の時間積分法の計算部分(サブ・モジュール呼び出し手続き部分)を追加した。入力ファイルの設定により、陽解法と陰解法のどちらかが選択される。

陽解法部分の各サブ・モジュールについては、LEAP-JET( Ver. 1.10 )より変更は無い。

一方、陰解法導入により、次の関連モジュールを改良・追加した。

#### (a) 圧力補正式計算の反復計算

圧力補正式の反復計算(外部反復計算)の繰り返しループを、CHANGEに設けた。このループの構成は次の通りである。実行前に古い時刻の保存量を記憶モジュールMEMORYを配置し、繰り返しループ内にコントロールボリューム(CV)内の保存量変化量計算のためのサブ・モジュールを陽解法と同じく配置する。ループの最後に、次回反復のための保存量を元に戻す読み出しモジュールRECALLを配置する。

#### (b) SIMPLE法に基づく圧力補正式の計算

陽解法の場合、PRESSD,PRS,VTPの各モジュールでCV圧力を算出したが、陰解法の場合、次のように圧力を計算する。まずVOLUMEモジュールで、二相流の質量・運動量・エネルギー変化に伴うCV体積の増分を算出する(ここでも陽解法と同様、VTPを用いる)。次に、前章で述べたCV体積の増分に伴う圧力補正量をPRESSEにて算出する。PRESSEでは、反復法のGauss-Sedel法による行列解法(内部反復計算)を用いた連立1次方程式の解をSOLMATで求める。そして、PCONVにて圧力補正式の収束を判定する。

VOLUME,PRESSE,PCONVの各モジュールは、(a)のループ内におけるRECALLの前に配置される。

## (2) 化学反応モデルの簡略化

本コードでは、計算負荷を低減するため、次のような物性値計算法の簡略化オプションを設置した。

### (a) 気液二相流の温度探索と物性値を算出するモジュールの簡略化

物性値計算モジュールSTATE2を、全タイムステップで呼び出すのではなく、数回おきに呼び出すような対応を可能にした。これにより、STATE2内部の温度探索モジュールEVTMODの呼び出しを簡略化出来る。

この物性値計算の簡略化は、陽/陰解法の両方に有効である。

### (b) 物性値関数の簡略化

Na-水反応系の各化学種・成分の物性値関数として、従来コードLEAP-JET(Ver. 1.10)までに用いていた関数に加えて、蒸気発生器体系に近い条件(温度550K、圧力0.3MPa)における値に固定した定数関数を、オプションとして追加した。ただし、圧力・温度変化の大きい気体の質量密度については、従来どおりとした。また定圧比熱や定積比熱と熱エンタルピとの整合性に留意した。

### (c) 圧力計算の簡略化

これは、従来コードLEAP-JET(Ver. 1.10)で既に対応済みの簡略化である。

陽解法における圧力計算モジュールPRESSDを、全タイムステップで呼び出すのではなく、数回おきに呼び出すような対応を可能にした。これにより、PRESSD内部の温度探索モジュールEVTMODおよび圧力探索モジュールPRS・VTPの呼び出しを簡略化出来る。

上記の方法による物性値計算法の簡略化は、簡略化しない場合と比較して解析精度が低下する場合もあり得る。そのため、物性値計算法を簡略化するかどうかを、入力ファイルの設定により選択できる。

## 5. 2 解析条件入力ファイルの説明

解析条件の入力方式は、固定フォーマットによるテキストファイル入力とする。以下に入力変数の意味を示す。

なお、<>付きの行数は相対値であり、設定内容により絶対行数については変動し得る。また、下線部の設定は、コード LEAP-JET (Ver. 1.20) において改良・追加したオプションである。

・最初の3行：入力ファイルのコメント部分(タイトル等)

・4行目

TITLE : 入力ファイルのタイトル(解析条件出力時に使用)。

・5/6行目(以降、入力データ名の省略名の次の行に、有効なデータを記載)

IRST : リスタート実行パラメータ(1:リスタート実行)。

・7/8行目

FILERS : リスタート用入力ファイル名。

・9/10行目

MD : ダミー・パラメータ(無効)。

MDS : 解析体系の選択フラグ。

・0: 平面2次元座標系、0>軸対称2次元座標系。

(1: x軸を対称軸に設定、2: y軸を対称軸に設定)

ITAU : 重力加速度付加関数GAIN/仮想圧力膜付加関数DAMPの時定数。

(タイプステップの倍数: ITAU後にGAIN=1、DAMP=0)

IDEL : GAIN/DAMPの変化開始遅れの時間(タイプステップの倍数)。

IFLDSY : 気液二相流の流体の選択と相変化考慮フラグ。

相変化考慮時=相変化する流体の数。

(0: 化学反応なし、0>化学反応あり、相変化の流体数)

※なお、流体番号と数には次の規定がある。

—液相の流体番号を奇数(2n-1)、気相を偶数(2n)に並べて決める。

(例: 水=1、水蒸気=2。ただし、水=3、水蒸気=2は不可)

—相変化する流体を小さい番号に、相変化しない流体を大きな番号に指定。

(例：Na-水反応系では、相変化するH<sub>2</sub>Oを1と2、Naを3と4に指定)

一流体番号は、各物性値関数や下記(E)の情報と矛盾無いように設定。

IMPLCT : 陽/陰解法の選択パラメータ。  
0 : 陽解法。1または2 : 陰解法(通常1を使用)。

・ 11/12行目

IHTFLX : 熱伝達考慮フラグ。  
(0 : 気液相間熱伝達なし、0 > 気液相間熱伝達あり)

IOOPT : 流速出力オプション(PLOTモジュールで使用)。  
・ 0 : 気液相の実流速を出力。  
・ 1 : 気液相の見かけ流速(体積率×実流速)を出力。  
・ 2 : 気液相の実流速と見かけ流速の両方を出力。

IVLINE : 流速非線形項(2乗項)の線形化オプション。  
・ 0 : 流速非線形項を線形化しない。  
・ 1 : 線形化する(BETA(0)の指定が必要)。

IFUNC : 物性値関数の選択オプション。  
1 = 簡略化された関数。0 = 従来の関数。

・ 13/14行目

OMG : 数値計算安定化定数(-)。  
CSQ : 付加質量係数(-)。  
AIMOM : 入口境界における局所圧損係数(-)。  
VB : ドリフト速度(m/s)。  
EATA : 相変化速度定数(s)。

0の時、相変化を考慮しない。

・ 15/16行目

CHM : 相変化発生時の相体積率の積の下限值(-)。  
CWF : 壁面摩擦係数(-)。  
EDDY : 渦粘性係数の分子粘性係数に対する倍数(-)。

0の時、粘性拡散を考慮しない。

EDDYTC : 渦熱拡散率の分子熱拡散率に対する倍数(-)。  
0の時、熱伝導(熱拡散)を考慮しない。

・ 17/18行目

EPPIM : 陰的圧力探索の際の初期圧力に対する割合。  
(デフォルト=反応なし2%、反応あり20%)

GAMMA : 加重平均によるセル圧力勾配平滑化のための  
隣接セル勾配への重み(デフォルト=10%)。

EPSI : 外部反復(圧力補正式)計算の収束判定因子。

EPSJ : 内部反復(Gauss-Seidel法)計算の収束判定因子。

OHM : 圧力の増分計算の緩和係数。

・ 19/20行目 : 0.0~1.0を指定。デフォルトは全て0.5。

BETA(0) : 流速非線形項(2乗項)の線形化割合(IVLINEと連携)。  
$$UOLD2 = BETA(0) \times UOLD2 + (1 - BETA(0)) \times U$$
  
UOLD2 : 古い時刻の速度、U : 新しい時刻の速度。

BETA(1) : 陰解法収束計算パラメータ(流速)。

BETA(2) : 陰解法収束計算パラメータ(圧力補正值)。

BETA(3) : 陰解法収束計算パラメータ(圧力)。

BETA(4) : 速度計算の線形化割合(VELOCモジュールで使用)。

BETA(0)と同様に、  
運動方程式における古い時刻の外力・加速度項を線形化。

・ 21/22行目

ITERMX : デフォルトは50。  
○陽解法=圧力計算(PRESSD/F)の簡略化回数。  
タイムステップのITERMX回おきに圧力計算。  
1 : 毎タイムステップで圧力計算。

○陰解法=外部反復(圧力補正式)計算の反復回数。  
1 : 毎タイムステップで圧力計算。

JTERMX : 内部反復(Gauss-Seidel法)計算の反復回数。

デフォルトは50。

KTERMX

:物性値計算(STATE2)の簡略化回数。

タイムステップのKTERMX回おきにSTATE2実行。

・ 23/24行目

- GR : 重力加速度。  
PY : 円周率。  
BOLTZ : ボルツマン定数。  
AVO : アボガドロ数。  
TKO : °C-K換算数(237.15):0に設定するとK単位で出力。  
EMS : 水の質量数(化学反応なしの時のみ有効)。

・ 25/26行目

- GRCX : 解析体系における重力方向の方向余弦(x方向)。  
0の時、x方向重力(浮力)を考慮しない。  
GRCY : 解析体系における重力方向の方向余弦(y方向)。  
0の時、y方向重力(浮力)を考慮しない。

・ 27/28行目 --- GEOMETRY : MESH

- NX : 粗メッシュ分割数(x方向)。  
NY : 粗メッシュ分割数(y方向)。

・ 29/30行目

- MESHX : 各粗メッシュ毎の細メッシュ分割数(x方向)。

・ 31/32行目

- XX : 粗メッシュノード点の座標(x方向)(m)。

・ 33/34行目

- MESHY : 各粗メッシュ毎の細メッシュ分割数(y方向)。

・ 35/36行目

- YY : 粗メッシュノード点の座標(y方向)(m)。

・ 37行目 : データの区切り

-----  
・ 38行目～：次の順で各データを指定。

(A)ポーラスメディアの指定。

(B)境界条件の指定。

(C)上流領域の指定。

(D)初期・境界条件の指定。

(E)化学反応に関わる入力指定。

なお、(A)～(D)の指定時にはつぎの事項に注意のこと。

(a) ( ) 付き変数名は入力部のみで使用。コード内部では未使用。

(b)指定希望数のデータ行数。指定終了行の次の行に「9999」を置く。

化学反応を考慮する場合、すなわち上記の「IFLDSY」が1以上の時のみ、  
(E)の指定が有効。

(A)ポーラスメディアの指定：POROUS DATA

・ < 1 行目 >：POROUS DATAタイトル。

・ < 2 行目 >：POROUS DATAにおける入力データ名の省略名。

・ < 3 行目以降 >

(NO) : データ指定行の番号。

(IXS) : データ指定開始の細メッシュ番号(x 方向)。

(IXE) : データ指定終了の細メッシュ番号(x 方向)。

(IYS) : データ指定開始の細メッシュ番号(y 方向)。

(IYE) : データ指定終了の細メッシュ番号(y 方向)。

(PERM(1)) : メッシュ左(西)側面の表面透過率(x 方向)。

(PERM(2)) : メッシュ右(東)側面の表面透過率(x 方向)。

(PERM(3)) : メッシュ下(南)側面の表面透過率(y 方向)。

(PERM(4)) : メッシュ上(北)側面の表面透過率(y 方向)。

(PORS) : メッシュの体積空隙率。

(CDFS) : メッシュの抗力係数。

・ < 4 行目 > 終了記号「9999」

※上記の指定は、セルの表面透過率、体積空隙率が1で無いときのみ指定すれ

ばよい(デフォルトは1)。

(B)境界条件の指定：BOUNDARY DATA

- ・ < 1 行目 > : BOUNDARY DATA タイトル。
- ・ < 2 行目 > : BOUNDARY DATA における入力データ名の省略名。
- ・ < 3 行目以降 >
  - (NO) : データ指定行の番号。
  - (XS) : データ指定開始の細メッシュ番号(x 方向)。
  - (XE) : データ指定終了の細メッシュ番号(x 方向)。
  - (YS) : データ指定開始の細メッシュ番号(y 方向)。
  - (YE) : データ指定終了の細メッシュ番号(y 方向)。
  - (IDIR) : メッシュの側面方向。  
(1=左(西)、2=右(東)、3=下(南)、4=上(北)側面)
  - (BC) : 境界条件番号。  
(0=対称境界、-1=壁、-2=入口、-3=出口、-4=自由流境界)
- ・ < 7 行目 > 終了記号 「9999」

(C)上流領域の指定：UPSTREAM REGION DATA

- ・ < 1 行目 > : UPSTREAM REGION DATA タイトル。
- ・ < 2 行目 > : UPSTREAM REGION DATA における入力データ名の省略名。
- ・ < 3 行目以降 >
  - (NO) : データ指定行の番号。
  - (XS) : データ指定開始の細メッシュ番号(x 方向)。
  - (XE) : データ指定終了の細メッシュ番号(x 方向)。
  - (YS) : データ指定開始の細メッシュ番号(y 方向)。
  - (YE) : データ指定終了の細メッシュ番号(y 方向)。
  - (IDIR) : メッシュの側面方向。  
(1=左(西)、2=右(東)、3=下(南)、4=上(北)側面)
  - (AREA) : 上流領域の番号M(1 から順に、1 以上を指定)。
  - (FLD) : <未使用：ダミー・パラメータ>

・ < 4 行目 > 終了記号「9999」

(D)初期・境界条件の指定：INITIAL&BOUNDARY CONDITION SETUP

・ < 1 / 2 行目 >

- (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。  
DT : タイムステップ。  
TMAX : 計算の終了時間。  
DTPR : 計算結果の出力時間間隔。PRINTモジュールで有効。  
DTPL : 計算結果の出力時間間隔。PLOTモジュールで有効。

次の3～8行目については、(C)の指定数だけ繰り返す上流条件。

ただし、(C)の指定番号の大きい順(大→小)順に指定することに注意。

・ < 3 / 4 行目 > : 上流条件

- (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。  
PIN(M) : 圧力(Pa)。  
ALPIN(M) : ボイド率(-)。

・ < 5 / 6 行目 > : 上流条件

- (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。  
TGIN(M) : 気相温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。  
TGOVIN(M) : 気相過熱温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。  
TLIN(M) : 液相温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。  
TLOVIN(M) : 液相過熱温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。

・ < 7 / 8 行目 > : 上流条件

- (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。  
UGIN(M) : x方向一気相流速(m/s)。  
VGIN(M) : y方向一気相流速(m/s)。  
ULIN(M) : x方向一液相流速(m/s)。  
VLIN(M) : y方向一液相流速(m/s)。

上記記号の(M)は、(C)のAREAの番号と対応される。

次の9～14行目については、下流条件として1回のみ指定。

(M=0に設定される)

- ・ < 9 / 10行目 > : 下流条件
  - (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。
  - PIN(0) : 圧力(Pa)。
  - ALPIN(0) : ボイド率(-)。
- ・ < 11 / 12行目 > : 下流条件
  - (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。
  - TGIN(0) : 気相温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。
  - TGOVIN(0) : 気相過熱温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。
  - TLIN(0) : 液相温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。
  - TLOVIN(0) : 液相過熱温度(Kまたは℃ : TKO指定に依存)。
- ・ < 13 / 14行目 > : 下流条件
  - (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。
  - UGIN(0) : x方向一気相流速(m/s)。
  - VGIN(0) : y方向一気相流速(m/s)。
  - ULIN(0) : x方向一液相流速(m/s)。
  - VLIN(0) : y方向一液相流速(m/s)。
- ・ < 15行目 > 終了記号「9999」

(E)化学反応に関わる入力指定 : CHEMICAL-REACTION PARAMETER

- ・ < 1 / 2行目 >
  - CFF : 水素/水モル転換比F(0以上、1以下)。
  - CRR : 水素反応速度定数K(0以上)。
  - CTH : 気相伝熱比 $\theta$ (絶対値1以下)。  
 0以上 : CTH指定の割合で伝熱比を決定。  
 0未満 : CTH×気相熱容量比の割合で伝熱比を決定。  
 (気相熱容量比 = 気相熱容量 / 気液全体の熱容量)
- ・ < 3 / 4行目 >
  - NCS : 化学種・成分の数。
- ・ < 5 / 6行目 >
  - CST(KMC) : 各化学種・成分の省略名(5文字以内)。

- ・ < 7 / 8 行目 >
  - WEC(KMC) : 各化学種・成分の分子量  $W_c$ 。
- ・ < 9 / 10 行目 > 流体番号と対応させること。
  - IC(1,0:KMC) : 液相に分類される化学種・成分の総数 / 分類番号。
  - IC(1,0) : 液相に分類される化学種・成分の総数。
  - IC(1,1~) : 液相に分類される化学種・成分の分類番号。
- ・ < 11 / 12 行目 >
  - IC(2,0:KMC) : 気相に分類される化学種・成分の数 / 分類番号。
  - IC(2,0) : 気相に分類される化学種・成分の総数。
  - IC(2,1~) : 気相に分類される化学種・成分の分類番号。
- ・ < 13 / 14 行目 >
  - IBF(M=0~) : 上流(M>1)・下流(M=0)領域に指定される流体番号。
    - 上記の相変化する流体番号に限定される。
    - 上流(M>1)・下流(M=0)領域の数だけ指定。
- ・ < 15 / 16 行目 >
  - (NO) : 4桁の番号(適当でよい)。
  - EATAC(1) : 相変化する流体の相変化速度定数(蒸発側)。
  - EATAC(2) : 相変化する流体の相変化速度定数(凝縮側)。
    - 相変化する流体の(番号の)小さい順に指定。
    - 相変化する流体の数だけ指定。
    - 蒸発側 / 凝縮側を独立して指定。
    - ゼロに指定した側の相変化は発生しない。

### 5. 3 計算セルのメッシュ分割規約

メッシュ情報入力について、以下に説明する。これは、従来の反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.00、および Ver. 1.10) と同一である。

図5.3-1に粗メッシュ分割に関する規約を、図5.3-2に細メッシュ分割に関する規約を示す。

本コードでは、解析領域をブロック毎に分け、このブロック境界を「粗メッシュ」と呼ぶ。各粗メッシュ(解析領域ブロック)はさらに細かいメッシュに分割されて、これを「細メッシュ」と呼ぶ。各細メッシュの一つ一つがコードにおける解析セルとなる。入力するのは粗メッシュ座標  $XX$ ,  $YY$  とその数  $MX$ ,  $MY$  (最大10)、そして各粗メッシュ内の細メッシュ分割数  $MESHX$ ,  $MESHY$  である。この情報を元に、SETUP1でメッシュ分割される。

本コードでは、計算セルに関する配列情報を1次元(添字K)で管理する「一連管理方式」に特徴がある。これによりメモリーの節約が図れ、高次元化への拡張性が保てる。細メッシュの  $x$  方向(添字I)と  $y$  方向(添字J)の分割番号I, JとKとの変換は、(1)I, JからKへは配列  $KIJ(I, J)$  の情報で、(2)KからI, Jへは配列  $IKK(K) \cdot JYK(K)$  の情報の参照による。

セル情報の詳細を図5.3-3に示す。

セルの形状情報は、 $x$ ,  $y$  方向にセルの幅  $DX \cdot DY$ 、セルの中心座標は  $XC \cdot YC$ 、セル境界座標は  $X \cdot Y$  である。K番目のセルの上下左右(東西南北)方向の隣接番号は変数NEXTの参照により知ることが出来る。ただし、NEXTには境界情報も含まれており、下記のように決められている。

- ・ NEXT=-1 : 壁面(速度=0、法線方向の圧力勾配=0)
- ・ NEXT=-2 : 入口境界(入口条件INLETを指定)
- ・ NEXT=-3 : 出口境界(出口条件EXITを指定)
- ・ NEXT=-4 : 自由流出境界(内側圧力・速度を直線外挿)

なお、LEAP-JET (Ver. 1.10)以降の改良コードでは、図のようにセルの面方向が次のように変更された。

1=左(西)、2=上(北)→右(東)、3=右(東)→下(南)、4=下(南)→上(北)側面

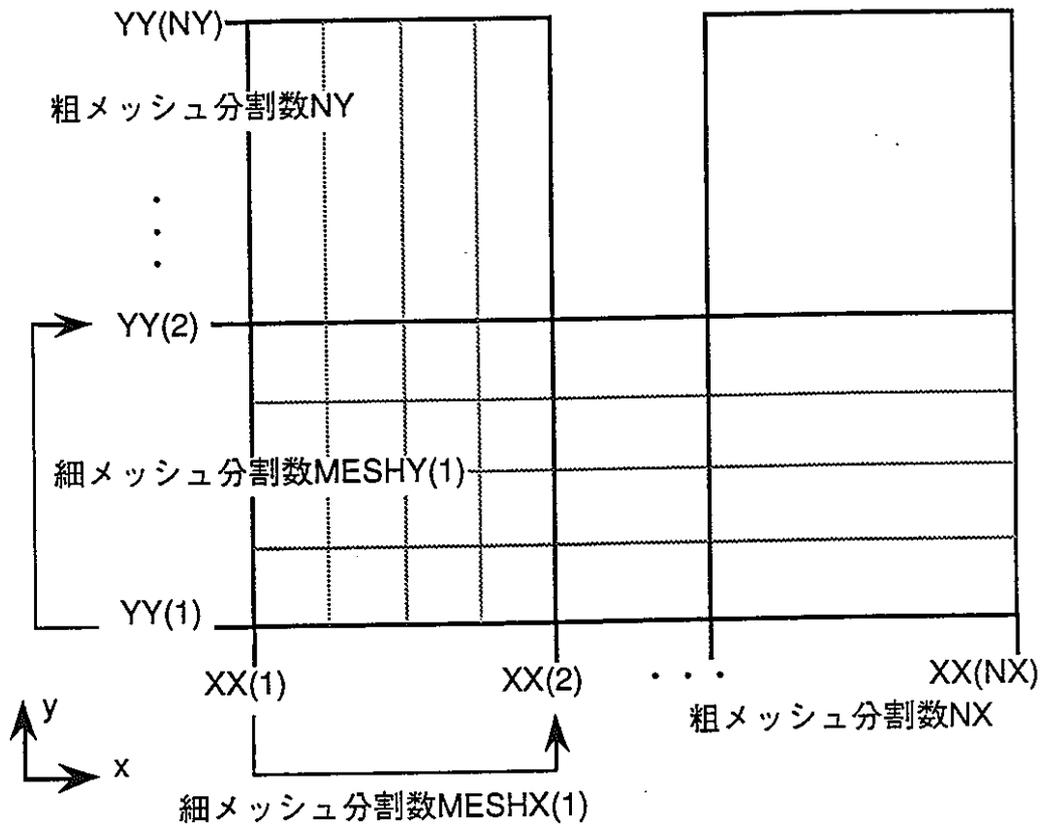


図5.3-1 粗メッシュ分割規約

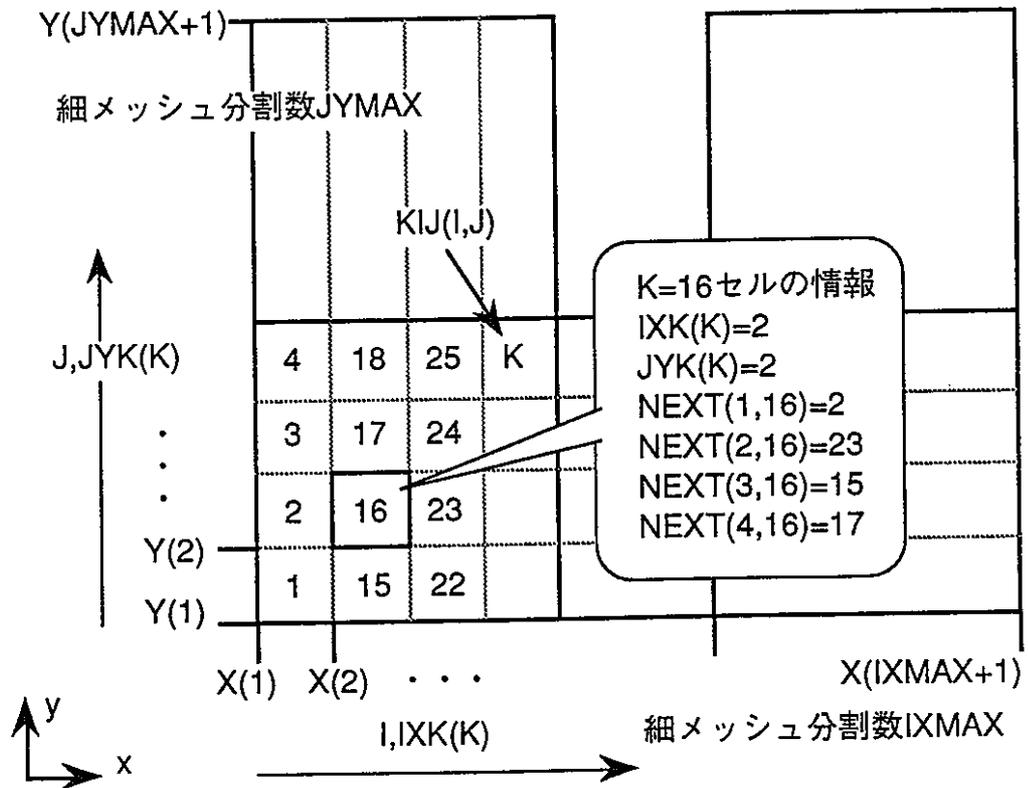


図5.3-2 細メッシュ分割規約

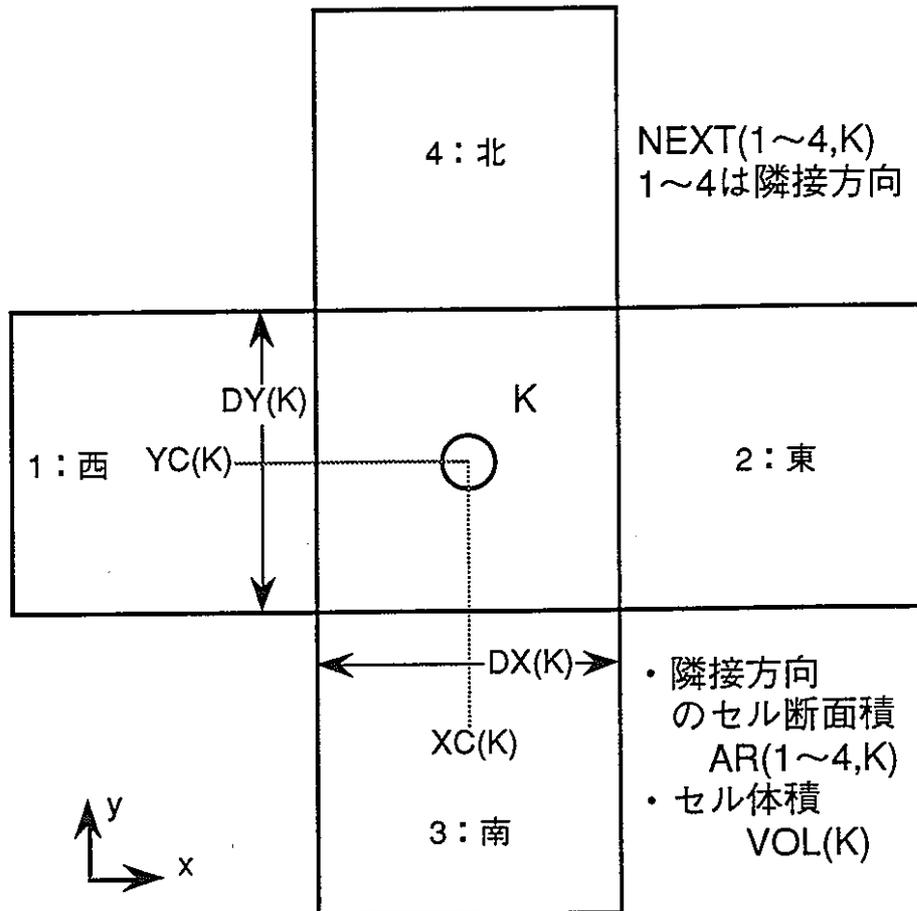
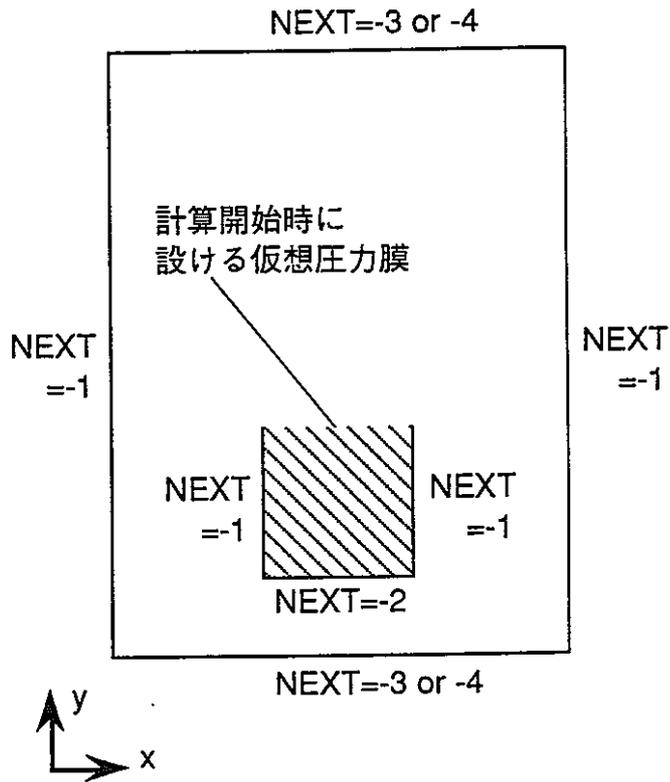


図5.3-3 メッシュ情報

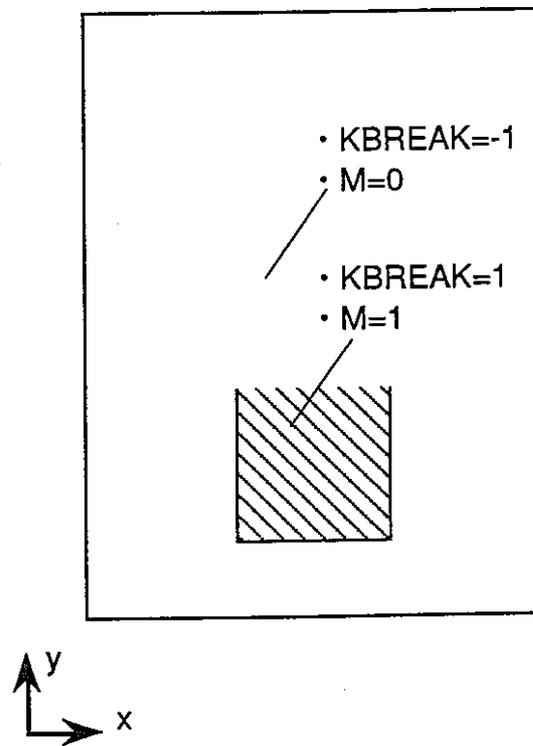
ファイルによる入力条件に基づいて、計算セル情報や、解析領域、境界条件、初期条件は、コード内部において自動的に設定される。

前節に記載の(A)ポラスメディア条件、(B)境界条件、(C)上流領域、(D)初期・境界条件、および(E)化学反応に関わる各入力指定により、前述のNEXTや、上流・下流領域を判別する変数KBREAKが決められる。さらに、KBREAKの指定に対して、領域番号Mに対応した流体番号や流体条件（圧力・温度など）が設定される。

図5.3-4に、本解析体系の例を示す。(a)の斜線部分に上流境界を、周囲に下流境界を設定している。領域の左右には固定壁(スリップ：NEXT=-1)条件、上下には出口境界(NEXT=-3)または自由流出境界(NEXT=-4)条件を指定している。また、斜線の上流境界の下方に入口境界(NEXT=-2)を、左右に固定壁条件を設定している。これらの指定に対して、(b)のように各変数は内部設定される。



(a)境界条件の設定



(b)領域・流体番号の設定

図5.3-4 コード内部での境界条件設定

## 5. 4 出力方法

入力設定に基づく解析条件(初期・境界条件)設定と、主要な計算結果については、テキストファイルにて出力される。

### (1) 解析条件設定の出力：PRTINTモジュール

出力装置番号7へ、ファイル名「入力ファイル名.O1」で出力される。出力形態は、解析条件入力ファイルに類似しており、入力条件に基づいた計算セル情報や、解析領域、境界条件、初期条件の設定結果が出力される。

### (2) 主要な計算結果の出力：PLOT・PRINTモジュール

次の情報を出力する。

- (a)入出力ファイル名：FILEIO。
- (b)計算結果(物理量)の項目数：IDN。
- (c)上下流境界の数：KSRFMX。
- (d) x, y 方向メッシュ節点数とメッシュ節点座標X, Y。
- (e) x, y 方向メッシュ番号とメッシュ中心座標XC, YC。
- (f) x, y 方向メッシュ番号I,Jと一連メッシュ番号Kのマトリクス。
- (g)出力時刻T、サイクル数ICYCLE、上下流境界における  
質量流束GFLUX[kg/m<sup>2</sup>s]、質量流量WFLUX[kg/s]。
- (h)主要な計算結果

(h)については、次のようにPLOT・PRINTモジュールで分けて出力される。

主要な計算結果の出力時間間隔は、入力ファイルにて指定する。

### (A)流体諸量：PLOTモジュール

出力装置番号8へ、ファイル名「入力ファイル名.O2」で出力される。

出力時間間隔はDTPLで指定する。

圧力	: PQ
体積率	: FQ
温度	: 液相TL、気相TG、平均TPM
実流速	: 液相U/VL、気相U/VG

または見かけ流速                   : 液相 $U/VL \times (1-FQ)$ 、気相 $U/VG \times FQ$

以下は、化学反応を考慮する場合のみ指定が有効。

モル分率                               : XLC

(B)流体諸量：PRINTモジュール

出力装置番号9へ、ファイル名「入力ファイル名.O3」で出力される。

出力時間間隔はDTPRで指定する。

圧力                                     : PQ

体積率                                 : FQ

セル質量                               : 気相QS、液相QW

セル運動量                             : 気相 $U/VMS$ 、液相 $U/VMW$

セル内部エネルギー                   : 気相ES、液相EW

以下は、化学反応を考慮する場合のみ指定が有効。

セル化学種質量                       : QC

(3) リスタート用ファイル入力・出力：RSTIN・RSTOUTモジュール

リスタート用ファイルは、主要なCOMMONブロック変数を固定フォーマットのテキスト形式で、ファイル名「入力ファイル名.RS」でアクセスされる。

解析開始時には、入力ファイルのリスタートフラグにより入力の有無を判定して、必要あればリスタートファイルを出力装置番号11より読み込む。また、解析終了時には、必ず出力装置番号10へリスタートファイルを出力する。

なお、主要なCOMMONブロック変数は次の通りである。COMMON変数の詳細については、次に説明する。

A, F, I 1~8, J 1~5, K 1~5, M 1~3, O 1

以下は、化学反応を考慮する場合のみ指定が有効。

O 2, R 1~4, S

## 5. 5 変数の説明

### (1) コード内共通変数

コード開発環境・FORTRAN処理系では、複数ソースファイルのコンパイル時指定読み込み、いわゆるINCLUDEコマンドが使用できる。このため、コードで共通使用するPARAMETER文とCOMMON文については、ソースファイル「com0.f」として分離した。

本コードで使用するPARAMETER文の変数の意味は、次の通りである。

K1	: x方向最大細メッシュ数。K4=K1+1。
K2	: y方向最大細メッシュ数。K5=K2+1。
KMS	: 最大細メッシュ分割数=K1×K2。
KML	: 最大細メッシュ・ノード数=K4×K5。
KB	: 上流・下流領域の最大数。
KMC	: 最大化学種・成分数。
KMP	: 相変化する流体の最大数。KMP2=KMP×2。

本コードで使用するCOMMON変数の意味について、COMMONブロック毎に下記に説明する。CVはコントロールボリューム(計算セル)を表す。

なお、下線部は、コードLEAP-JET (Ver. 1.20) において改良・追加したCOMMON変数である。

### ・COMAブロック

IRST	: リスタート実行パラメータ。
<u>MD</u>	<u>: ダミー・パラメータ。</u>
MDS	: 解析体系の選択フラグ。
ITAU	: 重力加速度付加関数GAIN / 仮想圧力膜付加関数DAMPの時定数のDTに対する倍数。
IDEL	: GAIN/DAMPの変化開始遅れの時間のDTに対する倍数。
<u>IMPLCT</u>	<u>: 陽/陰解法の選択パラメータ。</u>
IBNDX	: 速度境界指定数(x方向)。

IBNDY	: 速度境界指定数(y 方向)。
ICYCLE	: 計算回数(=TMAX/DT)。
ICS	: (リスタート時の)計算開始サイクル数。
ICE	: (リスタート時の)計算終了サイクル数。
NX	: 粗メッシュ分割数(x 方向)。
NY	: 粗メッシュ分割数(y 方向)。
KMAX	: セルの一連番号最大値。
IXMAX	: x 方向ノード最大値。
JYMAX	: y 方向ノード最大値。
IFLDSY	: 気液二相流の流体の選択と 相変化考慮フラグ(相変化考慮時=相変化する流体数)。
IPHCHG	: 相変化する流体数(相変化考慮時)。
IHTFLX	: 熱伝達考慮フラグ。
IOOPT	: 流速出力オプション(PLOTモジュールで使用)。
IVLINE	: 流速非線形項(2乗項)の線形化オプション。
IFUNC	: <u>物性値関数の選択オプション。</u>

・ COMB 1 ブロック

IXK(KMS)	: x 方向ノード番号。
JYK(KMS)	: y 方向ノード番号。
KIJ(K1,K2)	: セルの一連番号。

・ COMB 2 ブロック

MESHX(KB)	: 細メッシュ分割数(x 方向)。
MESHY(KB)	: 細メッシュ分割数(y 方向)。
NEXT(4,KMS)	: 隣接セルの一連番号(正値)・境界条件パラメータ(0・負値)。
NBOUND(4,K1,K2)	: 境界条件指定の作業変数。

・ COMB 3 ブロック

X(KML)	: x 方向ノード点座標(細メッシュ)。
Y(KML)	: y 方向ノード点座標(細メッシュ)。
XC(KMS)	: セル中心座標(x 方向)。

YC(KMS) : セル中心座標(y方向)。

DX(KMS) : x方向セル長さ。

DY(KMS) : y方向セル長さ。

・ COMB 4 ブロック

XX : x方向ノード点座標(粗メッシュ)。

YY : y方向ノード点座標(粗メッシュ)。

FRICX(KMS) : x方向壁面摩擦係数(VELOC/SETUPで使用)。

FRICY(KMS) : y方向壁面摩擦係数(VELOC/SETUPで使用)。

・ COMB 5 ブロック

VOL(KMS) : セル体積。

AR(4,KMS) : セル断面積(各方向)。表面透過率を考慮。

AC(4,KMS) : セル断面積(各方向)。セル寸法のみ考慮。

AB(KMS) : セル表面積(陰解法にて使用)。

・ COMB 6 ブロック

DRAGX(KMS) : x方向抗力係数(VELOC/SETUPで使用)。

DRAGY(KMS) : y方向抗力係数(VELOC/SETUPで使用)。

・ COMC 1 ブロック

PERMS(4,K4,K5) : セル表面透過率指定の作業変数(各方向)。

PORS(K4,K5) : セル体積空隙率指定の作業変数。

PERM(4,KMS) : セル表面透過率(各方向)。

POR(KMS) : セル体積空隙率。

CDFS(K4,K5) : セル抗力係数指定の作業変数。

CDF(KMS) : セル抗力係数。

・ COMC 2 ブロック

ISURFC(KB) : 境界条件番号。

JSURFC(KB) : 境界条件のメッシュの側面方向。

ISUFMX : 境界条件の指定数。

IXS(KB) : 境界条件のデータ指定開始の細メッシュ番号(x方向)。

IXE(KB) : 境界条件のデータ指定終了の細メッシュ番号(x方向)。

IYS(KB) : 境界条件のデータ指定開始の細メッシュ番号(y方向)。  
IYE(KB) : 境界条件のデータ指定終了の細メッシュ番号(y方向)。

・ COMDブロック

ISURFK(KB) : 上流領域番号。  
JSURFK(KB) : 上流領域のメッシュの方向。  
KSURFK(KB) : <未使用:ダミー・パラメータ。>  
KSRFMX : 上流領域の指定数。  
IXSK(KB) : 上流領域のデータ指定開始の細メッシュ番号(x方向)。  
IXEK(KB) : 上流領域のデータ指定終了の細メッシュ番号(x方向)。  
IYSK(KB) : 上流領域のデータ指定開始の細メッシュ番号(y方向)。  
IYEK(KB) : 上流領域のデータ指定終了の細メッシュ番号(y方向)。  
NGFLUX(K1,K2,3) : 上流領域指定の作業変数。

・ COMEブロック

KBREAK(KMS) : 解析領域の(上流・下流)内部指定番号。  
GFLUX(-1:KB) : 上流・下流境界における質量流束(各解析領域の境界毎)。  
WFLUX(-1:KB) : 上流・下流境界における質量流量(各解析領域の境界毎)。

・ COMFブロック

T : 解析時刻。  
DT : タイムステップ。  
TMAX : 計算時間の最大値。  
TAU : 仮想圧力膜における圧力変化の時定数(=DT×ITAU)。  
TPL : 計算結果出力用時間(PLOTモジュール用)。  
DTPL : 出力時間間隔(PLOTモジュール用)。  
TPR : 計算結果出力用時間(PRINTモジュール用)。  
DTPR : 出力時間間隔(PRINTモジュール用)。

・ COMG 1 ブロック

- OMG : 数値計算安定化定数(-)。  
CSQ : 付加質量係数(-)。  
AIMOM : 入口境界における局所圧損係数(-)。  
VB : ドリフト速度(m/s)。  
EATA : 蒸発速度時定数(s)。

・ COMG 2 ブロック

- CHM : 相変化発生時の相体積率の積の下限值(-)。  
CWF : 壁面摩擦係数(-)。  
EDDY : 渦粘性係数の分子粘性係数に対する倍数(-)。  
EDDYTC : 渦熱拡散率の分子熱拡散率に対する倍数(-)。

・ COMG 3 ブロック

- GR : 重力加速度。  
PY : 円周率。  
BOLTZ : ボルツマン定数。  
AVO : アボガドロ数。  
TKO : °C-K換算数(237.15) : 0に設定するとK単位で出力。  
EMS : 水の質量数(化学反応なしの時のみ有効)。

・ COMG 4 ブロック

- GRVX : 解析体系における x 方向重力成分。  
GRVY : 解析体系における y 方向重力成分。  
GRCX : 解析体系における重力方向の方向余弦(x 方向)。  
GRCY : 解析体系における重力方向の方向余弦(y 方向)。

・ COMG 0 0 ブロック

- EPPIM : (陰的圧力探索時の)初期圧力に対する割合。  
GAMMA : 加重平均によるセル圧力勾配平滑化のための隣接セル勾配への重み(デフォルト=10%)。  
EPSI : 外部反復 (圧力補正式) 計算の収束判定因子。  
EPSJ : 内部反復 (Gauss-Seidel法) 計算の収束判定因子。  
OHM : 圧力の増分計算の緩和係数。

・ COMG01ブロック

- ITERMX : 繰り返しカウンタの最大数。ITERと関連。  
○陽解法=圧力計算(PRESSD/F)の簡略化回数。  
1: 毎タイムステップで圧力計算。  
○陰解法=外部反復(圧力補正式)計算の反復回数。  
1: 毎タイムステップで圧力計算。
- JTERMX : 内部反復(Gauss-Seidel法)計算の反復回数。
- KTERMX : 繰り返しカウンタの最大数。KTERと関連。  
物性値計算(STATE2)の簡略化回数。
- ITER : 外部反復計算の反復/圧力計算簡略化回数のカウンタ。
- JTER : 内部反復計算の反復回数カウンタ。
- KTER : 内部反復計算の簡略化回数カウンタ。
- ICPD : 圧力計算の簡略化回数におけるカウンタ。

・ COMHブロック

- PIN(0:KB) : 各境界条件における圧力(Pa)。
- ALPIN(0:KB) : 各境界条件におけるボイド率(-)。
- TGIN(0:KB) : 各境界条件における気相温度(K)。
- TGOVIN(0:KB) : 各境界条件における気相過熱温度(K)。
- TLIN(0:KB) : 各境界条件における液相温度(K)。
- TLOVIN(0:KB) : 各境界条件における液相過熱温度(K)。
- UGIN(0:KB) : 各境界条件における x 方向一気相流速(m/s)。
- VGIN(0:KB) : 各境界条件における y 方向一気相流速(m/s)。
- ULIN(0:KB) : 各境界条件における x 方向一液相流速(m/s)。
- VLIN(0:KB) : 各境界条件における y 方向一液相流速(m/s)。
- EGIN(0:KB) : 各境界条件における気相内部エネルギー(J/kg)。
- ELIN(0:KB) : 各境界条件における液相内部エネルギー(J/kg)。
- RGIN(0:KB) : 各境界条件における気相密度(kg/m<sup>3</sup>)。
- RLIN(0:KB) : 各境界条件における液相密度(kg/m<sup>3</sup>)。
- UPGIN(0:KB) : 各境界条件における x 方向一気相運動量(kgm/s)。

VPGIN(0:KB) : 各境界条件における y 方向一気相運動量(kgm/s)。  
 UPLIN(0:KB) : 各境界条件における x 方向一液相運動量(kgm/s)。  
 VPLIN(0:KB) : 各境界条件における y 方向一液相運動量(kgm/s)。  
 HGIN(0:KB) : 各境界条件における気相エンタルピー(J/m<sup>3</sup>)。  
 HLIN(0:KB) : 各境界条件における液相エンタルピー(J/m<sup>3</sup>)。  
 HJGIN(0:KB) : 各境界条件における気相エンタルピー(J/kg)。  
 HJLIN(0:KB) : 各境界条件における液相エンタルピー(J/kg)。

・ COM I 1 ブロック

PQ(KMS) : 圧力(各相共通：1 圧力モデル)(Pa)。  
 FQ(KMS) : 各相の体積率(-)。  
 PR(4,KMS) : コントロールボリューム CV 境界面(4 面)の圧力。  
 QS(KMS) : 気相質量保有量(kg)。  
 QW(KMS) : 液相質量保有量(kg)。

・ COM I 2 ブロック

UMS(KMS) : x 方向一気相運動量(kgm/s)。  
 VMS(KMS) : y 方向一気相運動量(kgm/s)。  
 UMW(KMS) : x 方向一液相運動量(kgm/s)。  
 VMW(KMS) : y 方向一液相運動量(kgm/s)。

・ COM I 3 ブロック

ES(KMS) : 気相内部エネルギー(J)。  
 EW(KMS) : 液相内部エネルギー(J)。

・ COM I 4 ブロック

UG(KMS) : x 方向一気相流速(m/s)。  
 VG(KMS) : y 方向一気相流速(m/s)。  
 UL(KMS) : x 方向一液相流速(m/s)。  
 VL(KMS) : y 方向一液相流速(m/s)。

・ COM I 5 ブロック

PR(4,KMS) : セル境界面圧力(Pa)。  
 TG(KMS) : 気相温度。

TL(KMS) : 液相温度。  
TPM(KMS) : 相平均温度。

・ COM I 6 ブロック

DQS(KMS) : タイムステップ当たりのQSの変化量(kg)。  
DQW(KMS) : タイムステップ当たりのQWの変化量(kg)。  
DES(KMS) : タイムステップ当たりのESの変化量(J)。  
DEW(KMS) : タイムステップ当たりのEWの変化量(J)。

・ COM I 7 ブロック

DUMS(KMS) : タイムステップ当たりのUMSの変化量(kgm/s)。  
DVMS(KMS) : タイムステップ当たりのVMSの変化量(kgm/s)。  
DUMW(KMS) : タイムステップ当たりのUMWの変化量(kgm/s)。  
DVMW(KMS) : タイムステップ当たりのVMWの変化量(kgm/s)。

・ COM I 8 ブロック : 流速非線形項(2乗項)の線形化のための古い時刻の流速。

UGOLD2(KMS) : 古い時刻における x 方向一気相流速(m/s)。  
VGOLD2(KMS) : 古い時刻における y 方向一気相流速(m/s)。  
ULOLD2(KMS) : 古い時刻における x 方向一液相流速(m/s)。  
VLOLD2(KMS) : 古い時刻における y 方向一液相流速(m/s)。

COM I 1 ~ 4 ブロック : 陰解法において使用される、

古い時刻におけるコントロールボリュームの各値。

・ COM I 1 ブロック

PQOLD(KMS) : 圧力(各相共通 : 1 圧力モデル)(Pa)。  
FQOLD(KMS) : 各相の体積率(-)。  
QSOLD(KMS) : 気相質量保有量(kg)。  
QWOLD(KMS) : 液相質量保有量(kg)。

・ COM I 2 ブロック

UMSOLD(KMS) : x 方向一気相運動量(kgm/s)。  
VMSOLD(KMS) : y 方向一気相運動量(kgm/s)。  
UMWOLD(KMS) : x 方向一液相運動量(kgm/s)。  
VMWOLD(KMS) : y 方向一液相運動量(kgm/s)。

・ COMI 3ブロック

ESOLD(KMS) : 気相内部エネルギー(J)。

EWOLD(KMS) : 液相内部エネルギー(J)。

・ COMI 4ブロック

QCOLD(KMC,KMS) : 各化学種・成分の質量保有量(kg)。

・ COMI 5ブロック (陰解法の参照用: COMI 8ブロック変数とは異なる)

UGOLD(KMS) : 古い時刻における x 方向一気相流速(m/s)。

VGOLD(KMS) : 古い時刻における y 方向一気相流速(m/s)。

ULOLD(KMS) : 古い時刻における x 方向一液相流速(m/s)。

VLOLD(KMS) : 古い時刻における y 方向一液相流速(m/s)。

・ COMK 1ブロック

DNG(4,KMS) : CV内の気相質量の増分(BNの正值)。

DNL(4,KMS) : CV内の液相質量の増分(BNの正值)。

BNG(4,KMS) : CV内の気相質量の増分。

BNL(4,KMS) : CV内の液相質量の増分。

・ COMK 2ブロック

DDF(2,2) : 対流項補正量(MOVE内部で使用)。

DDFF(2) : 対流項補正量(MOVE内部で使用)。

・ COMK 3ブロック

FLGXM(KMS) : x 方向相間摩擦力(VELOC内部で使用)。

FLGYM(KMS) : y 方向相間摩擦力(VELOC内部で使用)。

・ COMK 4ブロック

FLXM(KMS) : x 方向一液相体積作用外力(VELOC内部で使用)。

FLYM(KMS) : y 方向一液相体積作用外力(VELOC内部で使用)。

FGXM(KMS) : x 方向一気相体積作用外力(VELOC内部で使用)。

FGYM(KMS) : y 方向一気相体積作用外力(VELOC内部で使用)。

・ COMK 5ブロック

ALXM(KMS) : x 方向一液相加速度(VELOC内部で使用)。

ALYM(KMS) : y 方向一液相加速度(VELOC内部で使用)。

- AGXM(KMS) : x 方向一気相加速度(VELOC内部で使用)。  
 AGYM(KMS) : y 方向一気相加速度(VELOC内部で使用)。

OCOMM 1～3 ブロック：陰解法における圧力補正式計算用の変数。

・ COMM 1 ブロック

- DVOL(KMS) : CV内の体積増分( $m^3$ )。  
 DDPP(KMS) : CV内の圧力増分(Pa)。  
 DDPPM(KMS) : CV内の圧力増分計算における緩和用データ(Pa)。

・ COMM 2 ブロック

- AA1(0:4,KMS) : 圧力補正式の係数( $m^2/m=m$ )。  
 AA1SUM(KMS) : 圧力補正式の係数総和( $m^2/m=m$ )。

・ COMM 3 ブロック

- Y3(KMS) : 内部反復計算の一時格納用圧力(Pa)。  
 Y4(KMS) : 外部反復計算の一時格納用圧力(Pa)。  
 DDPPOL(KMS) : 1 回前の反復計算における圧力の増分(Pa)。

・ COMN 1 ブロック

- RHO(2,KMS) : 気液相の質量密度( $kg/m^3$ )。  
 CPT(2,KMS) : 気液相の定圧比熱(J/kg)。  
 AST(2,KMS) : 気液相の音速(m/s)。  
 UMT(2,KMS) : 気液相の粘性係数( $Pa \cdot s$ )。

・ COMN 2 ブロック

- TCN(2,KMS) : 気液相の熱伝導率( $W/(m \cdot K)$ )。  
 DKA(2,KMS) : 気液相の比熱比(-)。  
 UNT(2,KMS) : 気液相の動粘性係数( $m^2/s$ )。  
 TDF(2,KMS) : 気液相の熱拡散率( $m^2/s$ )。

・ COMN 3 ブロック

- TSA(KMP,KMS) : 飽和温度(各物質で1つ) (K)。  
 HSA(KMP2,KMS) : 気液相の飽和エンタルピー(J/kg)。  
 RSA(KMP2,KMS) : 気液相の飽和密度( $kg/m^3$ )。

・ COMO 1 ブロック

- SOG(2,KMS) : 気液相の相変化による質量移動量(kg)。  
SOH(2,KMS) : 気液相の相変化によるエネルギー移動量(J)。

・ COMX ブロック

- TITLE(20) : 入力ファイルのタイトル(解析条件出力時に使用)。

・ COMY ブロック

- CST(KMC) : 化学種・成分の省略名(5文字以内)。

以降については、化学反応を考慮するときのみ有効。

・ COMO 2 ブロック

- SOM(2,KMS) : 化学種・成分質量移動に伴う気液各相の質量移動量(kg)。  
SOT(2,KMS) : 化学反応に伴う気液各相の伝熱量(J)。

・ COMP ブロック

- CFF : 水素/水モル転換比  $F$ 。  
CRR : 水素反応速度定数  $K$ 。  
CTH : 気相伝熱比  $\theta$ 。  
WEC(KMC) : 化学種・成分の分子量  $W_c$ 。  
NCS : 化学種・成分の数。  
IC(2,0:KMC) : 化学種・成分の気液分類番号。

・ COMQ ブロック

- ROCIN(KMC) : 各境界条件における各化学種・成分の質量密度。  
ALCIN(KMC) : 各境界条件における各化学種・成分の体積率。  
UPCIN(KMC) : 各境界条件における各化学種・成分の  $x$  方向一運動量。  
VPCIN(KMC) : 各境界条件における各化学種・成分の  $y$  方向一運動量。

- ・ COMR 1 ブロック
  - QC(KMC,KMS) : CV内の各化学種・成分の質量保有量(kg)。
  - XMC(KMC,KMS) : CV内の各化学種・成分の気液相におけるモル分率(-)。
  - XTC(KMC,KMS) : CV内の各化学種・成分の気液相における質量分率(-)。
- ・ COMR 2 ブロック
  - RHC(KMC,KMS) : CV内の化学種・成分の質量密度(kg/m<sup>3</sup>)。
  - XLC(KMC,KMS) : CV内の化学種・成分のモル分率(-)。
  - XSC(KMC,KMS) : CV内の化学種・成分の質量分率(-)。
- ・ COMR 3 ブロック
  - HCR(2,KMS) : 気液相熱容量比(-)。
- ・ COMR 4 ブロック
  - DQC(KMC,KMS) : タイムステップ当たりのQCの変化量(kg)。
- ・ COMT ブロック
  - EATAC(2,KMC) : 相変化する流体の相変化速度定数(1=蒸発側、2=凝縮側)。
  - IBF(M=0~) : 上流(M>1)・下流(M=0)領域に指定される流体番号。

(2) 一部モジュール間の共通変数

(1) 以外の、次のCOMMONブロックの変数については、一部モジュール間の共通使用される。

・COMFAブロック

IK	: 気液相の番号(1 = 液相、2 = 気相)。
PT	: 単一セル圧力。PQに相当。
XCI(KMC)	: 単一セルの各化学種・成分の気液相における質量分率。 各セルのXTCに相当。
ET	: 単一セル内部エネルギー。EG/Lに相当。
TBS	: 温度探索における基準温度(BaSe)。
TUL	: 温度探索における最高温度(Upper-Limit)。
TLL	: 温度探索における最低温度(Lower-Limit)。

上記およびPブロックの各変数は、化学反応考慮時の気液各相の内部エネルギー・モル分率より温度を探索する下記のモジュールで共用される。

- ・EVTMOD, EVT, STATE2(main0.f)
- ・VTP(pre0.f)

また、次のCOMMONブロックの変数は、標準出力へのメッセージ出力用のフラグ変数である。

・COMOAブロック

IOER :	1 のとき、標準出力へモジュール・メッセージを出力。
--------	----------------------------

### (3) 注意事項

次のブロックは、解析時間とCPU使用時間表示に関する、コード開発用EWS独自の拡張機能に用いられる。

他の処理系を利用の際には、本COMMON変数を利用するメインモジュール部分を削除して対応すればよい(ソースコードには明示済み)。

#### COMMON/CLCK/

CPUTM           : CPU時間。

CTM             : CPU時間。

TCLOCK(2)       : 動作ブロック毎のCPU時間保存変数。

ICLOCK(2,2)     : 動作ブロック毎のCPU時間保存変数。

## 6. 機能確認のための試計算

### 6.1 概要

本解析では、計算コードの改良前後について、実機体系での試計算を実施し、改良前のLEAP-JET( Ver. 1.10 )と改良後のLEAP-JET( Ver. 1.20 )の両方のコードにおける、計算速度(計算負荷)の改善の程度や計算結果(精度)への影響についての比較評価と検討を行う。

改良前後のコード比較の際には、

- (1) 時間積分方法の改良、
- (2) 化学反応モデルの簡略化、

の2つの項目別に、各オプションと設定パラメータに対する所要計算時間(CPU時間)の差異、および反応ジェット挙動や温度分布等の、解析結果における影響を確認する。

試計算条件は、平成10年1月までの作業における実機評価条件の内、「もんじゅ」蒸発器体系のケース1(100%出力条件、通常運転時のSG圧力、Na流動無し)の条件である<sup>(4)</sup>。

## 6. 2 解析体系（「もんじゅ」蒸発器体系）

### 6. 2. 1 解析体系のモデル化

図6.2-1に「もんじゅ」蒸発器<sup>(11)</sup>、および解析体系を示す。

蒸発器のヘリカルコイル型伝熱管群部分(コイル部高さ=5.41m、内筒とシュラウド間の幅=0.71m)を含む幅0.7m・高さ6mの領域を、解析領域とした。

伝熱管破損事故に関する解析条件は、次のように想定した。伝熱管の破損箇所は、コイル部の下から1/6の高さのコイル中央位置であると仮定した。水の噴出は、上向きに45度の方向で、リーク率 $W=1.5\text{kg/s}$ 、伝熱管内の冷却水の初期ボイド率=0%と仮定した。

解析体系のモデル化については、次の通りである。

使用コードは2次元解析コードのため、解析対象を2次元体系で模擬し、奥行きを単位長=1mと見なした。メッシュサイズは、伝熱管ピッチの数倍相当である横100×縦200mmを1メッシュとした。縦方向のメッシュ数を低減するために、縦に長いメッシュ分割とした。よって、解析領域を、横7×縦30=210メッシュに分割している。また、伝熱管群領域に相当する高さ=5.4mの領域を、ポーラスメディアで模擬し、領域内の計算セルの表面透過率と体積空隙率を設定した。なお、これ以上小さい伝熱管径程度のメッシュサイズを設定する場合には、ポーラスメディアではなく1メッシュ全体を壁面境界にすべきである。前述のコード改良により、どちらの対応も可能である。ただし、計算速度の問題から、より少数のメッシュで伝熱管群を模擬出来るポーラスメディア近似を、今回の解析では用いた。

解析に用いた反応基本コードには、伝熱管群の体積や流動抵抗(=摩擦・抗力)、水( $\text{H}_2\text{O}$ )とNaの相変化、および重力(気液密度差)も考慮されている。

## 6. 2. 2 解析条件の設定

### (1) 解析条件の詳細設定

表6.2-1に、「もんじゅ」蒸発器体系のケース1(100%出力条件、通常運転時のSG圧力、Na流動無し)に関する、解析条件の詳細を示す(12),(13)。なお、100%出力は公称値である。

表6.2-1 「もんじゅ」蒸発器体系の解析条件

	ケース1
出力条件(%)	100
蒸気発生器(SG)内部圧力	通常運転
Na流動	無し
注水圧力(ata)	154.0
注水圧力(MPa)	15.10
注水温度(°C)	240
ボイド率(%)	0
Na圧力(ata)	2.0
Na圧力(MPa)	0.196
Na温度(°C)	325
Na流速(m/s)	0

### (2) 解析条件の設定

解析に使用するコードにおいて陽解法を選択した場合、計算安定条件を満足するように、タイムステップを20 $\mu$ sに決めた。このタイムステップを基本とした。

解析時間は、1秒または10秒までとした。本作業の主目的は改良コードにおける解析高速化に関する機能確認なので、本作業の解析時間は従来コードにおける試計算での解析時間と同程度とした。後述の解析結果のように、実機の伝熱管群内に拡大する反応ジェットの大きさは、前記の解析時間程度で解析領域の横方向寸法程度の大きさに達することが分かった。よって、前記の解析時間であれば、反応ジェット挙動の概略を模擬出来る。

### (3) 伝熱管条件の設定

注水伝熱管を模擬したメッシュ位置に、伝熱管噴出条件の上流境界を設定した(以降、伝熱管境界と呼ぶ)。この境界における速度等の流動条件を、次のように推定して決めた。

伝熱管損傷時の水リーク現象に類似する噴流現象については過去の知見が無いことから、解析により当該の噴流現象を推定して伝熱管境界を設定した<sup>(4)</sup>。この解析結果から、伝熱管境界における流動条件は、「噴出口下流近傍」の推定値(圧力=約4MPa、ボイド率=2%、伝熱管内の水温度、流速=30~40m/s)に設定した。また上記結果により、噴流太さは噴出口下流近傍においても噴出口径と同程度と推定された。よって、伝熱管境界の解析セルの側面積(噴出断面積)は、注水管の噴出口径に設定した。

### (4) 化学反応モデルにおけるパラメータの設定

反応基本コードでは、気液二相流の条件の設定に加えて、化学反応モデルにおけるパラメータの設定も必要である。

パラメータは、次のように設定した。従来の知見で理論的に説明でき、定量化可能ものはそのまま使用する。気相伝熱比 $\theta$ は、気液相の熱容量(=密度×定圧比熱)の比と仮定した。また、水素/水モル転換比 $F=0.75$ と仮定した。一方、従来の知見で説明できない水素反応速度定数 $K$ は、SWAT-3試験と解析の比較による推定結果より<sup>(4)</sup>、水素反応速度定数 $K$ は $1E-5$ と設定した。

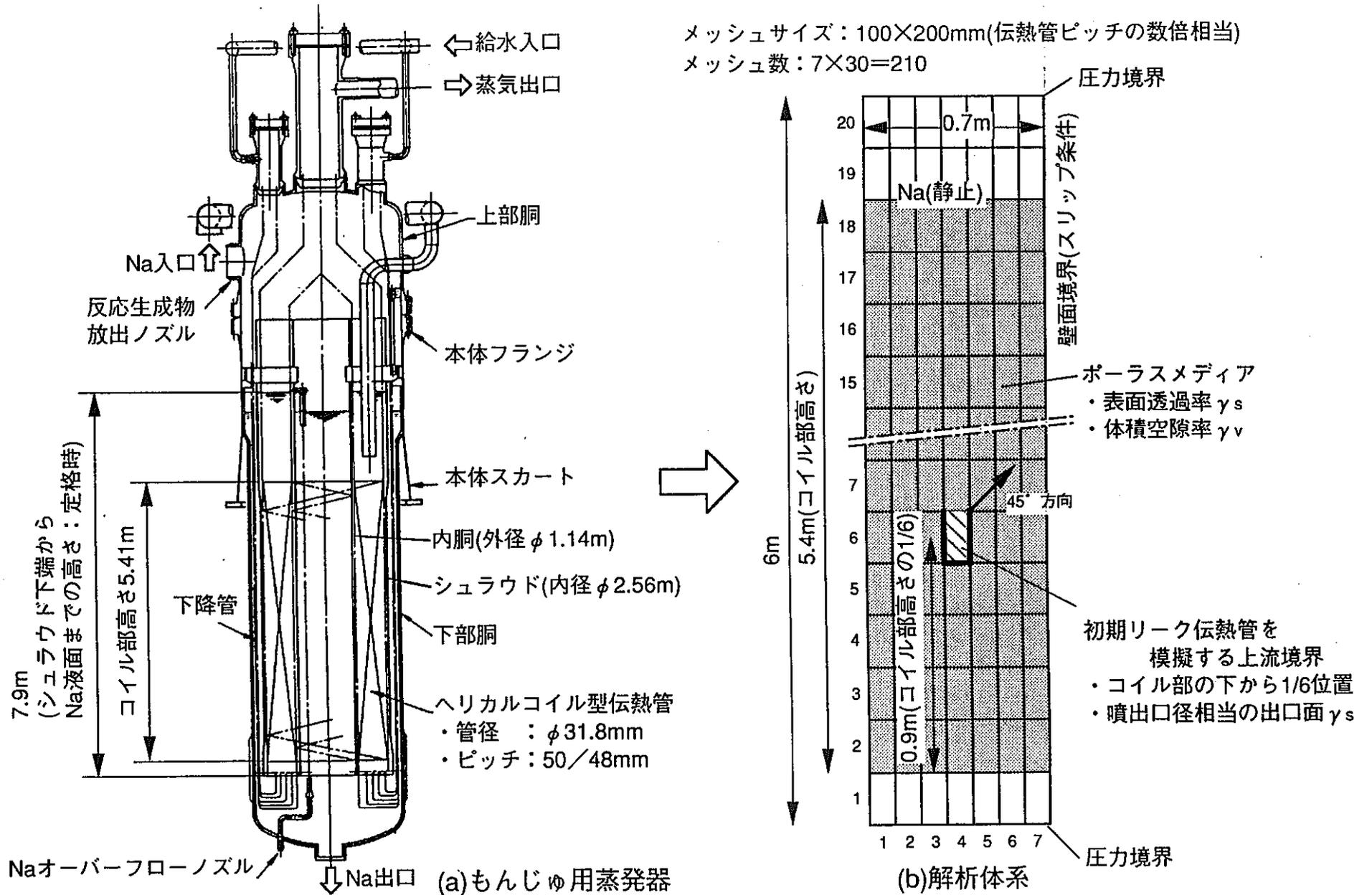


図6.2-1 もんじゅ蒸発器体系に対する解析体系

### 6. 3 解析結果の比較：時間積分方法の改良の場合

本節では、時間積分方法の改良に関する色々な条件について試計算を実施し、計算速度や反応ジェット挙動を比較する。

#### 6. 3. 1 試計算の条件

本節の試計算条件は、下記項目に対する選択と、(b)の設定条件について場合分けする。

(a)従来のEuler陽解法を選択した場合。

(b)SIMPLE法による陰解法を選択した場合。

なお、(b)の設定条件は、タイムステップDTや、前述の外部反復計算の最大反復回数ITERMXと収束判定値EPSIである。

陰解法導入によるコードの改良の検証のため、上記条件をパラメータとした解析時間1秒までの予備計算を実施した。表6.3-1に、時間積分方法の改良における予備計算の条件および結果を示す。

表6.3-1 時間積分方法の改良における予備計算

タイムステップ DT(秒)		外部反復計算			
		2x10 <sup>-5</sup>	5x10 <sup>-5</sup>	1x10 <sup>-4</sup>	2x10 <sup>-4</sup>
最大回数 ITERMX	収束判定値 EPSI	(基準DT)	(2.5倍)	(5倍)	(10倍)
30	1E-4	×	×	×	×
20	1E-3	×	×	○	×
10	1E-2	○	○	○	×
5	1E-1	○	×	○	×

(○：正常終了、×発散のため中断)

従来コードの陽解法の場合、計算継続可能な最大タイムステップは、2x10<sup>-5</sup>秒であった。一方、陰解法では、5倍程度タイムステップを大きくすることが出来た。ただし、前述のようにそれ以上のタイムステップでは、計算が不安定

になり長時間解析を継続することが出来なかった。また、計算継続の可否は、外部反復計算の最大反復回数や収束判定値にも依存することが確認された。これらの原因は後述する。

表6.3-2に、時間積分方法の改良における試計算条件を示す。条件1は陽解法、それ以外の条件は陰解法を採用した場合である。

なお、本節では、1秒または10秒までの反応ジェット解析を実施した。

表6.3-2 試計算条件：時間積分方法の改良

項目 条件	時間積分方法	タイムステップ°	外部反復計算	
	選択	$\mu s$	最大反復回数	収束判定値
条件1	陽解法	20	—	—
条件2	陰解法	100	20	1E-3
条件3	陰解法	20	10	1E-2
条件4	陰解法	50	10	1E-2
条件5	陰解法	100	10	1E-2
条件6	陰解法	100	5	1E-1

### 6. 3. 2 解析結果の比較

表6.3-3に、時間積分方法の改良条件に対する計算速度の比較を示す。表には、条件1を基準とした計算速度比=(条件1での解析に要するCPU時間)÷(各条件での解析に要するCPU時間)を示した。

表6.3-3 時間積分方法の改良条件に対する計算速度の比較

項目 条件	時間積分方法	タイムステップ°	外部反復計算		計算速度比 (基準：条件1)
	選択	μs	最大反復回数	収束判定値	
条件1	陽解法	20	—	—	1.000
条件2	陰解法	100	20	1E-3	4.400
条件3	陰解法	20	10	1E-2	0.757
条件4	陰解法	50	10	1E-2	1.924
条件5	陰解法	100	10	1E-2	4.119
条件6	陰解法	100	5	1E-1	4.158

陰解法は、陽解法に比べて1タイムステップ当たりの計算負荷が大きい。このため、同一タイムステップの条件1と3を比較した場合、計算速度は低下する。ただし、その速度の違いはそれほど大きくない。この理由は次の通りである。本コードで陽解法を選択した場合、圧力計算モジュールPRESSDにおいて温度探索と密度の式を用いた圧力探索という非線形方程式解の探索を2重に行う。また、本コードのような二流体モデル二相流解析手法は、体積率の拘束条件を満足する必要がある上に、化学反応に伴う気液相変化やエネルギー変化を評価するために、気液相の密度式(状態式)を常に確認する必要がある。このことから、陽解法であっても二流体モデルの流体基礎式を解くこと自体の計算負荷は比較的大きい。

陽解法での最大タイムステップ= $2 \times 10^{-5}$ 秒(条件1の場合)に比べて、陰解法ではタイムステップは5倍大きく、これにより計算速度は約4倍大きくなる。このように、SIMPLE法に基づく完全陰解法の導入により、改良コードはタイムステップ条件を緩和できたが、条件緩和の効果は期待したとおりとは言えない。この原因として、次のことが推定される。完全陰解法による二相流解析は、

次のように行われる。(a)外部反復計算のループ内部で、質量・運動量・エネルギーの流体基本式の各保存量が収束するまで、仮定速度場を元に陰的に解く。(b)ループ内部では、保存量の変化に伴う圧力分布の修正計算も行う(反復法では、内部反復計算による行列解法を使用)。本コードでは、二流体モデル気液二相流解析では流体基礎式の非線形性は特に強いと考えられ、また二流体モデル特有の解析困難性：不適切性の問題も考慮する必要がある。このため、本コードでは、上記の反復計算の過程で流体諸量の誤差が増大して発散に至る可能性は大きい。そして、解析時間同一の場合、小さいタイムステップで反復回数の多い条件では、計算誤差の蓄積が大きくなると考えられる。

以上のことから、本コードでは本質的に解析が不安定になりやすい性質がある。このため、本コードにおける計算継続の条件、すなわち解析安定条件は、Courant条件で定まるタイムステップの条件だけでなく、外部反復計算の最大反復回数や収束判定値にも依存したものと考えられる。

図6.3-1～24に、時間積分方法の改良の各試計算条件に対する反応ジェットの解析結果を示す。図6.3-1～12には、異なる時刻(0.5秒と1.0秒後)のボイド率と相平均温度分布を示す。図6.3-13～24には気液各相の温度を示す。

表6.3-4に、時間積分方法の改良条件に対する温度比較を示す。図や表のように相平均温度で試験結果と比較する理由は、各相の体積率や熱容量(密度×比熱)の影響を受けて、解析セル内の気液相温度の変化が大きいためである。これについては、熱容量の低い気相温度が、体積率の低いセルで高く評価される傾向がある。この時の温度を、本解析のように比較的粗い寸法である当該セルの代表温度とすることは適当と言えない。表には、最大の相平均温度のメッシュ位置である、x,y方向メッシュ番号を併記した。

噴出位置より45度右斜め上方に水が噴出し、反応ジェットが形成される。反応ジェットの気相成分は浮力の作用により上に向かう傾向があるため、ボイド率の高い部分は本来の水の噴出方向よりも垂直線に対する傾きが小さい。

反応ジェットの高いボイド率の領域は、噴出口より遠方(上方)まで及んでいる。これに対し、高温領域はやや噴出口下流近傍の領域にとどまっている。これは、噴流の上方では対流により熱拡散が促進されるのに対し、反応ジェットの

左右および下方の対流が小さいために熱拡散が進まないためであると考えられる。ただし、1秒までの解析では反応ジェットの広がり小さいので、高ボイド率領域と高温領域との位置の違いは大きくない。

時間経過と共に、噴出水と反応に伴う生成物(水素)が増加するため、高いボイド率の領域は拡大する。また、反応による高温領域の温度も上昇する。

解析における最大温度は、伝熱管条件を与えたセルより噴出口下流側の1メッシュ離れた位置である。これは、伝熱管条件を与えたセルよりセル中心位置で50~100mm程度の距離に相当する。

陽解法と陰解法とを比較した場合、計算結果の高ボイド率や温度分布の反応ジェット挙動に違いが見られる。条件1の陽解法の場合、高ボイド率領域は噴出口近傍に止まっているのに対し、条件2~6の陰解法の場合、高ボイド率領域は噴出口下流側の図の上方へと拡大している。また、条件1に比べて条件2~6における温度は低く評価される。タイムステップが大きいほど、温度を低く評価するが、外部反復計算の最大反復回数や収束判定値に対する温度評価への影響は小さいといえる。

このタイムステップや時間積分方法の違いによる反応ジェット挙動の差異は、解析における数値拡散や誤差に起因すると考えられる。タイムステップが小さい場合、大きい場合と比較して任意の解析時間までの計算回数は多くなる。この場合、化学反応に伴う変化(化学種の質量変化や発熱)の「解析へのフィードバック」の大きさ(度合い)は、計算回数に依存する。そして、タイムステップの小さい方が、一般に計算精度は高い。逆に、タイムステップが大きいほど、計算誤差は大きいと考えられる。さらに、陽解法の場合、任意のセルにおける圧力を含む全ての流体保存量は、各タイムステップにおいて隣接セルとの間のみの保存量収支を考慮して時間積分されている。一方陰解法の場合、任意セルの流体保存量は、各タイムステップにおいて解析領域全体のセルとの間で保存量収支を考慮して時間積分されている。つまり、1タイムステップ当たりの保存量の変化は、陰解法の方がより速く解析領域を伝播する。このことから、陰解法の方が、陽解法よりも拡散現象を大きく評価する傾向にある(数値拡散が大きい)といえる。このような理由から、タイムステップや時間積分方法の違いに

より、反応ジェット挙動の評価結果に違いが現れたものと考えられる。

以上のように、SIMPLE法に基づく陰解法の導入により、改良コード LEAP-JET (Ver. 1.20) の高速化が可能となった。

試算により、高速化に対する陰解法条件の依存性を明らかにした。陰解法を選択してタイムステップを大きくする方が、計算負荷の低減により計算速度は向上するが、従来コード同様の陽解法を選択した場合の反応ジェット挙動結果との違いも大きくなる。

実機体系では、高速化が優先される場合があるので、タイムステップを出来るだけ大きく取るように、解析に対しては要請がある。しかし、改良コード LEAP-JET(Ver. 1.20)において、時間積分方法の改良により解析速度を高速化する場合には、時間積分方法の選択とタイムステップによる(a)計算速度の向上効果と(b)結果の差異に留意する必要がある。その上で、化学反応等の解析モデルに関するパラメータの再設定をするのが良い。

この点については、今後の課題である。

表6.3-4 時間積分方法の改良条件に対する温度比較

項目 条件	時間積分方法	タイムステップ <sup>o</sup>	外部反復計算		相平均温度(最大値)	
	選択	$\mu s$	最大反復回数	収束判定値	0.5秒後	1.0秒後
条件 1	陽解法	20	—	—	1413°C	1502°C
(x,yメッシュ番号)					(4,7)	(4,7)
条件 2	陰解法	100	20	1E-3	784°C	1053°C
(x,yメッシュ番号)					(4,7)	(4,8)
条件 3	陰解法	20	10	1E-2	1353°C	956°C
(x,yメッシュ番号)					(4,7)	(4,7)
条件 4	陰解法	50	10	1E-2	1035°C	756°C
(x,yメッシュ番号)					(4,7)	(4,8)
条件 5	陰解法	100	10	1E-2	787°C	1049°C
(x,yメッシュ番号)					(4,7)	(4,8)
条件 6	陰解法	100	5	1E-1	787°C	1049°C
(x,yメッシュ番号)					(4,7)	(4,8)

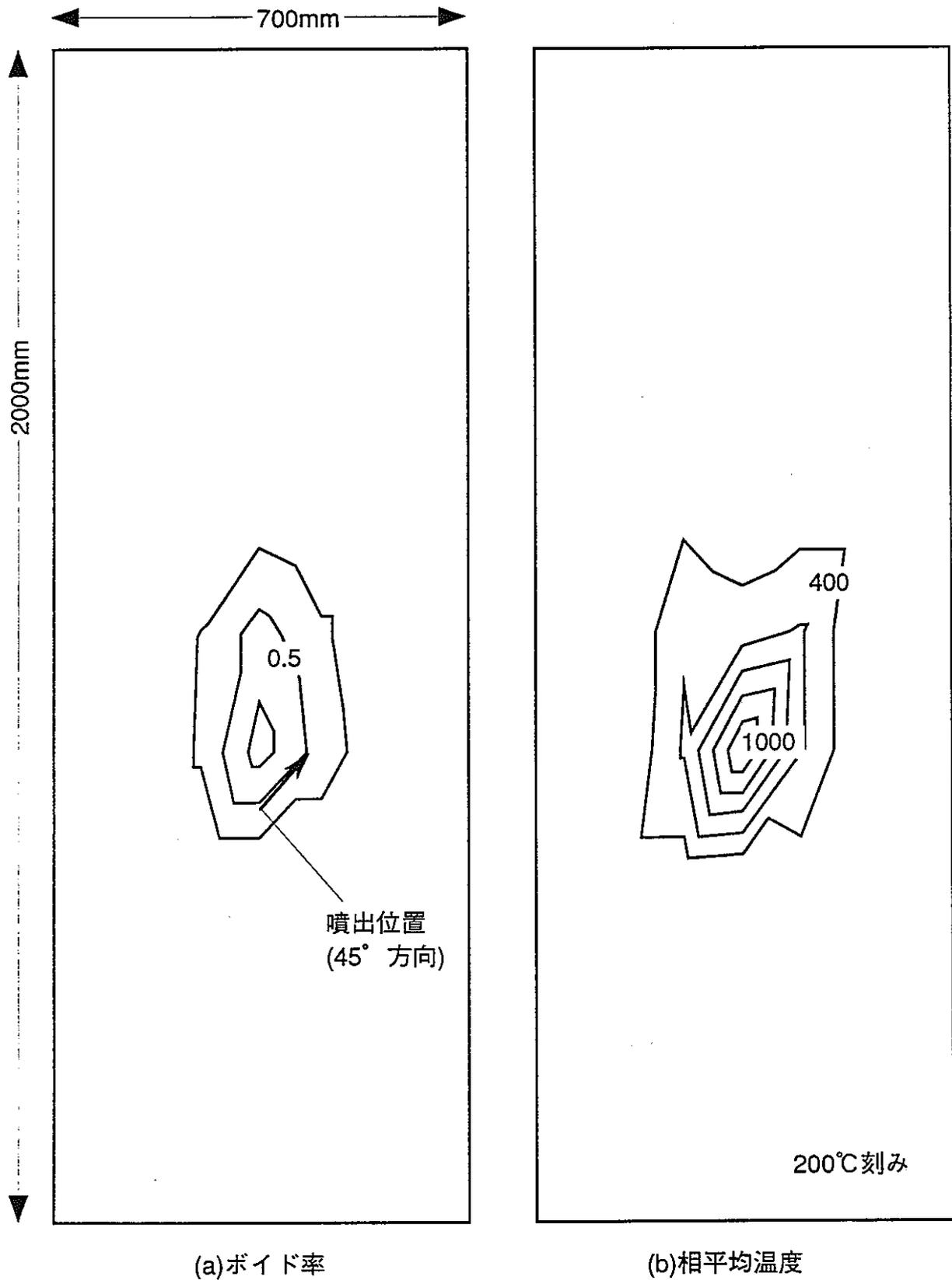


図6.3-1 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件1  
(ボイド率／相平均温度：0.5秒後)

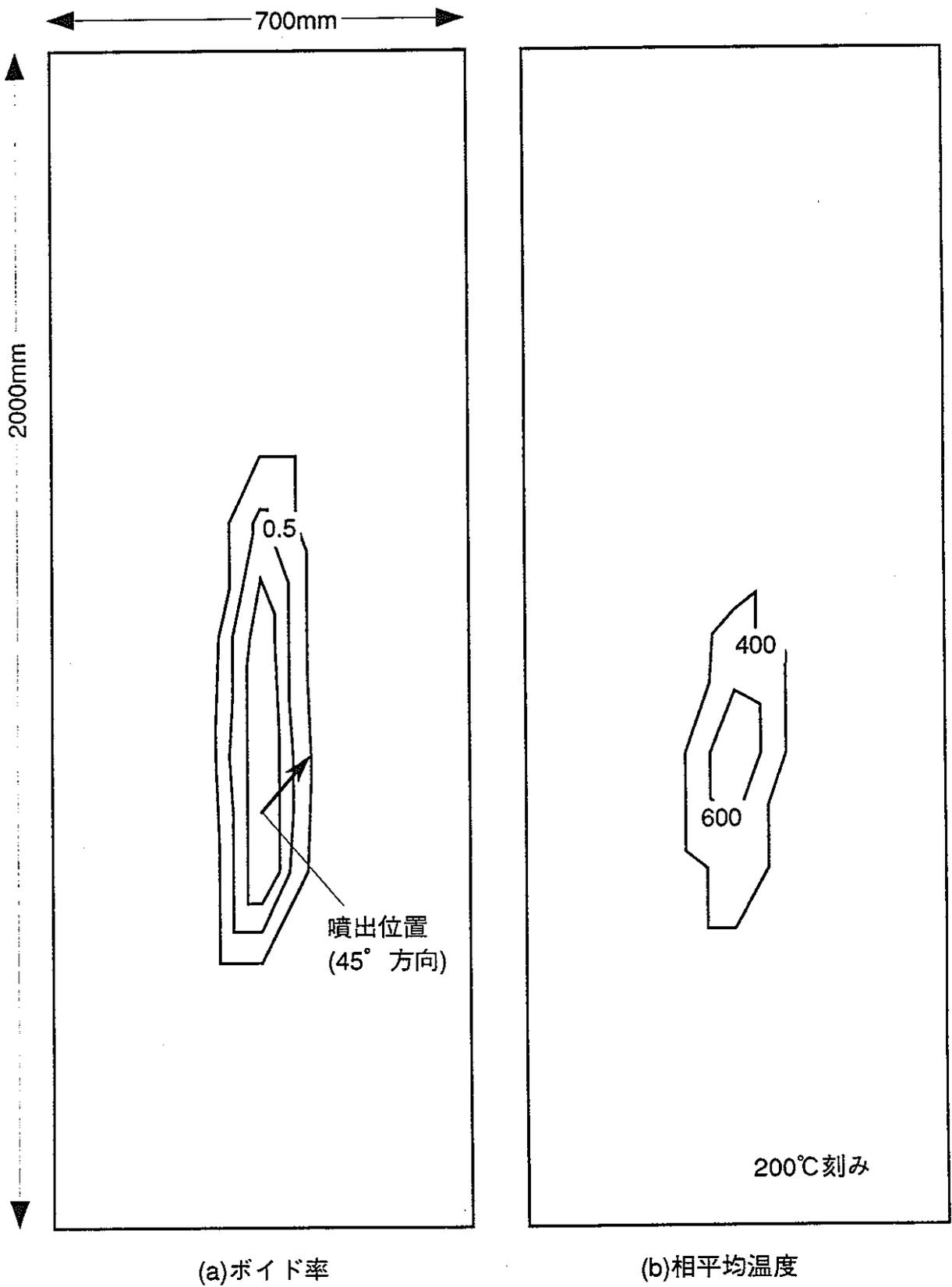


図6.3-2 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件2  
 (ボイド率/相平均温度：0.5秒後)

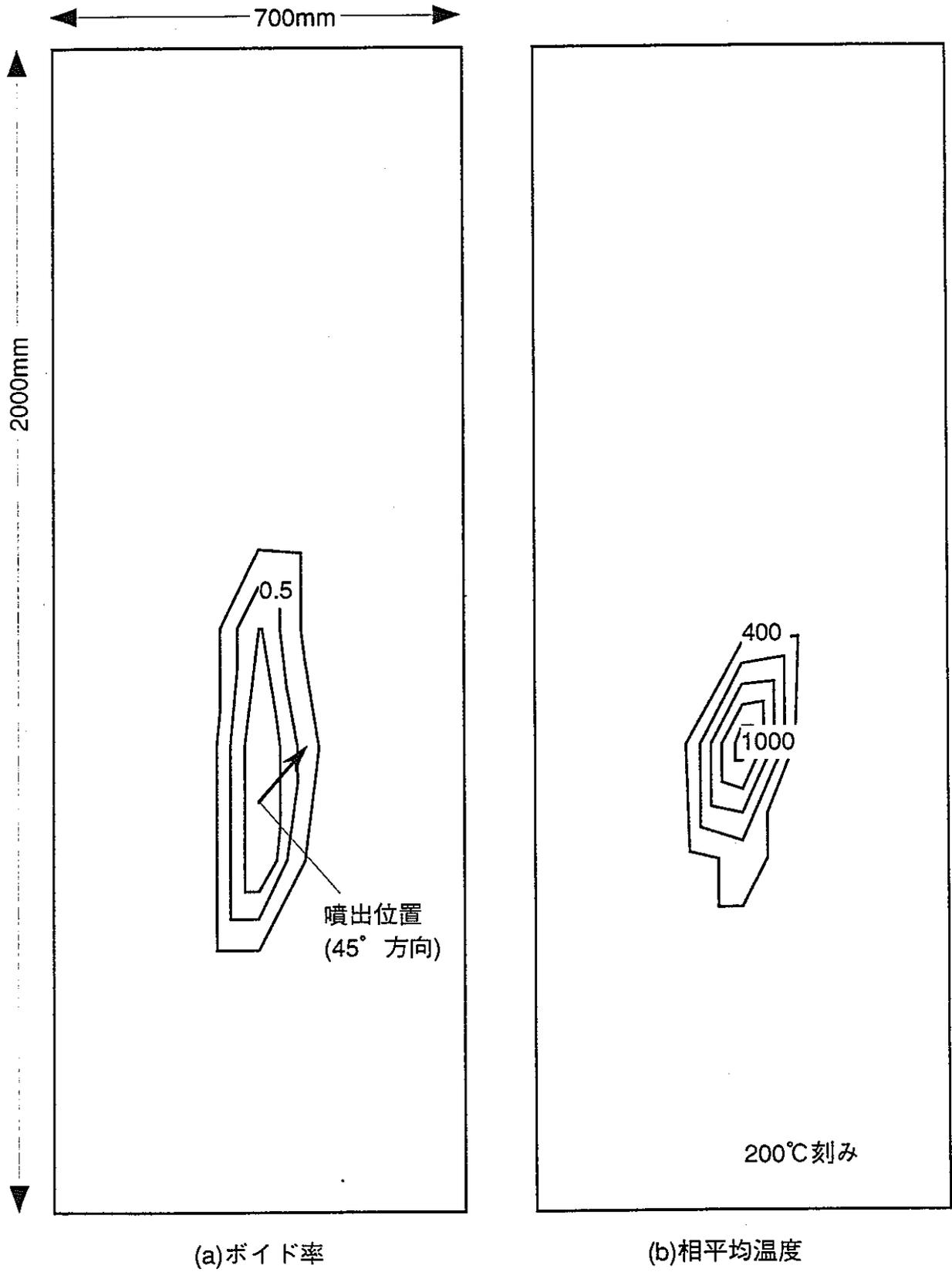


図6.3-3 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3  
(ボイド率/相平均温度：0.5秒後)

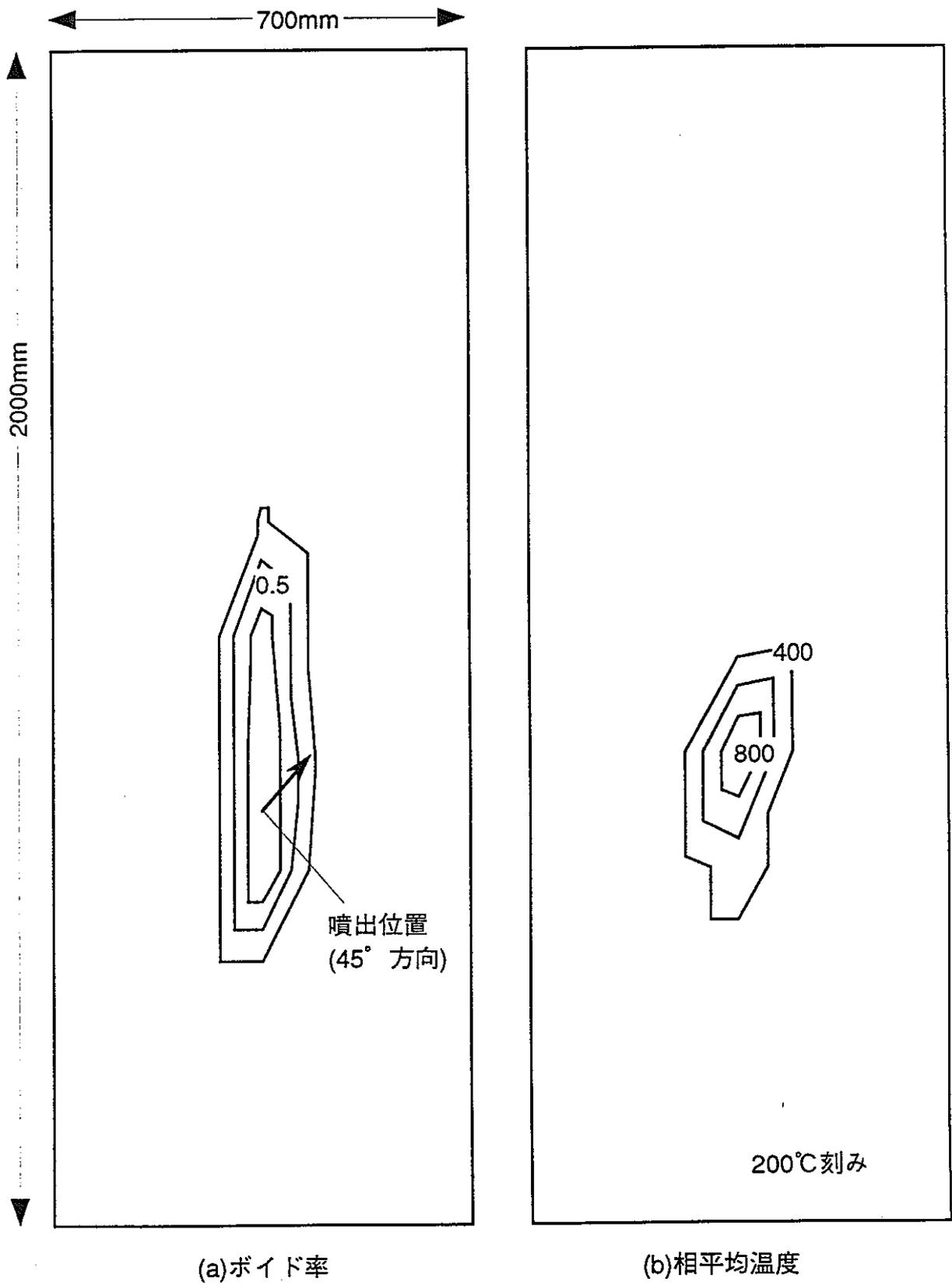


図6.3-4 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 4  
(ボイド率／相平均温度：0.5秒後)

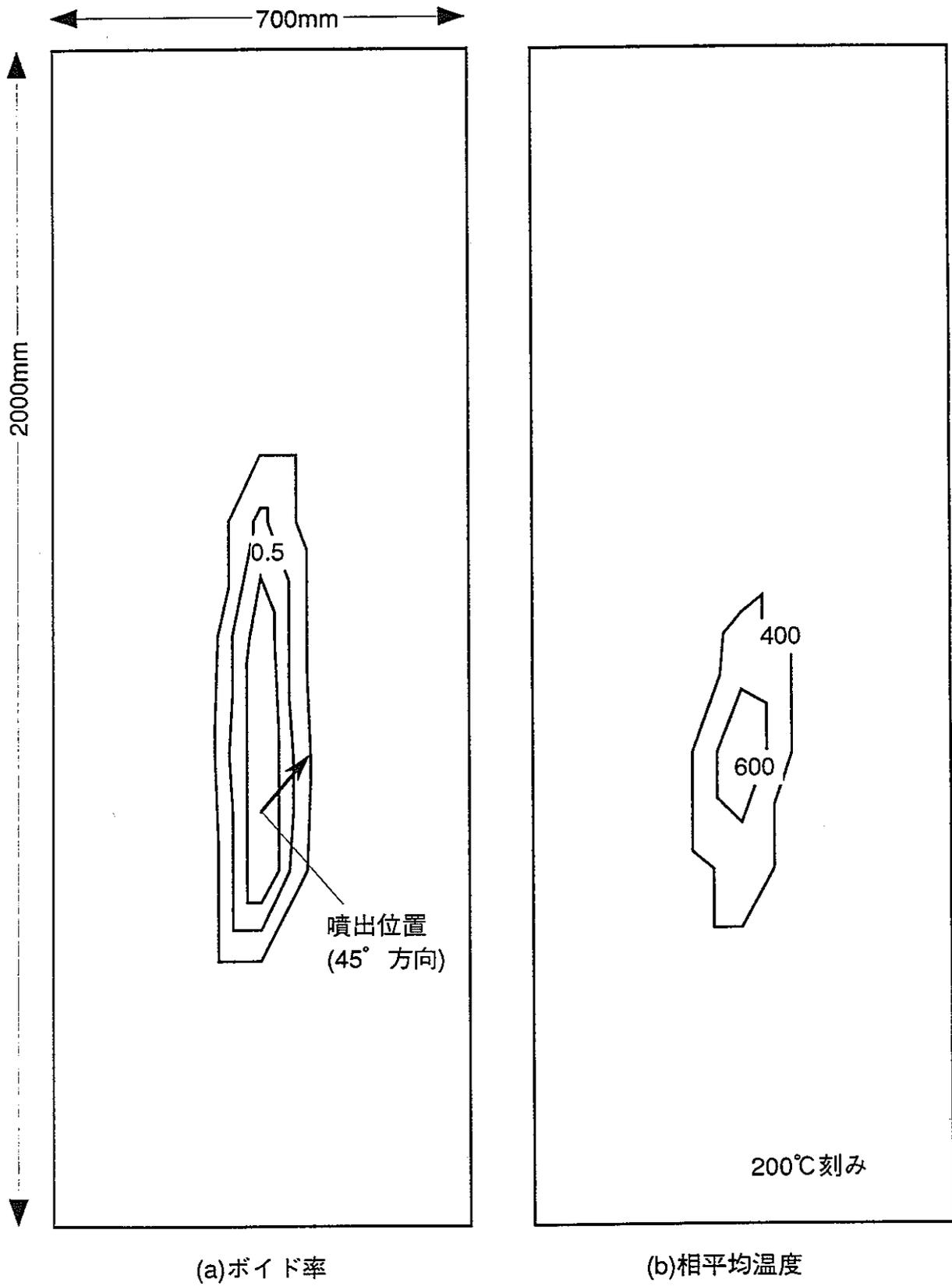


図6.3-5 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 5  
(ボイド率／相平均温度：0.5秒後)

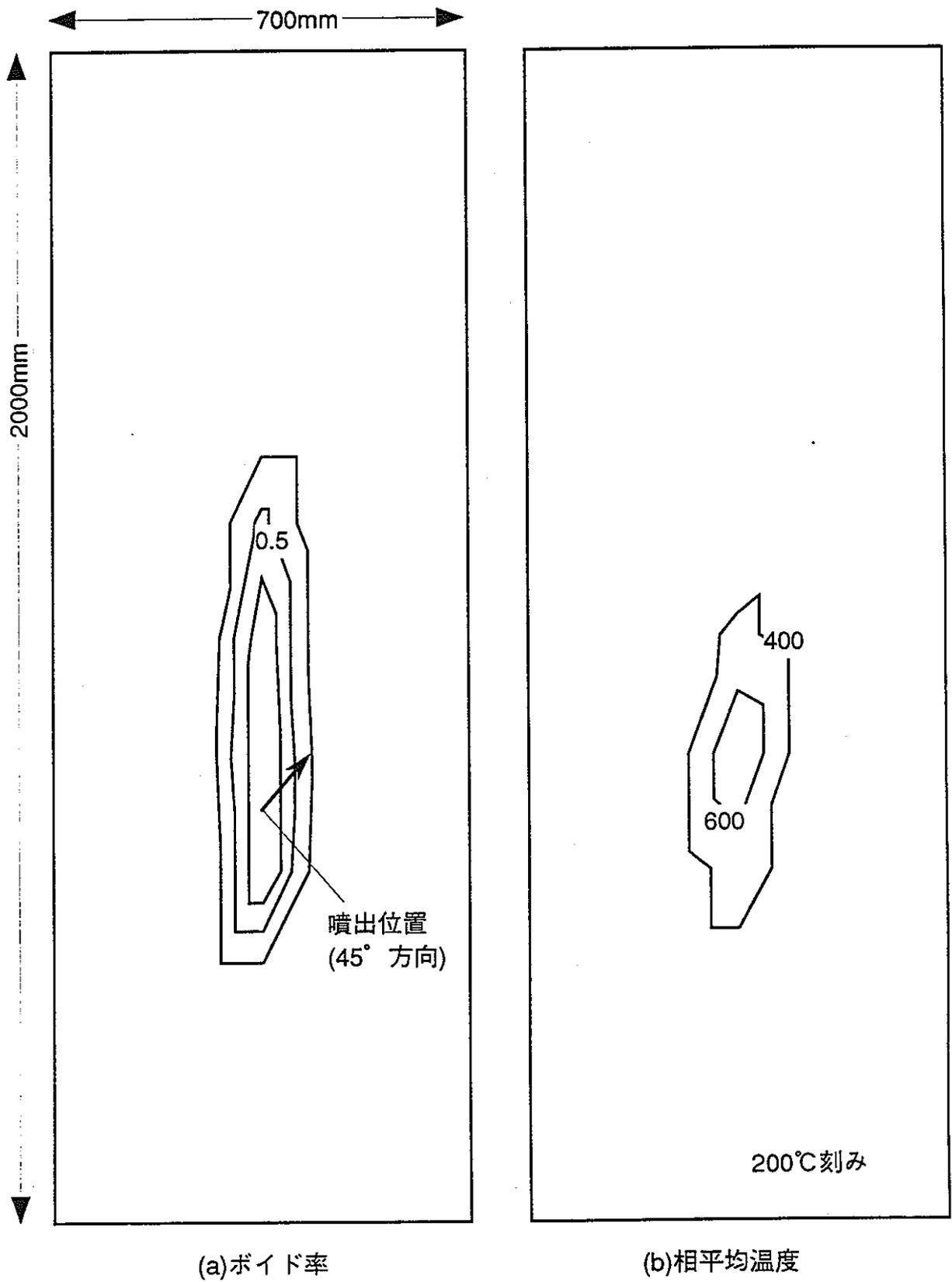


図6.3-6 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 6  
(ボイド率／相平均温度：0.5秒後)

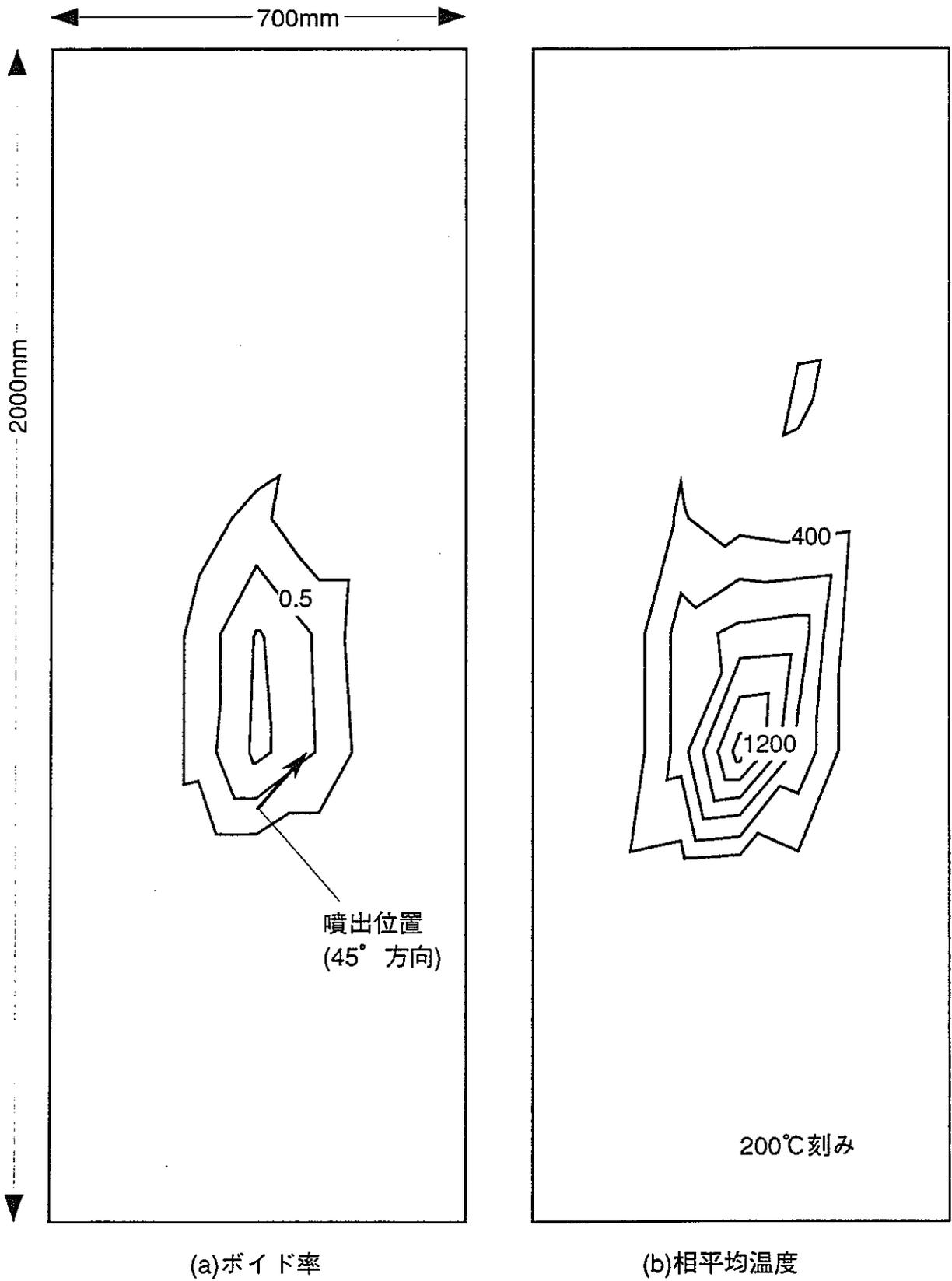


図6.3-7 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 1  
(ボイド率／相平均温度：1.0秒後)

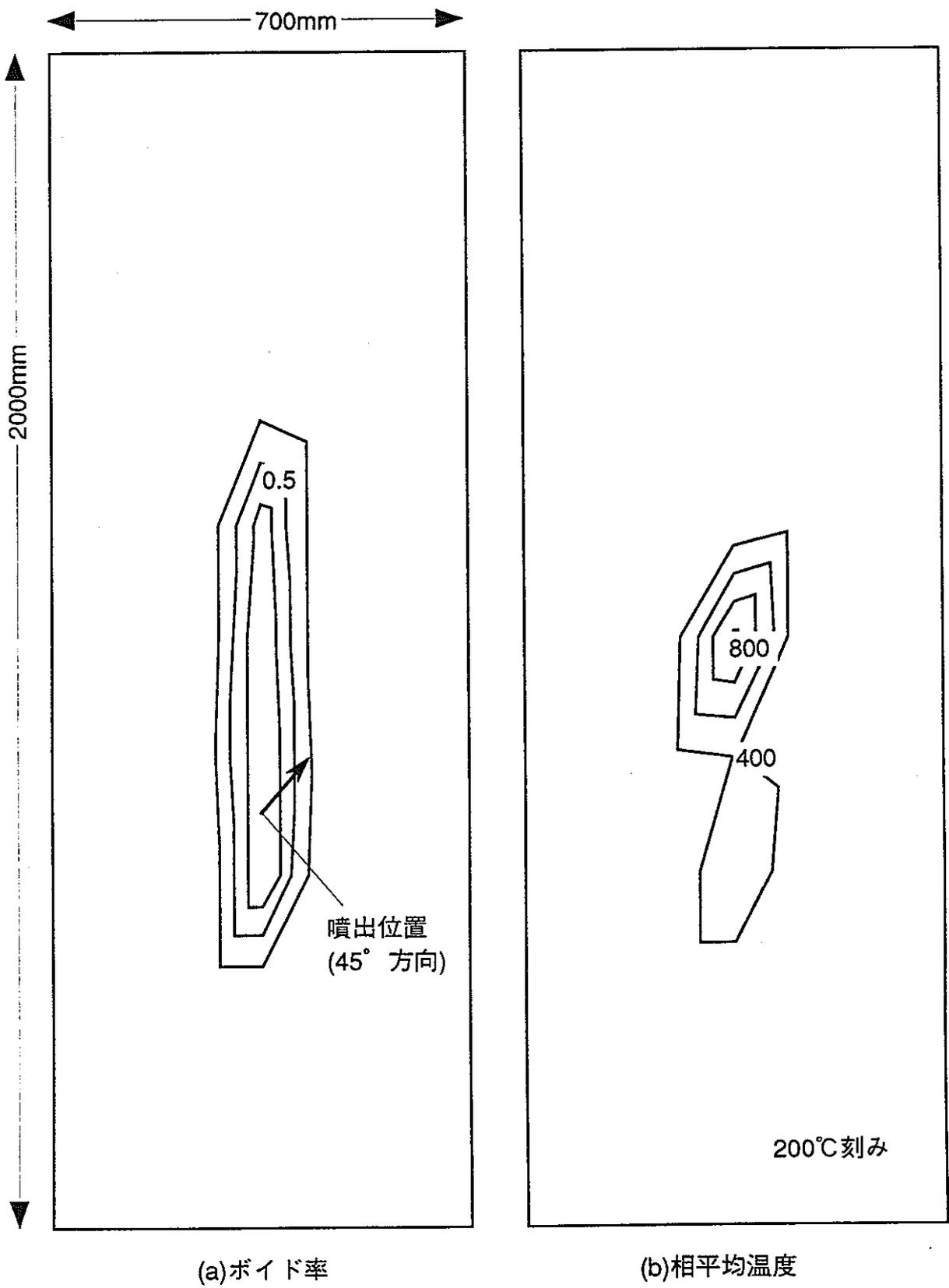
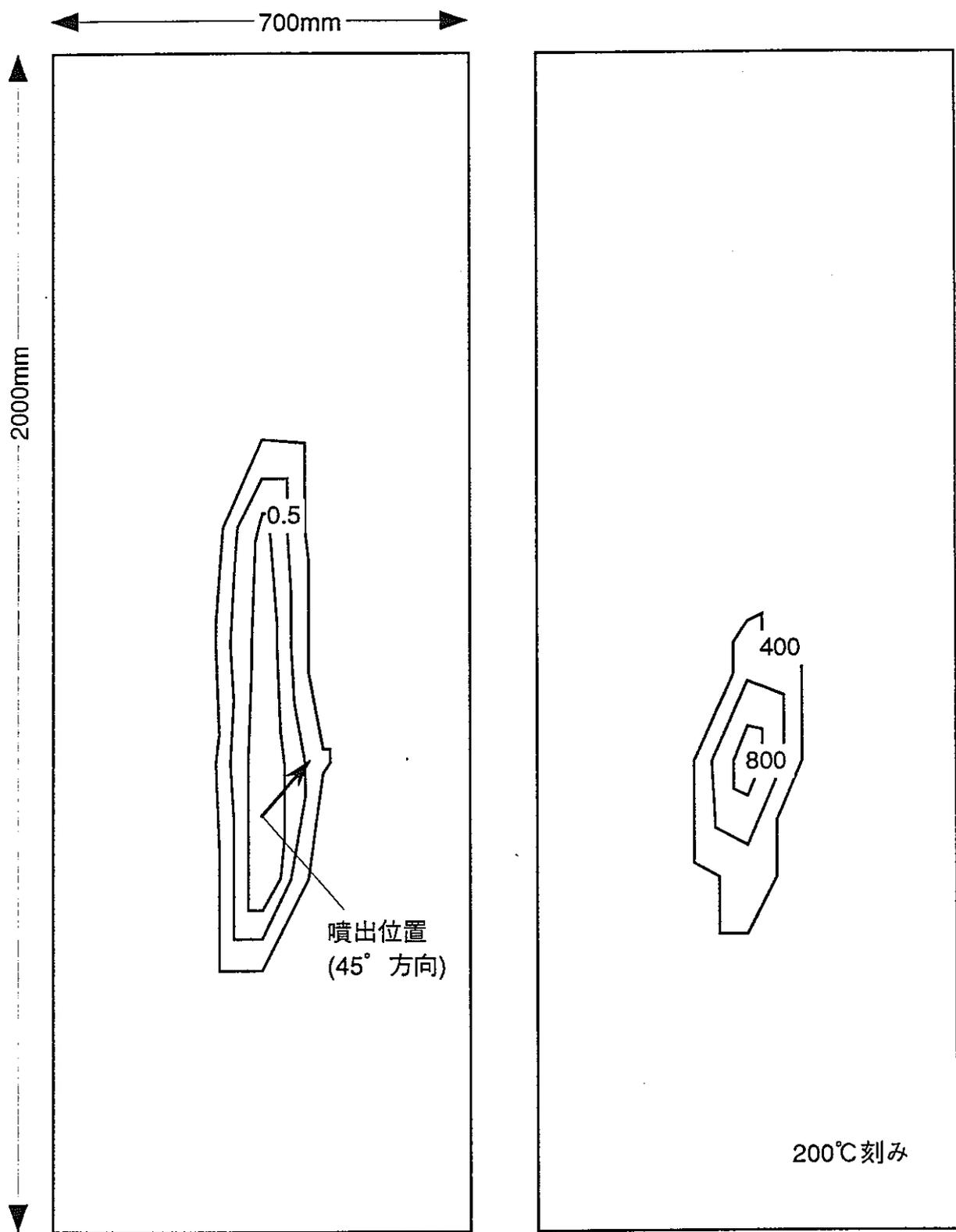


図6.3-8 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件2  
 (ボイド率/相平均温度：1.0秒後)



(a)ボイド率

(b)相平均温度

図6.3-9 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3  
 (ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

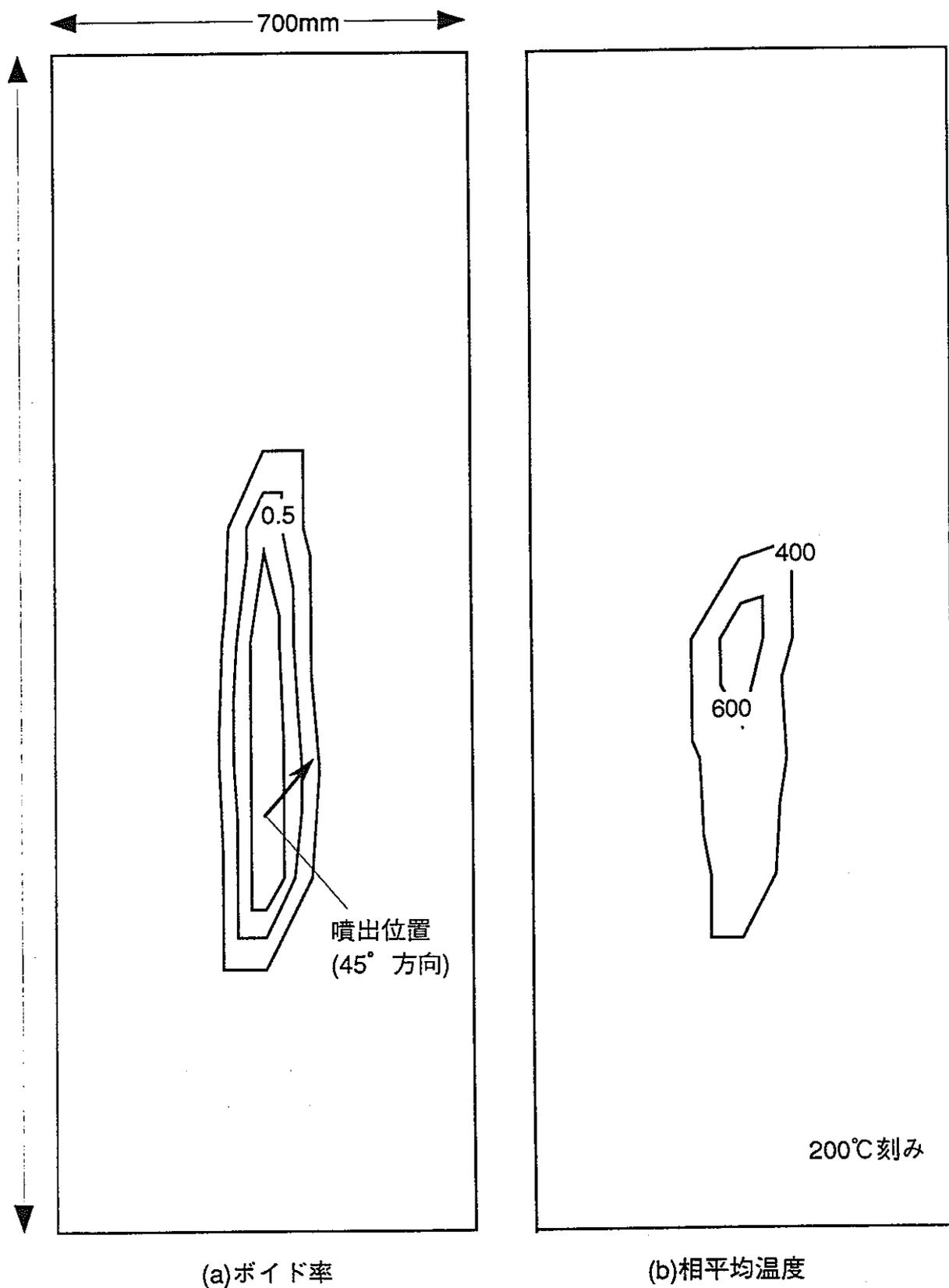


図6.3-10 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 4  
(ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

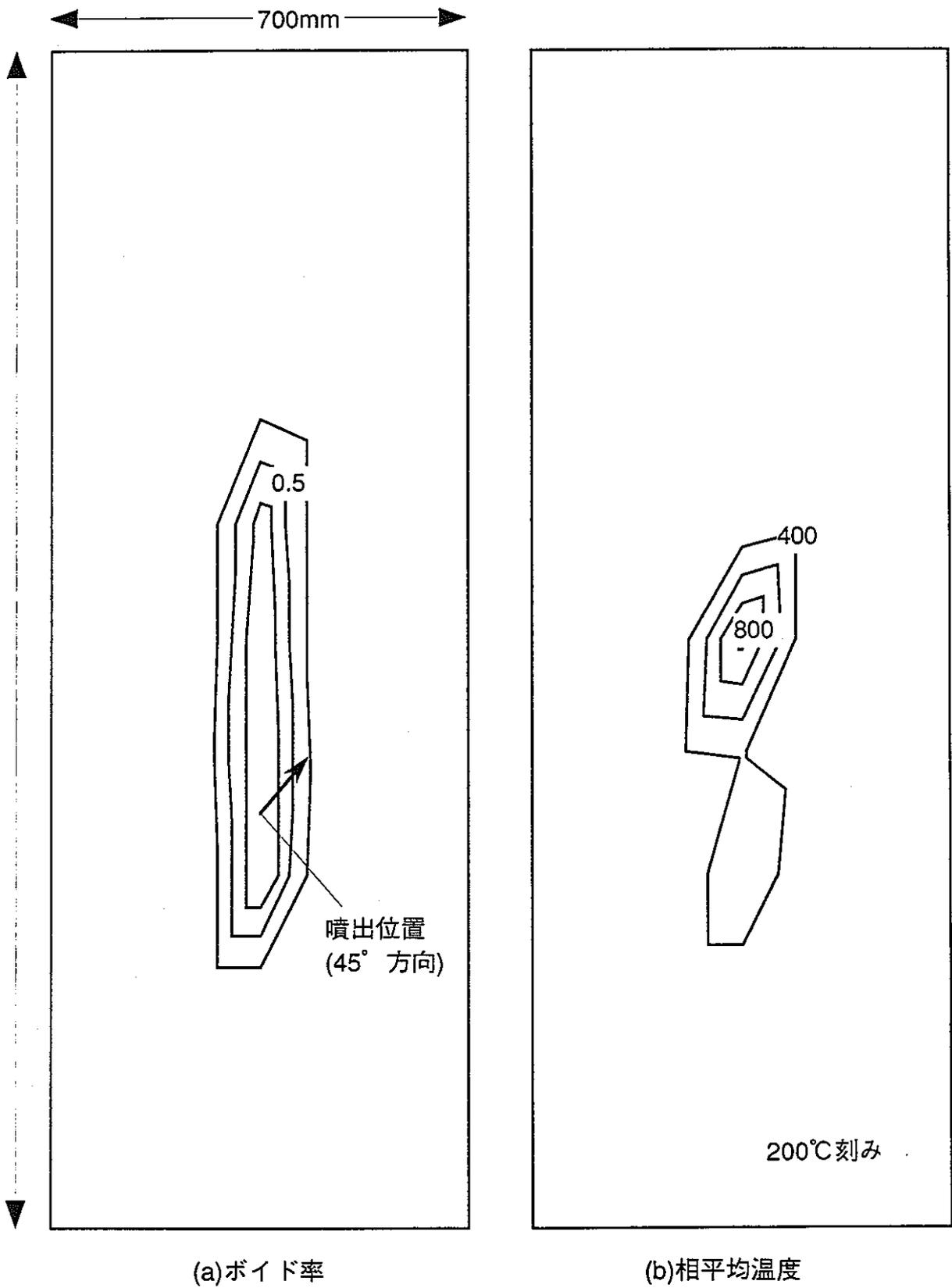
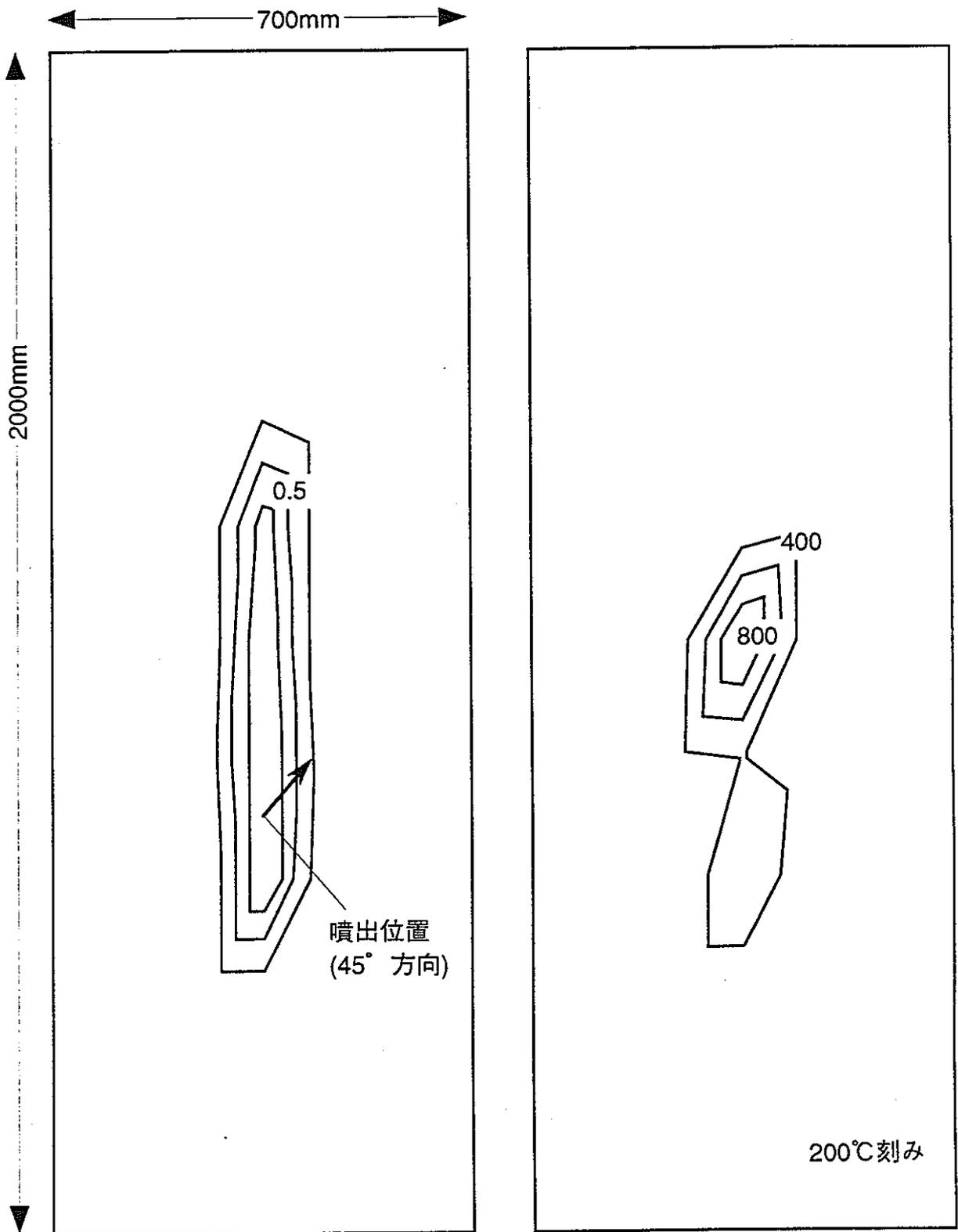


図6.3-11 実機体系での試算結果：時間積分方法の改良条件5  
(ボイド率／相平均温度：1.0秒後)



(a) ボイド率

(b) 相平均温度

図6.3-12 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件6  
 (ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

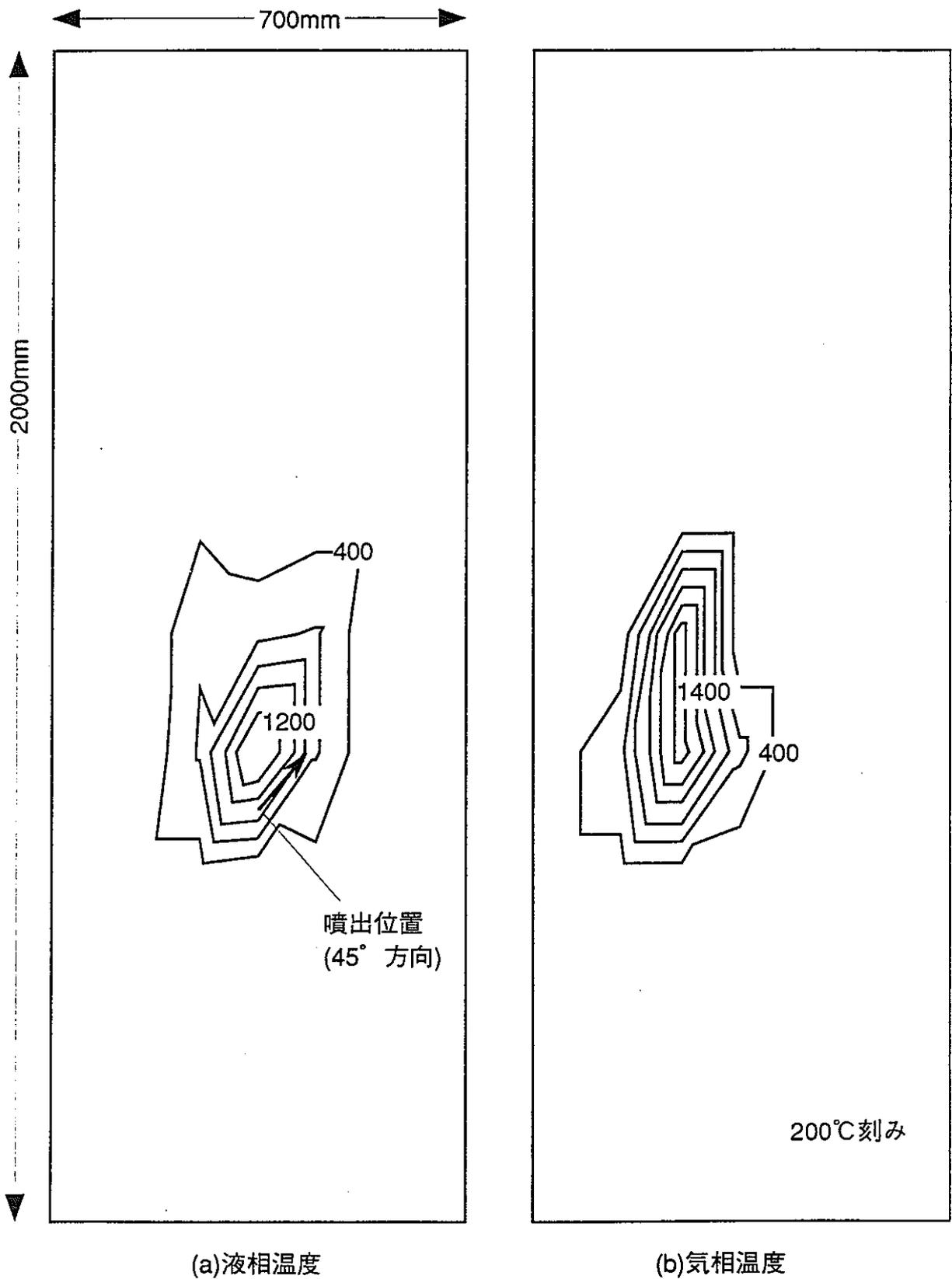


図6.3-13 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件1  
(気液相温度：0.5秒後)

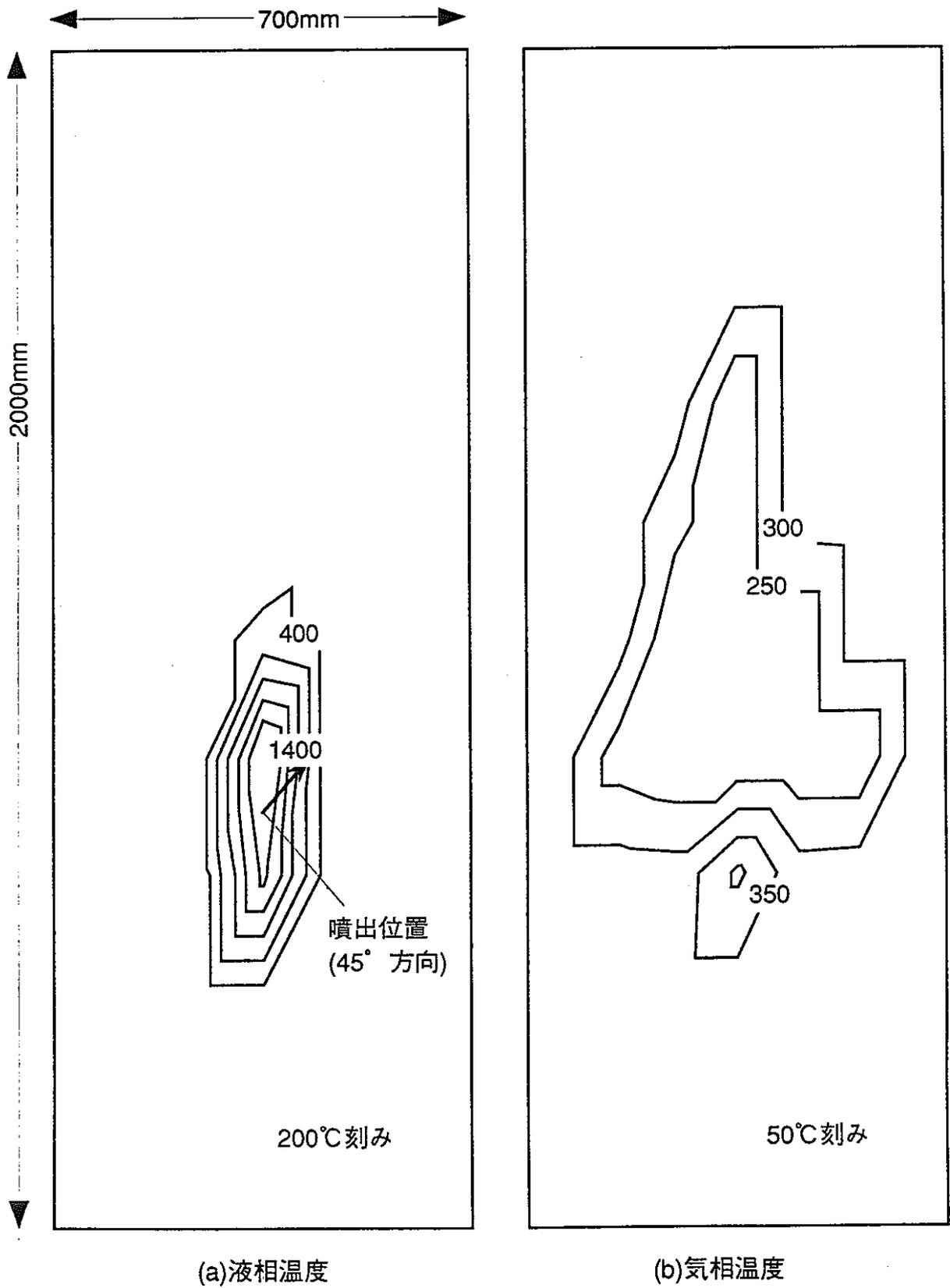


図6.3-14 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件2  
(気液相温度：0.5秒後)

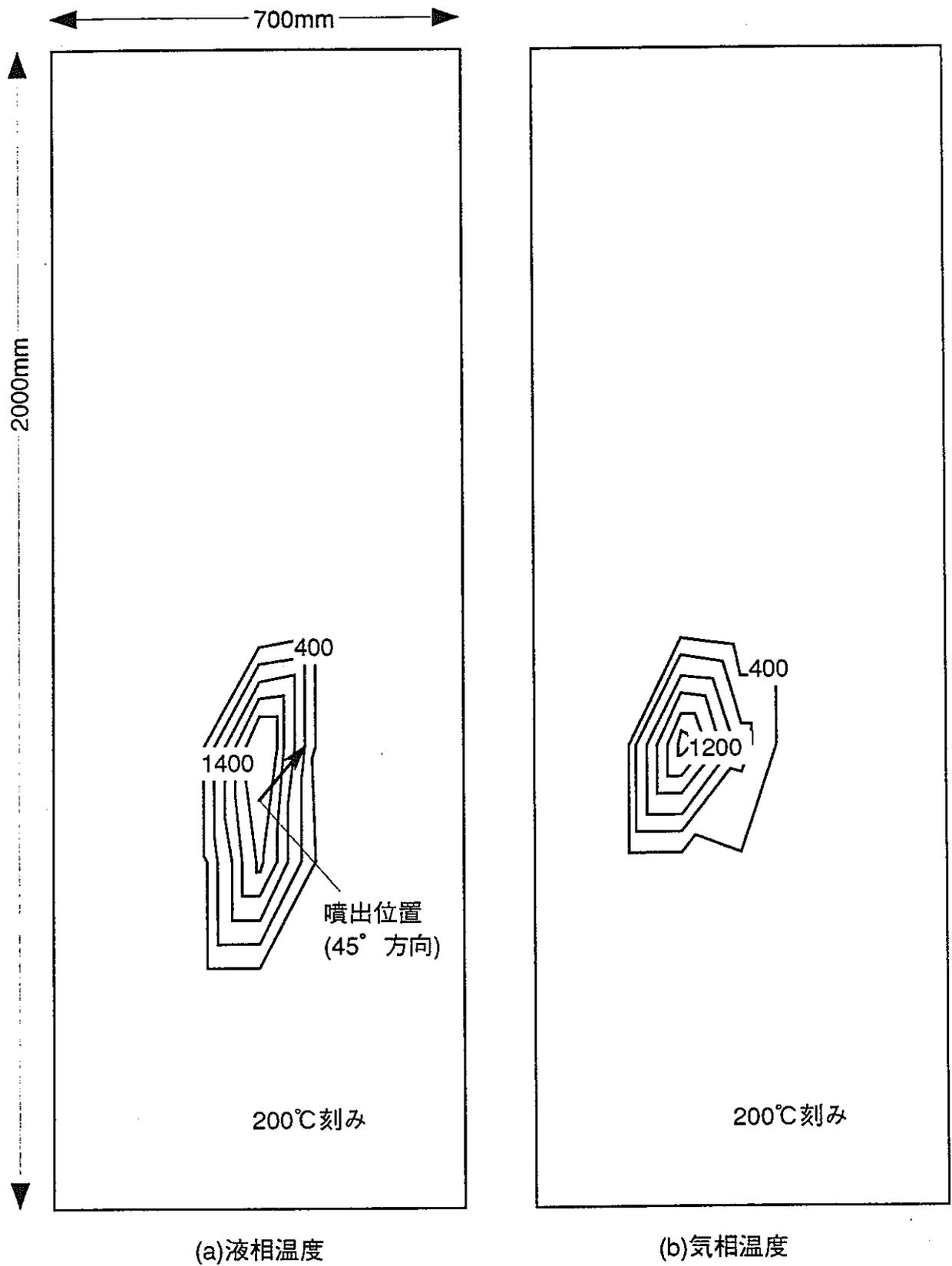


図6.3-15 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3  
(気液相温度：0.5秒後)

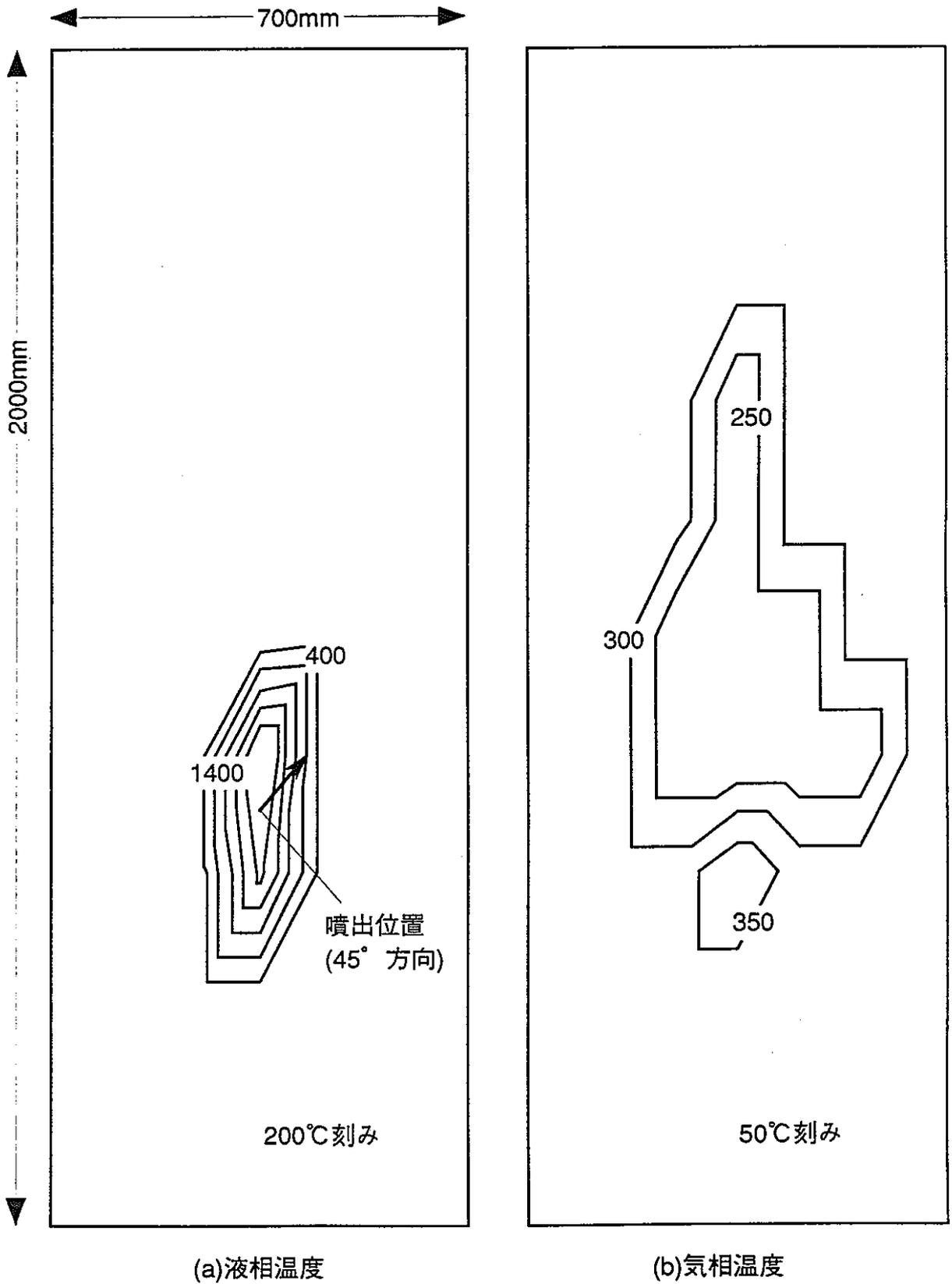


図6.3-16 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件4  
(気液相温度：0.5秒後)

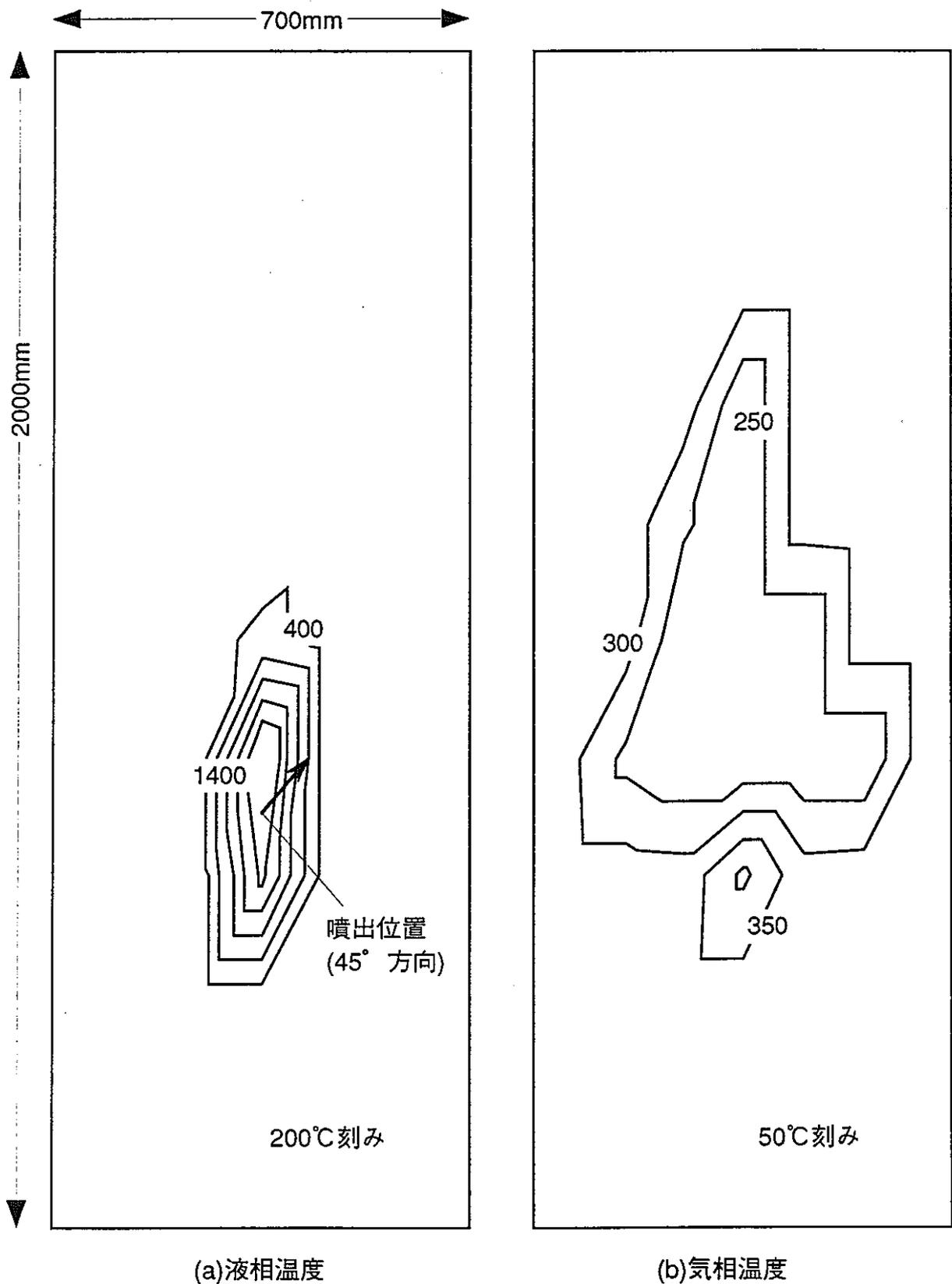


図6.3-17 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 5  
(気液相温度：0.5秒後)

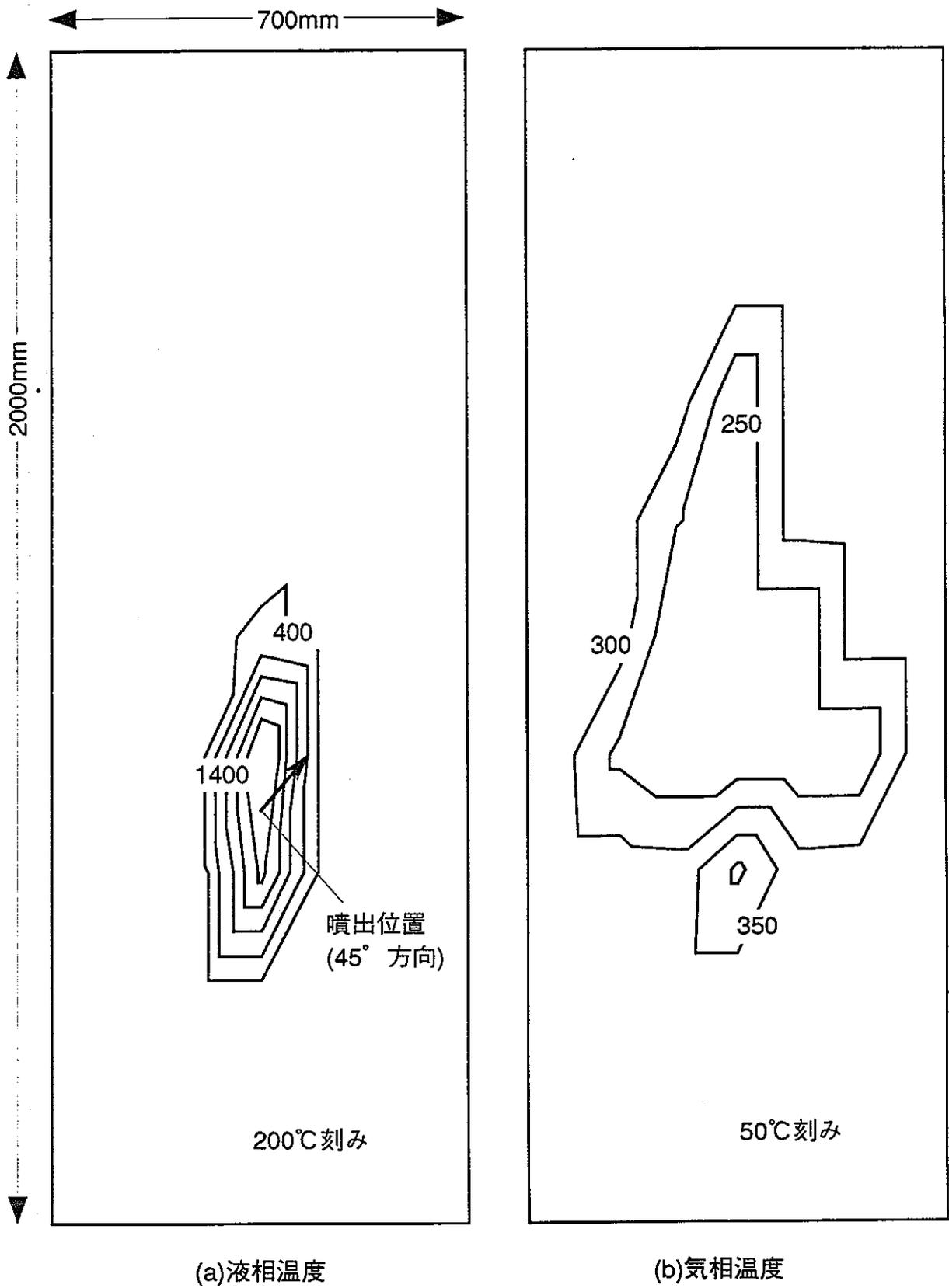


図6.3-18 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件6  
 (気液相温度：0.5秒後)

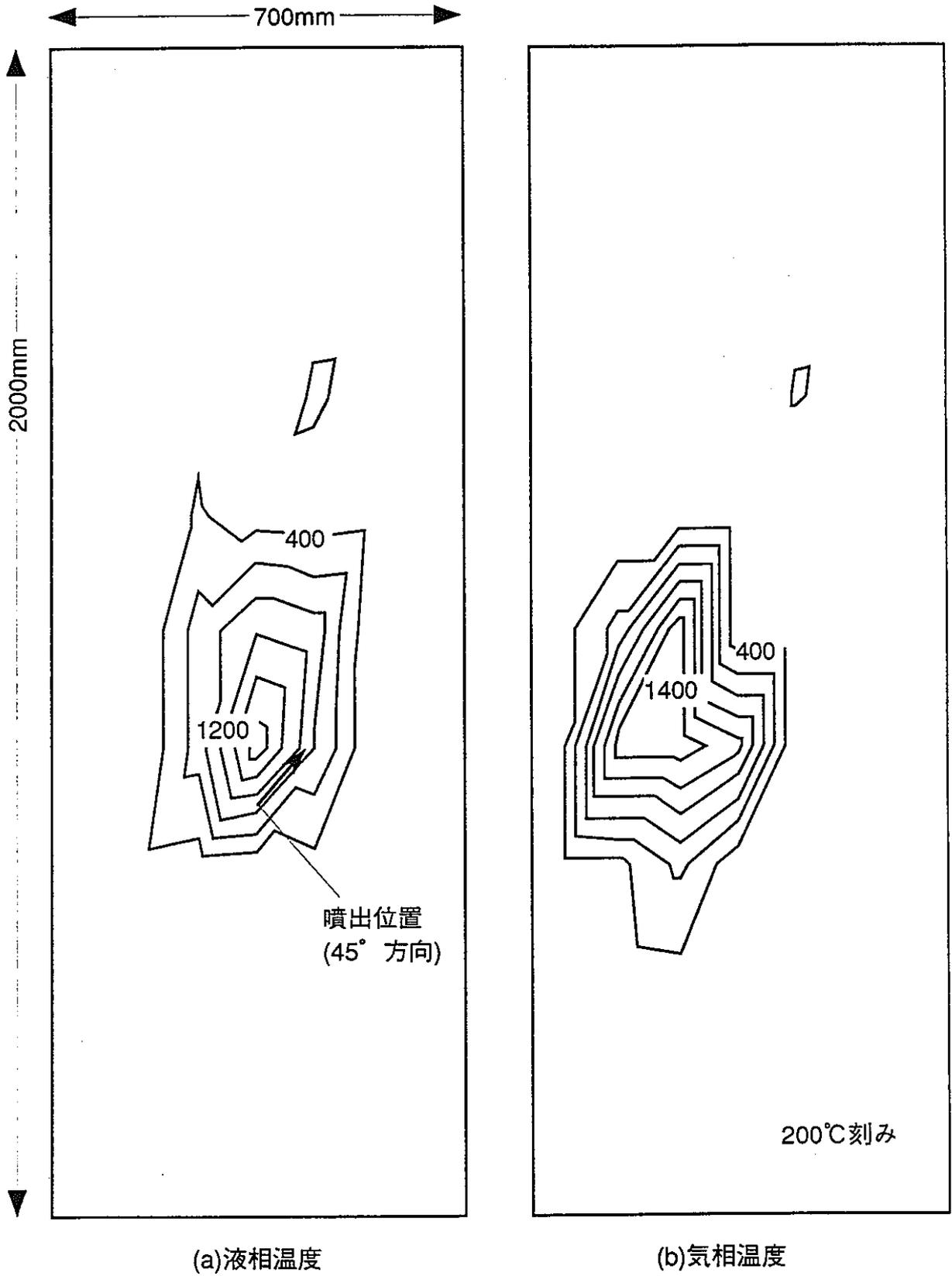


図6.3-19 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件1  
(気液相温度：1.0秒後)

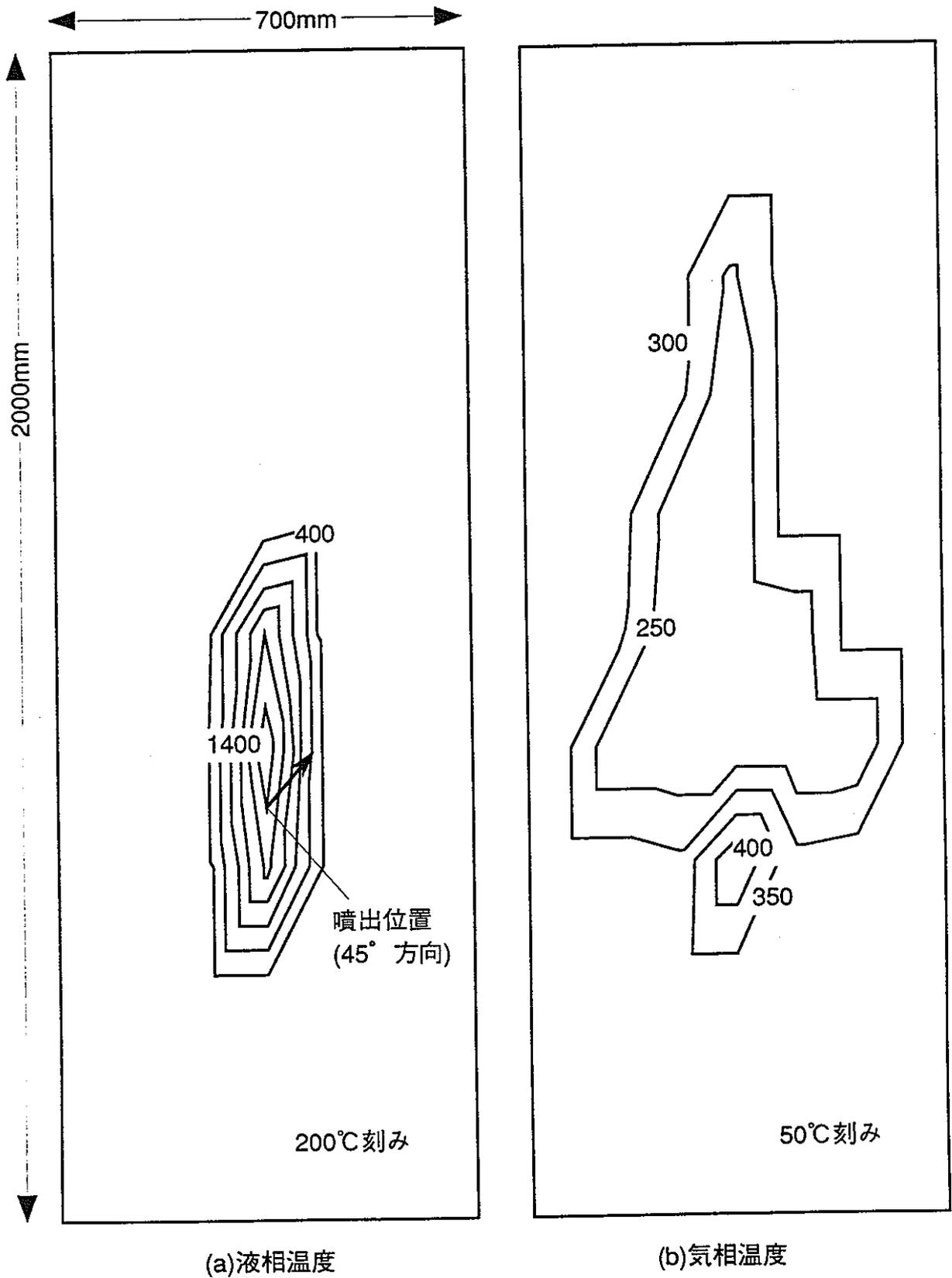


図6.3-20 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 2  
 (気液相温度：1.0秒後)

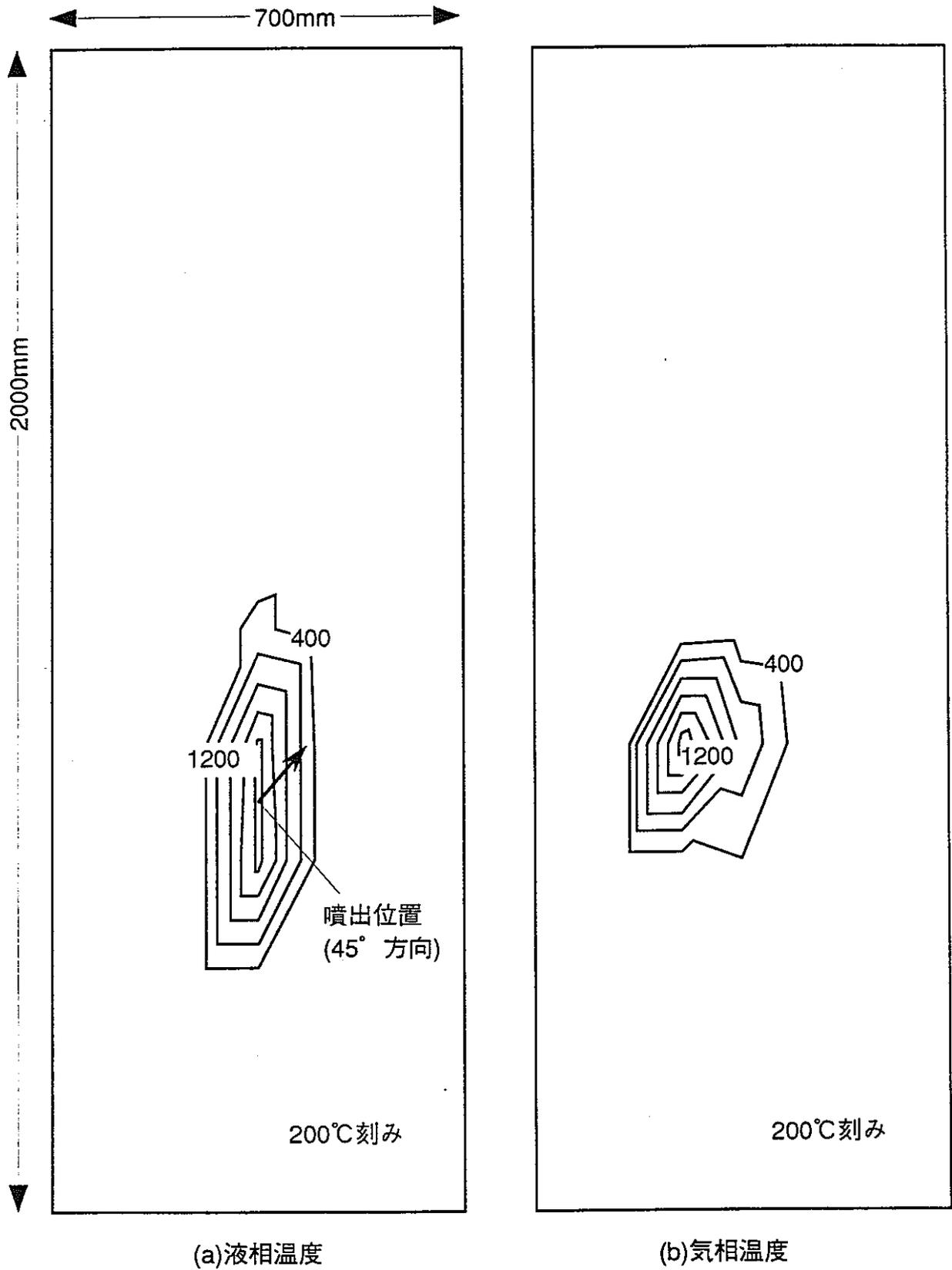


図6.3-21 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件 3  
(気液相温度：1.0秒後)

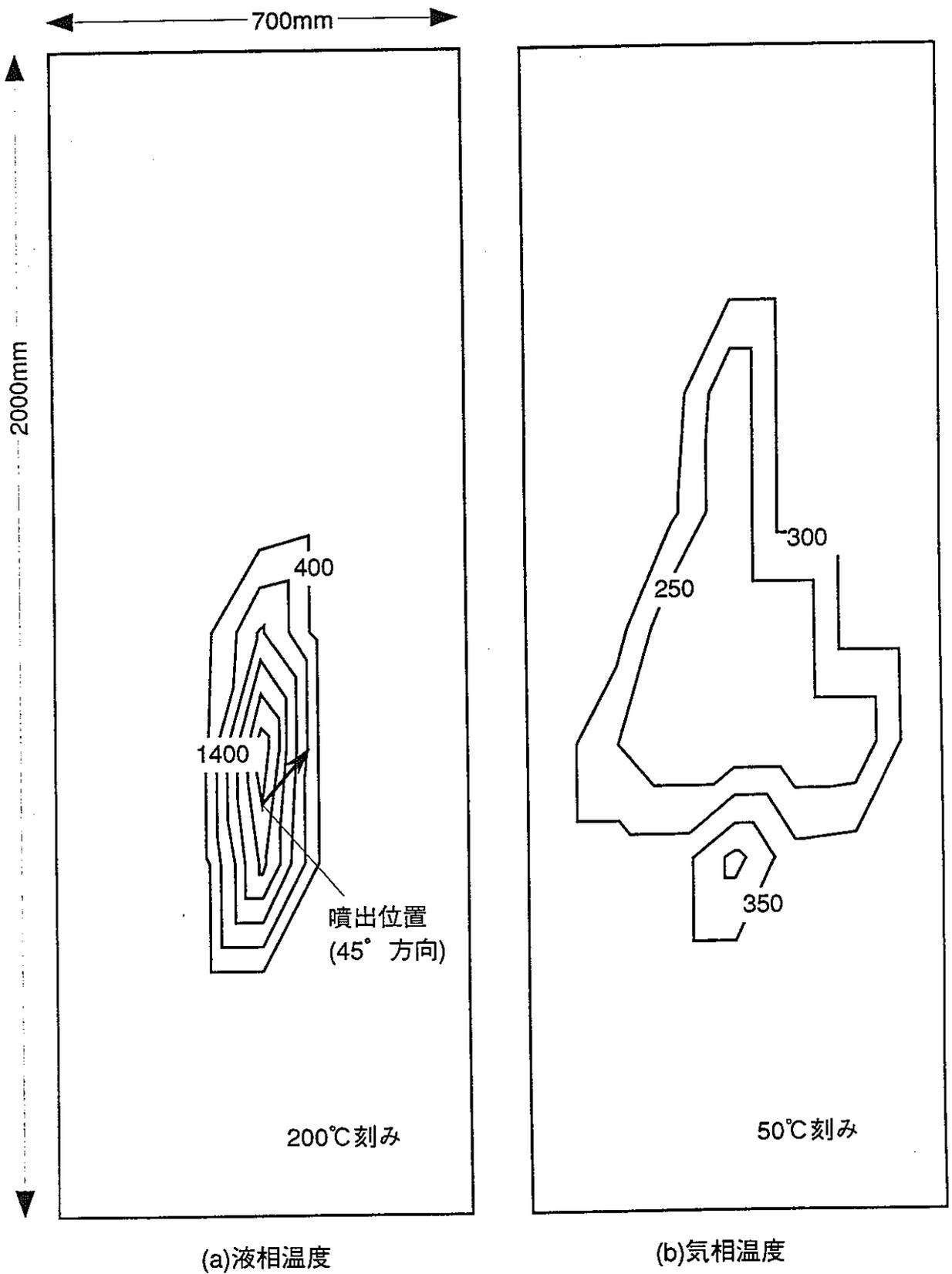


図6.3-22 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件4  
(気液相温度：1.0秒後)

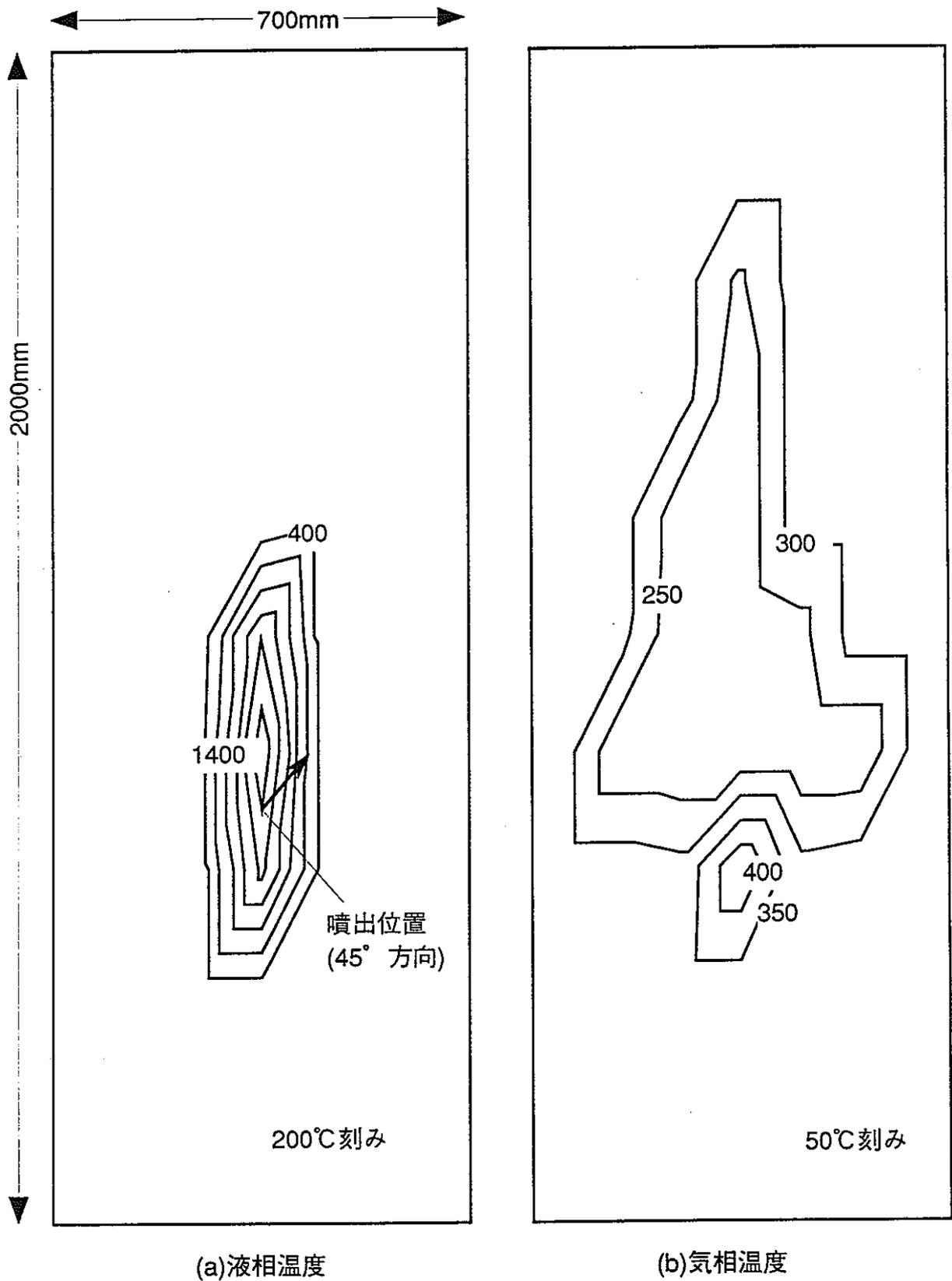


図6.3-23 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件5  
(気液相温度：1.0秒後)

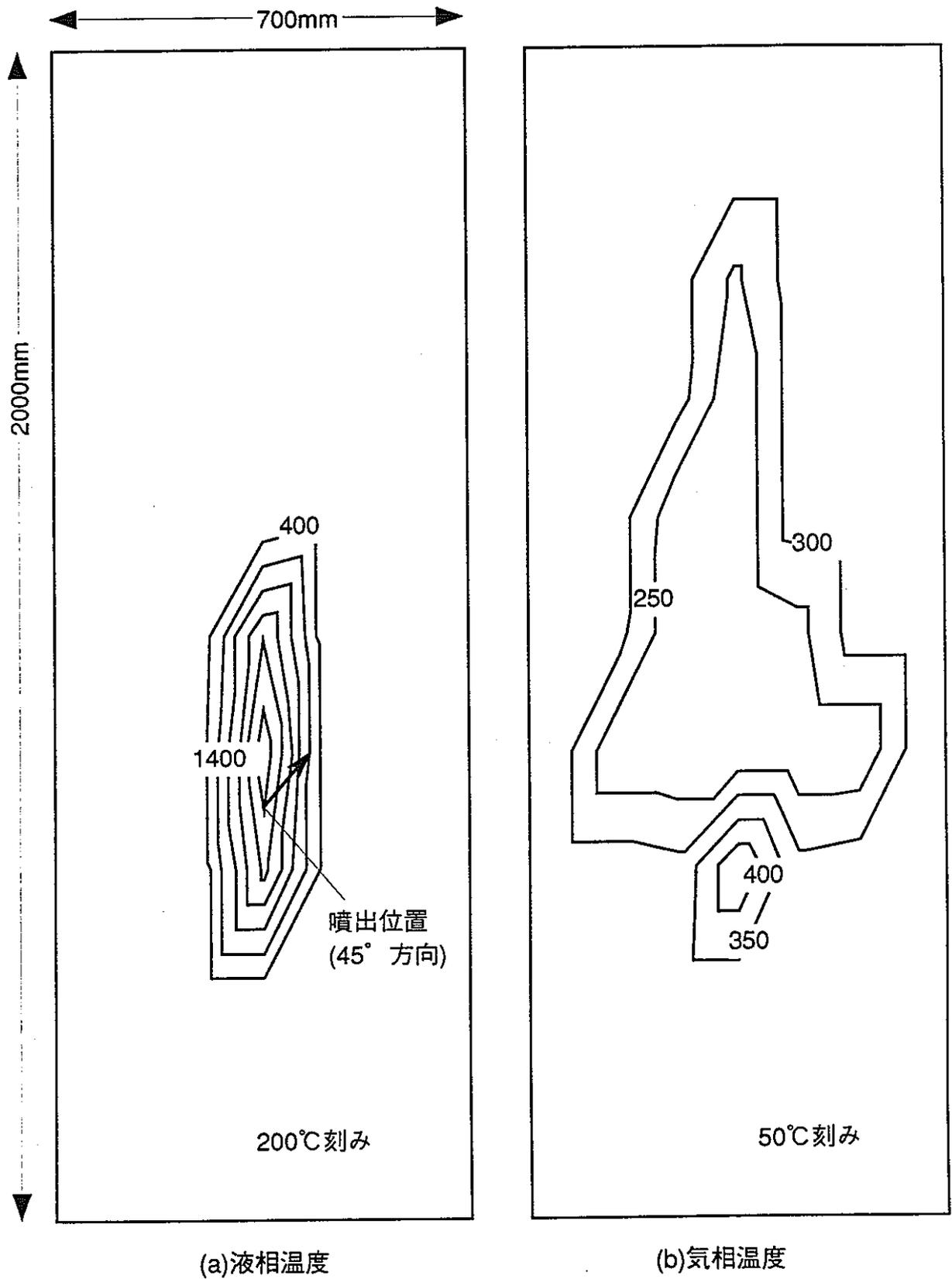


図6.3-24 実機体系での試計算結果：時間積分方法の改良条件6  
(気液相温度：1.0秒後)

次に、前述よりもさらに長時間である10秒までの反応ジェット解析について、異なる時間積分方法に対する解析結果を比較する。陽解法は前述の条件1に、陰解法は条件6に対応する。なお、時間積分方法のオプション以外の解析条件は、同一に設定した。

図6.3-25～34に陽解法を選択した場合の解析結果を、図6.3-35～44に陰解法を選択した場合の解析結果を示す。図6.3-25～29と図6.3-35～39は異なる時刻(2、4、6、8および10秒後)のボイド率と相平均温度分布であり、また、図6.3-30～34と図6.3-40～44は異なる時刻の気液各相の温度である。

陽解法と陰解法とを比較した場合、1秒までの解析結果と同様に、計算結果の高ボイド率や温度分布の反応ジェット挙動に違いが見られる。

陽解法では、時間経過と共に高ボイド率領域は噴出口からより遠方に離れ、時間経過と共に噴出口近傍における低ボイド率領域は拡大する傾向がみられる。高ボイド率領域は左斜め下以外の噴出口周囲に拡大するが、高温領域は高ボイド率領域の左斜め上方および右斜め下方の領域にとどまっている。

一方、陰解法では、時間経過と共に高ボイド率領域が拡大しても、陽解法のように噴出口から離れるような挙動は見られない。高温領域の位置は、陽解法と同様に、高ボイド率領域の左斜め上方および右斜め下方の領域にとどまっている。ただし、相平均温度の絶対値は、両者異なっている。

表6.3-5に、2～10秒での温度変化を示す。陽解法に比べて陰解法における相平均温度は高めに評価される。

表6.3-5 時間積分方法の改良条件に対する温度比較(10秒までの解析)

相平均温度(最高値)	2秒	4秒	6秒	8秒	10秒
陽解法の場合	1274℃	1298℃	1329℃	1346℃	1495℃
陰解法の場合	1050℃	1140℃	961℃	1521℃	1521℃

陽解法では、1秒までの解析結果において一旦温度は低下していたが、10秒までの解析において時間経過と共に高温部分の温度は次第に上昇する。陰解法では、温度低下は時間の遅い2～8秒において現れている。この温度低下の原因として、次のことが考えられる。反応ジェットの拡大と共に、反応進行の大きな高温部分と噴出水・周囲Naとの距離が大きくなるために、反応の進行が大きい部分から周囲への熱拡散が小さくなり、この領域での温度が次第に高くなると考えられる。陰解法では陽解法よりも温度低下の発生時刻が遅れることも、陰解法では陽解法よりも高ボイド率の拡大が比較的小さいので、上記の原因によるものと考えられる。

以上のように、改良コードLEAP-JET( Ver. 1.20 )において陰解法を選択した場合、陽解法と比較して計算速度の向上は図れるが、反応ジェット挙動に関する結果の差異が現れることに注意が必要である。

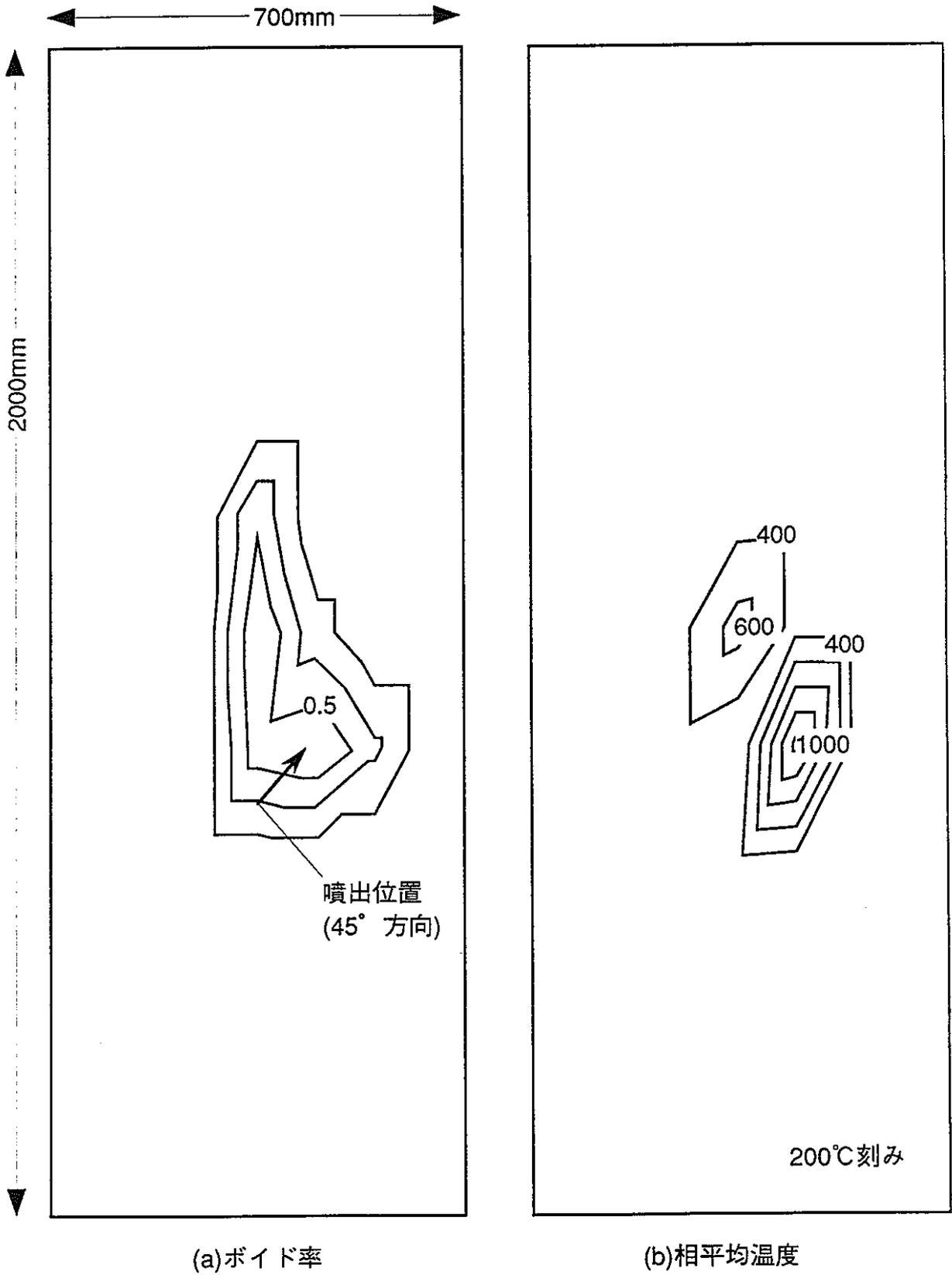


図6.3-25 実機体系での試計算結果：陽解法の場合  
(ボイド率／相平均温度：2秒後)

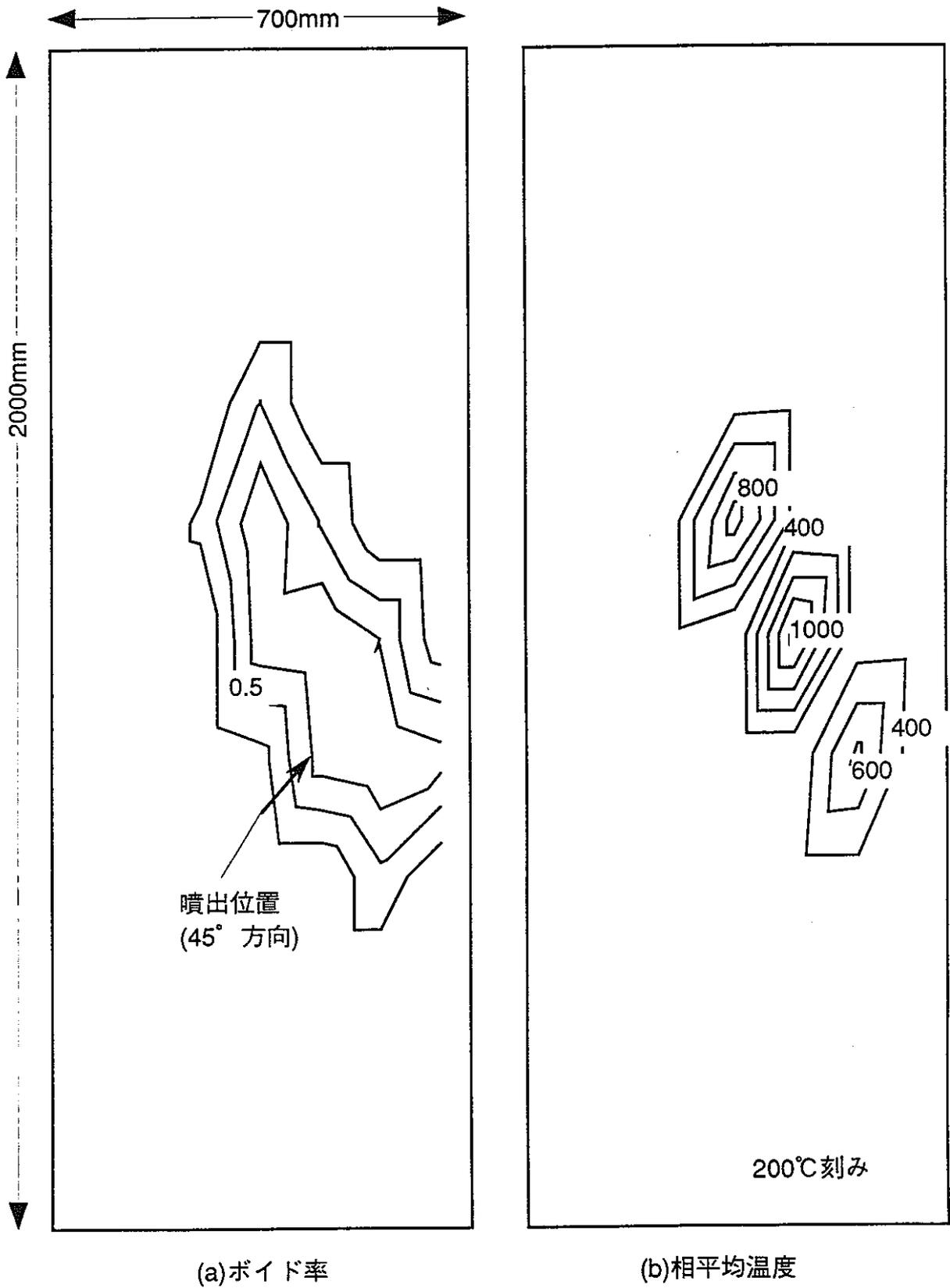


図6.3-26 実機体系での試計算結果：陽解法の場合  
(ボイド率/相平均温度：4秒後)

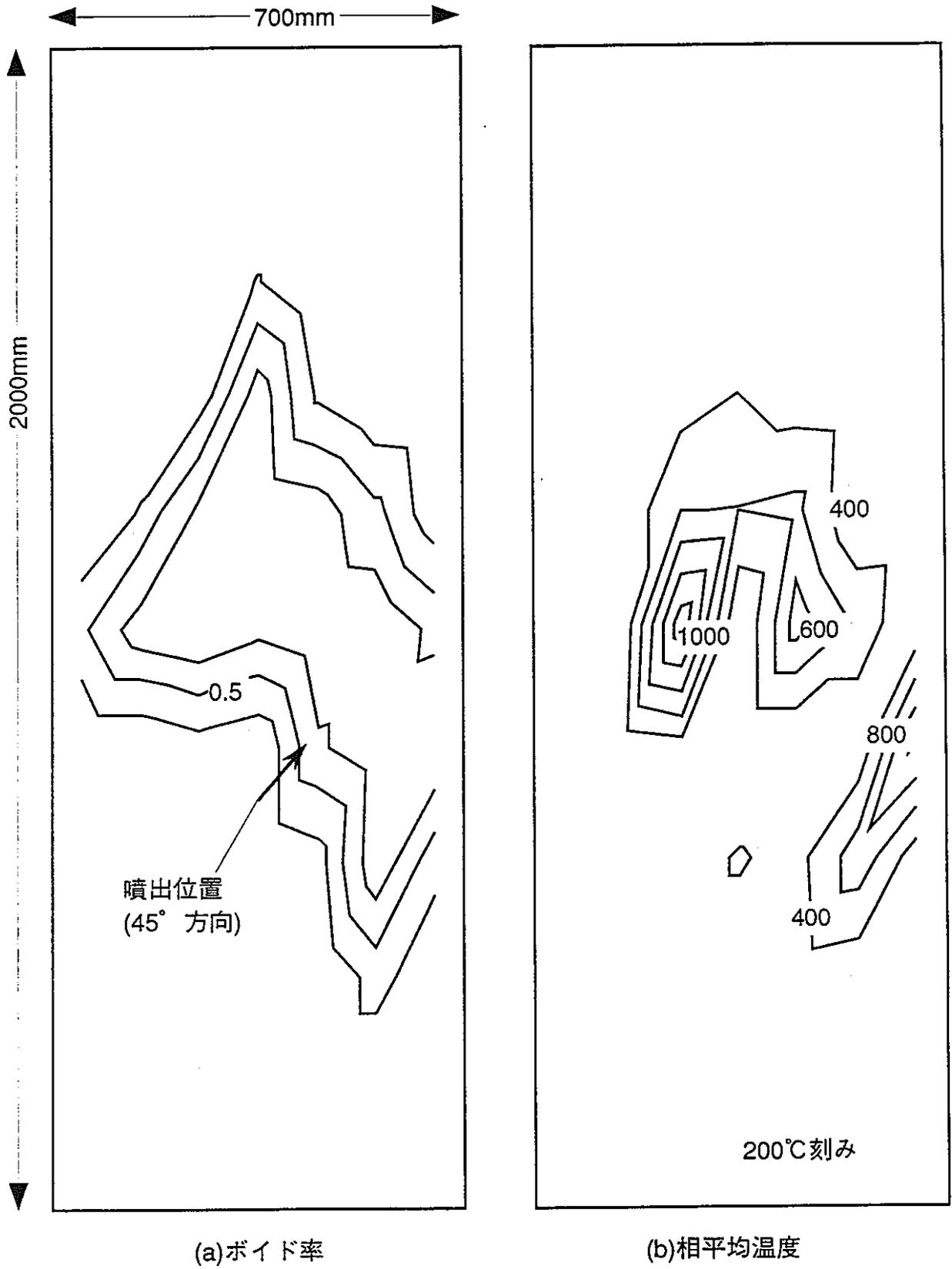
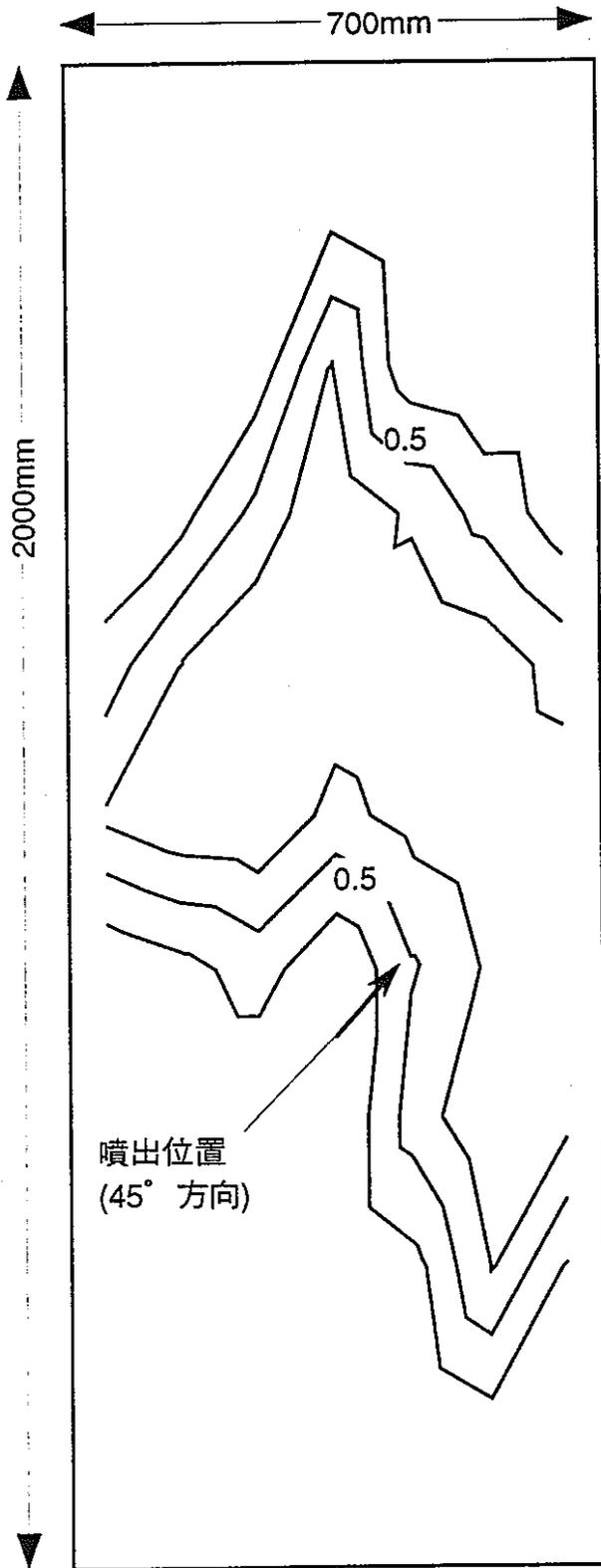
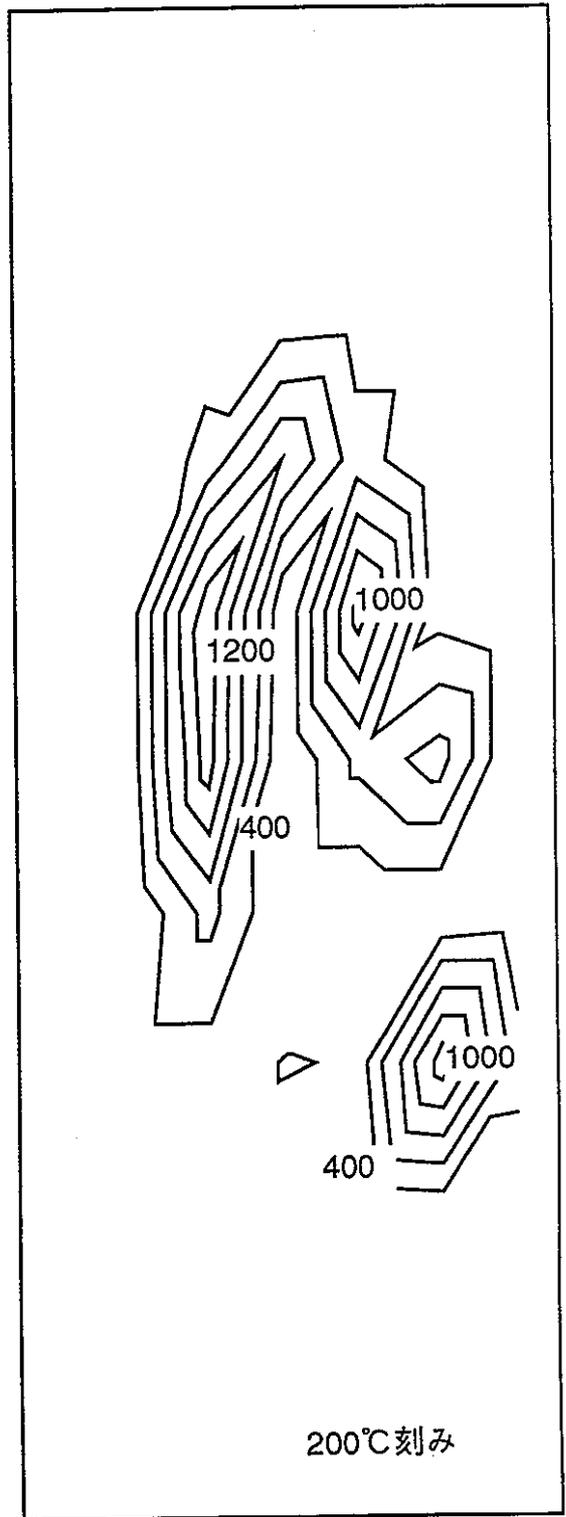


図6.3-27 実機体系での試計算結果：陽解法の場合  
 (ボイド率/相平均温度：6秒後)

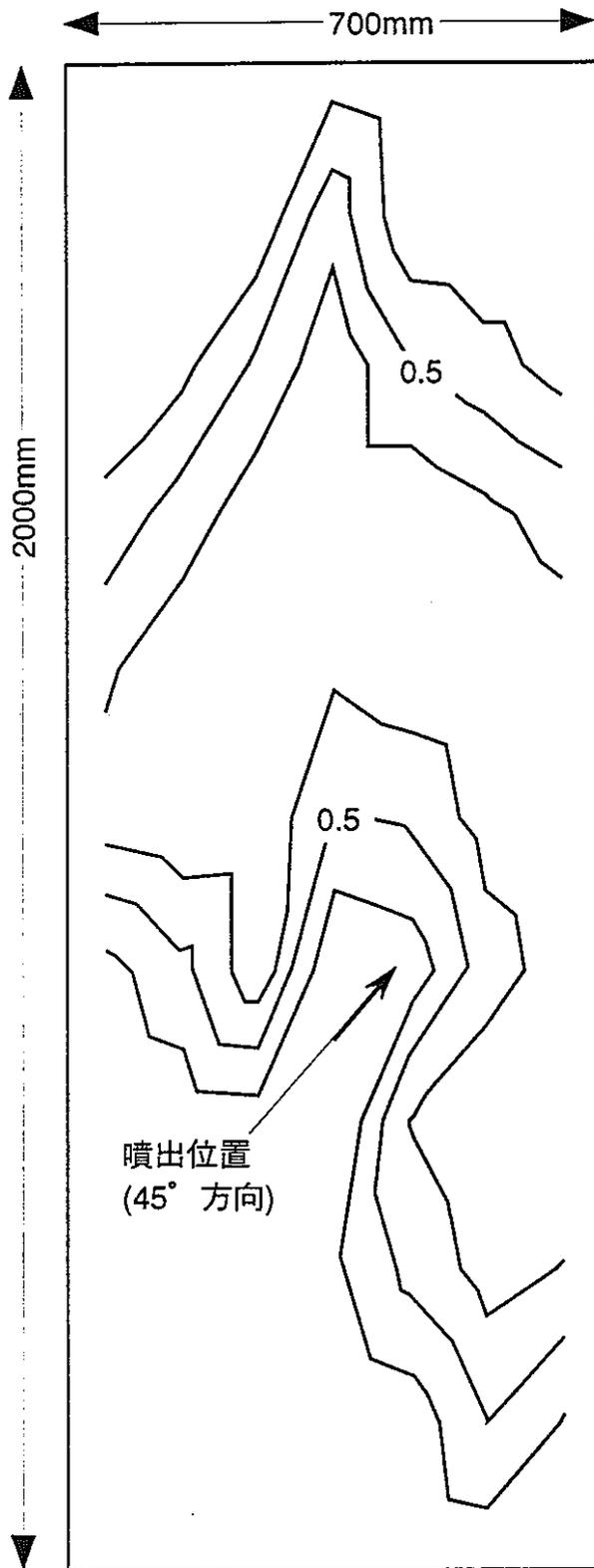


(a) ボイド率

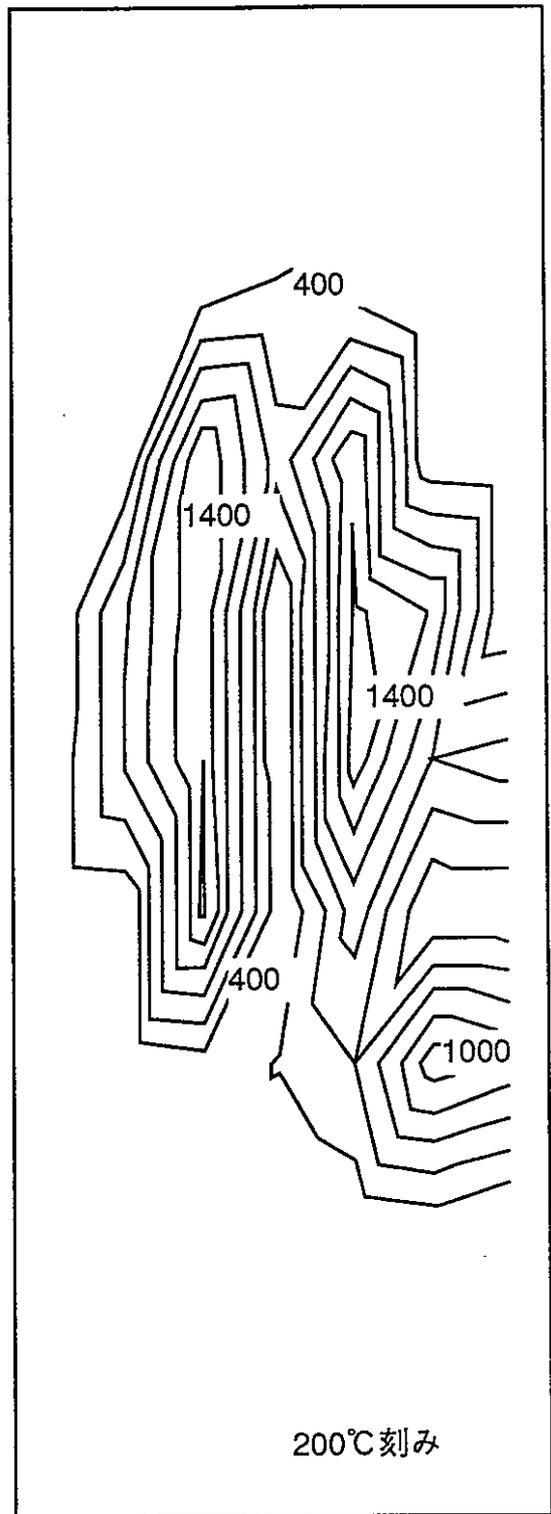


(b) 相平均温度

図6.3-28 実機体系での試計算結果：陽解法の場合  
(ボイド率/相平均温度：8秒後)



(a) ボイド率



(b) 相平均温度

図6.3-29 実機体系での試計算結果：陽解法の場合  
(ボイド率／相平均温度：10秒後)

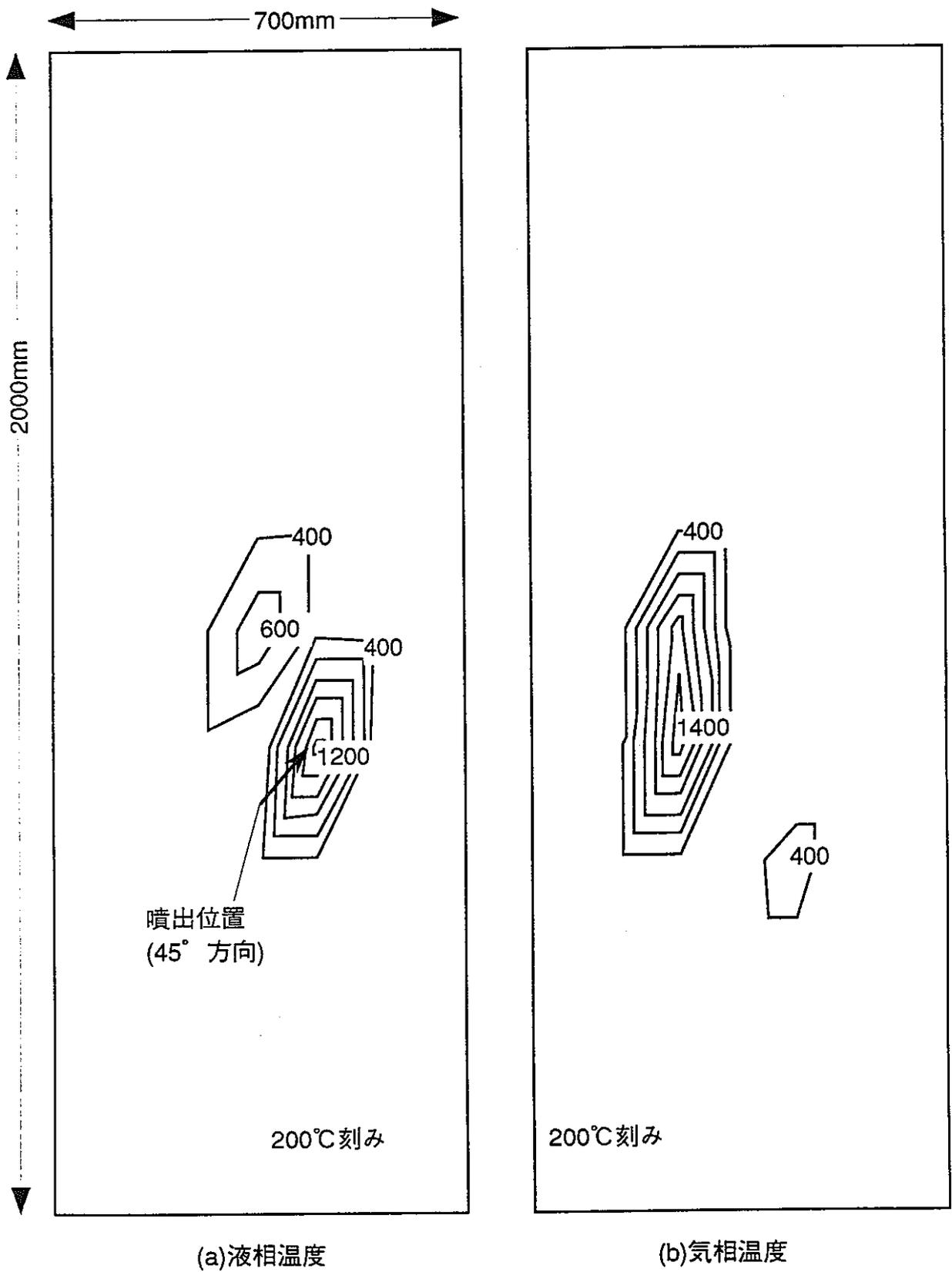


図6.3-30 実機体系での試計算結果：陽解法の場合（気液相温度：2秒後）

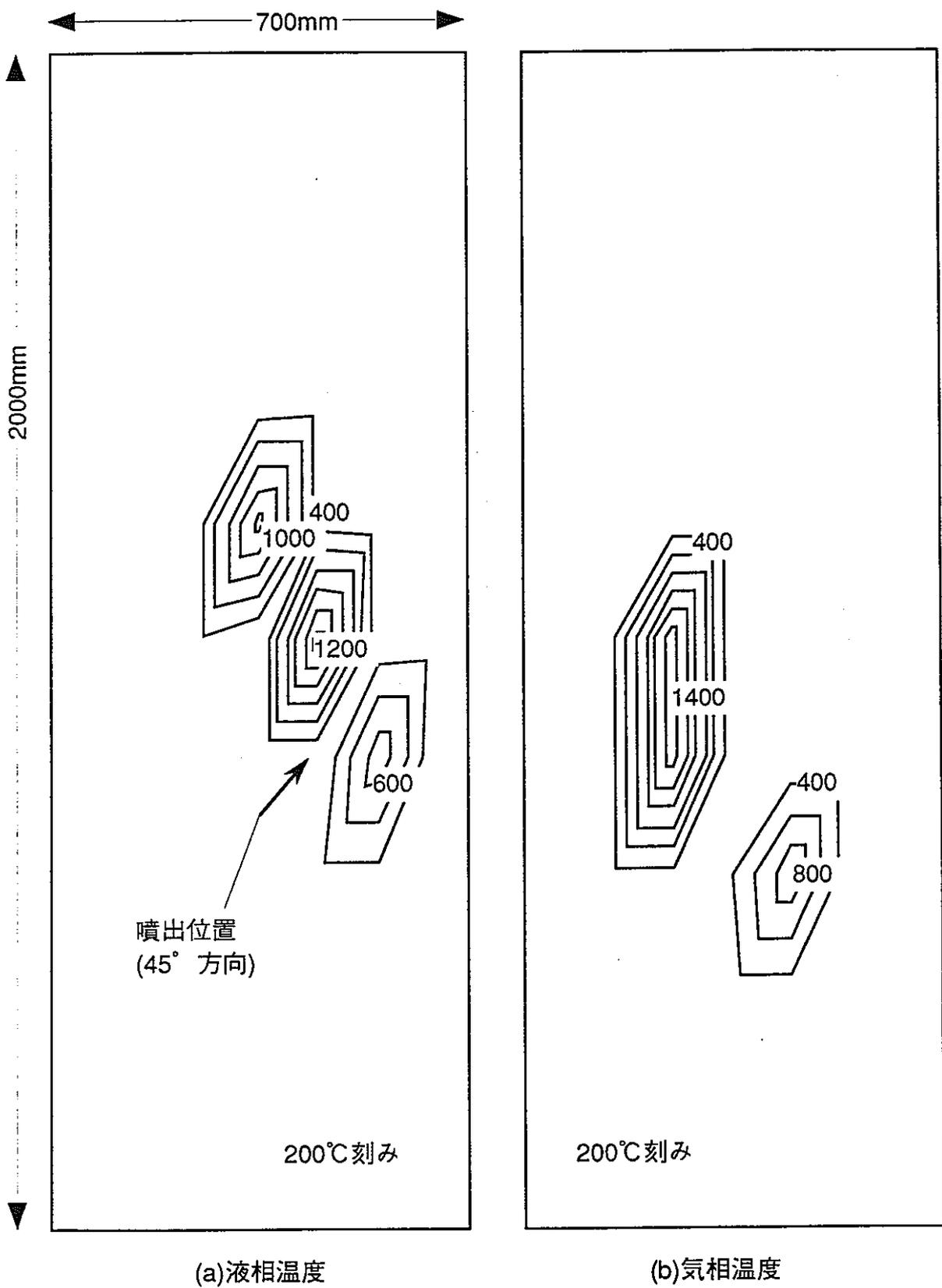
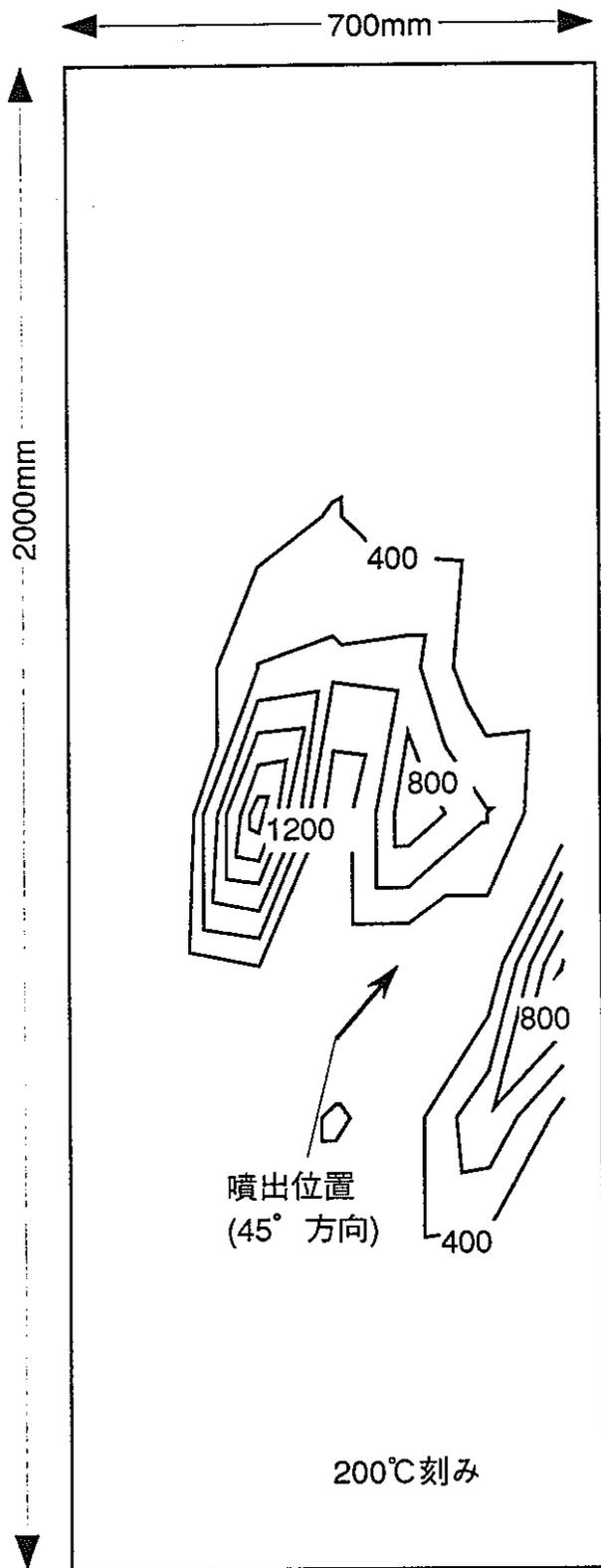
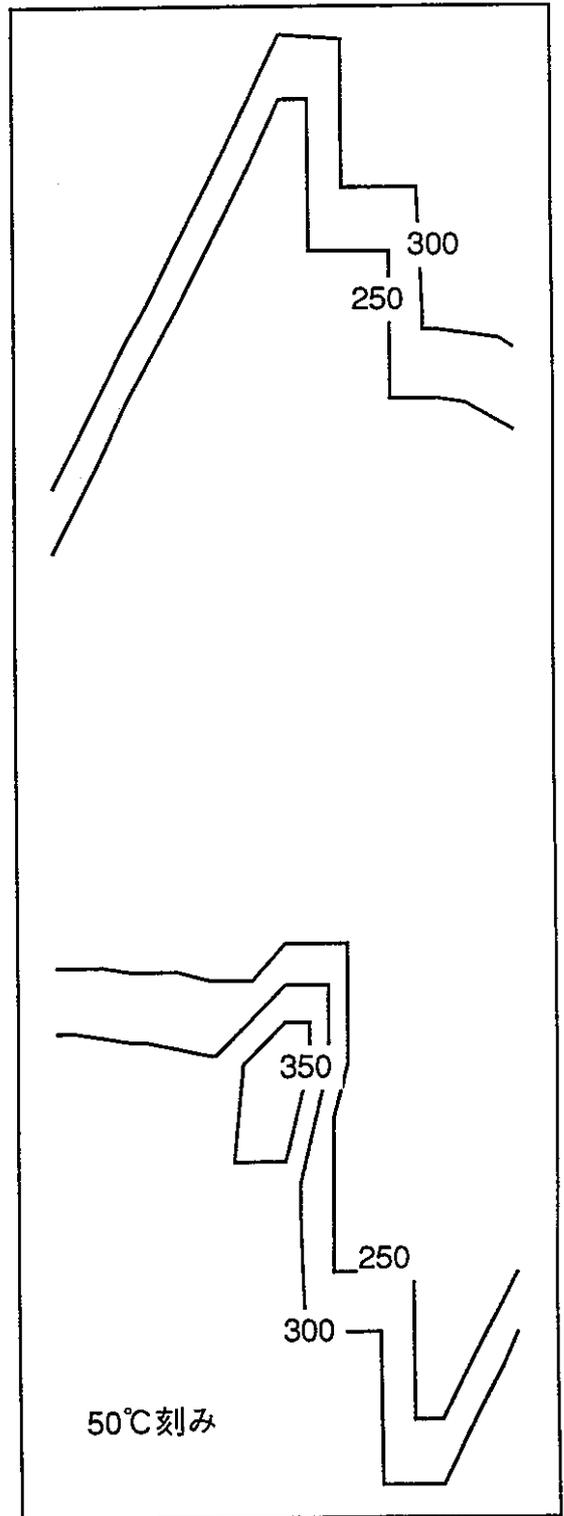


図6.3-31 実機体系での試計算結果：陽解法の場合（気液相温度：4秒後）



(a)液相温度



(b)気相温度

図6.3-32 実機体系での試計算結果：陽解法の場合（気液相温度：6秒後）

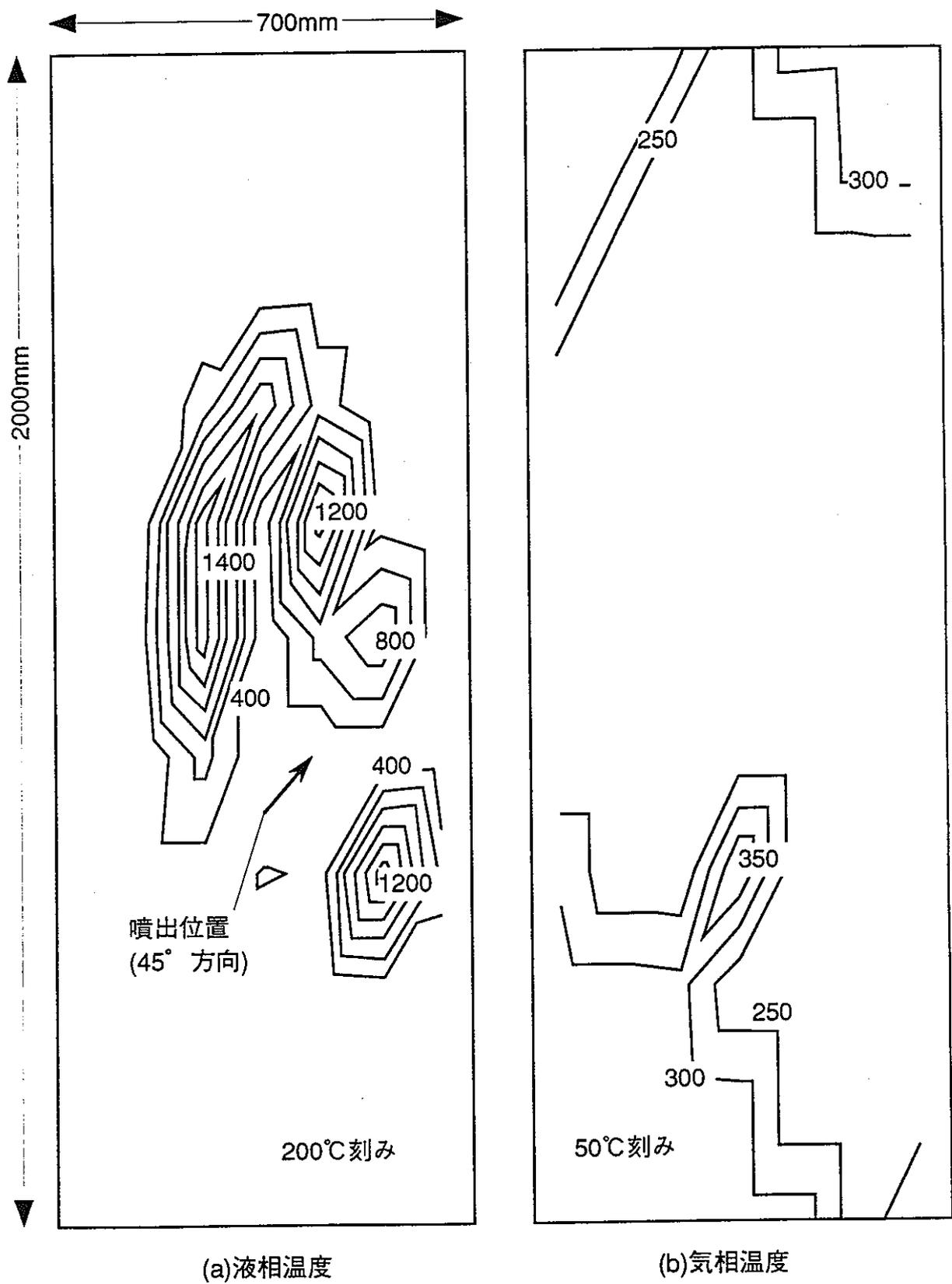


図6.3-33 実機体系での試計算結果：陽解法の場合（気液相温度：8秒後）

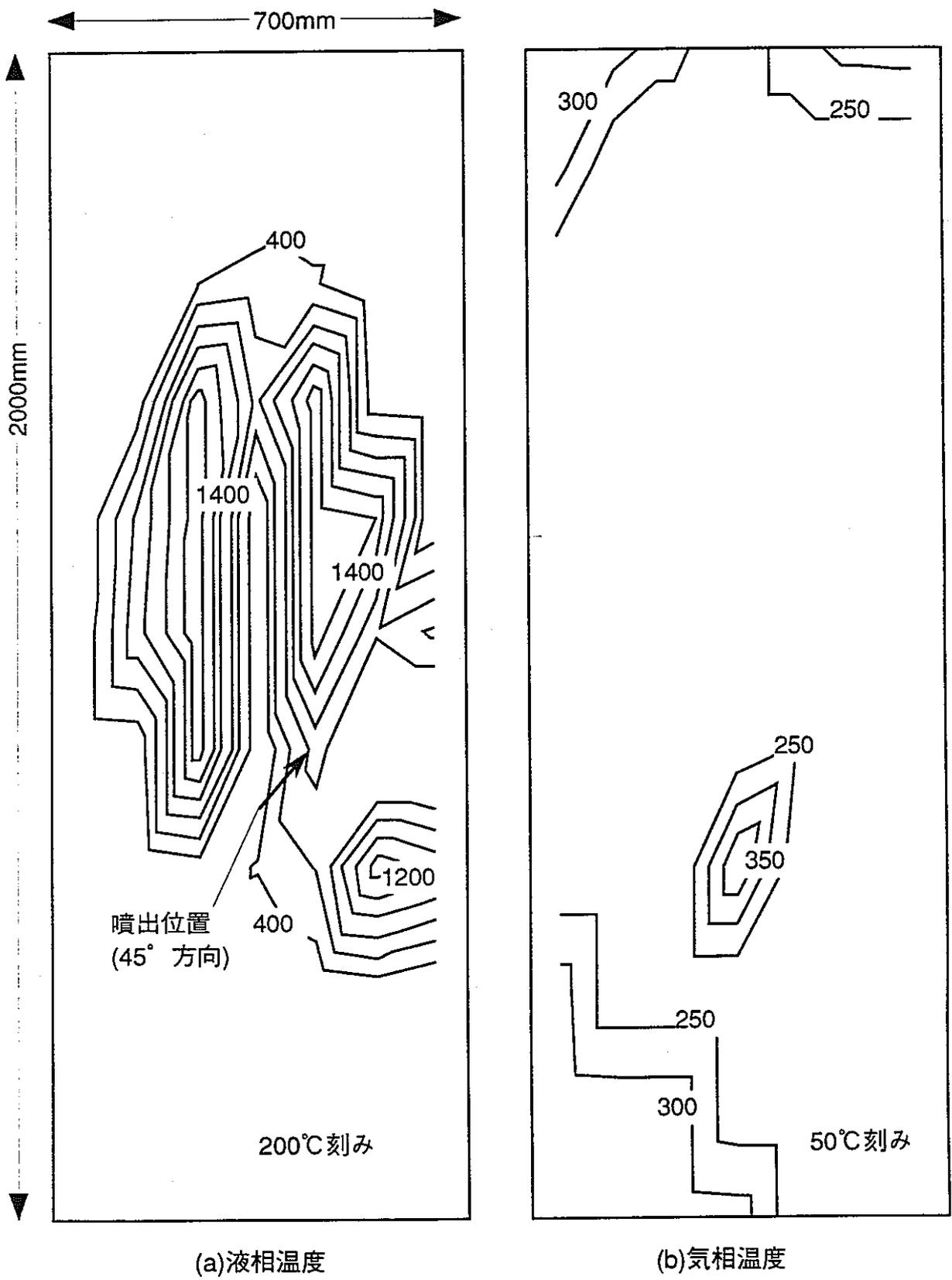


図6.3-34 実機体系での試計算結果：陽解法の場合（気液相温度：10秒後）

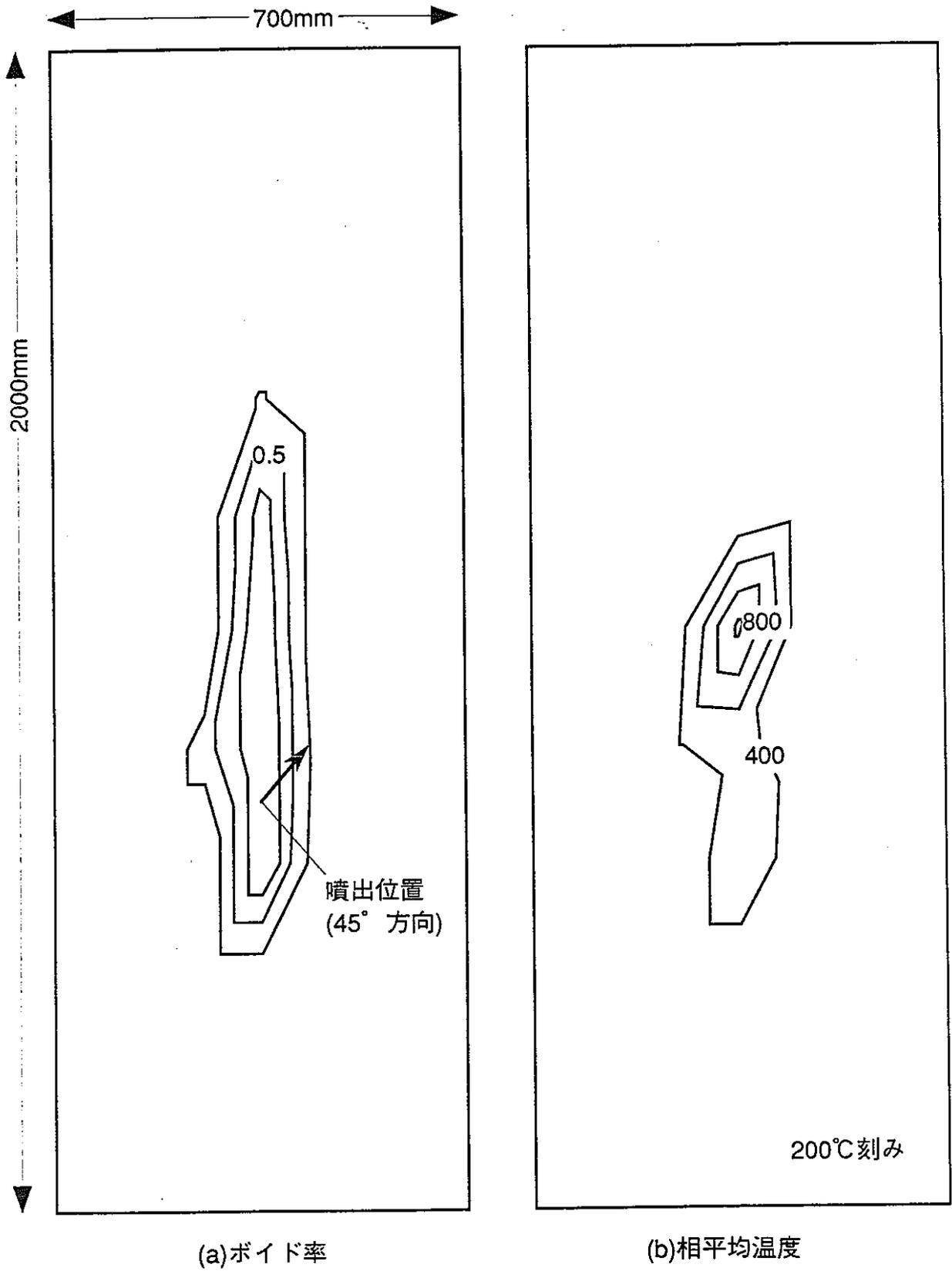


図6.3-35 実機体系での試計算結果：陰解法の場合  
 (ボイド率/相平均温度：2秒後)

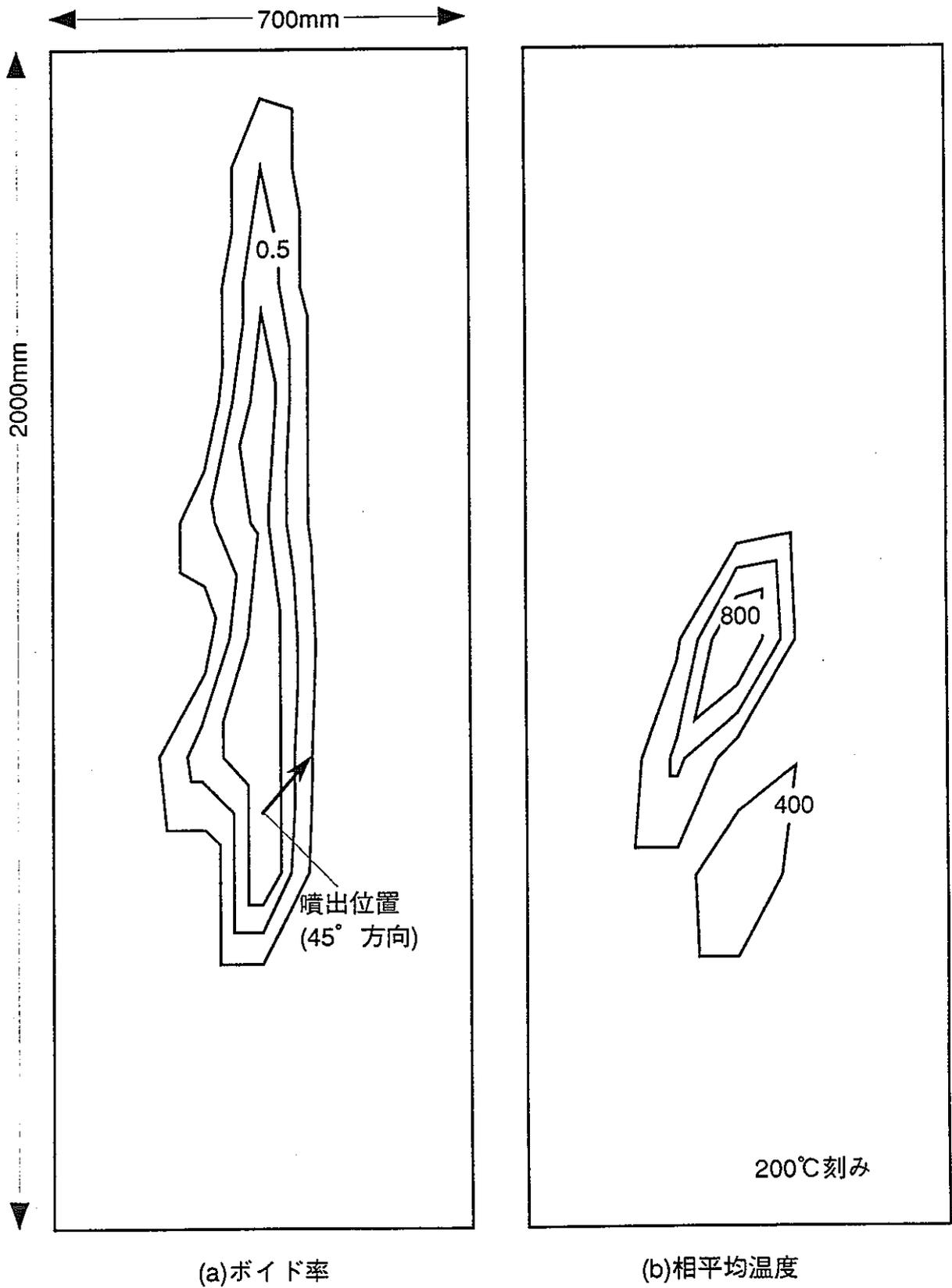


図6.3-36 実機体系での試計算結果：陰解法の場合  
(ボイド率/相平均温度：4秒後)

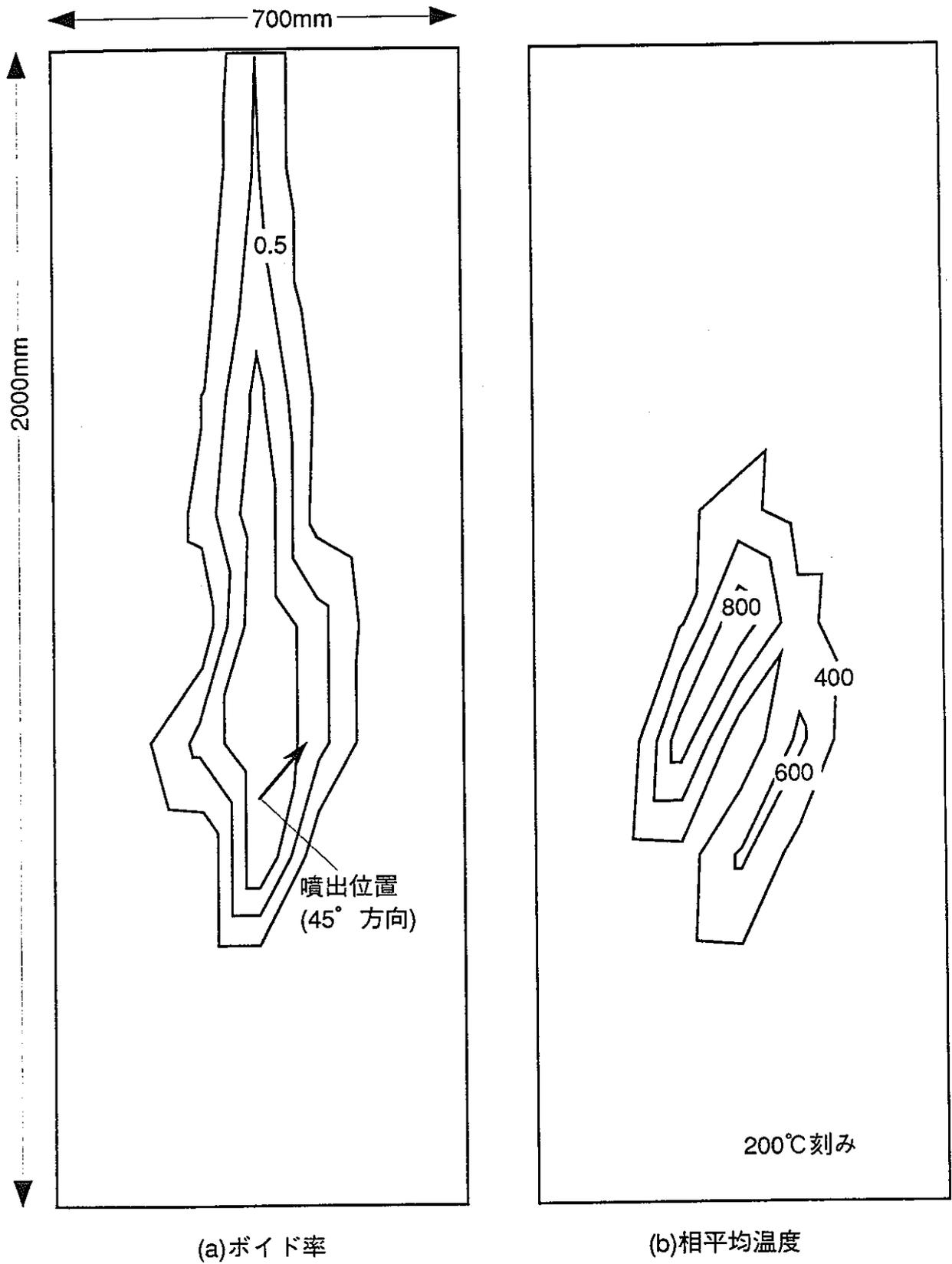


図6.3-37 実機体系での試計算結果：陰解法の場合  
 (ボイド率/相平均温度：6秒後)

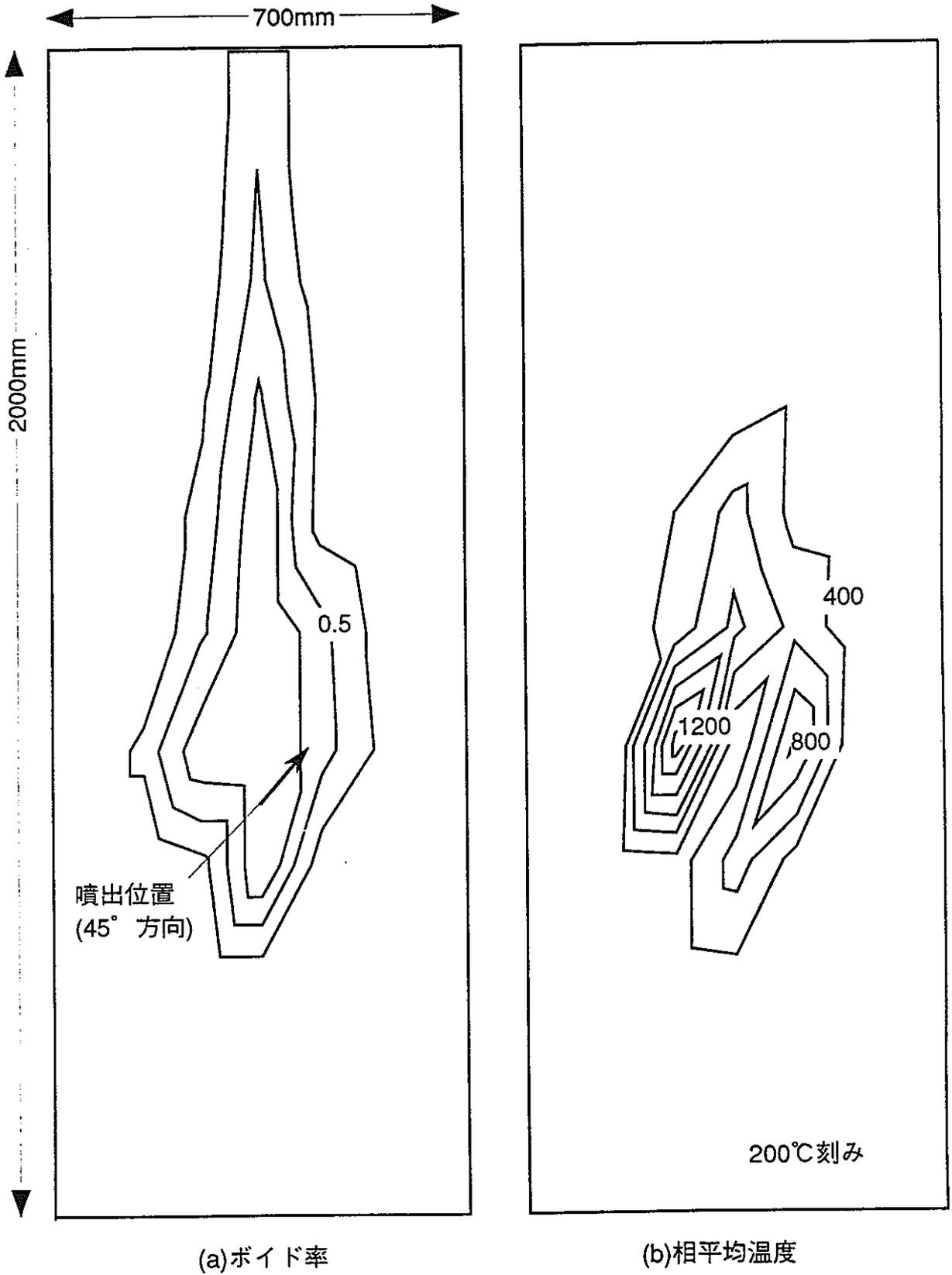


図6.3-38 実機体系での試計算結果：陰解法の場合  
(ボイド率/相平均温度：8秒後)

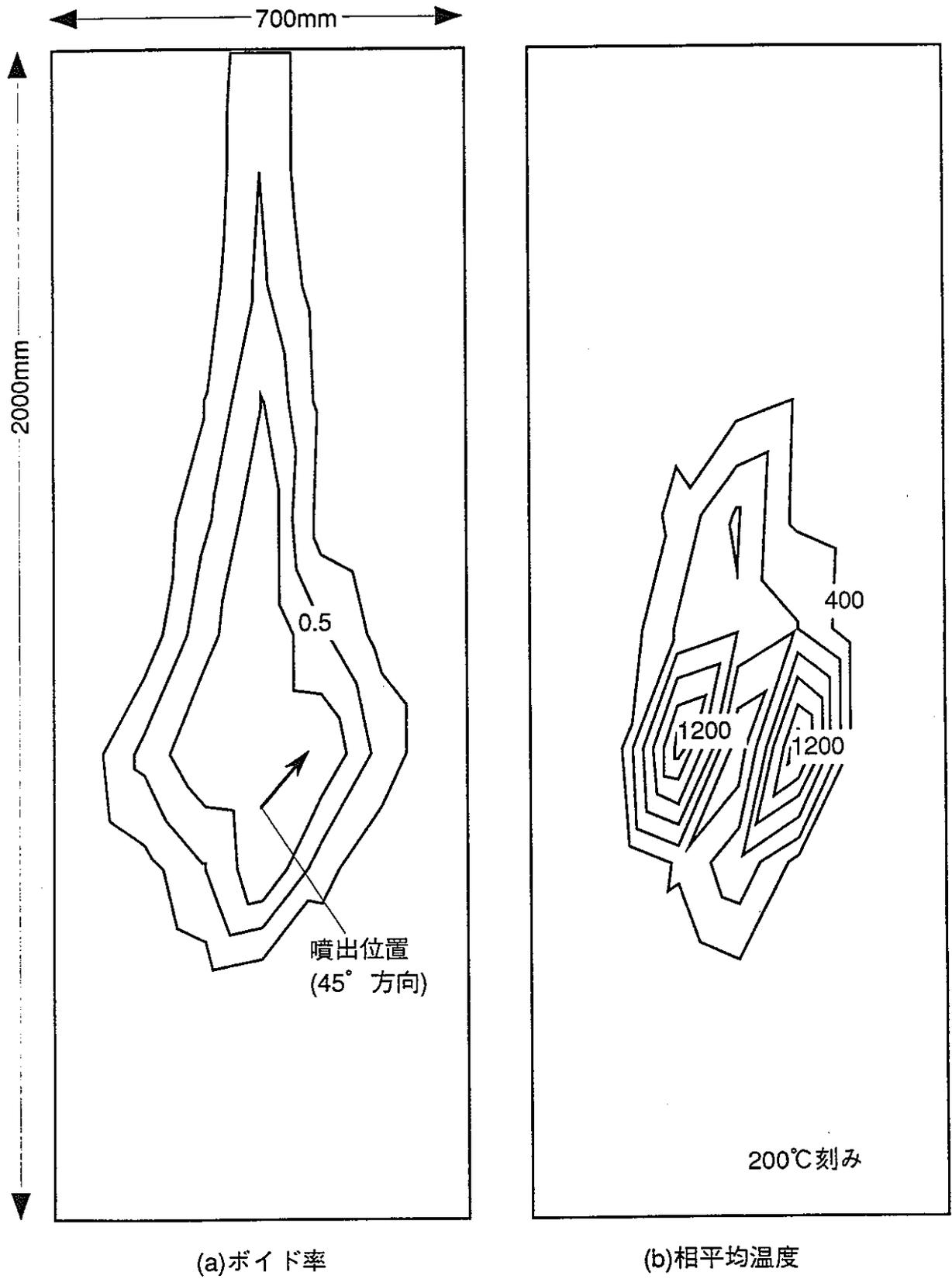


図6.3-39 実機体系での試計算結果：陰解法の場合  
(ボイド率／相平均温度：10秒後)

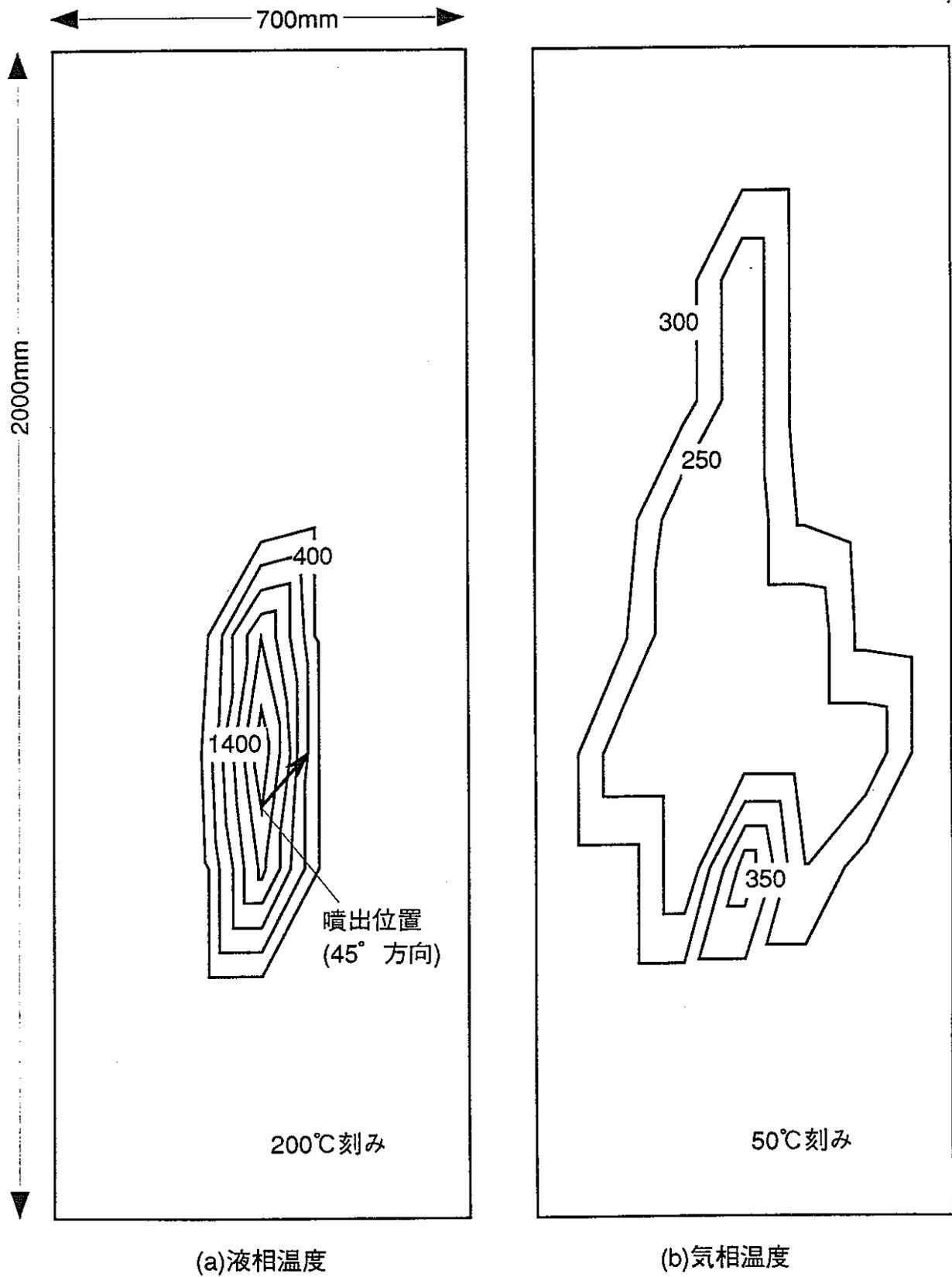


図6.3-40 実機体系での試計算結果：陰解法の場合（気液相温度：2秒後）

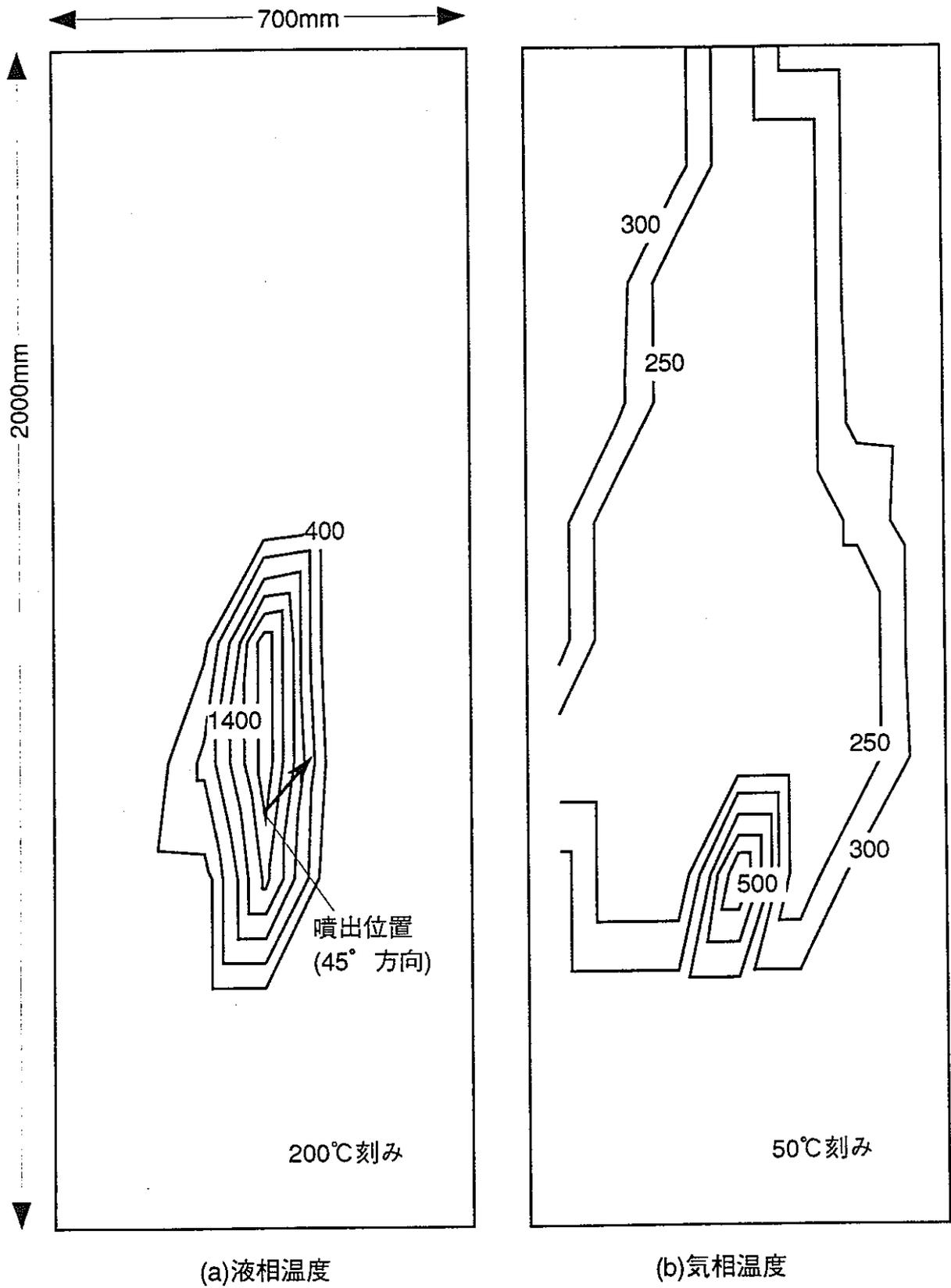


図6.3-41 実機体系での試計算結果：陰解法の場合（気液相温度：4秒後）

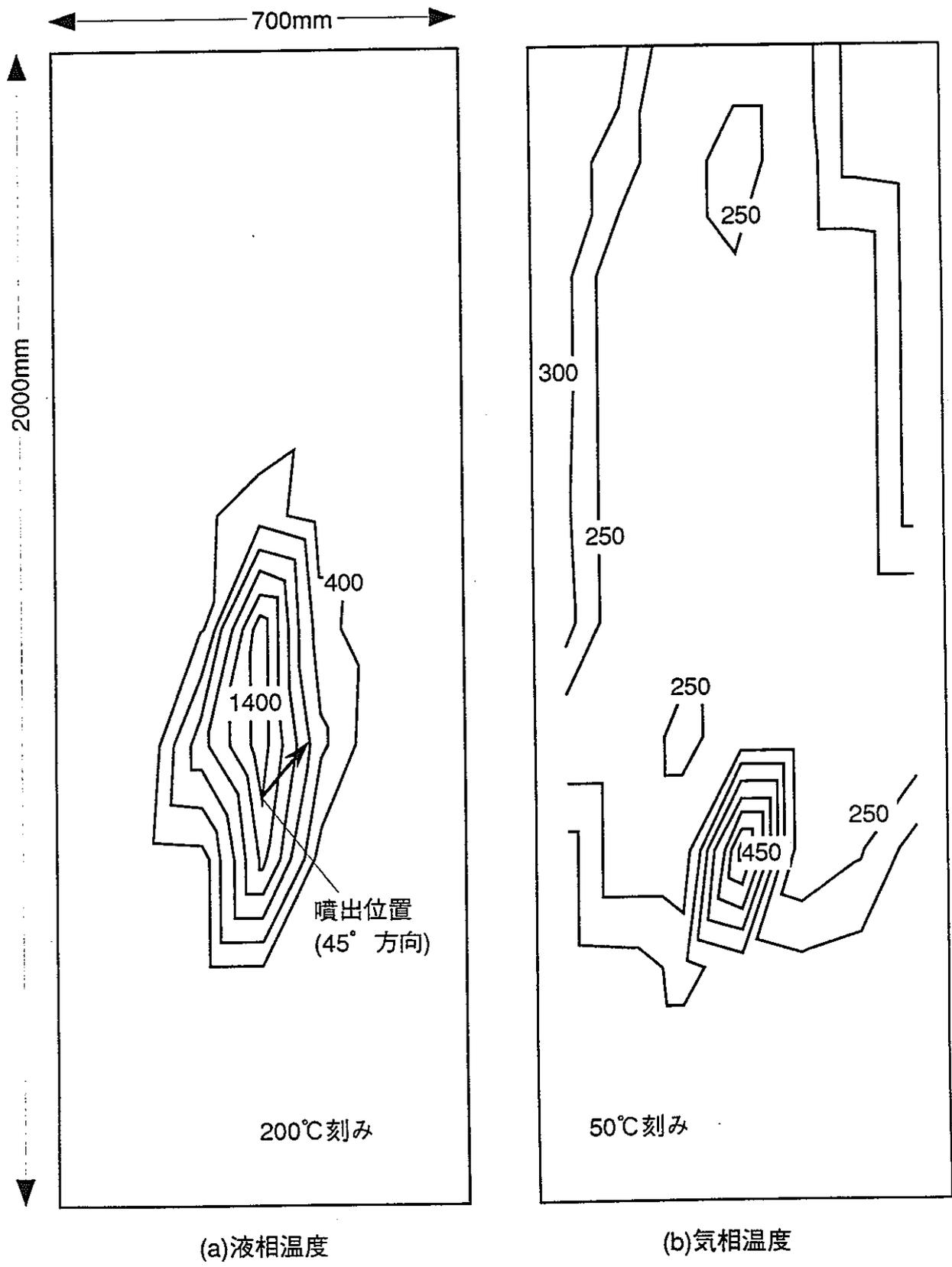


図6.3-42 実機体系での試計算結果：陰解法の場合（気液相温度：6秒後）

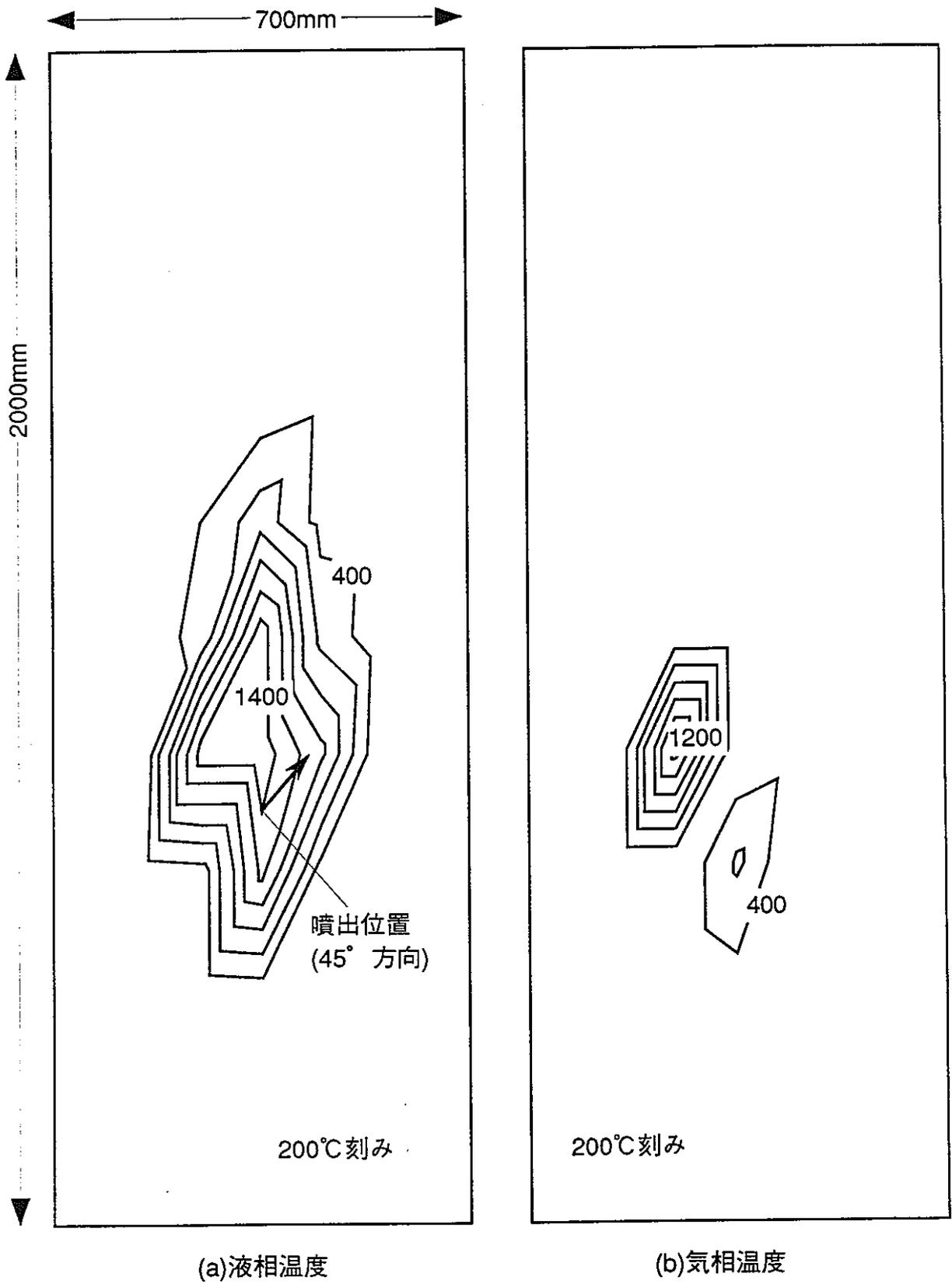


図6.3-43 実機体系での試計算結果：陰解法の場合（気液相温度：8秒後）

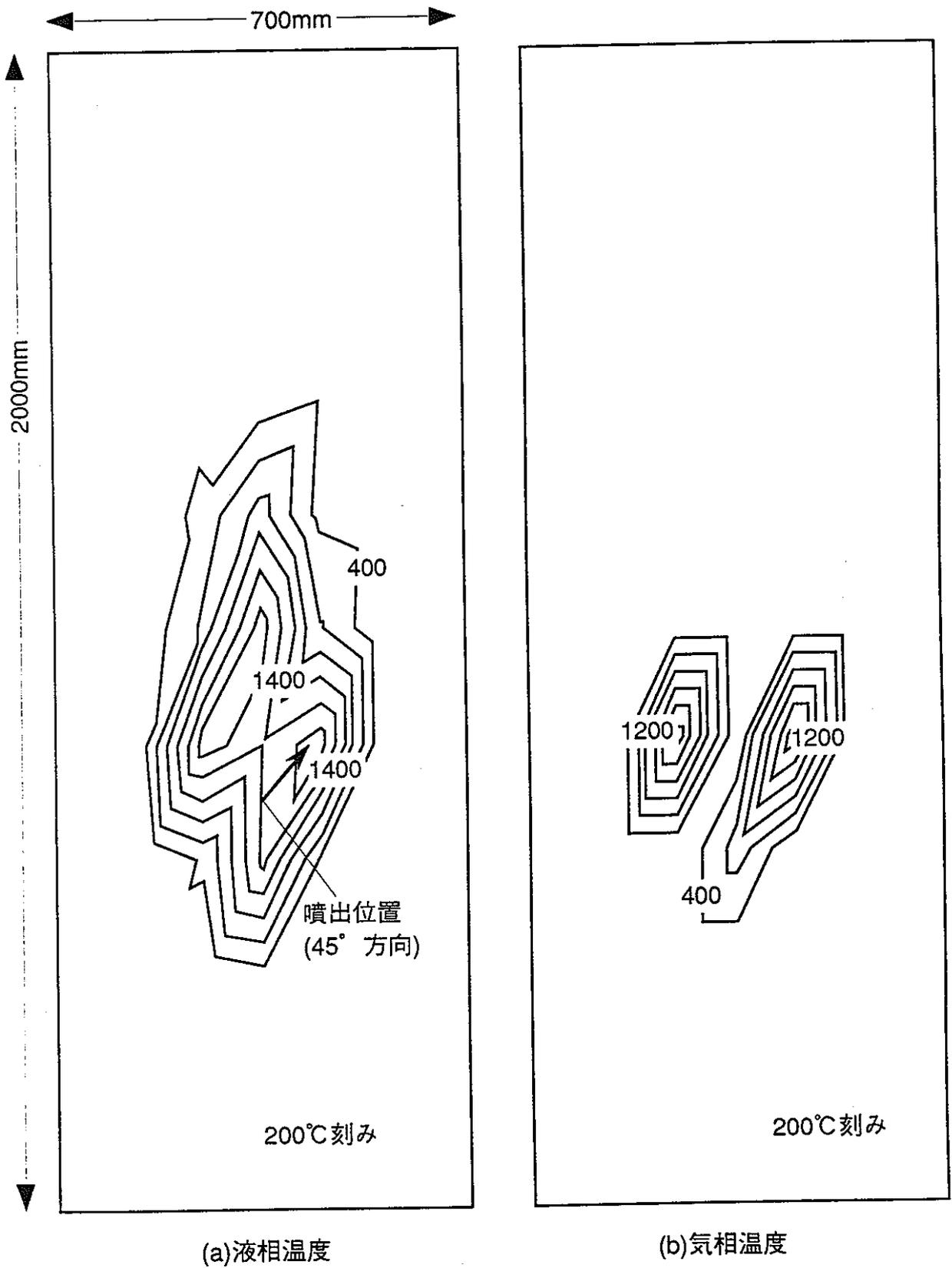


図6.3-44 実機体系での試計算結果：陰解法の場合（気液相温度：10秒後）

## 6. 4 解析結果の比較：化学反応モデルの簡略化の場合

本節では、化学反応モデルの簡略化に関する色々な条件について試計算を実施し、計算速度や反応ジェット挙動を比較する。

### 6. 4. 1 試計算の条件

本節の試計算条件は、下記項目に対する選択と実行回数の簡略化度合いについて場合分けする。

- (a) 気液二相流の温度探索と物性値を算出する各モジュールの簡略化。
  - (a-1) 圧力分布計算モジュールPRESSDの実行回数の簡略化。
  - (a-2) 物性値計算モジュールSTATE2の実行回数の簡略化。
- (b) 物性値関数の簡略化：各化学種・成分の固定値関数の選択。

表6.4-1に、化学反応モデルの簡略化における試計算条件を示す。(a-1)の項目は、従来コードLEAP-JET(Ver. 1.10)において採用・実施済みである<sup>(4)</sup>。しかし、これまで計算負荷の定量的効果が明らかでなかったことから、試計算の比較条件に加えた。条件1は全く簡略化しない場合である。一方、条件7は、表中、最も簡略化の度合いが大きい。

なお、本節では、タイムステップを20 $\mu$ sに設定し、1秒までの反応ジェット解析を実施した。

表6.4-1 試計算条件：化学反応モデルの簡略化

簡略化項目 条件	(a-1)	(a-2)	(b)
	PRESSDの 実行	STATE2の 実行	物性値関数
	実行回数	実行回数	選択
条件1	毎タイムステップ°	毎タイムステップ°	近似関数
条件2	10回毎	毎タイムステップ°	近似関数
条件3	100回毎	毎タイムステップ°	近似関数
条件4	毎タイムステップ°	10回毎	近似関数
条件5	毎タイムステップ°	100回毎	近似関数
条件6	毎タイムステップ°	毎タイムステップ°	固定値
条件7	100回毎	100回毎	固定値

#### 6. 4. 2 解析結果の比較

表6.4-2に、化学反応モデルの簡略化条件に対する計算速度の比較を示す。表には、条件1を基準とした計算速度比=(条件1での解析に要するCPU時間)÷(各条件での解析に要するCPU時間)を示した。

表6.4-2 化学反応モデルの簡略化条件に対する計算速度の比較

簡略化項目 条件	(a-1)	(a-2)	(b)	計算速度比 (基準：条件1)
	PRESSD 実行回数	STATE2 実行回数	物性値 選択	
条件1	毎 タイムステップ°	毎 タイムステップ°	関数	1.000
条件2	10回毎	毎 タイムステップ°	関数	3.271
条件3	100回毎	毎 タイムステップ°	関数	4.239
条件4	毎 タイムステップ°	10回毎	関数	1.156
条件5	毎 タイムステップ°	100回毎	関数	2.437
条件6	毎 タイムステップ°	毎 タイムステップ°	固定	1.196
条件7	100回毎	100回毎	固定	13.105

物性値関数を固定値化した条件6では、計算速度は2割程度向上する。このことから、本コードでは物性値関数の引用が多いために、この部分の計算負荷が比較的大きいことが分かる。しかし、条件6よりも条件2～5の方が、計算速度は大きい。これは、条件6では物性値関数のみを簡略化しているのに対し、条件2～5では温度探索と物性値計算の両方を簡略化しているために、条件6よりも条件2～5の方が計算の簡略化度合いが大きいためである。

また、条件4より条件2の方が計算速度は約2.8倍大きく、条件5より条件3の方が計算速度は約1.7倍大きい。このように、STATE2の実行回数を簡略化した条件4と5に比べて、PRESSDの実行回数を簡略化した条件2と3の方が、CPU時間の低減効果や計算速度の向上の度合いは大きい。これは次の理由による。STATE2では、非線形方程式の温度探索と物性値計算を行う。これに対し、

PRESSDでは温度探索と密度の式を用いた圧力探索という、非線形方程式解の探索を2重に行う。このことから、STATE2よりもPRESSDの方がモジュールの計算負荷は大きい。

このように、物性値関数よりもSTATE2、STATE2よりもPRESSDの方が、モジュール計算負荷はより大きいために、これを簡略化した場合の計算速度の向上の度合いは大きいと言える。

条件7の計算速度は、条件1に比べて約13倍大きい。

図6.4-1～28に、化学反応モデル簡略化の各試計算条件に対する反応ジェットの解析結果を示す。図6.4-1～14には、異なる時刻(0.5秒と1.0秒後)のボイド率と相平均温度分布を示す。図6.4-15～28には気液各相の温度を示す。

表6.4-3に、化学反応モデルの簡略化条件に対する温度比較を示す。前節同様の理由で、図や表には相平均温度を示した。図や表のように相平均温度で試験結果と比較する理由は、各相の体積率や熱容量(密度×比熱)の影響を受けて、解析セル内の気液相温度の変化が大きいためである。これについては、熱容量の低い気相温度が、体積率の低いセルで高く評価される傾向がある。この時の温度を、本解析のように比較的粗い寸法である当該セルの代表温度とすることは適当と言えない。表には、最大の相平均温度のメッシュ位置である、x,y方向メッシュ番号を併記した。

噴出位置より45度右斜め上方に水が噴出し、反応ジェットが形成される。反応ジェットの気相成分は浮力の作用により上に向かう傾向があるため、ボイド率高い部分は本来の水の噴出方向よりも垂直線に対する傾きが小さい。

反応ジェットの高いボイド率の領域は、噴出口より遠方(上方)まで及んでいる。これに対し、高温領域はやや噴出口下流近傍の領域にとどまっている。時間経過と共に、噴出水と反応に伴う生成物(水素)が増加するため、高いボイド率の領域は拡大する。また、反応による高温領域の温度も上昇する。解析における最大温度は、伝熱管条件を与えたセルより噴出口下流側の1メッシュ離れた位置である。これは、伝熱管条件を与えたセルよりセル中心位置で50～100mm程度の距離に相当する。

これらの反応ジェット挙動については、前節同様である。

図と表においては、計算結果の高ボイド率や温度分布の反応ジェット挙動における差異は小さいが、相平均温度の絶対値に各解析条件の違いが見られる。条件2・4・6と1との違いは小さいが、条件3・5と1との違いは大きい。また、条件5と1との違いに比べて、条件3と1との違いはより大きい。つまり、前述のモジュール計算負荷と計算速度との関係とは逆に、計算負荷を簡略化する度合いの大きい方が、解析結果の反応ジェット挙動における基準条件1との違いの度合いは大きいといえる。

以上のように、圧力計算モジュールPRESSDと物性値計算モジュールSTATE2の実行回数の簡略化や物性値関数の簡略化により、改良コードLEAP-JET(Ver. 1.20)の高速化が可能となった。

試算により、高速化に対するそれらの簡略化条件の依存性を明らかにした。計算負荷を簡略化する度合いの大きい方が、計算速度は向上するが、簡略化しない場合の反応ジェット挙動結果との違いも大きくなる。

改良コードLEAP-JET(Ver. 1.20)において、化学反応モデルの簡略化により解析速度を高速化する場合には、上記の(a)計算速度の向上効果と(b)結果の差異に注意が必要である。実機体系では、(a)と(b)の両方の観点から、条件2または条件5の設定で解析するのが良いと判断される。

表6.4-3 化学反応モデルの簡略化条件に対する温度比較

簡略化項目 条件	(a-1)	(a-2)	(b)	相平均温度(最大値)	
	PRESSD 実行回数	STATE2 実行回数	物性値 選択	0.5秒後	1.0秒後
条件1 (x,yメッシュ番号)	毎 タイムステップ°	毎 タイムステップ°	関数	1413℃ (4,7)	1502℃ (4,7)
条件2 (x,yメッシュ番号)	10回毎	毎 タイムステップ°	関数	1402℃ (4,7)	1488℃ (4,7)
条件3 (x,yメッシュ番号)	100回毎	毎 タイムステップ°	関数	1284℃ (4,7)	1190℃ (4,7)
条件4 (x,yメッシュ番号)	毎 タイムステップ°	10回毎	関数	1414℃ (4,7)	1502℃ (4,7)
条件5 (x,yメッシュ番号)	毎 タイムステップ°	100回毎	関数	1414℃ (4,7)	1503℃ (4,7)
条件6 (x,yメッシュ番号)	毎 タイムステップ°	毎 タイムステップ°	固定	1422℃ (4,7)	1521℃ (4,7)
条件7 (x,yメッシュ番号)	100回毎	100回毎	固定	1270℃ (4,7)	1339℃ (4,7)

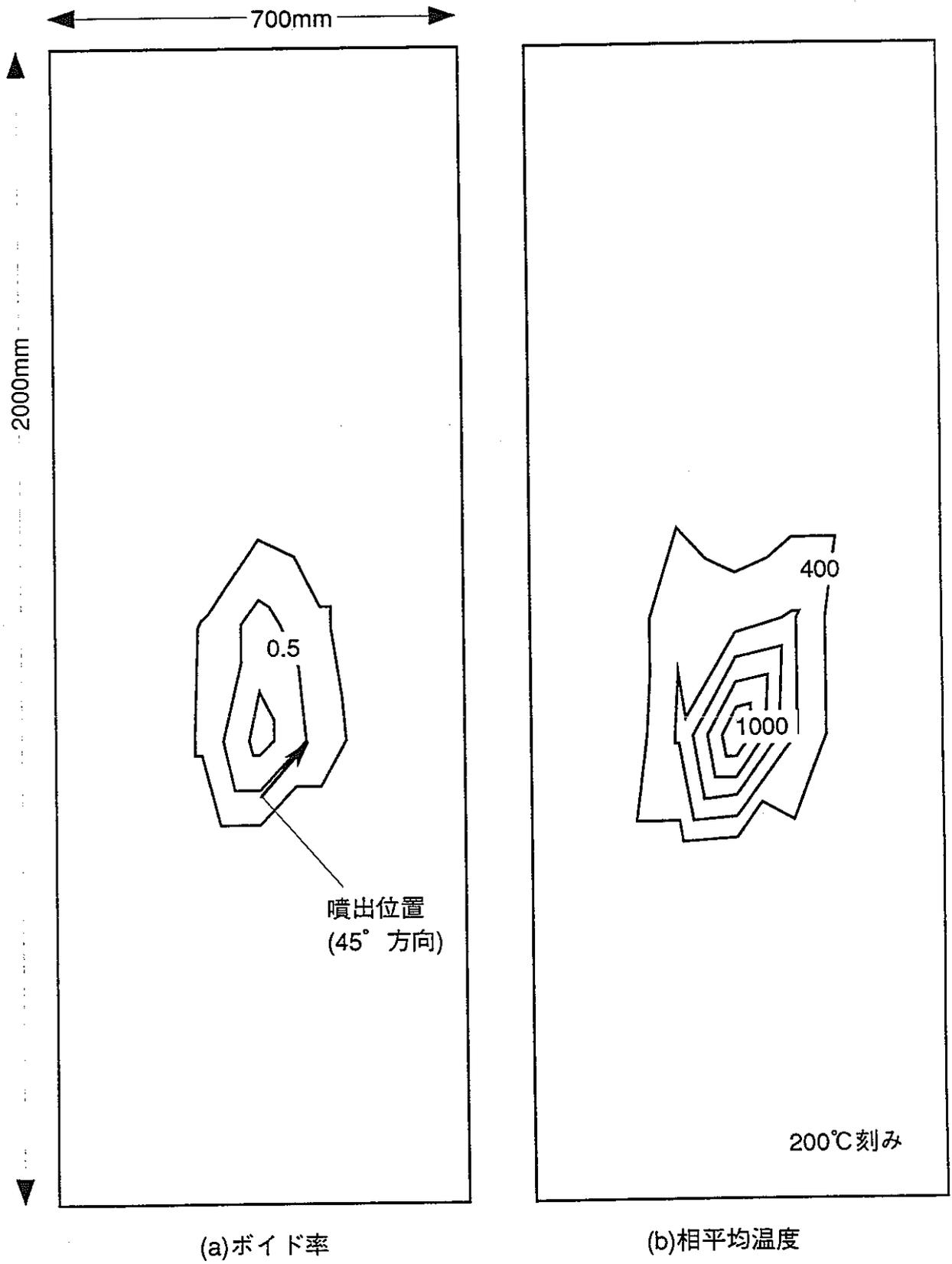


図6.4-1 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 1  
(ボイド率/相平均温度：0.5秒後)

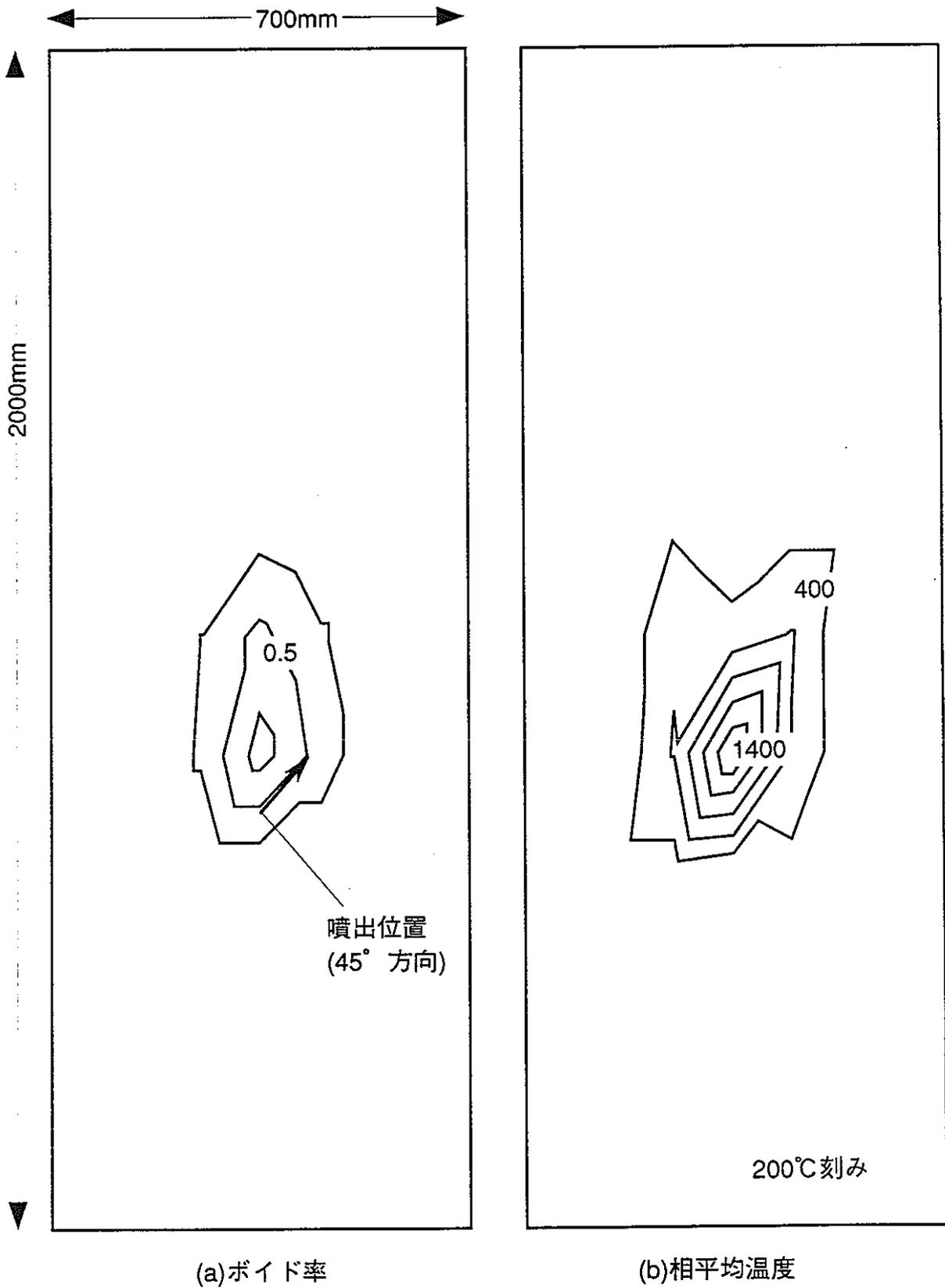


図6.4-2 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 2  
(ボイド率/相平均温度：0.5秒後)

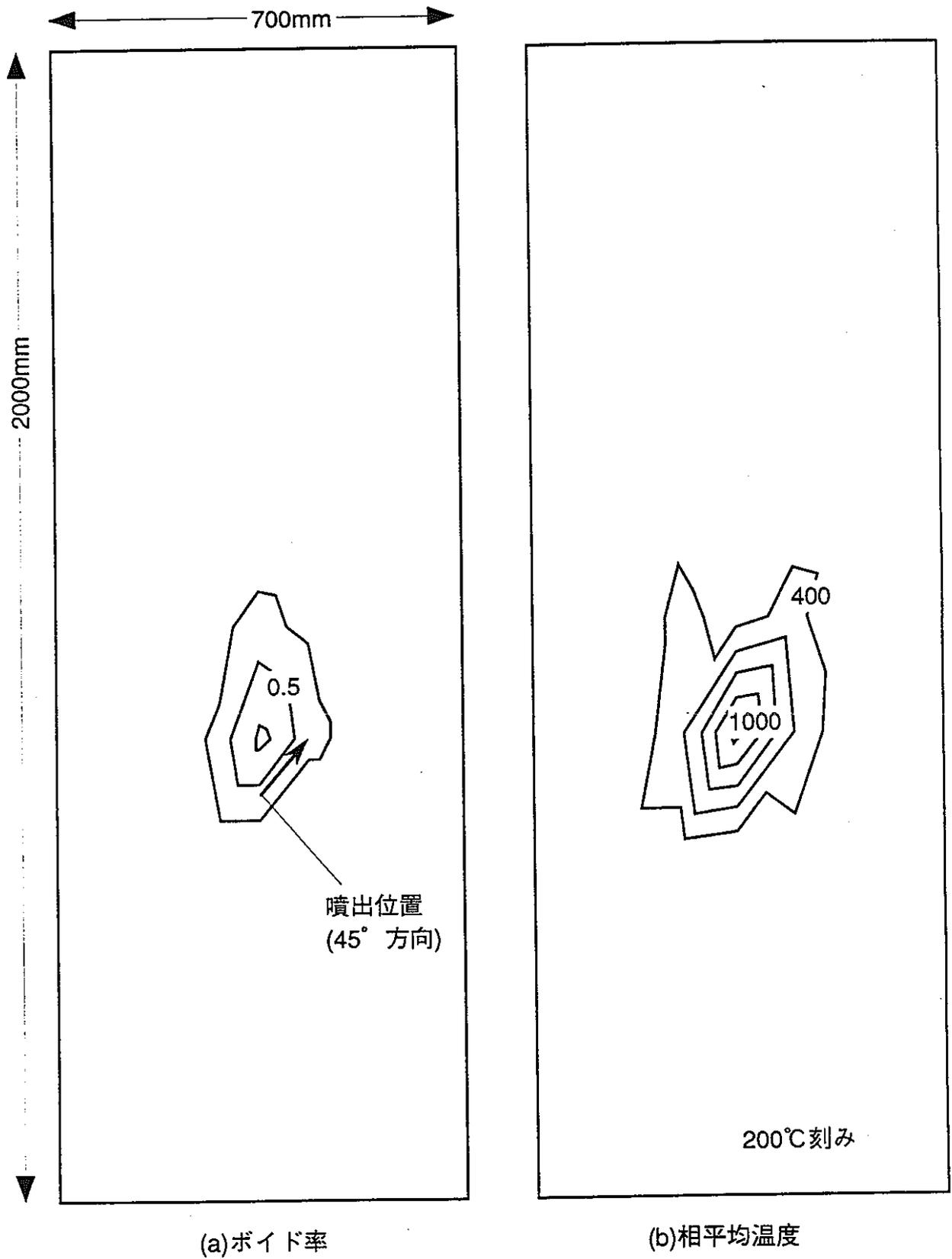


図6.4-3 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件3  
(ボイド率／相平均温度：0.5秒後)

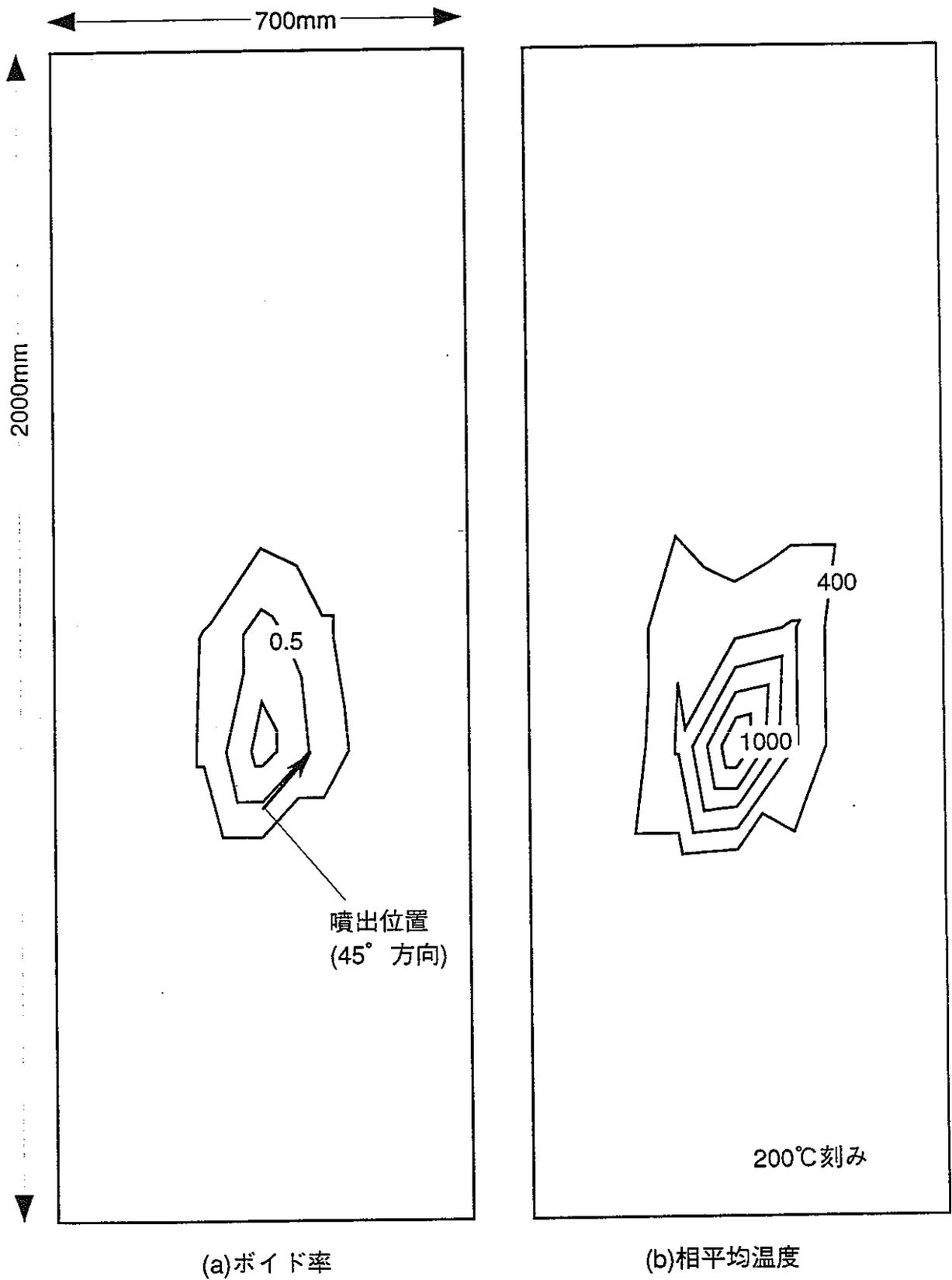


図6.4-4 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件4  
(ボイド率/相平均温度：0.5秒後)

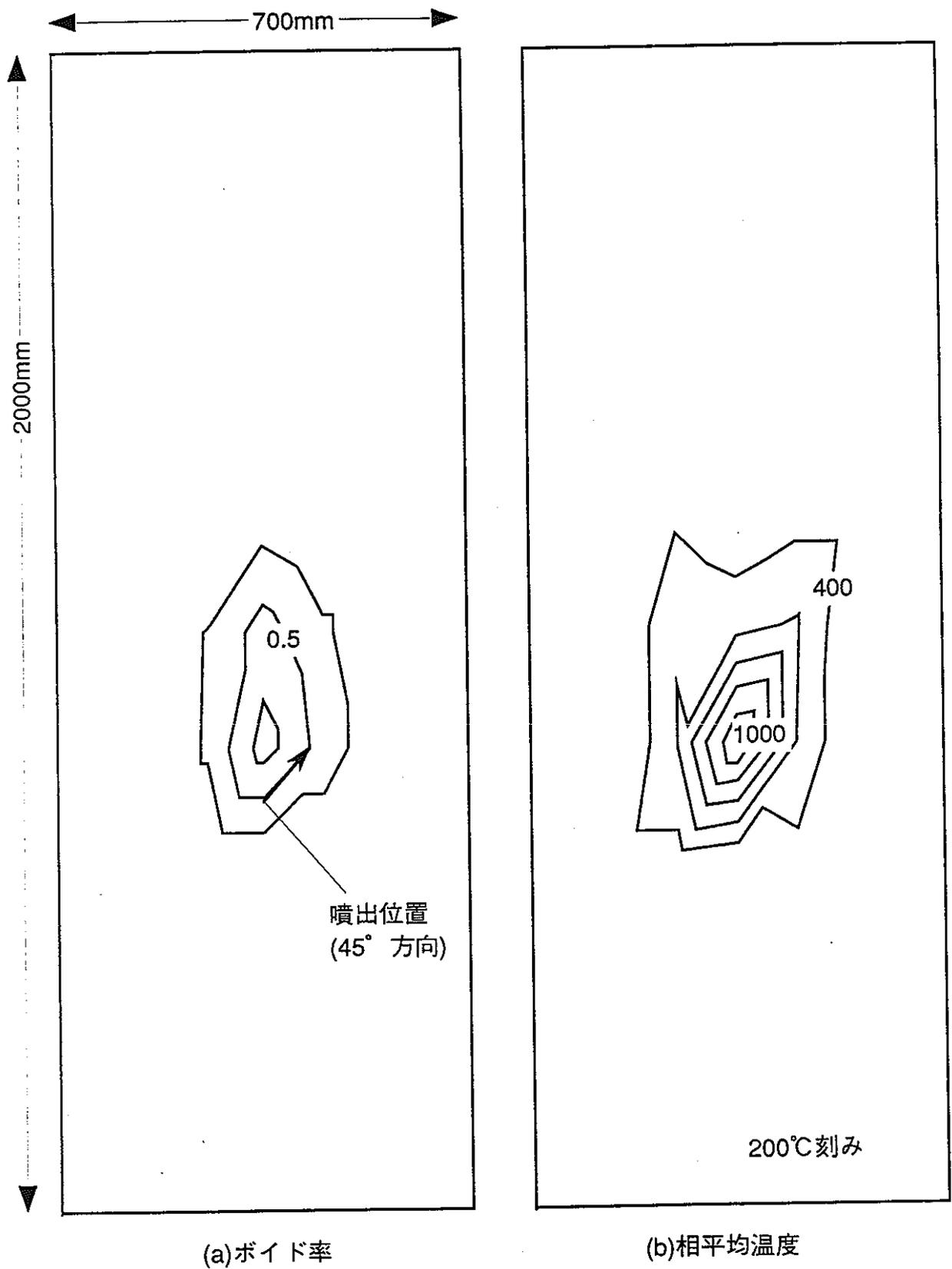


図6.4-5 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 5  
(ボイド率/相平均温度：0.5秒後)

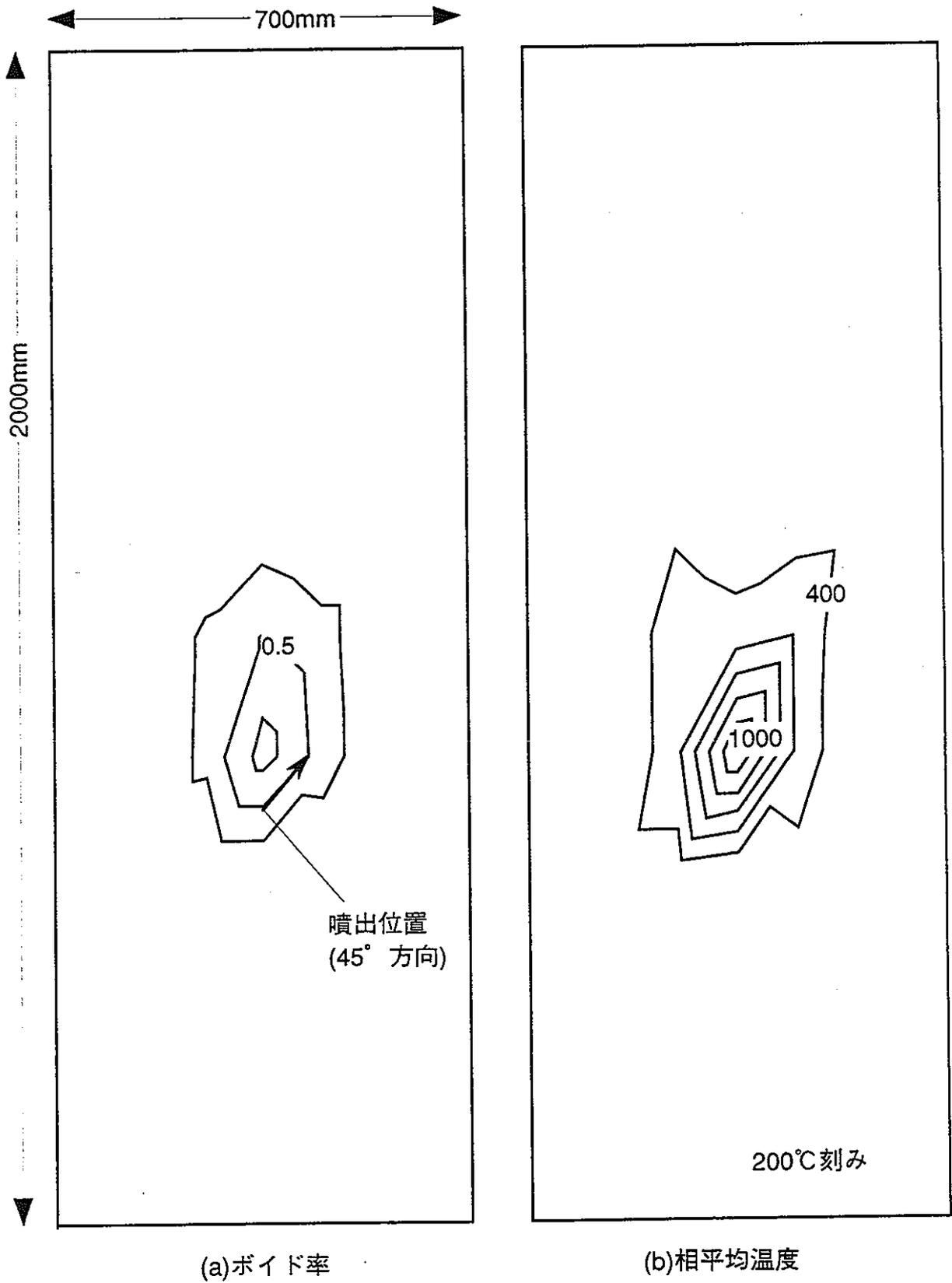


図6.4-6 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 6  
(ボイド率／相平均温度：0.5秒後)

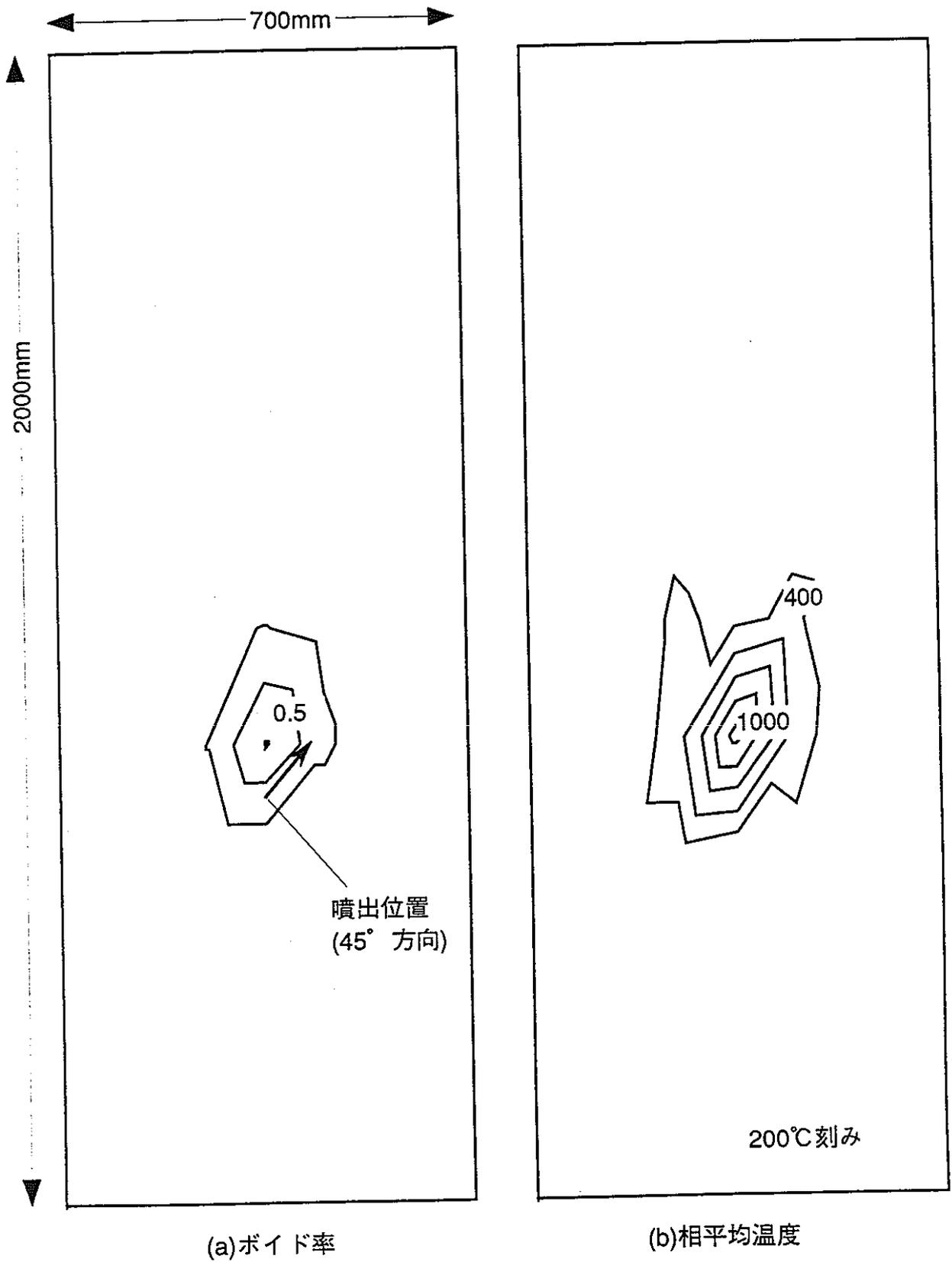


図6.4-7 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件7  
(ボイド率/相平均温度：0.5秒後)

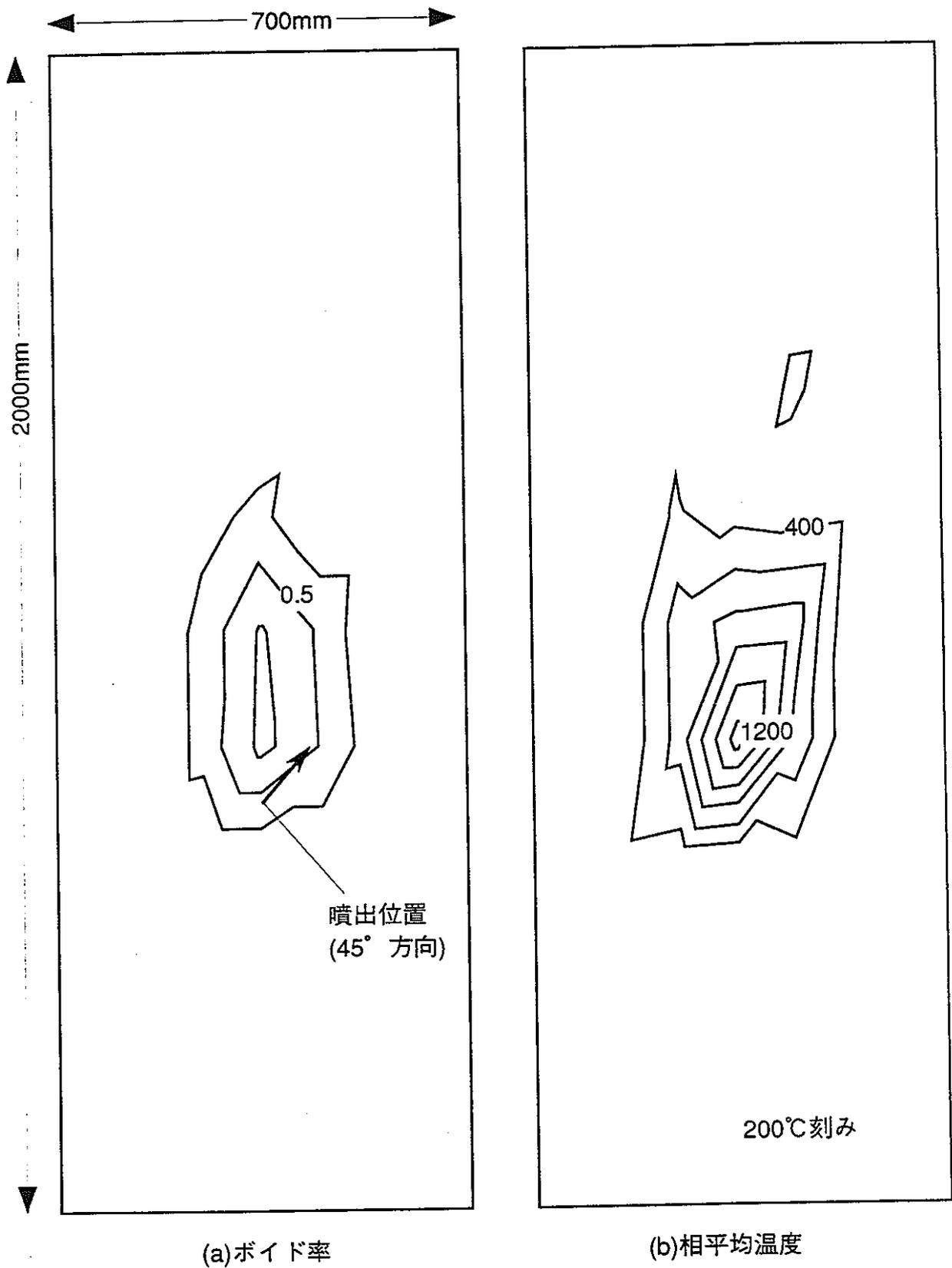


図6.4-8 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 1  
(ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

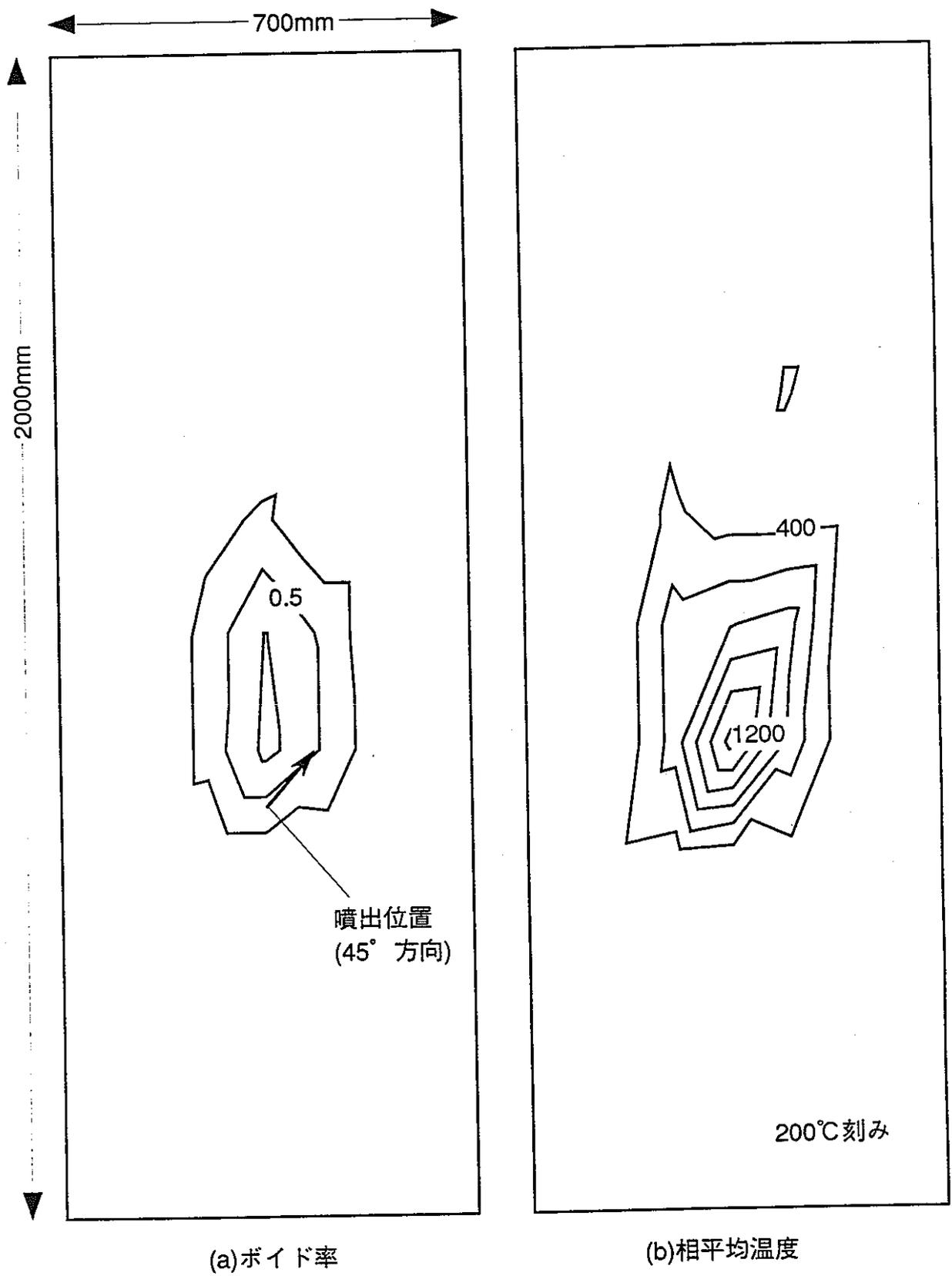


図6.4-9 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件2  
(ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

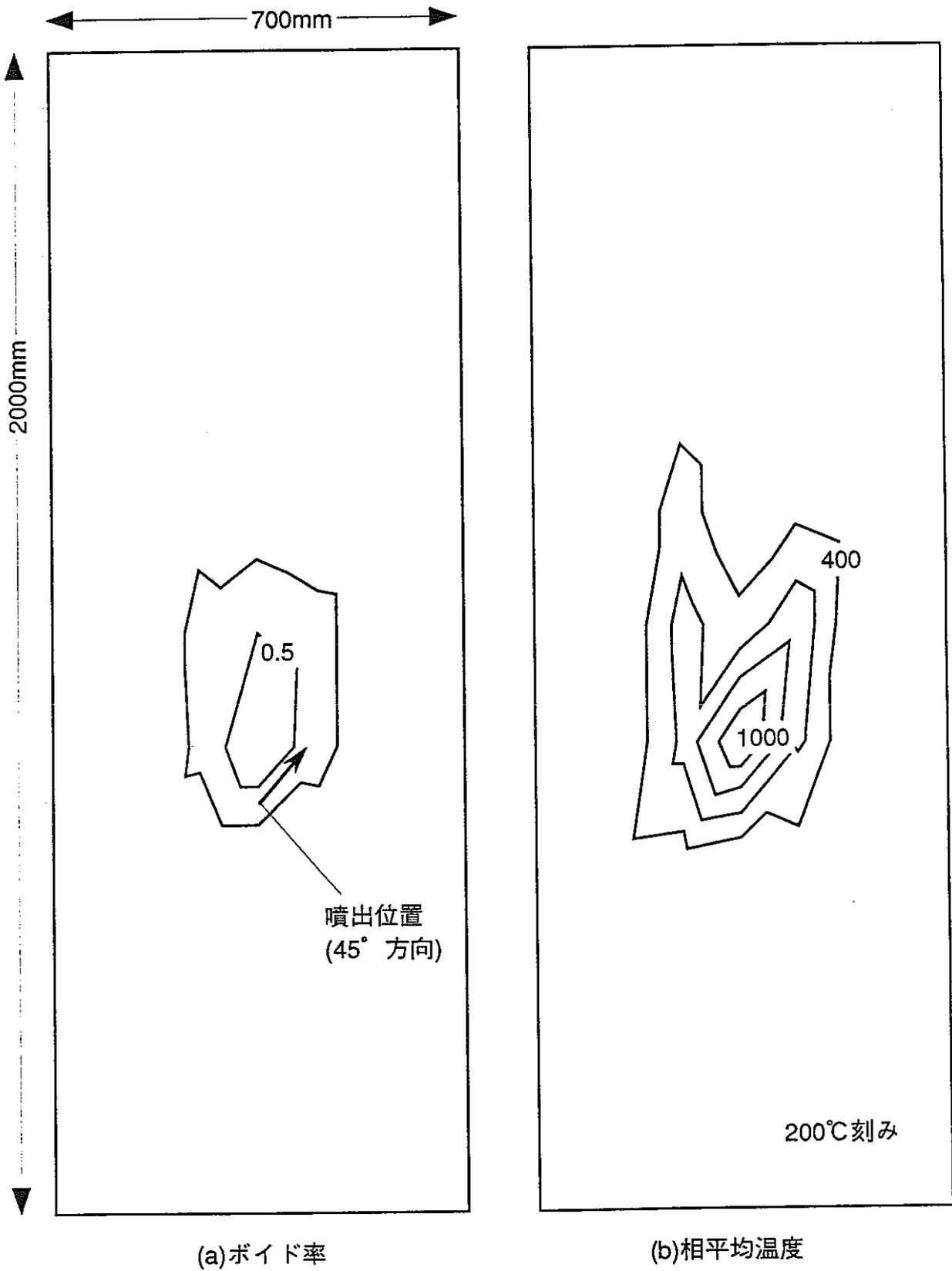


図6.4-10 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 3  
 (ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

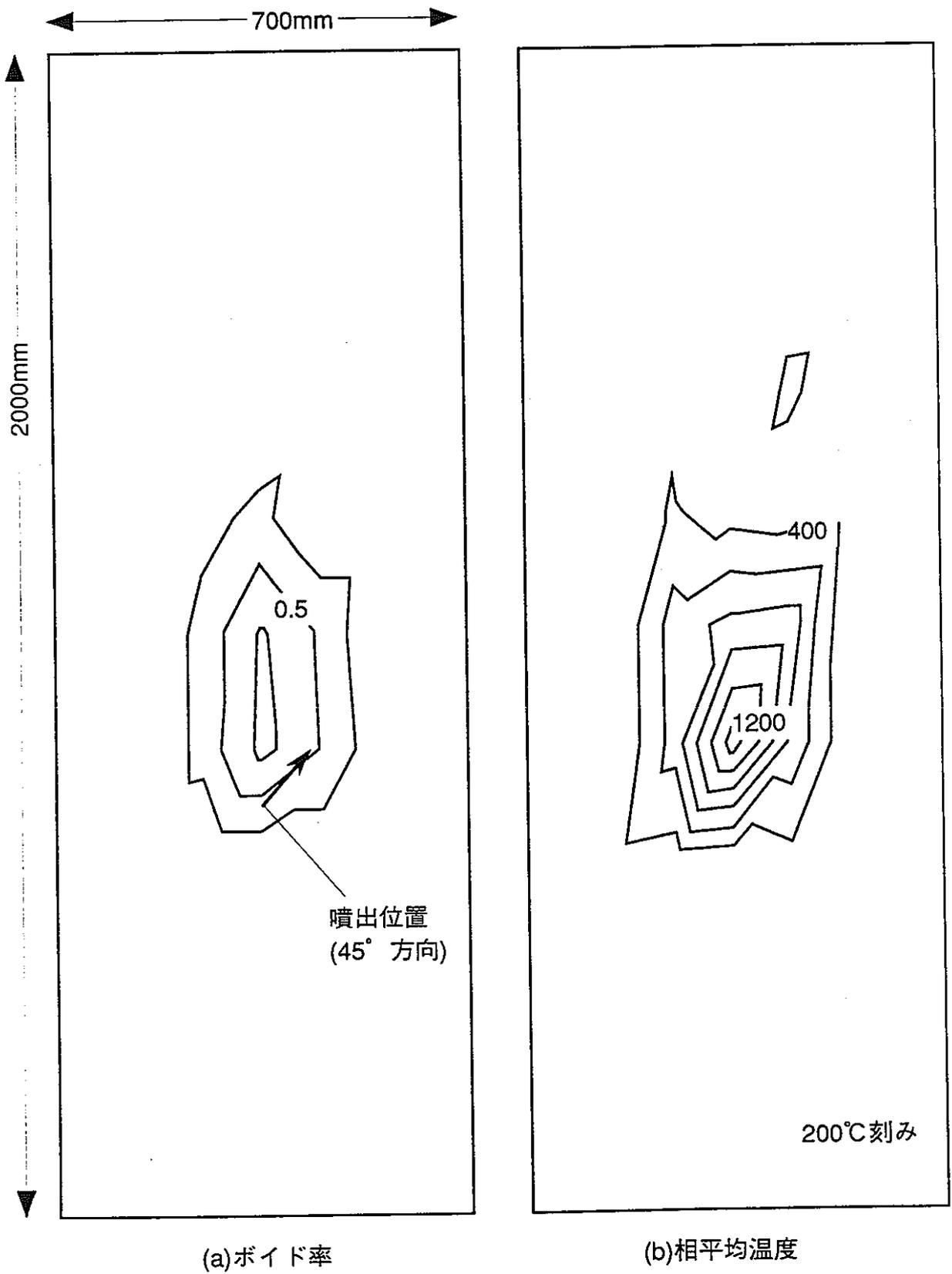


図6.4-11 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件4  
(ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

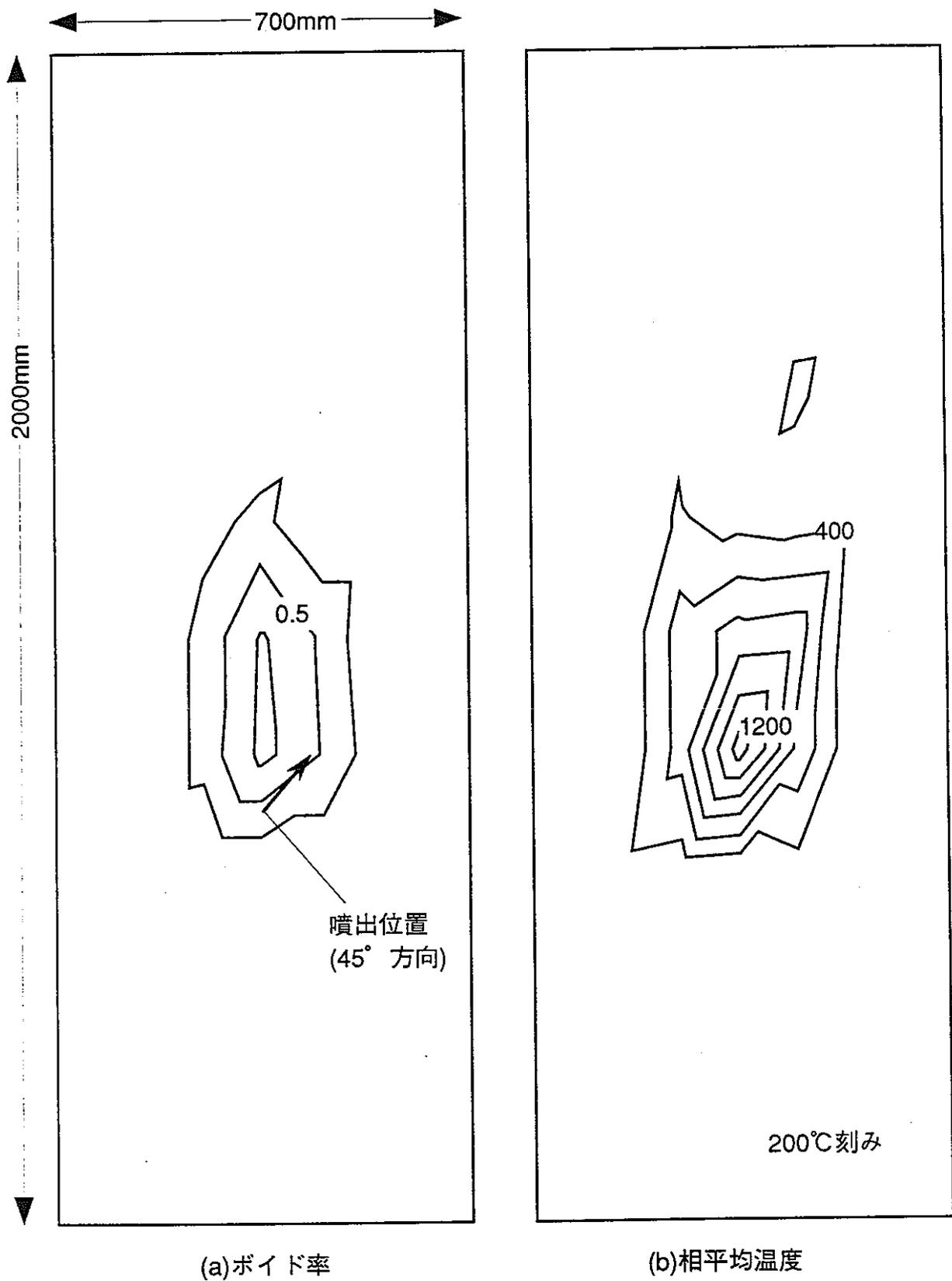


図6.4-12 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件5  
(ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

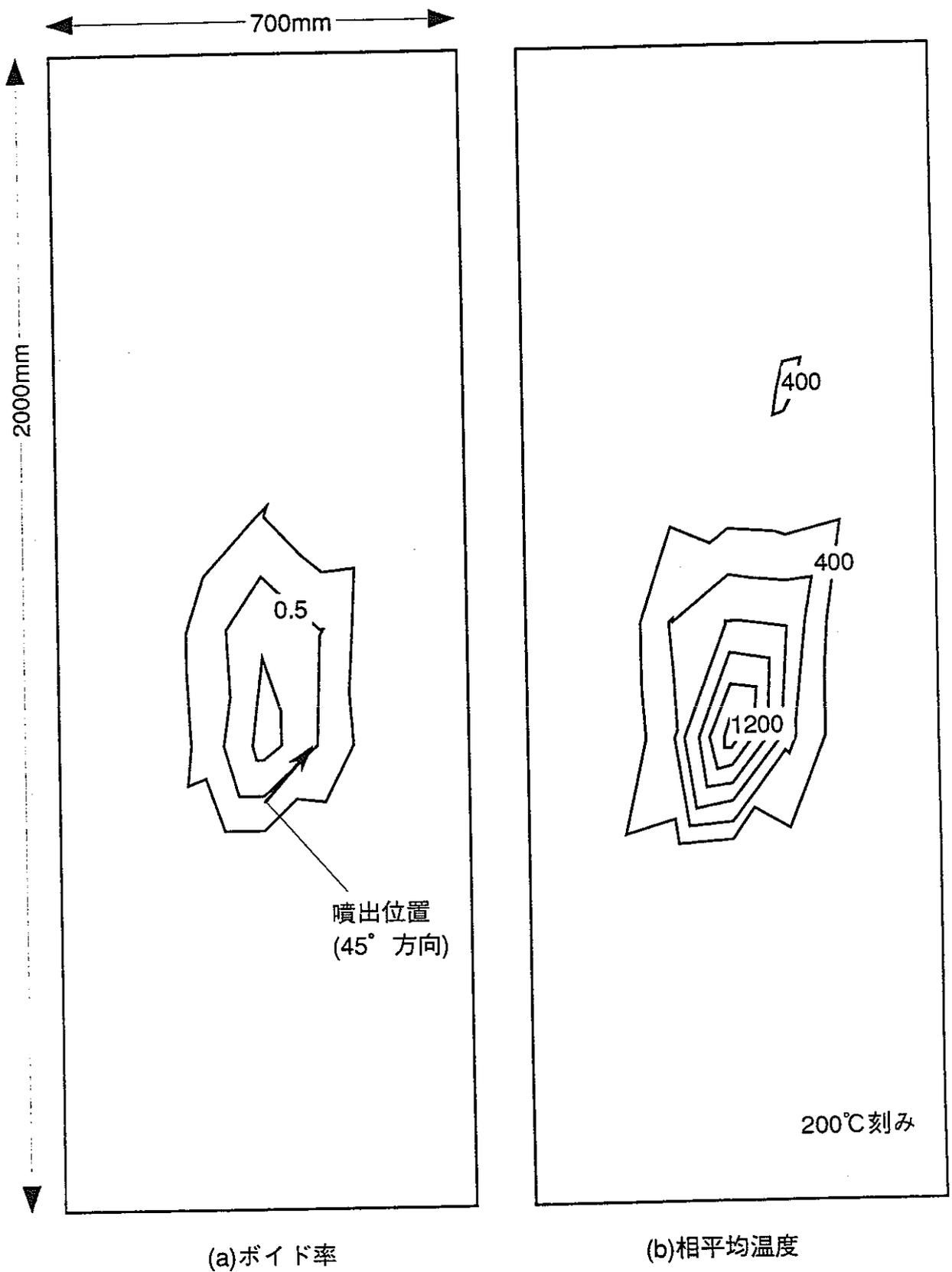


図6.4-13 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 6  
(ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

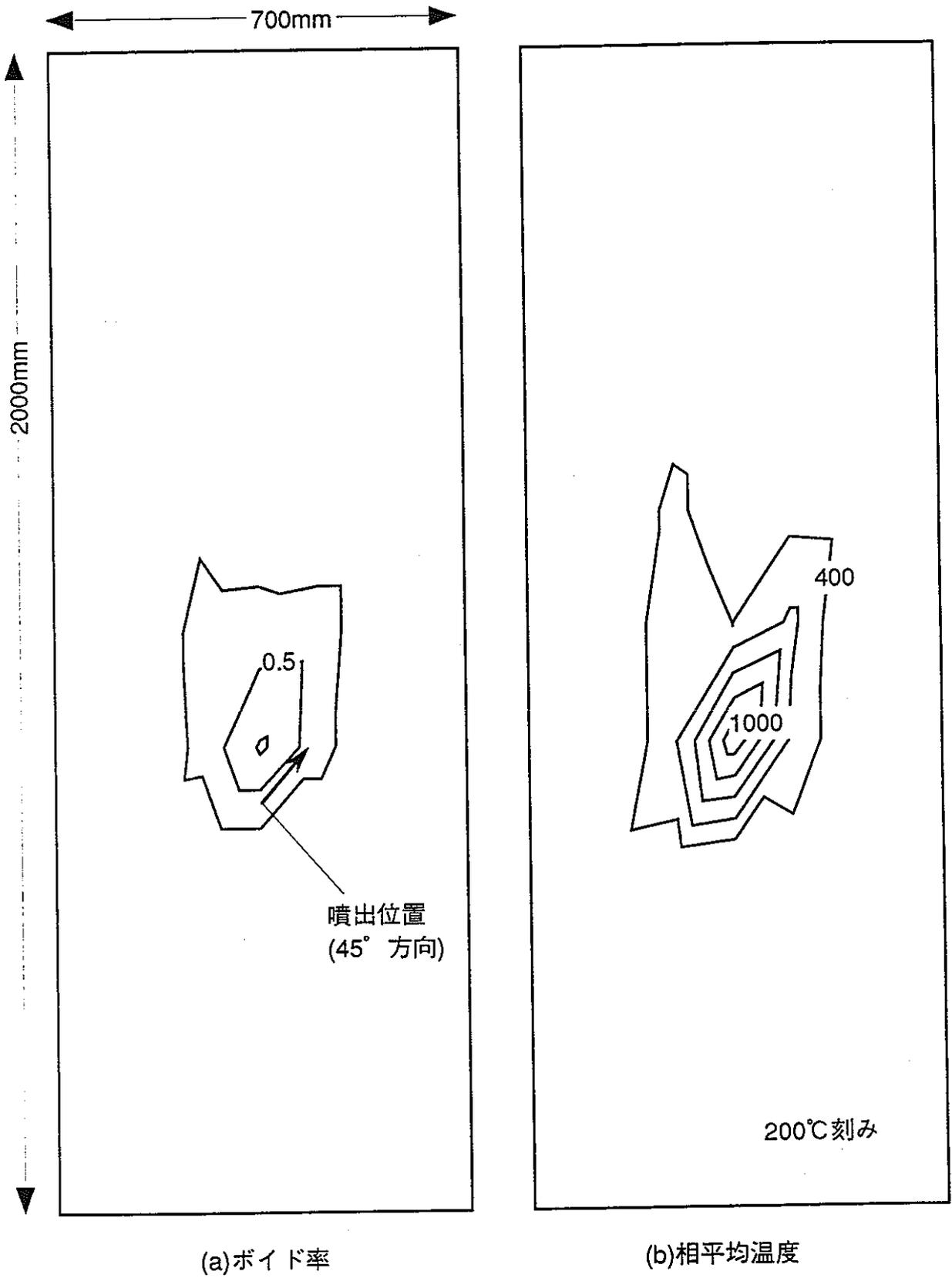


図6.4-14 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件7  
(ボイド率/相平均温度：1.0秒後)

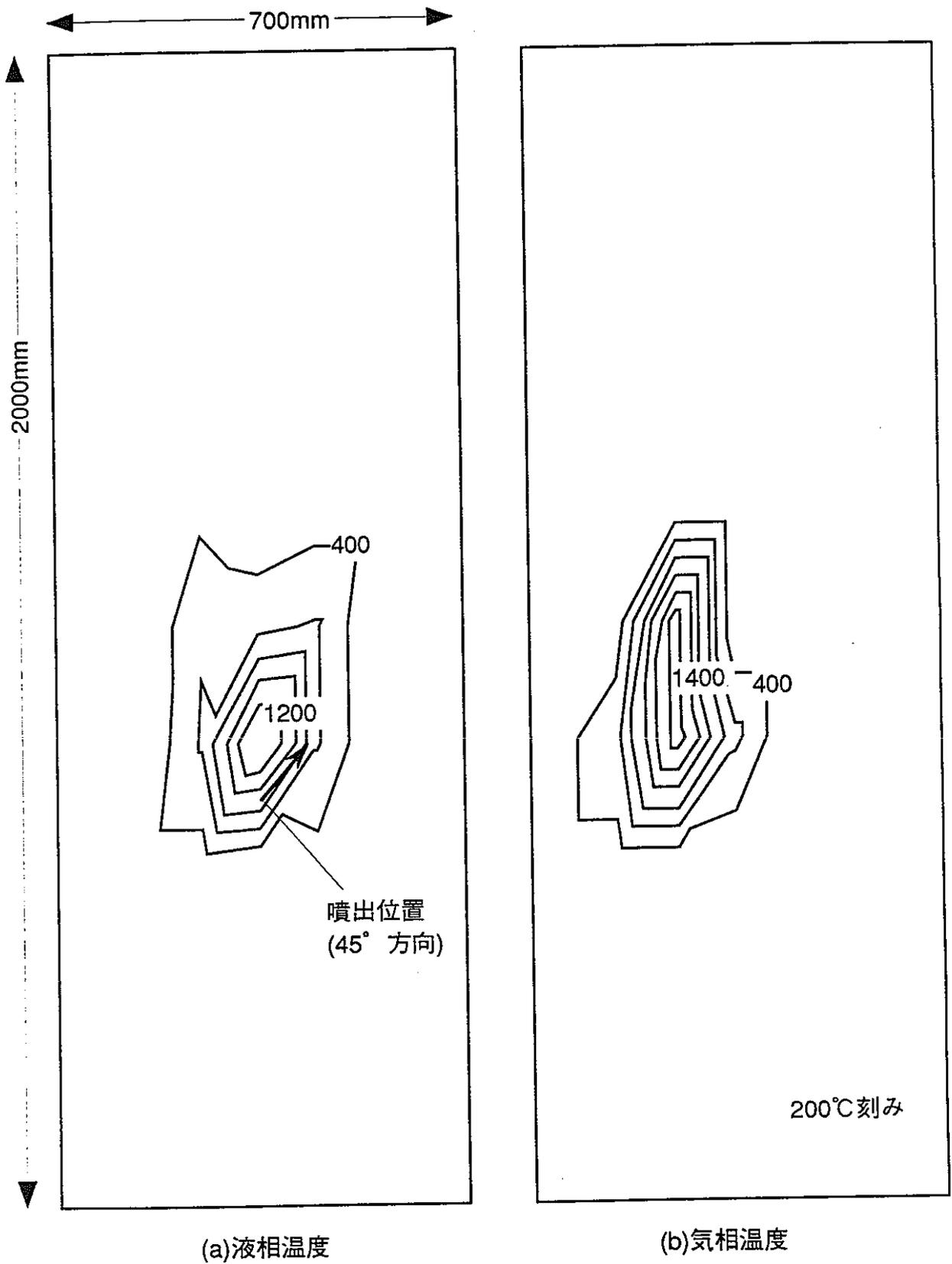


図6.4-15 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件1  
(気液相温度：0.5秒後)

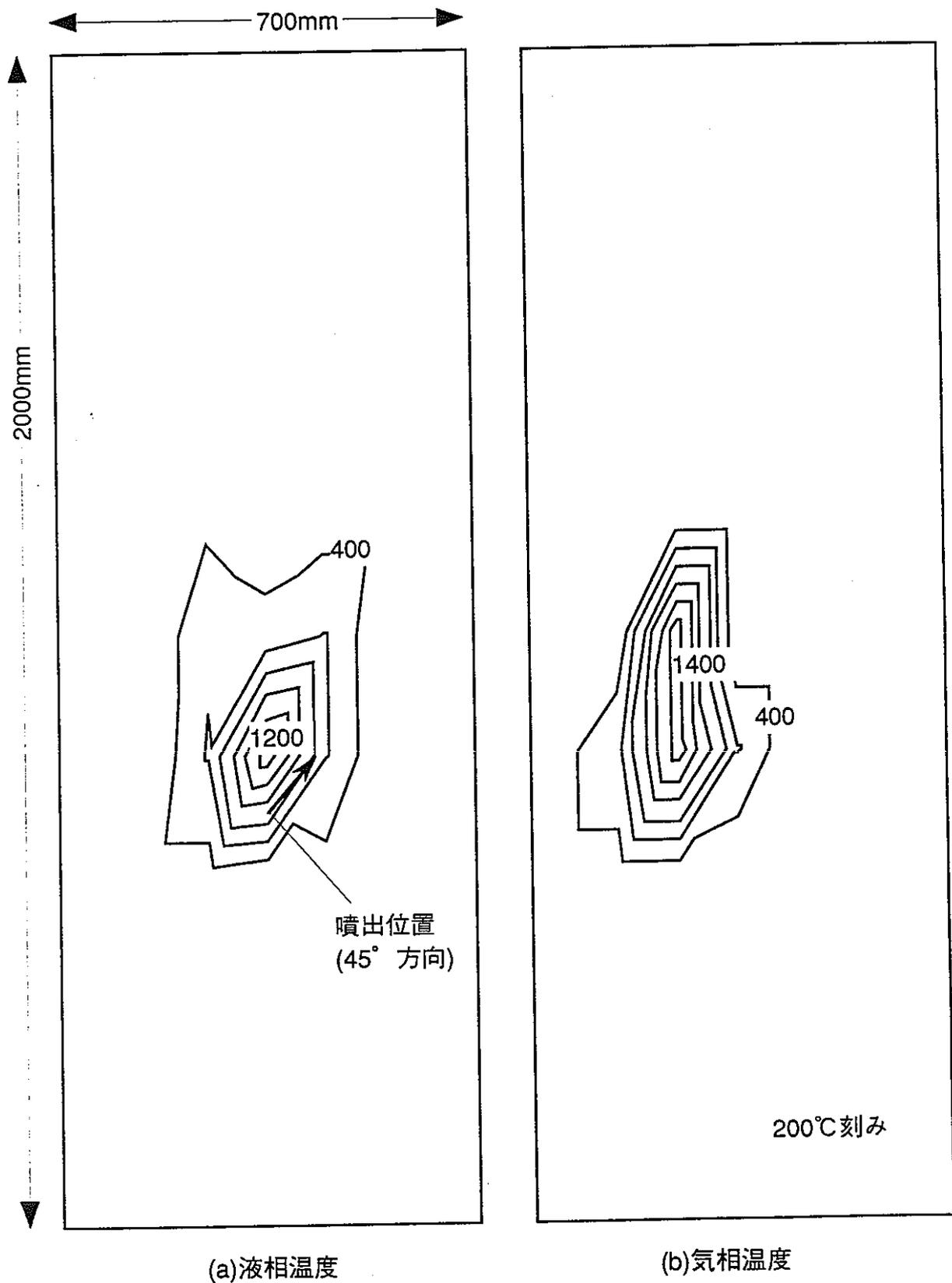


図6.4-16 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件2  
(気液相温度：0.5秒後)

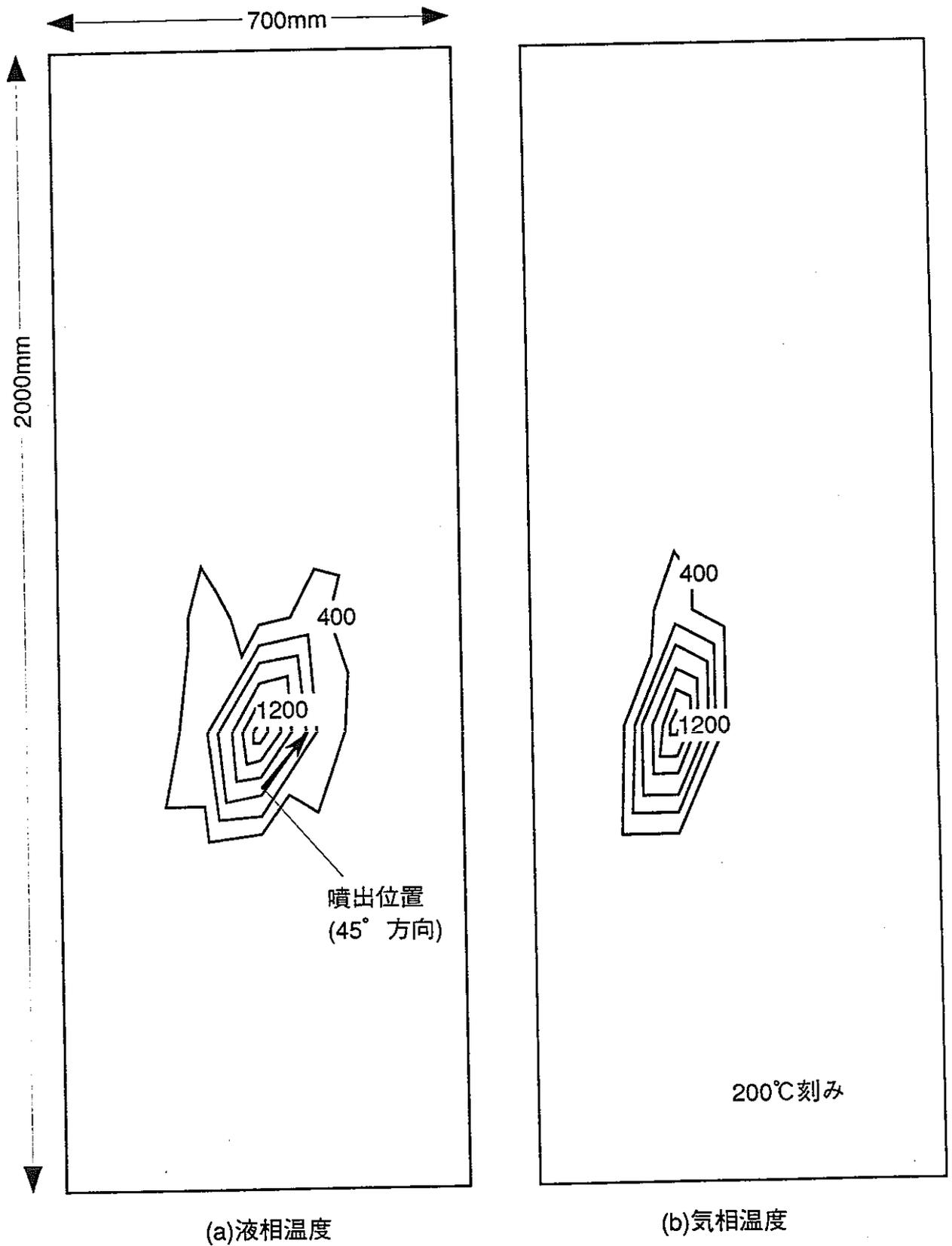


図6.4-17 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 3  
(気液相温度：0.5秒後)

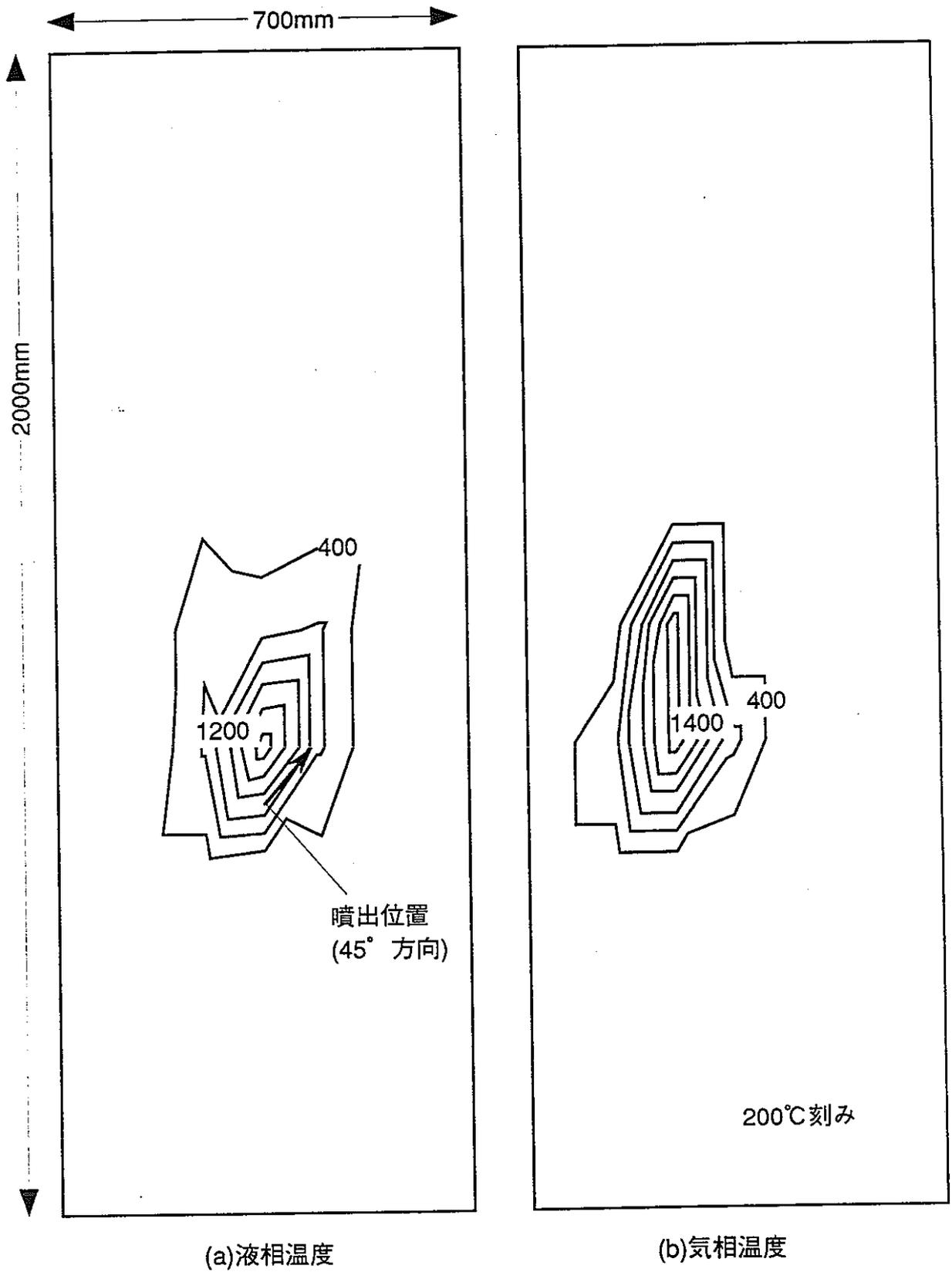


図6.4-18 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 4  
(気液相温度：0.5秒後)

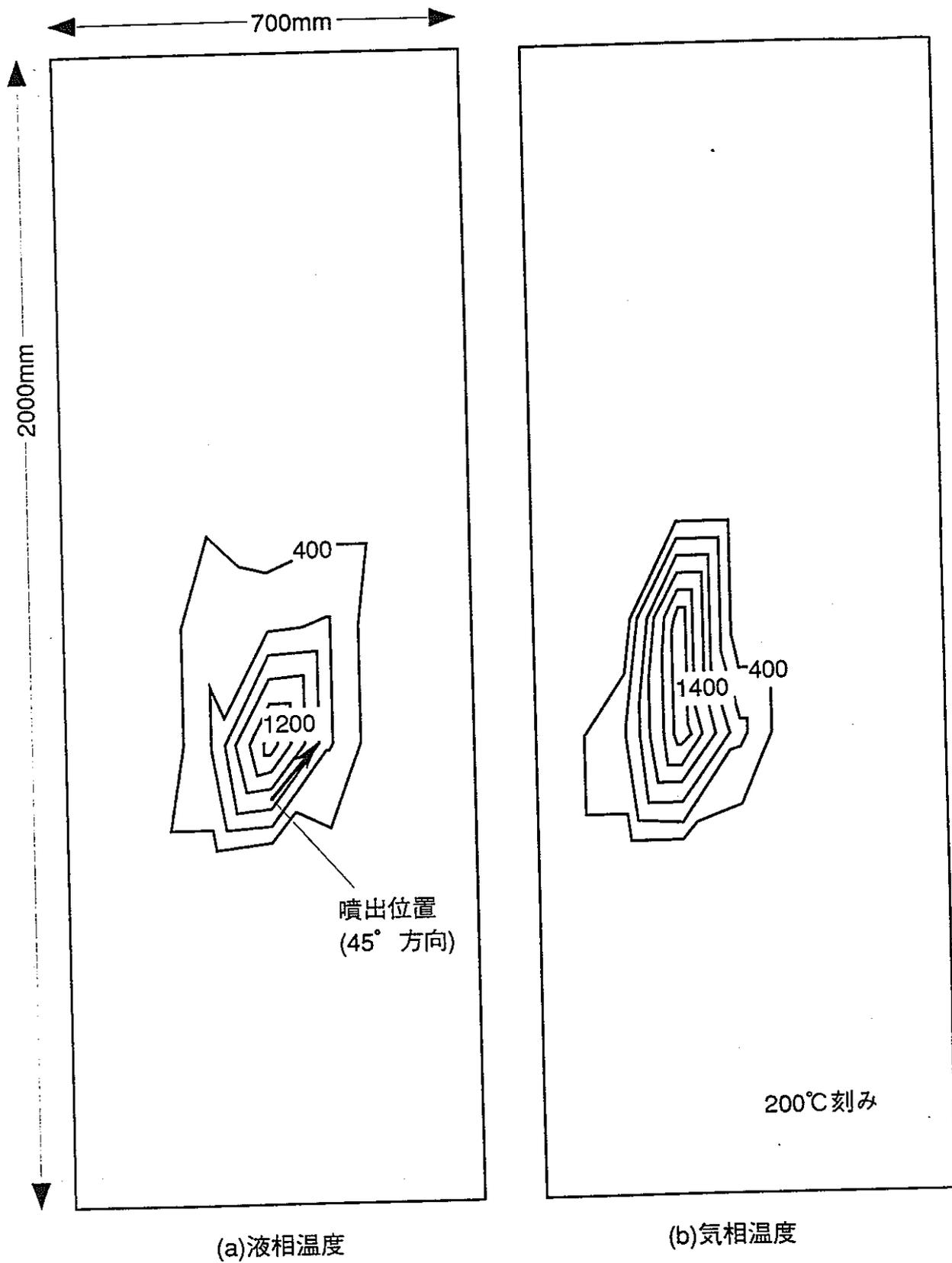


図6.4-19 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件5  
(気液相温度：0.5秒後)

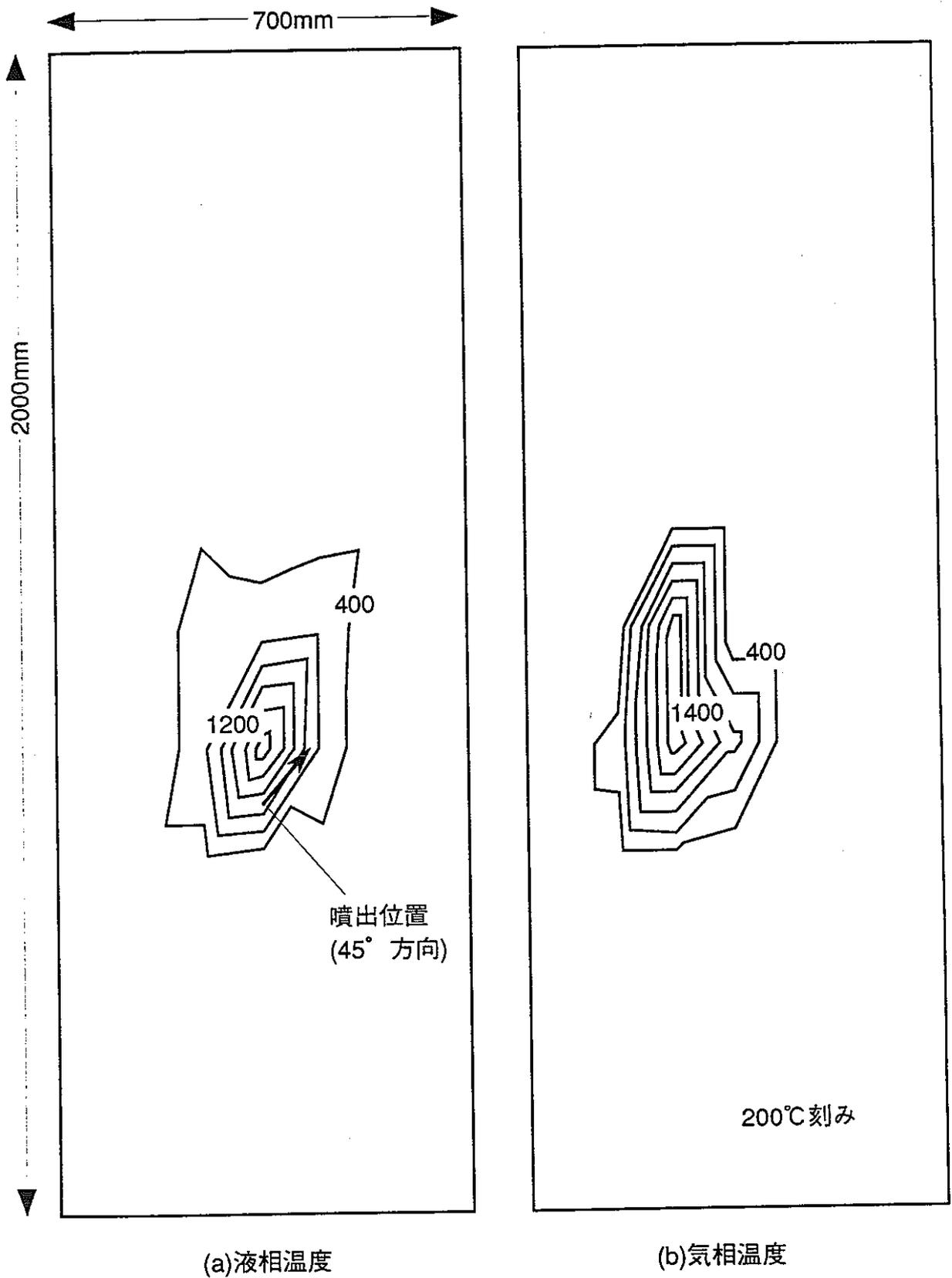


図6.4-20 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 6  
(気液相温度：0.5秒後)

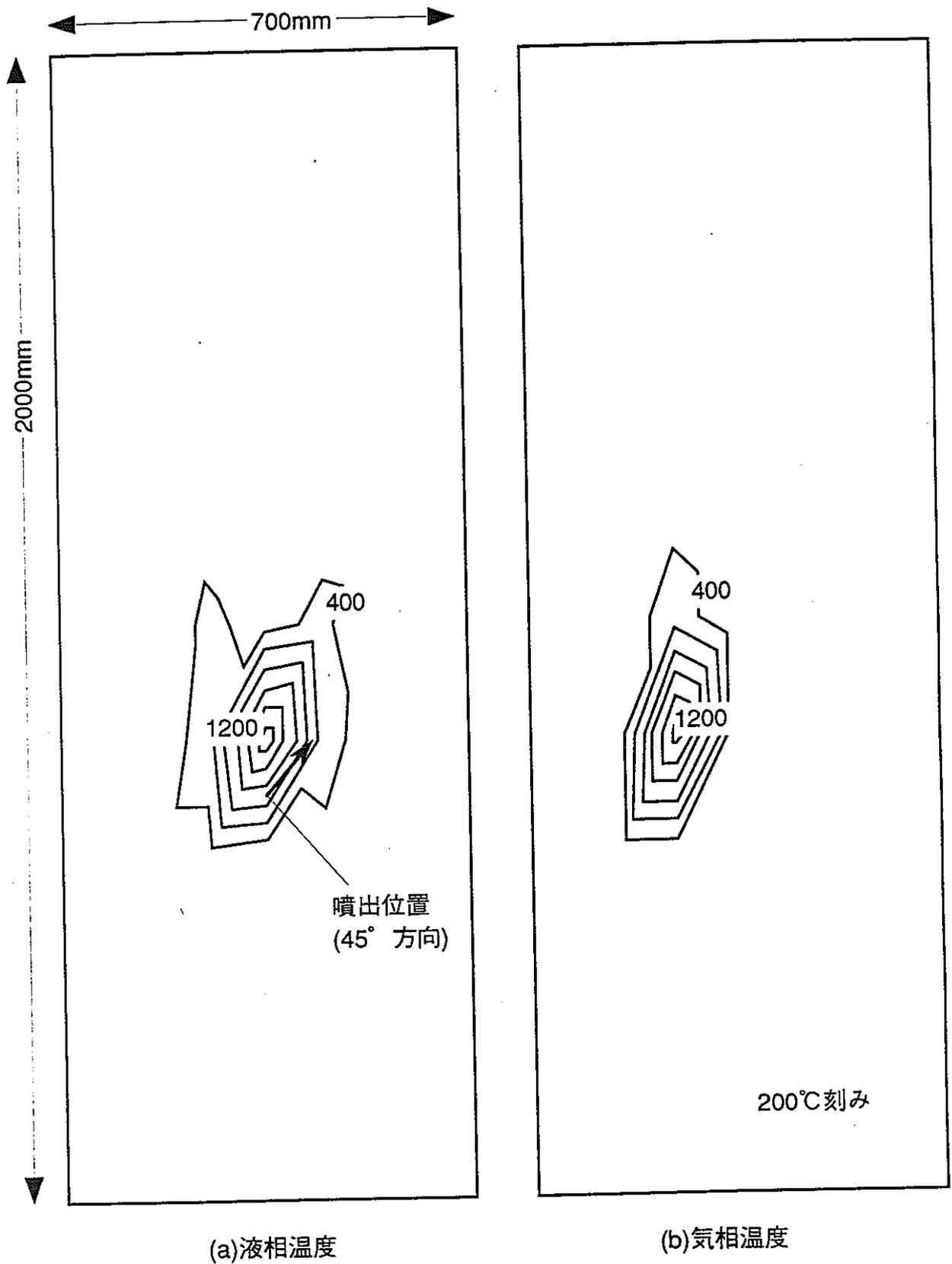


図6.4-21 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件7  
(気液相温度：0.5秒後)

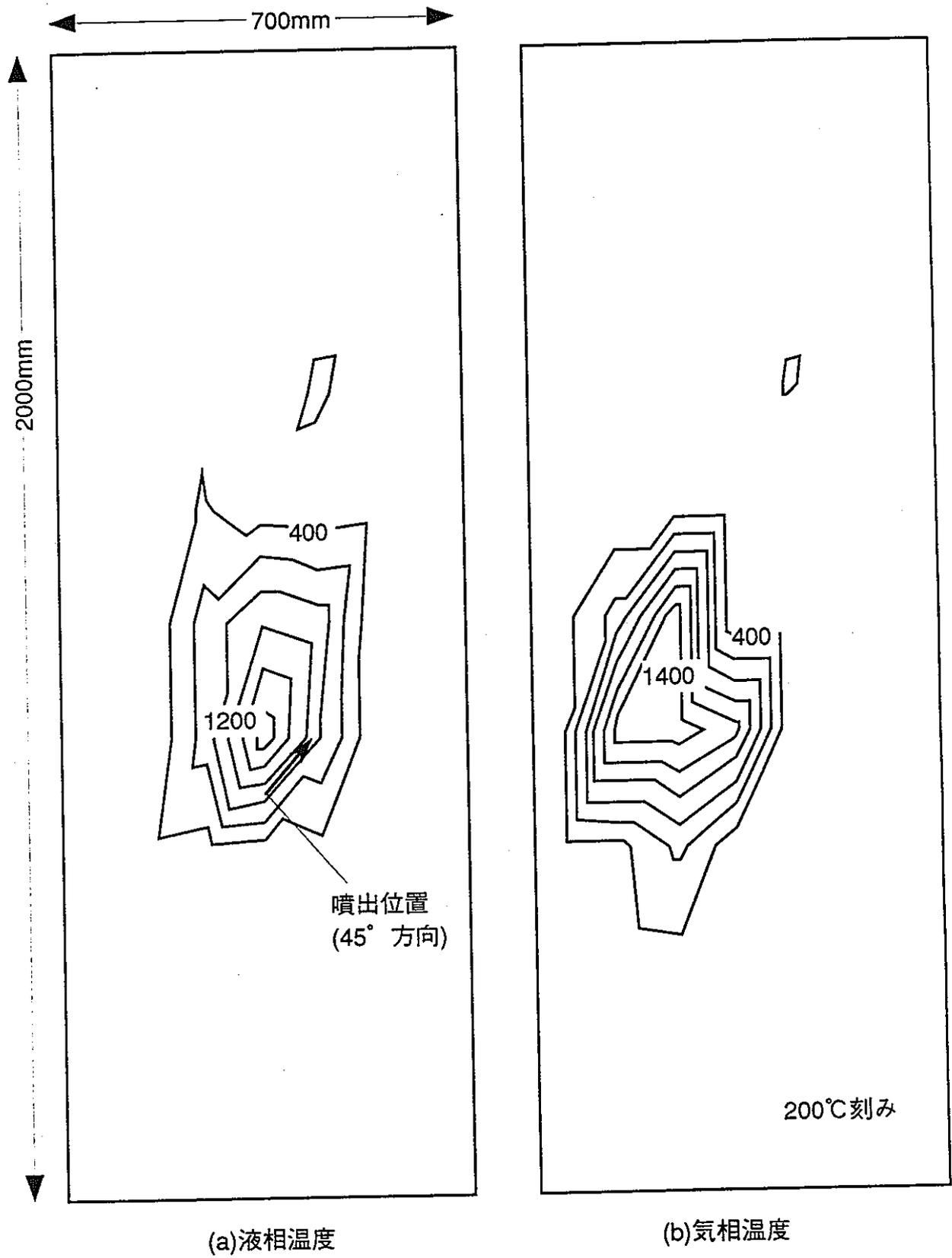


図6.4-22 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件1  
(気液相温度：1.0秒後)

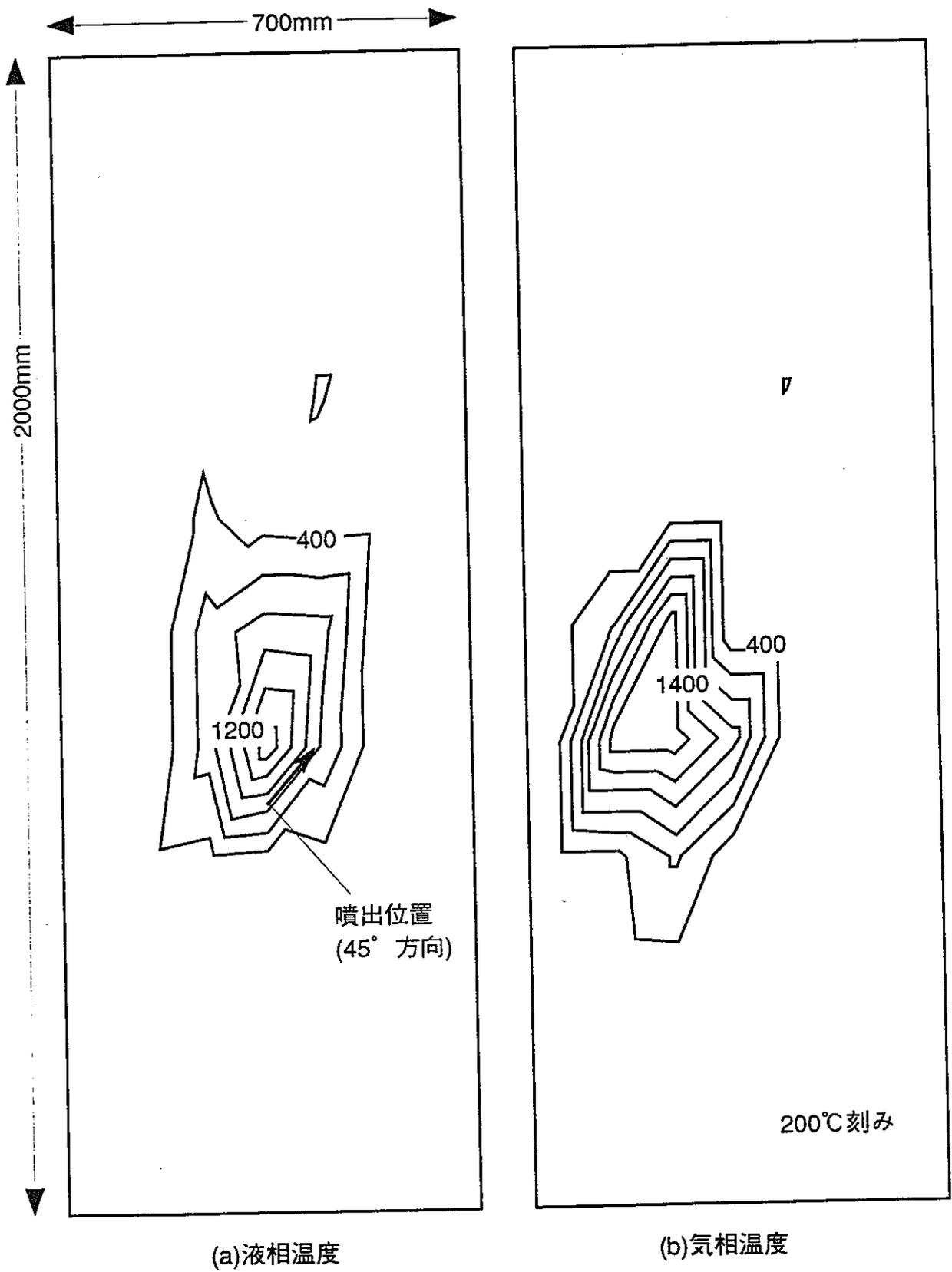


図6.4-23 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 2  
(気液相温度：1.0秒後)

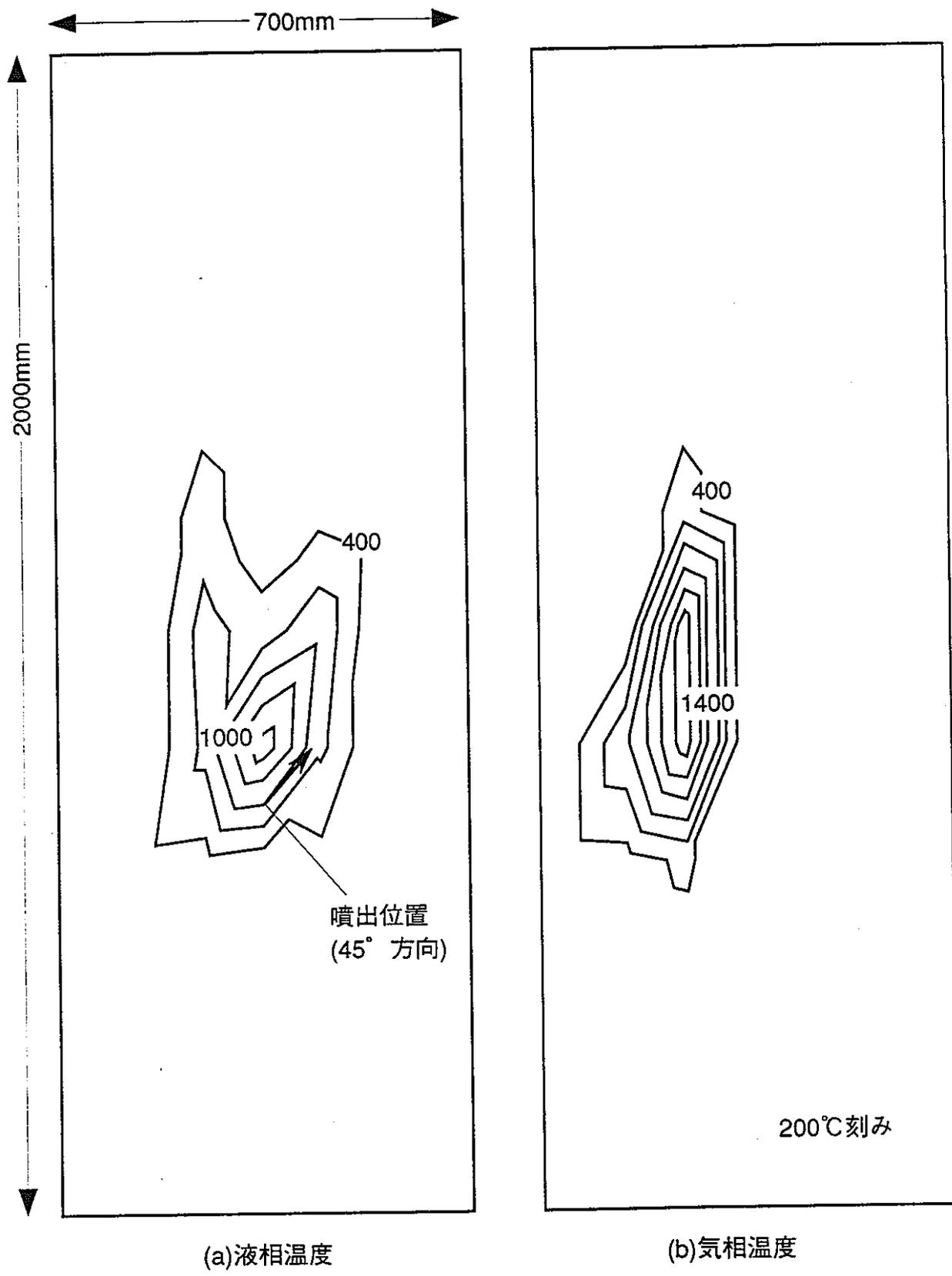


図6.4-24 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 3  
(気液相温度：1.0秒後)

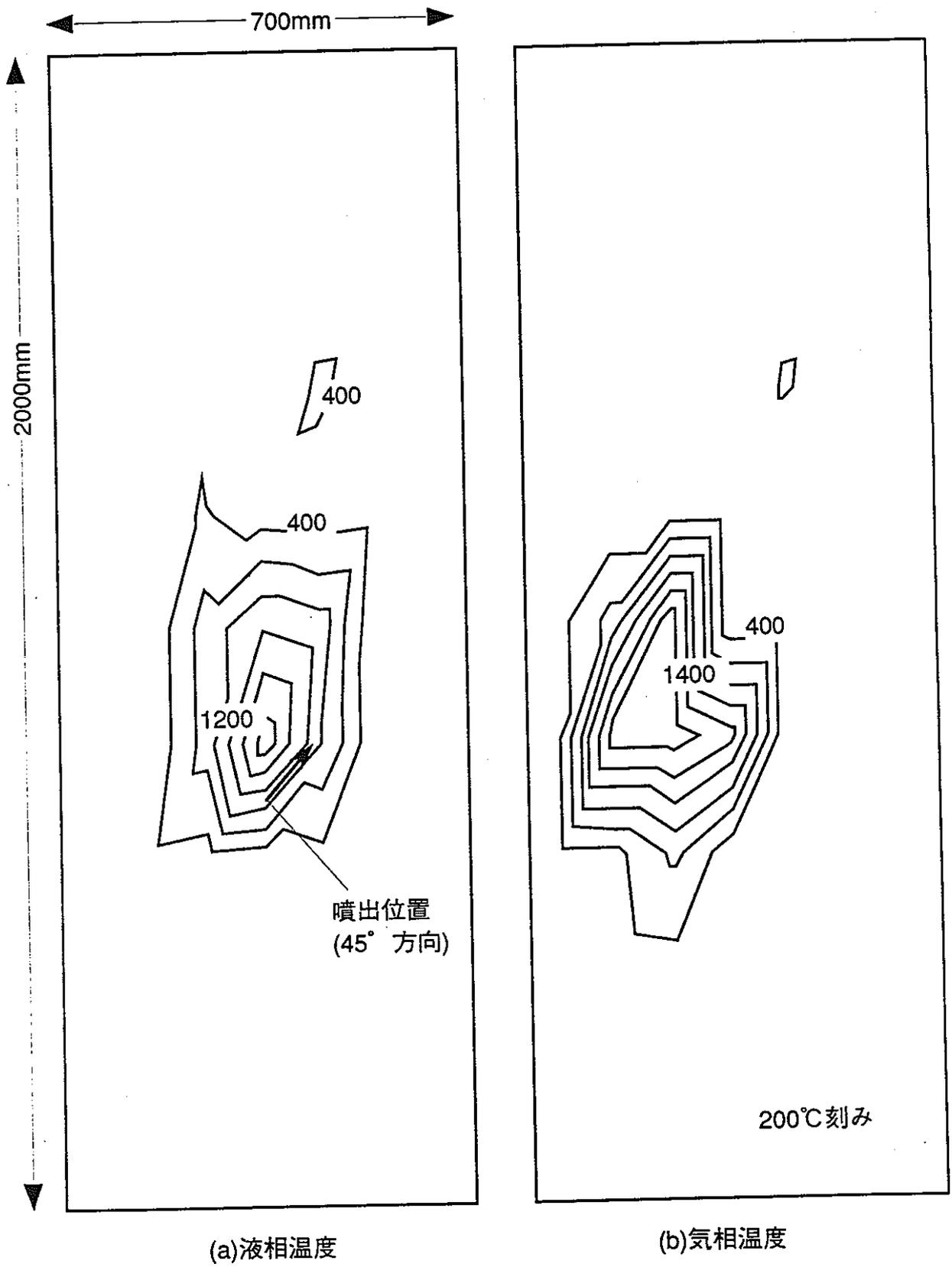


図6.4-25 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件4  
(気液相温度：1.0秒後)

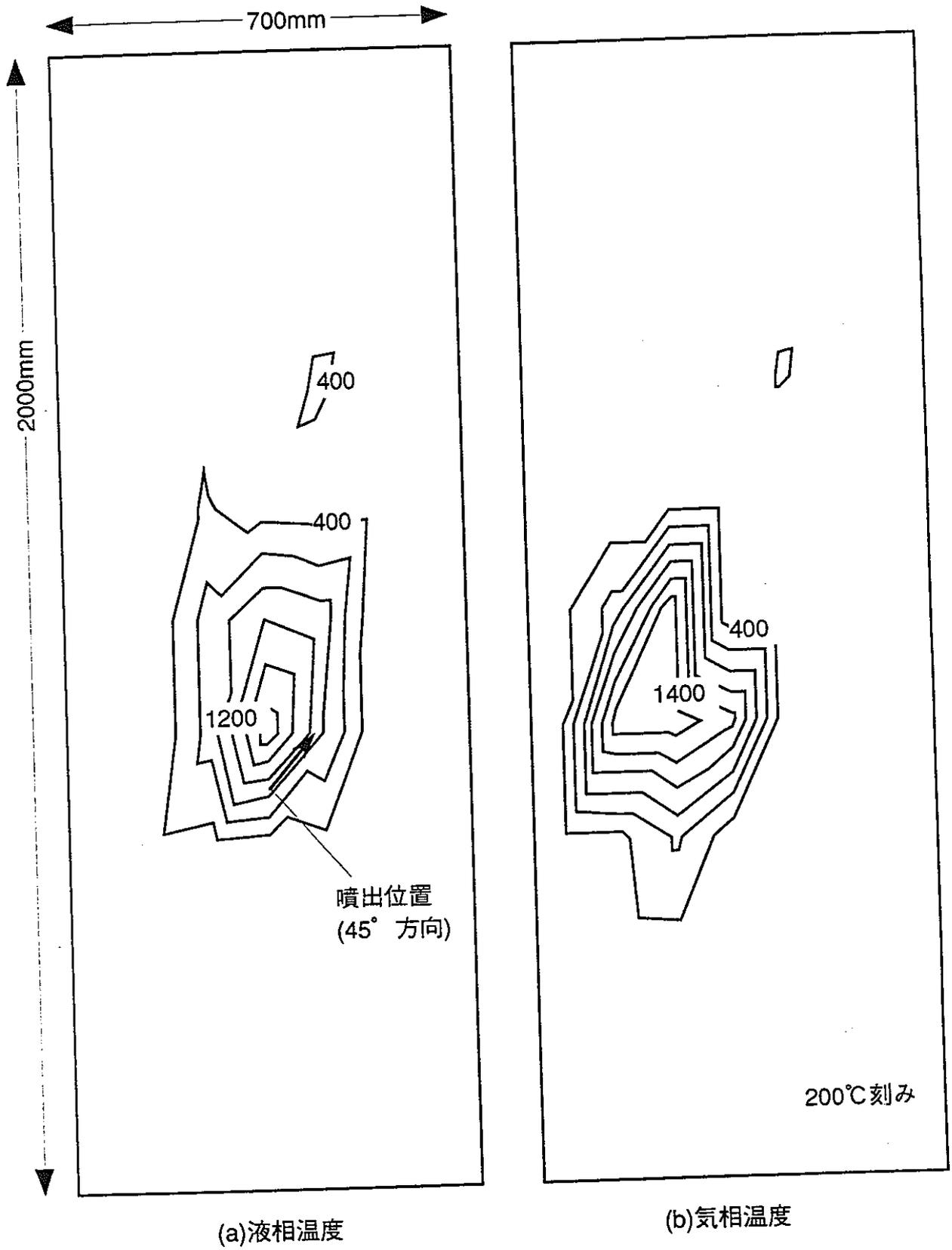


図6.4-26 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件 5  
(気液相温度：1.0秒後)

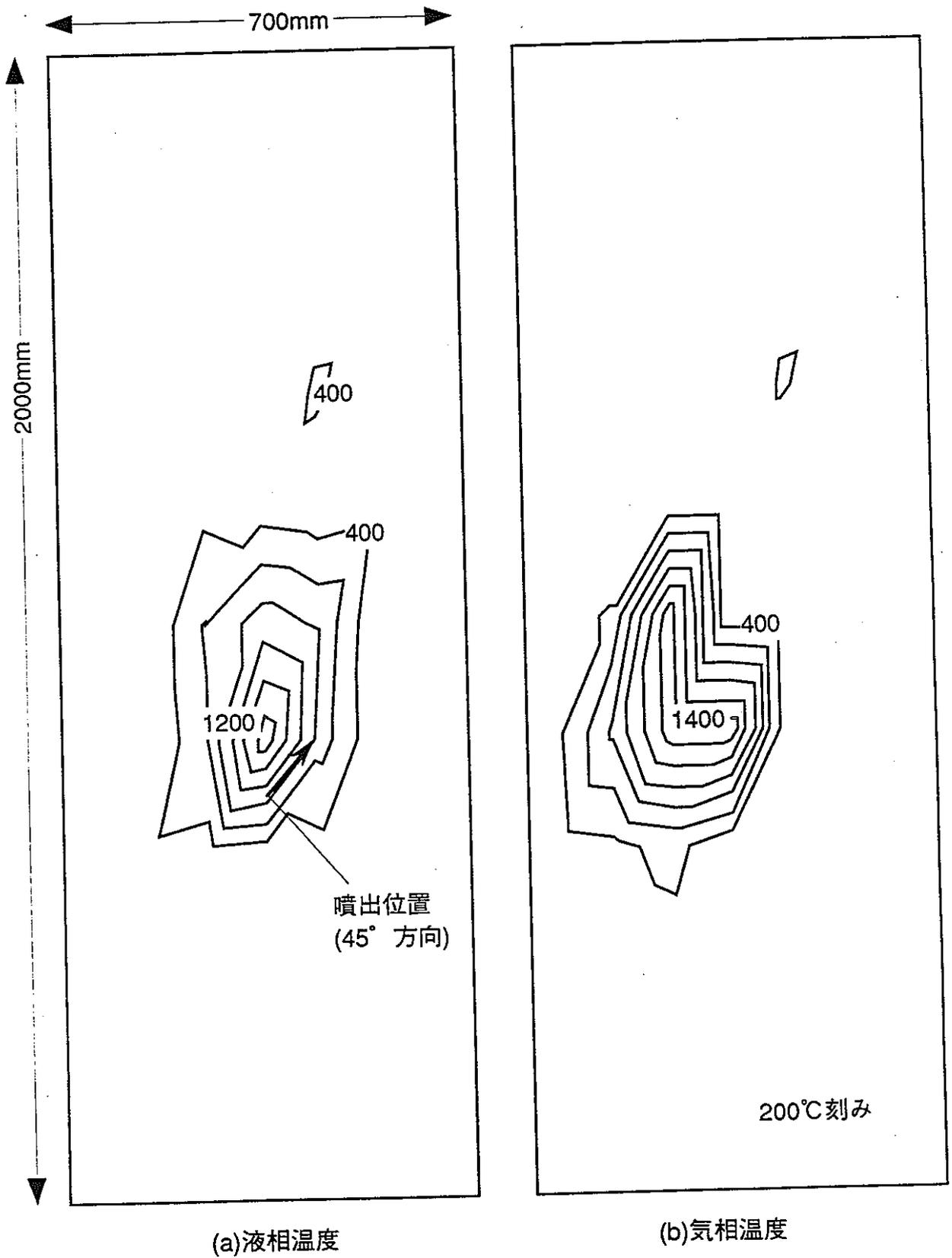


図6.4-27 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件6  
(気液相温度：1.0秒後)

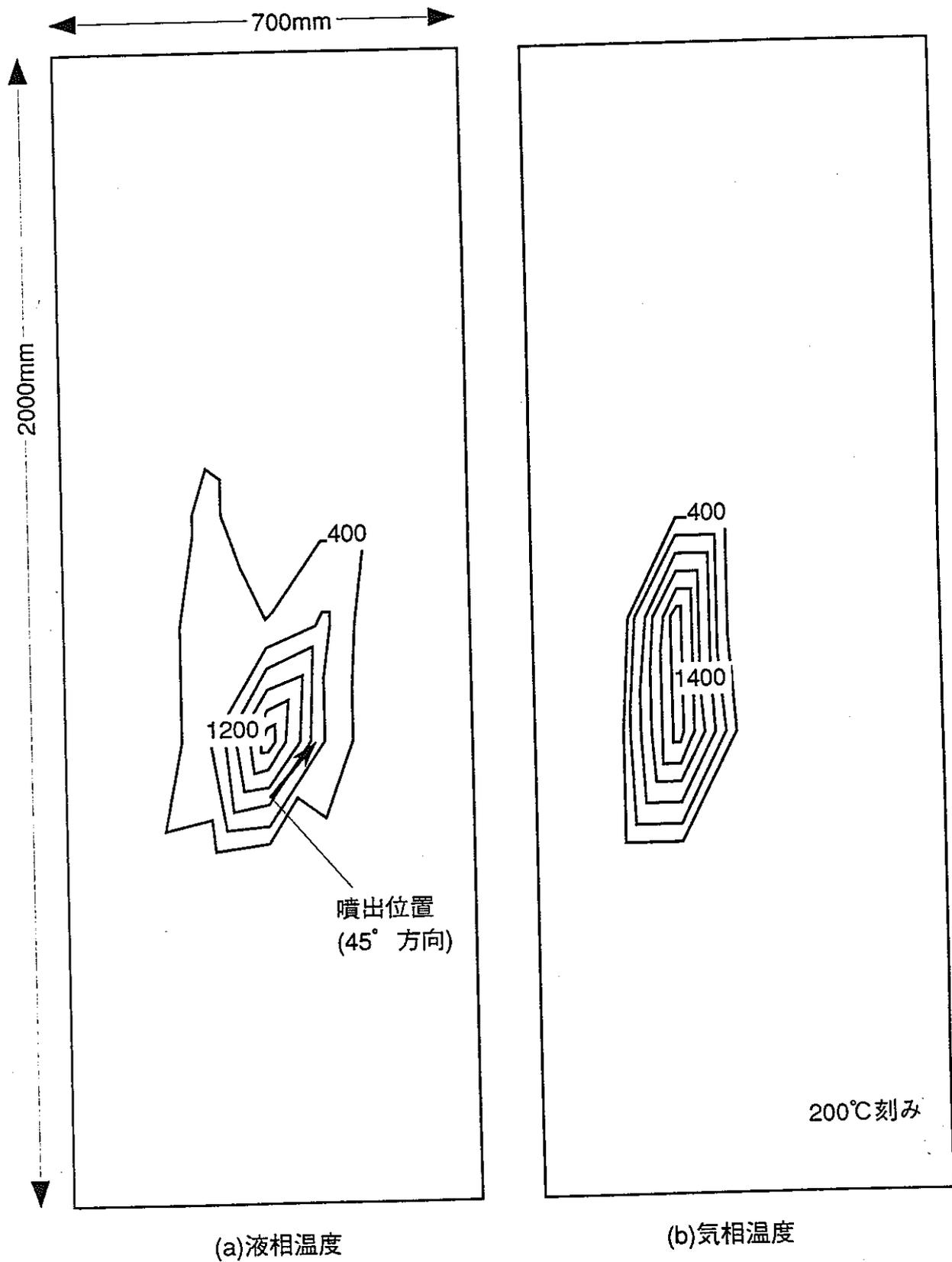


図6.4-28 実機体系での試計算結果：化学反応モデル簡略化条件7  
(気液相温度：1.0秒後)

## 6.5 まとめ

本解析では、計算コードの改良前後について、実機体系での試計算を実施し、改良前のLEAP-JET( Ver. 1.10 )と改良後のLEAP-JET( Ver. 1.20 )の両方のコードにおける、計算速度(計算負荷)の改善の程度や計算結果(精度)への影響について、解析結果を比較評価した。

試計算条件は、「もんじゅ」蒸発器体系のケース1(100%出力条件、通常運転時のSG圧力、Na流動無し)の条件を採用した。改良後のコードにおける解析結果により、ボイド率や温度分布等の反応ジェット現象の定性的傾向についての妥当性が確認された。

また、計算コードの高速化対策に関する(1)時間積分方法の改良、(2)化学反応モデル(物性値計算)の簡略化の2項目について、各オプションと設定パラメータに対する所要計算時間(CPU時間)の差異、および反応ジェット挙動や温度分布等の解析結果における影響として、次のことが確認された。

### (1) 時間積分方法の改良

(a)従来のEuler陽解法を選択した場合と、(b)SIMPLE法による陰解法を選択した場合の2つのオプションと、(b)のタイムステップの大きさに対して、解析結果を比較した。

(a)よりも(b)の方が、1タイムステップ当たりの計算負荷は大きいために、同一のタイムステップでは計算速度は低下する。しかし、(b)においてタイムステップを大きく取った場合、(a)に比べて計算速度を最大4倍に向上できることを確認した。この場合、同一計算時間までの所要CPU時間を低減することが可能である。このように、陰解法はタイムステップを大きく取ることが可能で、計算速度の向上は大きい。一方、計算結果の高ボイド率や温度分布の反応ジェット挙動においては、陰解法で、かつタイムステップの大きい方が、陽解法との違いの度合いは大きいといえる。

このように、陰解法で計算負荷を低減する度合いの大きい方が、計算速度は向上するが、陽解法における反応ジェット挙動結果との違いも大きくなる。

## (2) 化学反応モデル(物性値計算)の簡略化

(a)圧力分布計算モジュールPRESSDの実行回数を簡略化した場合、(b)物性値計算モジュールSTATE2の実行回数を簡略化した場合、および(c)物性値関数を固定値化した場合、の3つのオプションと、(a)と(b)の実行回数に対して、解析結果を比較した。

(c)よりも(b)、(b)よりも(a)の方が、モジュール計算負荷は大きいため、簡略化した場合の計算速度の向上効果は大きい。一方、計算結果の高ボイド率や温度分布の反応ジェット挙動においては、計算負荷を簡略化する度合いの大きい方が、簡略化しない場合との違いの度合いは大きいといえる。(a)~(c)のオプションによっては、計算速度を最大13に倍向上可能であることを確認した。

このように、計算負荷を低減化する度合いの大きい方が、計算速度は向上するが、化学反応モデルを簡略化しない場合の反応ジェット挙動結果との違いも大きくなる。

今回作業において改良されたコードLEAP-JET( Ver. 1.20 )では、時間積分方法と物性値計算の簡略化に関する計算高速化のためのオプション選択が可能である。そのような高速化オプションを選択した場合、本コードは従来コードLEAP-JET( Ver. 1.10 )よりもより高速に解析できることが確認された。しかし、解析速度を高速化する場合には、計算速度の向上効果とともに結果の差異にも注意が必要である。

## 7. まとめ

次期高速炉蒸気発生器(SG)伝熱管の合理的設計基準水リーク率(DBL)の選定にあたって、高温ラプチャによる破損伝播の可能性を定量的に評価する必要がある。そこで、本件では、つぎのような作業を実施した。

本作業においては、これまでに開発された基本計算コード：LEAP-JET ( Ver. 1.10 ) を対象として、計算速度の向上を目的とした計算コードの改良を実施した。高速化対策は、(1)時間積分方法の改良と、(2)化学反応モデル(物性値計算)の簡略化に関するコード改良である。

改良コード LEAP-JET ( Ver. 1.20 ) を用いて機能確認のための試計算を実施し、計算速度(計算負荷)の改善の程度や計算結果(精度)への影響について、計算コードの改良前後における解析結果を比較評価した。試計算条件は、「もんじゅ」蒸発器体系のケース 1 (100%出力条件、通常運転圧力、流動無し)の条件である。

改良後のコードにおける解析結果により、ボイド率や温度分布等の反応ジェット現象の定性的傾向についての妥当性が確認された。

改良コードLEAP-JET( Ver. 1.20 )では、時間積分方法と物性値計算の簡略化に関する計算高速化のためのオプション選択が可能である。そのような高速化オプションを選択した場合、本コードは従来コードLEAP-JET( Ver. 1.10 )よりもより高速に解析できることが確認された。しかし、解析速度を高速化する場合には、計算速度の向上効果とともに結果の差異にも注意が必要である。

## 8. あとがき

本作業においては、これまでに開発した反応基本コードLEAP-JET (Ver.1.10)を対象として、計算速度の向上を目的とした改良コードLEAP-JET (Ver.1.20)を開発した。さらに改良コードの機能確認のための試計算を実施し、従来コードよりもより高速に解析できることが可能となった。

今後は、本報告で改良・開発した反応基本コードを用いて、予定されているナトリウム-水反応試験設備SWATによる実験検証と並行して、各種パラメータの影響(感度解析)等の評価を、詳細かつ定量的に実施する必要がある。具体的には、ナトリウム-水反応ジェットに対する各種モデルの特性の把握が必要と考えられる。

実機条件における反応ジェット予測精度を向上させるためには、本作業で推定した水リーク時の伝熱管噴出条件を実験的に確定する必要がある。その上で、反応ジェットの高温領域に与えるナトリウム側温度、熱伝達率、発熱量あるいは管内冷却効果の影響等を評価し、解析面からの高温ラプチャ現象の的確な把握が必要と考えられる。

一方、伝熱管と反応ジェットとの熱伝達モデルは、高温ラプチャ予測精度へ大きな影響を与えると推定される。従って、反応基本コードの高度化としては、高温ラプチャ予測精度への影響を与えるような反応ジェットと蒸気発生器構造物との相互作用に関するモデルを考慮することが重要である。このようなモデルを取り入れる反応基本コードの高度化が、今後の課題である。

それとともに、他のLEAPコード(ブローダウン解析コード・高温ラプチャ解析コード)へのカップリングの方法等について、具体的に検討して行くことが必要と考えられる。

## 9. 謝辞

本作業の遂行にあたり、動力炉・核燃料開発事業団大洗工学センタープラント安全工学室の田辺裕美室長、濱田広次副主任研究員、栗原成計研究員をはじめ関係各位に御討論、御指導を頂くことにより本作業を達成することができました。ここにあらためて関係各位に対し謝意を表します。

## 10. 参考文献

- (1) 真野多喜夫, 岡部綾夫, 石井孝信, 藤又和博, 国井誠,  
LEAPコード用ブローダウンモデルの開発：PNC PJ9124 95-003 (1995)
- (2) 齋藤義則, 床井博見, 池田孝志, 真野多喜夫, 岡部綾夫, LEAPコード用  
反応ジェットコードの開発設計：PNC PJ9124 96-005 (1996)
- (3) 齋藤義則, 床井博見, 糸岡聡, 岡部綾夫, 池崎利弘, ナトリウム-水反応  
ジェット解析用基本コードの開発：PNC PJ9124 97-007 (1997)
- (4) 齋藤義則, 床井博見, 糸岡聡, 岡部綾夫, ナトリウム-水反応ジェット  
コードの整備・解析：PNC PJ9124 98-001 (1998)
- (5) 日本原子力学会熱流動部会編, 気液二相流の数値解析, 朝倉書店, 東京  
(1993)
- (6) 日本機械学会編, 気液二相流技術ハンドブック, コロナ社, 東京 (1989)
- (7) 高森和英, 湊明彦, 給水加熱器内二相流および伝熱特性評価手法の開発：  
日本機械学会論文集, No.59-Vol.568 (1993-12)
- (8) 河村洋, 土方邦夫, 熱と流れのシミュレーション, 丸善, 東京 (1995-3)
- (9) 香月正司, 中山顕, 熱流動の数値シミュレーション, 森北出版, 東京  
(1990)
- (10) 日本流体力学会編, 流体力学ハンドブック, 丸善, 東京 (1987)
- (11) 動力炉・核燃料開発事業団 高速増殖炉もんじゅ発電所, 原子炉設置  
許可申請書：本文及び添付書類 (1980.12)
- (12) FBEC事務局, 総点検4-(5) 安全性評価データの妥当性確認：新・  
旧比較表 (1997.8.8)
- (13) 東芝・日立・三菱・FBEC編, 原型炉総合機能試験予測解析のための  
入力データの整備(II)：PNC ZJ2449 90-001(2) (1990.3)

# [付録]

付録A. 計算入力ファイルのサンプル.....	A-1
付録B. 解析結果ファイルのサンプル.....	B-1
付録C. 入力ファイル作成用 シェルスクリプトのサンプル.....	C-1
付録D. パラメータサーベイ用 実行シェルスクリプトのサンプル.....	D-1
付録E. コード使用時の注意.....	E-1

これより、今回の解析作業において使用された反応基本コード LEAP-JET (Ver. 1.20) の入出力サンプルを示す。なお、それぞれの入出力ファイルの詳細については、5. に記載されている。

付録A. 計算入力ファイルのサンプル  
(「もんじゅ」蒸発器体系・ケース1の場合)

入力ファイル名：U0327101 (本ケースは陽解法の場合)

下線部の設定は、コード LEAP-JET (Ver. 1.20) において改良・追加したオプションである。

```

C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---65---70
C U0327101 NEW SIMA2DA INPUT DATA FOR SW-JET (1998.03.27M-C)
C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---65---70
** SIMA2DA INPUT DATA FOR SW-JET **
  IRST
    0
  FILERS
U0327101
  GEO-DIMSYM-OPTION      ITAU      ITDEL      FLDSYS-F      IMPLCT
    0          0          500          500          2          0
  IHTFLX      IOOPT      IVLINE      IFUNC
    1          0          1          0
  OMG          CSQ          AIMOM          VB          EATA
0.000D+0  1.000D+1  1.000D+0  2.000D-4  0.000D+0
  CHM          CWF          EDDY          EDDYTC
1.000D-2  3.000D-2  1.000D+0  1.000D+0
  EPPIM          GAMMA      EPSI          EPSJ          OMH
  5.0D-2  1.000D-1  1.000D-3  1.000D-5  0.100D+0
  BETA(0)  BETA(1)  BETA(2)  BETA(3)  BETA(4)
  5.000D-1  5.000D-1  5.000D-1  5.000D-1  1.000D+0
  ITERMX      JTERMX      KTERMX
  100          100          1
  GR          PY          BOLTZ          AVO          TKO          EMS
  9.807D+0  3.1416D+0  1.381D-23  6.022D+23  2.7315D+2  18.0D-3
  GR-X          GR-Y
  0.000D+0  1.000D+0
  NX          NY
    1          1
  MESHX(I), I=1, NX
    7
  XX(I), I=1, NX+1
  0.0D0  0.700D0
  MESHY(J), J=1, NY
    30
  YY(J), J=1, NY+1
  0.0D0  6.000D0
C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---65---70

```

POROUS DATA <<CURRENT MAXIMUM NUMBER OF SURFACES IS KB >>  
 ----- IXS IXE IYS IYE PERMS(1) PERMS(2) PERMS(3) PERMS(4)  
 PORS CDFS ---UNREADING COMMENT  
 1 7 2 28 3.64D-1 3.64D-1 3.64D-1 3.64D-1  
 6.82D-1 1.00D+2 --->TUBE BUNDLE  
 1 7 1 1 1.0D0 1.0D0 1.0D0 3.64D-1  
 1.0D0 0.00D+0 --->SOUTH OF TUBE BUNDLE  
 1 7 29 29 1.0D0 1.0D0 3.64D-1 1.0D0  
 1.0D0 0.00D+0 --->NORTH OF TUBE BUNDLE  
 4 4 5 5 3.64D-1 3.64D-1 3.64D-1 0.0D0  
 6.82D-1 1.00D+2 --->OUTSIDE OF INLET-1(SOUTH)  
 3 3 6 6 3.64D-1 0.0D0 3.64D-1 3.64D-1  
 6.82D-1 1.00D+2 --->OUTSIDE OF INLET-1(WEST)  
 5 5 6 6 0.0D0 3.64D-1 3.64D-1 3.64D-1  
 6.82D-1 1.00D+2 --->OUTSIDE OF INLET-1(EAST)  
 4 4 6 6 0.0D0 0.0D0 1.00D-1 1.00D-1  
 1.00D+0 1.00D+0 --->INSIDE OF INLET-1  
 4 4 7 7 3.64D-1 3.64D-1 1.00D-1 3.64D-1  
 6.82D-1 1.00D+2 --->OUTSIDE OF INLET-1(NORTH:MOUTH)  
 9999

BOUNDARY DATA <<CURRENT MAXIMUM NUMBER OF SURFACES IS KB >>  
 -----NO XS XE YS YE IDIR BC---UNREADING COMMENT  
 1 1 1 1 30 1 -1 --->:WALL-WEST  
 2 7 7 1 30 2 -1 --->:WALL-EAST  
 3 1 7 30 30 4 -2 --->:INLET-NORTH  
 4 1 7 1 1 3 -4 --->:OUTLET-SOUTH  
 5 4 4 6 6 3 -2 --->:INLET-1  
 9999

UPSTREAM REGION FOR PRES. GAP & GFLUX ESTIMATION <<MAX NO. IS KB>>  
 -----NO XS XE YS YE IDIR AREA FLD---UNREADING COMMENT  
 1 4 4 6 6 3 1 1--->:INLET-1  
 2 1 7 30 30 4 2 1--->:INLET-1  
 9999

INIT. CONDITION (>0):UPSTREAM (0):DOWNSTREAM  
 1 DT TMAX DTPR DTPL  
 1 2.000D-5 1.000D-1 1.000D-2 1.000D-2  
 111 PIN(2) ALPIN(2)  
 111 4.90D+05 1.0000D-2  
 0327 TGIN(2) TGOVIN(2) TLIN(2) TLOVIN(2)  
 0327 3.250D+2 1.00D-1 3.250D+2 1.00D01  
 0327 UGIN(2) VGIN(2) ULIN(2) VLIN(2)  
 0327 0.000D+0 0.000D+0 0.000D+0 0.000D+0  
 111 PIN(1) ALPIN(1)  
 111 4.00D+06 2.000D-2  
 0327 TGIN(1) TGOVIN(1) TLIN(1) TLOVIN(1)  
 0327 2.400D+2 1.00D-1 2.400D+2 1.00D-1  
 0327 UGIN(1) VGIN(1) ULIN(1) VLIN(1)  
 0327 2.616D+01 2.616D+01 2.616D+01 2.616D+01  
 111 PIN(0) ALPIN(0)  
 111 4.90D+05 1.0000D-2  
 0327 TGIN(0) TGOVIN(0) TLIN(0) TLOVIN(0)  
 0327 3.250D+2 1.00D-1 3.250D+2 1.00D-1  
 0327 UGIN(0) VGIN(0) ULIN(0) VLIN(0)  
 0327 0.000D+0 0.000D+0 0.000D+0 0.000D+0

9999

C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---65---70

	CFF	CRR	CTH				
	7.50D-1	1.0D-04	-1.000D+0				
	NCS						
	7						
	CST(L)						
	H2O-L	h2o-G	NA-L	na-G	H2	NaOH	Na2O
	WEC(L)						
	0.018D0	0.018D00	0.023D0	0.023D0	0.002D0	0.040D0	0.062D00
	NO(IK=1)	IK=1(1)	IK=1(2)	IK=1(3)	IK=1(4)		
	4	1	3	6	7		
	NO(IK=2)	IK=2(1)	IK=2(2)	IK=2(3)	IK=2(4)		
	3	2	4	5			
	IBF(M=0)	IBF(M=1)	IBF(M=2)				
	2	1	2				

0327 EATAC(II=1:EVAP/2:COND ,LL=1-IPHCHG)

1 1.00D+1 0.00D+0

2 1.00D-2 0.00D+0

C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---65---70

付録B. 解析結果ファイルのサンプル  
 (「もんじゅ」蒸発器体系・ケース1の場合)

下記ファイルは、入力ファイルU0327101に対応した解析出力である。

(1) U0327101.01

下線部は、コードLEAP-JET(Ver.1.20)において改良・追加したオプションの出力である。

```
*****
** SIMA2DA INPUT DATA FOR SW-JET **
*****
.....<入力した解析条件・パラメータ>
***** CAL PARAMETER *****
      FILEIO      FILERS
      U0327101    U0327101
      IRST        GEO-DIMSYM-OPTION
           0          0          0
      ITAU        ITDEL      IFLDSY      IMPLCT
           500        500          2          0
      IPHCHG      IHTFLX      IOOPT      IVLINE      IFUNC
           2          1          0          1          0
      OMG         CSQ         AIMOM         VB         EATA
      0.000D+00  1.000D+01  1.000D+00  2.000D-04  0.000D+00
      CHM         CWF         EDDY         EDDYTC
      1.000D-02  3.000D-02  1.000D+00  1.000D+00
      EPPIM       GAMMA      EPSI         EPSJ         OMH
      5.000D-02  1.000D-01  1.000D-03  1.000D-05  1.000D-01
      BETA(0:L)  BETA(1:V)  BETA(2:P)  BETA(3:R)  BETA(4:X)
      5.000D-01  5.000D-01  5.000D-01  5.000D-01  1.000D+00
      ITERMX      JTERMX      KTERMX
      100          100          1
      GR          PY          BOLTZ      AVO         TKO         EMS
      9.807D+00  3.142D+00  1.381D-23  6.022D+23  2.731D+02  1.800D-02
      GR-X        GR-Y
      0.000D+00  9.807D+00
      NX          NY
           1          1
      IXMAX      JYMAX      KMAX      ISRFMX      KSRFMX
           7          30         210        5           2
      .....<粗メッシュ座標XX,YY>
      XX(NX+1)
      0.000D+00  7.000D-01
      YY(NY+1)
      0.000D+00  6.000D+00
      .....<細メッシュ座標X,Y>
      X(IXMAX+1)
      0.000D+00  1.000D-01      ... 7.000D-01
      Y(JYMAX+1)
      0.000D+00  2.000D-01      ... 6.000D+00
```

.....<一連メッシュ番号K・隣接情報NEXT>

K	NEXT(1,K)	NEXT(2,K)	NEXT(3,K)	NEXT(4,K)	KBREAK(K)
1	-1	31	-4	2	-1
210	180	-1	209	-2	2

.....<メッシュ中心座標XC,YC・メッシュ寸法DX,DY>

K	XC(K)	YC(K)	DX(K)	DY(K)
1	5.000D-02	1.000D-01	1.000D-01	2.000D-01
210	6.500D-01	5.900D+00	1.000D-01	2.000D-01

.....<メッシュ面積AR・メッシュ体積VOL>

K	AR(1)	AR(2)	AR(3)	AR(4)	VOL(K)
1	2.000D-01	2.000D-01	1.000D-01	3.640D-02	2.000D-02
210	2.000D-01	2.000D-01	1.000D-01	1.000D-01	2.000D-02

.....<ポーラスメディア情報>

\*\*\*\*\* POROUS DATA \*\*\*\*\*

IX	JY	PERMS(1)	PERMS(2)	PERMS(3)	PERMS(4)	PORS
1	1	1.000D+00	1.000D+00	1.000D+00	3.640D-01	1.000D+00
7	29	1.000D+00	1.000D+00	3.640D-01	1.000D+00	1.000D+00

.....<境界条件情報>

\*\*\*\*\* BOUNDARY DATA \*\*\*\*\*

NO	IXS	IXE	IYS	IYE	IDIR	BCOND
1	1	1	1	30	1	-1
2	7	7	1	30	2	-1
3	1	7	30	30	4	-2
4	1	7	1	1	3	-4
5	4	4	6	6	3	-2

.....<上流領域情報>

\*\*\*\*\* UPSTREAM REGION \*\*\*\*\*

NO	IXS	IXE	IYS	IYE	IDIR	AREA
1	4	4	6	6	3	1
2	1	7	30	30	4	2

.....<X方向番号I・Y方向番号JとKの対応>

\*\*\*\*\* REGION MATRIX ( K )\*\*\*\*\*

IXMAX	JYMAX
7	30
0 1 2 3 4 5 6 7	
1 1 31 61 91 121 151 181	
30 30 60 90 120 150 180 210	

.....<X方向番号I・Y方向番号Jと領域番号M>

\*\*\*\*\* REGION MATRIX ( KBREAK )\*\*\*\*\*

IXMAX	JYMAX
7	30
0 1 2 3 4 5 6 7	
1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1	

```

29 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1
30 2 2 2 2 2 2 2

```

.....<X方向番号I・Y方向番号Jと境界条件番号>

\*\*\*\*\* REGION MATRIX ( BOUNDARY ) \*\*\*\*\*

```

IXMAX+2  JYMAX+2
      9      32
0  0  1  2  3  4  5  6  7  8
0  0 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4  0
1 -1  1 31 61 91 121 151 181 -1

29 -1 29 59 89 119 149 179 209 -1
30 -1 30 60 90 120 150 180 210 -1
31  0 -2 -2 -2 -2 -2 -2 -2  0

```

.....<初期・境界条件>

\*\*\*\*\* INITIAL & BOUNDARY CONDITION \*\*\*\*\*

```

DT      TMAX      DTPR      DTPL
2.000D-05 1.000D-01 1.000D-02 1.000D-02
M      PIN(M)  ALPIN(M)
2 4.900D+05 1.000D-02
M      TGIN(M) TGOVIN(M)  TLIN(M)  TLOVIN(M)
2 3.250D+02 1.000D-01 3.250D+02 1.000D+01
M      EGIN(M)  RGIN(M)  ELIN(M)  RLIN(M)
2 3.247D+05 2.266D+00 7.893D+05 8.784D+02
M      UGIN(M)  VGIN(M)  ULIN(M)  VLIN(M)
2 0.000D+00 0.000D+00 0.000D+00 0.000D+00
M      PIN(M)  ALPIN(M)
1 4.000D+06 2.000D-02
M      TGIN(M) TGOVIN(M)  TLIN(M)  TLOVIN(M)
1 2.400D+02 1.000D-01 2.400D+02 1.000D-01
M      EGIN(M)  RGIN(M)  ELIN(M)  RLIN(M)
1 7.648D+05 1.688D+01 2.252D+06 8.534D+02
M      UGIN(M)  VGIN(M)  ULIN(M)  VLIN(M)
1 2.616D+01 2.616D+01 2.616D+01 2.616D+01
M      PIN(M)  ALPIN(M)
0 4.900D+05 1.000D-02
M      TGIN(M) TGOVIN(M)  TLIN(M)  TLOVIN(M)
0 3.250D+02 1.000D-01 3.250D+02 1.000D-01
M      EGIN(M)  RGIN(M)  ELIN(M)  RLIN(M)
0 3.247D+05 2.266D+00 7.893D+05 8.784D+02
M      UGIN(M)  VGIN(M)  ULIN(M)  VLIN(M)
0 0.000D+00 0.000D+00 0.000D+00 0.000D+00

```

.....<速度境界の指定フラグ(内部にて使用)>

\*\*\*\*\* VELOCITY CONDITION \*\*\*\*\*

```

IBNDX  IBNDY
      2      2

```

.....<化学反応に関わる設定>

\*\*\*\*\* CAL. PARAMETER \*\*\*\*\*

```

<< CHEMICAL SPECIES >>
      CFF      CRR      CTH
7.500D-01 1.000D-04-1.000D+00
      NCS
      7
      CST(L)

```

	H2O-L	h2o-G	NA-L	na-G	H2	NaOH	Na2O
WEC (L)							
1.800D-02	1.800D-02	2.300D-02	2.300D-02	2.000D-03	4.000D-02	6.200D-02	
IC (1,0)	IC (1,L)						
4	1	3		6	7		
IC (2,0)	IC (2,L)						
3	2	4		5			
LL	<u>EATAC (EV)</u>	<u>EATAC (CO)</u>					
1	1.000D+01	0.000D+00					
LL	<u>EATAC (EV)</u>	<u>EATAC (CO)</u>					
2	1.000D-02	0.000D+00					

.....<上流・下流領域の化学種の設定>

\*\*\*\*\* INITIAL & BOUNDARY CONDITION \*\*\*\*\*

```

M   IBF (M)
2       2
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
1   H2O-L  0.000D+00  0.000D+00
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
2   h2o-G  0.000D+00  0.000D+00
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
3   NA-L   8.784D+02  9.900D-01
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
4   na-G   2.266D+00  1.000D-02

```

```

M   IBF (M)
1       1
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
1   H2O-L  8.534D+02  9.800D-01
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
2   h2o-G  1.688D+01  2.000D-02
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
3   NA-L   0.000D+00  0.000D+00
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
4   na-G   0.000D+00  0.000D+00

```

```

M   IBF (M)
0       2
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
1   H2O-L  0.000D+00  0.000D+00
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
2   h2o-G  0.000D+00  0.000D+00
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
3   NA-L   8.784D+02  9.900D-01
L   CST (L)  ROCIN (L)  ALCIN (L)
4   na-G   2.266D+00  1.000D-02

```

(2) U0327101.02

```
----- SIMA2DA : PLOT << U0327101 >> -----
.....<入出力ファイル名>
U0327101
.....<出力物理量の項目数IDN>
      IDN          16
.....<上下流境界個数KSRFMX>
      KSRFMX       2
.....<細メッシュ座標X>
      8  0.000D+00  1.000D-01      ..... 7.000D-01
.....<細メッシュ座標Y>
     31  0.000D+00  2.000D-01      ..... 6.000D+00
.....<Y方向メッシュ個数IXMAX・メッシュ中心座標XC>
      7  5.000D-02  1.500D-01      ..... 6.500D-01
.....<Y方向メッシュ個数JYMAX・メッシュ中心座標YC>
     30  1.000D-01  3.000D-01      ..... 5.900D+00
.....<X方向番号I・Y方向番号JとKの対応>
      0   1   2   3   4   5   6   7
      1   1  31  61  91 121 151 181
      2   2  32  62  92 122 152 182

     29  29  59  89 119 149 179 209
     30  30  60  90 120 150 180 210
```

```
.....<途中経過の出力>
.....<時刻・サイクル数・境界を通過する質量流束・流量>
U0327101
U0327101 TIME= 0.000D+00 CYCLE=          0 GFLUX( 2)= 0.000D+00
WFLUX( 2)= 0.000D+00
U0327101 TIME= 0.000D+00 CYCLE=          0 GFLUX( 1)= 0.000D+00
WFLUX( 1)= 0.000D+00

U0327101 TIME= 9.980D-03 CYCLE=          498 GFLUX( 1)= 1.486D+04
WFLUX( 1)= 1.486D+02

U0327101 TIME= 1.996D-02 CYCLE=          997 GFLUX( 1)= 1.356D+03
WFLUX( 1)= 1.356D+01

U0327101 TIME= 2.994D-02 CYCLE=         1496 GFLUX( 1)= 6.241D+02
WFLUX( 1)= 6.241D+00

U0327101 TIME= 3.992D-02 CYCLE=         1995 GFLUX( 1)= 5.316D+02
WFLUX( 1)= 5.316D+00

U0327101 TIME= 4.990D-02 CYCLE=         2494 GFLUX( 1)= 6.708D+02
WFLUX( 1)= 6.708D+00

U0327101 TIME= 5.988D-02 CYCLE=         2993 GFLUX( 1)= 8.491D+02
WFLUX( 1)= 8.491D+00

U0327101 TIME= 6.986D-02 CYCLE=         3492 GFLUX( 1)= 1.074D+03
WFLUX( 1)= 1.074D+01
```

U0327101 TIME= 7.984D-02 CYCLE= 3991 GFLUX( 1)= 1.359D+03  
WFLUX( 1)= 1.359D+01

U0327101 TIME= 8.982D-02 CYCLE= 4490 GFLUX( 1)= 1.719D+03  
WFLUX( 1)= 1.719D+01

U0327101  
U0327101 TIME= 9.980D-02 CYCLE= 4989 GFLUX( 2)= 0.000D+00  
WFLUX( 2)= 0.000D+00

U0327101 TIME= 9.980D-02 CYCLE= 4989 GFLUX( 1)= 2.174D+03  
WFLUX( 1)= 2.174D+01

.....<圧力>  
PQ 7 30

.....<ボイド率>  
FQ 7 30

	1	2	3	4	5	6	7
6	7						
1	1.000D-02						
02	1.000D-02						
4	1.000D-02	1.000D-02	1.000D-02	1.000D-02	9.999D-03	1.000D-02	
02	1.000D-02						
5	1.000D-02	1.000D-02	9.997D-03	1.000D-02	9.992D-03	9.999D-03	
03	1.000D-02						
6	9.999D-03	9.968D-03	1.004D-02	9.973D-01	1.004D-02	9.971D-03	
03	9.997D-03						
7	9.956D-03	9.626D-03	1.148D-02	6.911D-01	1.149D-02	9.638D-03	
03	9.935D-03						
30	1.000D-02						
02	1.000D-02						

.....<液相温度>  
TL 7 30

.....<気相温度>  
TG 7 30

.....<相平均温度>  
TPM 7 30

	1	2	3	4	5	6	7
6	7						
1	3.250D+02						
	3.250D+02	3.250D+02					
4	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	
	3.250D+02	3.250D+02					
5	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	3.250D+02	
	3.250D+02	3.250D+02					
6	3.250D+02	3.250D+02	3.251D+02	4.478D+02	3.251D+02		
	3.250D+02	3.250D+02					
7	3.249D+02	3.245D+02	3.256D+02	7.349D+02	3.228D+02		
	3.245D+02	3.249D+02					
30	3.250D+02						
	3.250D+02	3.250D+02					

.....<気液二相流の流速、温度、密度>			
UL	7	30	
VL	7	30	
UG	7	30	
VG	7	30	
.....<化学種の密度・各相における質量分率>			
.....<液相H <sub>2</sub> O>			
XLCH2O-L	1	7	30
.....<気相H <sub>2</sub> O>			
XLCh2o-G	2	7	30
.....<液相Na>			
XLC NA-L	3	7	30
.....<気相Na>			
XLC na-G	4	7	30
.....<H <sub>2 </sub>			
XLC H2	5	7	30
.....<NaOH>			
XLC NaOH	6	7	30
.....<Na <sub>2</sub> O>			
XLC Na2O	7	7	30

(3) U03271101.03

```
----- SIMA2DA : PRINT << U0327101 >> -----
.....<入出力ファイル名>
U0327101
.....<出力物理量の項目数IDN>
      IDN          17
.....<上下流境界個数KSRFMX>
      KSRFMX       2
.....<細メッシュ座標X>
      8  0.000D+00  1.000D-01      .....  7.000D-01
.....<細メッシュ座標Y>
      31 0.000D+00  2.000D-01      .....  6.000D+00
.....<Y方向メッシュ個数IXMAX・メッシュ中心座標XC>
      7  5.000D-02  1.500D-01      .....  6.500D-01
.....<Y方向メッシュ個数JYMAX・メッシュ中心座標YC>
      30 1.000D-01  3.000D-01      .....  5.900D+00
.....<X方向番号I・Y方向番号JとKの対応>
      0   1   2   3   4   5   6   7
      1   1  31  61  91 121 151 181
      2   2  32  62  92 122 152 182

      29  29  59  89 119 149 179 209
      30  30  60  90 120 150 180 210
```

```
.....<途中経過の出力>
.....<時刻・サイクル数・境界を通過する質量流束・流量>
U0327101
U0327101 TIME= 0.000D+00 CYCLE=          0 GFLUX( 2)= 0.000D+00
WFLUX( 2)= 0.000D+00
U0327101 TIME= 0.000D+00 CYCLE=          0 GFLUX( 1)= 0.000D+00
WFLUX( 1)= 0.000D+00

U0327101 TIME= 9.980D-03 CYCLE=        498 GFLUX( 1)= 1.486D+04
WFLUX( 1)= 1.486D+02

U0327101 TIME= 1.996D-02 CYCLE=        997 GFLUX( 1)= 1.356D+03
WFLUX( 1)= 1.356D+01

U0327101 TIME= 2.994D-02 CYCLE=       1496 GFLUX( 1)= 6.241D+02
WFLUX( 1)= 6.241D+00

U0327101 TIME= 3.992D-02 CYCLE=       1995 GFLUX( 1)= 5.316D+02
WFLUX( 1)= 5.316D+00

U0327101 TIME= 4.990D-02 CYCLE=       2494 GFLUX( 1)= 6.708D+02
WFLUX( 1)= 6.708D+00

U0327101 TIME= 5.988D-02 CYCLE=       2993 GFLUX( 1)= 8.491D+02
WFLUX( 1)= 8.491D+00

U0327101 TIME= 6.986D-02 CYCLE=       3492 GFLUX( 1)= 1.074D+03
WFLUX( 1)= 1.074D+01
```

U0327101 TIME= 7.984D-02 CYCLE= 3991 GFLUX( 1)= 1.359D+03  
WFLUX( 1)= 1.359D+01

U0327101 TIME= 8.982D-02 CYCLE= 4490 GFLUX( 1)= 1.719D+03  
WFLUX( 1)= 1.719D+01

U0327101  
U0327101 TIME= 9.980D-02 CYCLE= 4989 GFLUX( 2)= 0.000D+00  
WFLUX( 2)= 0.000D+00

U0327101 TIME= 9.980D-02 CYCLE= 4989 GFLUX( 1)= 2.174D+03  
WFLUX( 1)= 2.174D+01

.....<圧力>

PQ	7	30
----	---	----

.....<ボイド率>

FQ	7	30
----	---	----

.....<気液相のセル質量QS/QW>

QS	7	30
QW	7	30

.....<セル運動量U/VMS,U/VMW>

UMS	7	30
VMS	7	30
UMW	7	30
VMW	7	30

.....<セル内部エネルギーES/EW>

ES	7	30
EW	7	30

.....<各化学種のセル質量QC>

.....<液相H<sub>2</sub>O>

QCH2O-L	1	7	30
---------	---	---	----

.....<気相H<sub>2</sub>O>

QCh2o-G	2	7	30
---------	---	---	----

.....<液相Na>

QC NA-L	3	7	30
---------	---	---	----

.....<気相Na>

QC na-G	4	7	30
---------	---	---	----

.....<H<sub>2</sub>>

QC H2	5	7	30
-------	---	---	----

.....<NaOH>

QC NaOH	6	7	30
---------	---	---	----

.....<Na<sub>2</sub>O>

QC Na2O	7	7	30
---------	---	---	----

(4) U0327101. OX : 解析中に標準出力される情報

```
I/O FILE NAME =
.....<入出力ファイル名>
I/O FILE NAME =U0327101
.....<途中経過の出力>
CAUTION :SF-MIN (@ MOVE) /T      = 2.00D-02
CAUTION :SF-MIN (@ MOVE) /T      = 4.00D-02
CAUTION :SF-MIN (@ MOVE) /T      = 6.00D-02
CAUTION :SF-MIN (@ MOVE) /T      = 8.00D-02
CAUTION :SF-MIN (@ MOVE) /T      = 1.00D-01
.....<対流項評価モジュールMOVEの補正情報>
CAUTION :SF-MIN (@ MOVE) /K,SFPT = 0 1.00D+00
CAUTION :SF-MIN (@ MOVE) /SFPG/L = 1.00D+00 1.00D+00
.....<化学反応評価モジュールCMSACTの補正情報>
CAUTION :SF-MIN (@ CMSACT)      /T = 1.00D-01
CAUTION :SF-MIN (@ CMSACT) /K,LL,PRIOR,SFP = 0 1 0
1.00D+00
CAUTION :SF-MIN (@ CMSACT) /K,LL,PRIOR,SFP = 0 2 0
1.00D+00
CAUTION :SF-MIN (@ CMSACT) /K,LL,PRIOR,SFP = 0 3 0
1.00D+00
CAUTION :SF-MIN (@ CMSACT) /K,LL,PRIOR,SFP = 0 4 0
1.00D+00
```

付録C. 入力ファイル作成用シェルスクリプトのサンプル  
(「もんじゅ」蒸発器体系・ケース1の場合)

下記は、本作業におけるパラメータサーベイのための入力ファイルを作成するシェルである。下記の変数は、各パラメータの場合分け判定用のためのシェル変数である。

- ・ m1 : 計算条件。1 = 「時間積分方法の改良」の試計算用。  
2 = 「化学反応モデルの簡略化」の試計算用。
- ・ m2 : パラメータ設定条件の判定。
- ・ m3 : 体系の判定(1 ~ 5 : ケース1に固定)。

下線部の設定は、コード LEAP-JET (Ver. 1.20) において改良・追加したオプションである。

ファイル名: I980327C

```
#!/bin/csh
#
# < I980327C > InputData for New SIMA
#   MONJU-EVAPORATOR GEOMETRY
#
#-----METHOD LOOP
#  1 : IMPLICIT .....「時間積分方法の改良」の試計算用
#  2 : EXPLICIT .....「化学反応モデルの簡略化」の試計算用
foreach m1 ( 1 2 )
#-----OPTIONS LOOP
#  m1=1 : ITER-EPSI, JTER-EPSJ, DT
#  m1=2 : ITER      , IFUNC      , KTER
switch($m1)
  case 1:
foreach m2 ( 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 A B C D E F G )
  breaksw
  default:
foreach m2 ( 0 1 2 3 4 5 6 )
  breaksw
endsw
#-----EV LOOP
# PARAMETER m3 : INITIAL CONDITIONS
#  1 : 100% , Normal Pressure , U(Na) = 0
#  2 : 100% , R/D   Pressure , U(Na) = 0
#  3 : 100% , Normal Pressure , U(Na) = 0.83
#  4 :  40% , Normal Pressure , U(Na) = 0
#  5 :  10% , Normal Pressure , U(Na) = 0
```

```

#foreach m3 ( 1 2 3 4 5 )
foreach m3 ( 1 )

echo 'C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---
65---70' > iii
echo 'C XXXXXXXX NEW SIMA2DA INPUT DATA FOR SW-JET (1998.03.27M-C)'
>> iii
echo 'C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---
65---70' >> iii
echo '** SIMA2DA INPUT DATA FOR SW-JET **' >> iii
echo '      IRST' >> iii
echo '      0' >> iii
echo '      FILERS' >> iii
echo '      XXXXXXXX' >> iii
echo '      GEO-DIMSYM-OPTION      ITAU      ITDEL      FLDSYS-F      IMPLCT'
>> iii
echo '      0      0      ITITIT      ITITIT      2      IMP1111'
>> iii
echo '      IHTFLX      IOOPT      IVLINE      IFUNC' >> iii
echo '      1      0      1      IFUNC22' >> iii
echo '      OMG      CSQ      AIMOM      VB      EATA' >> iii
echo '      0.000D+0      1.000D+1      1.000D+0      2.000D-4      1.000D+0' >> iii
echo '      CHM      CWF      EDDY      EDDYTC' >> iii
echo '      1.000D-2      3.000D-2      1.000D+0      1.000D+0' >> iii
echo '      EPPIM      GAMMA      EPSI      EPSJ      OMH' >> iii
echo '      5.0D-2      1.000D-1      EPSIIII      EPSJJJJ      OHM1234' >> iii
echo '      BETA(0)      BETA(1)      BETA(2)      BETA(3)      BETA(4)' >> iii
echo '      5.000D-1      5.000D-1      5.000D-1      5.000D-1      1.000D+0' >> iii
echo '      ITERMX      JTERMX      KTERMX' >> iii
echo '      TERIIII      TERJJJJ      TERKKKK' >> iii
echo '      GR      PY      BOLTZ      AVO      TKO      EMS'
>> iii
echo '      9.807D+0      3.1416D+0      1.381D-23      6.022D+23      2.7315D+2      18.0D-3'
>> iii
echo '      GR-X      GR-Y' >> iii
echo '      0.000D+0      1.000D+0' >> iii
echo '      NX      NY' >> iii
echo '      1      1' >> iii
echo '      MESHX(I), I=1, NX' >> iii
echo '      7' >> iii
echo '      XX(I), I=1, NX+1' >> iii
echo '      0.0D0      0.700D0' >> iii
echo '      MESHY(J), J=1, NY' >> iii
echo '      30' >> iii
echo '      YY(J), J=1, NY+1' >> iii
echo '      0.0D0      6.000D0' >> iii
echo 'C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---
65---70' >> iii

echo 'POROUS DATA      <<CURRENT MAXIMUM NUMBER OF SURFACES IS KB >>'
>> iii
echo '----- IXS      IXE      IYS      IYE      PERMS(1)      PERMS(2)      PERMS(3)
PERMS(4)      PORS      CDFS ---UNREADING COMMENT' >> iii
echo '      1      7      2      28      3.64D-1      3.64D-1      3.64D-1

```

```

3.64D-1  6.82D-1  1.00D+2  --->TUBE BUNDLE' >> iii
echo '      1  7  1  1  1.0D0  1.0D0  1.0D0
3.64D-1  1.0D0  0.00D+0  --->SOUTH OF TUBE BUNDLE' >> iii
echo '      1  7  29  29  1.0D0  1.0D0  3.64D-1
1.0D0  1.0D0  0.00D+0  --->NORTH OF TUBE BUNDLE' >> iii
echo '      4  4  5  5  3.64D-1  3.64D-1  3.64D-1
0.0D0  6.82D-1  1.00D+2  --->OUTSIDE OF INLET-1(SOUTH)' >> iii
echo '      3  3  6  6  3.64D-1  0.0D0  3.64D-1
3.64D-1  6.82D-1  1.00D+2  --->OUTSIDE OF INLET-1(WEST)' >> iii
echo '      5  5  6  6  0.0D0  3.64D-1  3.64D-1
3.64D-1  6.82D-1  1.00D+2  --->OUTSIDE OF INLET-1(EAST)' >> iii
echo '      4  4  6  6  0.0D0  0.0D0  1.00D-1
1.00D-1  1.00D+0  1.00D+0  --->INSIDE OF INLET-1' >> iii
echo '      4  4  7  7  3.64D-1  3.64D-1  1.00D-1
3.64D-1  6.82D-1  1.00D+2  --->OUTSIDE OF INLET-1(NORTH: MOUTH)' >>
iii
echo '9999' >> iii

echo 'BOUNDARY DATA <<CURRENT MAXIMUM NUMBER OF SURFACES IS KB >>'
>> iii
echo '-----NO  XS  XE  YS  YE  IDIR  BC---UNREADING COMMENT'
>> iii
echo '      1  1  1  1  30  1  -1 ---:WALL-WEST' >> iii
echo '      2  7  7  1  30  2  -1 ---:WALL-EAST' >> iii
#-----
switch($m3)
  case 3:
echo '      3  1  7  30  30  4  -4 ---:INLET-NORTH'>>iii
echo '      4  1  7  1  1  3  -2 ---:OUTLET-
SOUTH'>>iii
  breaksw
  default:
echo '      3  1  7  30  30  4  -2 ---:INLET-NORTH'>>iii
echo '      4  1  7  1  1  3  -4 ---:OUTLET-
SOUTH'>>iii
  breaksw
endsw
#-----
echo '      5  4  4  6  6  3  -2 ---:INLET-1' >> iii
echo '9999' >> iii

echo 'UPSTREAM REGION FOR PRES. GAP & GFLUX ESTIMATION <<MAX NO. IS
KB>>' >> iii
echo '-----NO  XS  XE  YS  YE  IDIR  AREA  FLD---UNREADING
COMMENT' >> iii
switch($m3)
  case 3:
echo '      2  1  7  1  28  3  2  1---:INLET-1'>>iii
echo '      1  4  4  6  6  3  1  1---:INLET-1'>>iii
  breaksw
  default:
echo '      1  4  4  6  6  3  1  1---:INLET-1'>>iii
echo '      2  1  7  30  30  4  2  1---:INLET-1'>>iii
  breaksw

```

```

endsw
#-----
echo '9999' >> iii

echo 'INIT. CONDITION (>0):UPSTREAM (0):DOWNSTREAM' >> iii
echo '1_____DT          TMAX          DTPR          DTPL' >> iii
echo '1_____DTDTDTDT 1.000D+0 1.000D-1 1.000D-1' >> iii

#-----UPSTREAM-2 : TOP OF THE TEST SECTION ( NA )
echo '111          PIN(2)  ALPIN(2)' >> iii
switch($m3)
  case 2:
echo '111          1.96D+05 1.0000D-2' >> iii
  breaksw
  case 3:
echo '111          1.96D+05 3.0000D-2' >> iii
  breaksw
  default:
echo '111          4.90D+05 1.0000D-2' >> iii
  breaksw
endsw
echo '0327          TGIN(2) TGOVIN(2)  TLIN(2) TLOVIN(2)' >> iii
switch($m3)
  case 4:
echo '0327          2.770D+2  1.00D-1  2.770D+2  1.00D-1' >> iii
  breaksw
  case 5:
echo '0327          2.500D+2  1.00D-1  2.500D+2  1.00D-1' >> iii
  breaksw
  default:
echo '0327          3.250D+2  1.00D-1  3.250D+2  1.00D01' >> iii
  breaksw
endsw
echo '0327          UGIN(2)  VGIN(2)  ULIN(2)  VLIN(2)' >> iii
switch($m3)
  case 3:
echo '0327          0.000D+0 -0.830D+0  0.000D+0 -0.830D+0' >> iii
  breaksw
  default:
echo '0327          0.000D+0  0.000D+0  0.000D+0  0.000D+0' >> iii
  breaksw
endsw

#-----UPSTREAM-1 : LEAK TUBE ( H2O )
echo '111          PIN(1)  ALPIN(1)' >> iii
echo '111          4.00D+06          AL1' >> iii
echo '0327          TGIN(1) TGOVIN(1)  TLIN(1) TLOVIN(1)' >> iii
switch($m3)
  case 4:
echo '0327          1.940D+2  1.00D-1  1.940D+2  1.00D-1' >> iii
  breaksw
  case 5:
echo '0327          1.950D+2  1.00D-1  1.950D+2  1.00D-1' >> iii
  breaksw

```

```

default:
echo '0327 2.400D+2 1.00D-1 2.400D+2 1.00D-1' >> iii
breaksw
endsw
echo '0327 UGIN(1) VGIN(1) ULIN(1) VLIN(1)' >> iii
echo '0327 UM1 VM1 UM1 VM1' >> iii

#-----DOWNSTREAM : BOTTOM OF THE TEST SECTION ( NA )
echo '111 PIN(0) ALPIN(0)' >> iii
switch($m3)
case 2:
echo '111 1.96D+05 1.0000D-2' >> iii
breaksw
default:
echo '111 4.90D+05 1.0000D-2' >> iii
breaksw
endsw
echo '0327 TGIN(0) TGOVIN(0) TLIN(0) TLOVIN(0)' >> iii
switch($m3)
case 4:
echo '0327 2.770D+2 1.00D-1 2.770D+2 1.00D-1' >> iii
breaksw
case 5:
echo '0327 2.500D+2 1.00D-1 2.500D+2 1.00D-1' >> iii
breaksw
default:
echo '0327 3.250D+2 1.00D-1 3.250D+2 1.00D-1' >> iii
breaksw
endsw
echo '0327 UGIN(0) VGIN(0) ULIN(0) VLIN(0)' >> iii
echo '0327 0.000D+0 0.000D+0 0.000D+0 0.000D+0' >> iii
echo '9999' >> iii
echo 'C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---
65---70' >> iii
echo ' CFF CRR CTH' >> iii
echo ' 7.50D-1 1.0D-04 -1.000D+0' >> iii
echo ' NCS' >> iii
echo ' 7' >> iii
echo ' CST(L)' >> iii
echo ' H2O-L h2o-G NA-L na-G H2 NaOH
Na2O' >> iii
echo ' WEC(L)' >> iii
echo ' 0.018D0 0.018D00 0.023D0 0.023D0 0.002D0 0.040D0
0.062D00' >> iii
echo ' NO(IK=1) IK=1(1) IK=1(2) IK=1(3) IK=1(4)' >> iii
echo ' 4 1 3 6 7' >> iii
echo ' NO(IK=2) IK=2(1) IK=2(2) IK=2(3) IK=2(4)' >> iii
echo ' 3 2 4 5' >> iii
echo ' IBF(M=0) IBF(M=1) IBF(M=2)' >> iii
echo ' 2 1 2' >> iii
echo '0327 EATAC(II=1:EVAP/2:COND ,LL=1-IPHCHG)' >> iii
echo ' 1 1.00D+1 0.00D+0' >> iii
echo ' 2 1.00D-2 0.00D+0' >> iii
echo 'C---5---10---15---20---25---30---35---40---45---50---55---60---

```

65---70' >> iii

```
#=====
#                               : INLET CONDITIONS
#                               : @ EXIT      : @ ORIFICE
# PIN1                          : 4 MPa      : 4MPa
# AL1                           : 2%        : 0.1% ( ---> 0% )
# U                             : 37 m/s    : 107 m/s
# DIRECTION [deg.]             : 45       : 45
# UM1 = VM1                     : 26.16 m/s : 75.66 m/s
#-----
sed -e 's/      PIN1/4.000D+6/g' -e 's/      AL1/2.000D-2/g' iii > jjj
rm iii
sed -e 's/      UM1/2.616D+01/g' -e 's/      VM1/2.616D+01/g' jjj >
iii
#sed -e 's/      UM1/7.566D+01/g' -e 's/      VM1/7.566D+01/g' jjj >
iii
rm jjj
```

.....<パラメータ設定条件の判定>

```
#=====
switch($m1)
.....<「時間積分方法の改良」の比較用>
```

```
case 1:
#----- FOR IMPLICIT METHOD
# IMP1111 = 0 : EXPLICIT METHOD
# IMP1111 = 1/2 : IMPLICIT METHOD
# TERIIII = 100 / 1 / 5,10,20,30
# TERJJJJ = 100 / 1 / 50
# EPSIIII = 1.0D-1,-2,-3,-4
# EPSJJJJ = 1.0D-5
# OHM1234 = 1.0D-1
# TERKKKK = 1
# IFUNC22 = 0
# ITITIT = 500 --- 1
# DTDITDT = 2.000D-5 --- 1.000D-1

sed -e 's/TERKKKK/      1/g' -e 's/IFUNC22/      0/g' -e
's/EPSJJJJ/1.00D-5/g' -e 's/OHM1234/1.00D-1/g' iii > jjj
rm iii
```

```
switch($m2)
case 0:
sed -e 's/IMP1111/      0/g' -e 's/TERIIII/      1/g' -e 's/TERJJJJ/
1/g' -e 's/EPSIIII/1.00D-3/g' jjj > iii
breaksw
case 1:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIII/      20/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIII/1.00D-3/g' jjj > iii
breaksw
case 2:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIII/      20/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIII/1.00D-3/g' jjj > iii
breaksw
```

```

case 3:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      20/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-3/g' jjj > iii
breaksw
case 4:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      10/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-2/g' jjj > iii
breaksw
case 5:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      10/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-2/g' jjj > iii
breaksw
case 6:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      10/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-2/g' jjj > iii
breaksw
case 7:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      30/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-4/g' jjj > iii
breaksw
case 8:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      30/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-4/g' jjj > iii
breaksw
case 9:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      30/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-4/g' jjj > iii
breaksw
case A:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      20/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-3/g' jjj > iii
breaksw
case B:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      10/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-2/g' jjj > iii
breaksw
case C:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      30/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-4/g' jjj > iii
breaksw
case D:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      5/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-1/g' jjj > iii
breaksw
case E:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      5/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-1/g' jjj > iii
breaksw
case F:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      5/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-1/g' jjj > iii
breaksw
case G:
sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      5/g' -e 's/TERJJJJ/

```

```

50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-1/g' jjj > iii
  breaksw
  default:
    sed -e 's/IMP1111/      1/g' -e 's/TERIIIII/      20/g' -e 's/TERJJJJ/
50/g' -e 's/EPSIIIII/1.00D-3/g' jjj > iii
  breaksw
endsw
# rm jjj

switch($m2)
  case 2:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/1.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case 3:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/2.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case 5:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/1.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case 6:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/2.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case 8:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/1.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case 9:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/2.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case A:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/5.000D-5/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case B:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/5.000D-5/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case C:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/5.000D-5/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case D:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/2.000D-5/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
  case E:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/      500/g' -e
's/DTDTDTD/1.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw

```

```

    case F:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/ 500/g' -e
's/DTDTDTDT/2.000D-4/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
    case G:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/ 500/g' -e
's/DTDTDTDT/5.000D-5/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
    default:
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/ITITIT/ 500/g' -e
's/DTDTDTDT/2.000D-5/g' iii > U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
endsw
breaksw

#-----
.....<「化学反応モデルの簡略化」の比較用>
    default:
# IMP1111 = 0 : FOR EXPLICIT METHOD
    sed -e 's/IMP1111/ 0/g' iii > jjj
rm iii
#----- FOR EXPLICIT METHOD
# ITITIT = 500
# TERIIIII = 1 / 100
# TERJJJJ = 1
# EPSIIIII = 1.0D-3
# EPSJJJJ = 1.0D-5
# OHM1234 = 1.0D-1
# TERKKKK = 1 / 100
# IFUNC22 = 0 / 1
# DTDTDTDT = 2.000D-5

    sed -e 's/EPSIIIII/1.00D-3/g' -e 's/EPSJJJJ/1.00D-5/g' -e
's/OHM1234/1.00D-1/g' -e 's/ITITIT/ 500/g' -e 's/TERJJJJ/ 1/g'
-e 's/DTDTDTDT/2.000D-5/g' jjj > iii

switch($m2)
    case 0:
#..... TERIIIII = 1 , TERKKKK = 1 , IFUNC22 = 0
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/TERIIIII/ 1/g' -e
's/TERKKKK/ 1/g' -e 's/IFUNC22/ 0/g' iii >
U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
    case 1:
#..... TERIIIII = 10 , TERKKKK = 1 , IFUNC22 = 0
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/TERIIIII/ 10/g' -e
's/TERKKKK/ 1/g' -e 's/IFUNC22/ 0/g' iii >
U0327${m1}${m2}${m3}
    breaksw
    case 2:
#..... TERIIIII = 100 , TERKKKK = 1 , IFUNC22 = 0
    sed -e 's/XXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/TERIIIII/ 100/g' -e
's/TERKKKK/ 1/g' -e 's/IFUNC22/ 0/g' iii >
U0327${m1}${m2}${m3}

```

```

breaksw
case 3:
#..... TERIIIII = 1 , TERK KKK = 10 , IFUNC22 = 0
sed -e 's/XXXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/TERIIIII/ 1/g' -e
's/TERK KKK/ 10/g' -e 's/IFUNC22/ 0/g' iii >
U0327${m1}${m2}${m3}
breaksw
case 4:
#..... TERIIIII = 1 , TERK KKK = 100 , IFUNC22 = 0
sed -e 's/XXXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/TERIIIII/ 1/g' -e
's/TERK KKK/ 100/g' -e 's/IFUNC22/ 0/g' iii >
U0327${m1}${m2}${m3}
breaksw
case 5:
#..... TERIIIII = 1 , TERK KKK = 1 , IFUNC22 = 1
sed -e 's/XXXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/TERIIIII/ 1/g' -e
's/TERK KKK/ 1/g' -e 's/IFUNC22/ 1/g' iii >
U0327${m1}${m2}${m3}
breaksw
default:
#..... TERIIIII = 100 , TERK KKK = 100 , IFUNC22 = 1
sed -e 's/XXXXXXXXXX/U0327'$m1$m2$m3'/g' -e 's/TERIIIII/ 100/g' -e
's/TERK KKK/ 100/g' -e 's/IFUNC22/ 1/g' iii >
U0327${m1}${m2}${m3}
breaksw
endsw
breaksw
endsw

rm jjj
rm iii

end

end

end

```

付録D. パラメータサーベイ用実行シェルスクリプトのサンプル  
(「もんじゅ」蒸発器体系・ケース1の場合)

下記は、本作業におけるパラメータサーベイのための実行シェルである。シェル変数m1～m3の意味は、C. と同じである。

実行シェルの実行手順は次の通りである。

(1) echo 'U0327'\$m3\$m2\$m1 > int

「int」ファイルに入出力ファイル名がリダイレクト入力される。

(2) date > U0327\${m3}\${m2}\${m1}.OT

反応基本コード実行直前の時刻を「U0327\${m3}\${m2}\${m1}.OT」に記録(リダイレクト)。

(3) \${cwd}/s80 < int > U0327\${m3}\${m2}\${m1}.OX

反応基本コードの実行ファイル名は、「s80」である。また、実行中の標準出力は「U0327\${m3}\${m2}\${m1}.OX」にリダイレクトされる。

(4) date >> U0327\${m3}\${m2}\${m1}.OT

反応基本コード実行直後の時刻を「U0327\${m3}\${m2}\${m1}.OT」に再び記録(リダイレクト)。

(5) grep TIME U0327\${m3}\${m2}\${m1}.O2 >U\${m3}\${m2}\${m1}

「\*.O2」出力ファイルにおける境界通過流量の時間経過を、「U\*」ファイルに別途作成する(grepコマンドで文字TIMEを含む行を探索)。

ファイル名：X980327C

```
#!/bin/csh
#
# < X980327C > Execute Shell for New SIMA
#   MONJU-EVAPORATOR GEOMETRY
#
#-----METHOD LOOP
foreach m1 ( 1 2 )

#-----OPTIONS LOOP
switch($m1)
  case 1:
foreach m2 ( 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 A B C D E F G )
  breaksw
  default:
foreach m2 ( 0 1 2 3 4 5 6 )
  breaksw
endsw

#-----EV LOOP
#foreach m3 ( 1 2 3 4 5 )
foreach m3 ( 1 )

echo 'U0327'$m1$m2$m3 > int
date > U0327${m1}${m2}${m3}.OT
${cwd}/s80 < int > U0327${m1}${m2}${m3}.OX
date >> U0327${m1}${m2}${m3}.OT
grep TIME U0327${m1}${m2}${m3}.O2 >U${m1}${m2}${m3}

rm U*.O1
rm U*.RS
#compress U*.RS

end

end

end
```

## 付録E. コード使用時の注意

### (1) FORTRAN処理系による変更点

以下の事項は、コード開発と試計算に使用したEWS(日立製3050RX)に固有の処理である。よって、他の処理系への導入に当たっては変更が必要である。

- ・OPEN文中の「TYPE」オプションは、他の処理系では削除が必要である。
- ・COMMON/CLCK/ブロックは、解析時間やCPU使用時間表示に関するEWS独自の拡張機能に用いられる。他の処理系では、メインモジュールにおけるCOMMON/CLCK/ブロックの変数使用部分の削除が必要である。

### (2) タイムステップの制約

本コードでは時間積分法として、Euler陽解法またはSIMPLE法に基づく陰解法を使用している。それぞれの解法において、下記のようにタイムステップの制約条件がある。

時間積分法として陽解法を選択した場合、流動中の物性値伝播速度(=音速)によりタイムステップが制約される。この場合、タイムステップの大きさは(最小計算セル寸法)/(流体の音速)以下の基準を満たせばよいが、さらに気液二相流の保存式を連立して解く際の不安定性回避のため、上記基準より数分の1以上小さいタイムステップが望ましい。

なお、本解析作業の体系では、タイムステップの基準は(メッシュ寸法 $10^{-1}$ mのオーダー)/(音速 $=10^3$ m/sのオーダー) $=10^{-4}$ sのオーダーとなるが、これより10分の1程度小さいタイムステップで解析した。

一方、時間積分法として陰解法を選択した場合、陽解法のような明確なタイムステップの制約は無い。しかし、あまりタイムステップを大きく取ると、タイムステップ間の流体諸量の変化が大きくなるために計算が不安定になりやすく、また計算精度が低下する場合がある。SIMPLE法に基づく陰解法の場合、タイムステップの大きさの目安は、(メッシュ寸法)/(流速)を大きく超えない大きさまでとされている。

実際の動作状況については、6. を参考にされたい。

### (3) 解析速度の改善について

本コードでは、時間積分方法の選択によらずモジュールSTATE2とVTPにおいて、気液相の平均温度算出時の非線形方程式の解の探索(収束計算)を実施する。この計算において、2つの探索モジュールLIT(割線法)、BIT(二分法・はさみうち法の併用法)を用意している。LITでは、初期値の制約はないものの初期値により収束速度が大きく依存する。一方のBITでは、求める解(方程式の零点)を挟むように2つの初期値を与える必要があり、収束速度は余り高くない。このように、2つの探索法には一長一短があるが、物性値関数の性質を見極めてモジュール・初期値の設定を変更すれば、解析速度の向上はある程度期待できる。

今回用意した物性値関数は単調変化のため、初期値制約の無いLITを用いている。

### (4) 本解析作業における解析の高速化

時間積分法としてEuler陽解法を選択した場合、圧力算出モジュールPRESSD/PRESSF内の温度探索と圧力探索における、計算負荷の非常に大きい2重の非線形方程式解の探索(収束計算)を必要とする。このことから、本コードでは一定のタイムステップ間隔で圧力を更新することで、圧力算出部分における解析負荷をある程度低減できる。ただし、この圧力計算方法は、圧力に依存する保存量評価の精度を下げているため、解析全体の精度の低下を招く。

解析を本質的に高速化するには、タイムステップ依存性の緩和が可能な陰解法を採用した方が良い。

### (5) 陰解法に関連したパラメータ

5章に述べたように、陰解法に関連したパラメータは、次の通りである。

ITERMX	: 外部反復計算の反復回数。
JERMX	: 内部反復(圧力補正式G-S法)計算の反復回数。
EPSI	: 外部反復計算の収束判定因子。
EPSJ	: 内部反復(圧力補正式G-S法)計算の収束判定因子。
OHM	: 圧力補正式計算の緩和係数。
BETA(1)	: 陰解法収束計算パラメータ(流速)

BETA(2) : 陰解法収束計算パラメータ(圧力補正值)。

BETA(3) : 陰解法収束計算パラメータ(圧力)。

次の項目におけるそれぞれのパラメータは、相互に関連し、(a)～(c)の項目相互も関連する。

(a) SIMPLE法の圧力補正式の収束判定ループ：ITERMXと、EPSI。

(b) 圧力補正式(ポアソン式)の行列解法：JTERMXと、EPSJ。

(c) 陰解法収束計算における緩和係数：BETA(1)～BETA(3)と、OHM。

陰解法を用いて解析するに当たっては、まず上記のパラメータを調整して、解析速度(=反復計算における収束速さ)や解析安定性を確認するように、推奨する。