

# 多次元熱流動解析コードAQUAへの エアロゾルモデルの組み込み

1997年12月

動力炉・核燃料開発事業団  
大洗工学センター

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下さい。

〒311-1393 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

Inquires 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, 311-1393, Japan

© 動力炉・核燃料開発事業団

(Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation) 1998

## 多次元熱流動解析コードAQUA へのエアロゾルモデルの組み込み

木曾原 直之\*1

山口 彰\*2

## 要旨

高速炉安全解析の一環として、ナトリウム燃焼時のエアロゾルの主要機器等へ移行量、空气中湿分との反応量および燃焼熱のエアロゾル粒子を介したふく射伝熱による周囲構造物への影響を評価する必要がある。このために、従来からエアロゾルの挙動解析にはABC-INTG (Aerosol Behavior in Containment-INTeGrated Version) が用いられてきた。しかし、ABC-INTGは1セルモデルによる均一な雰囲気における挙動を計算するコードであるため、より詳細な室内のエアロゾル濃度分布を把握することを目的として、多次元熱流動解析コードAQUAにABC-INTGで用いられているエアロゾル計算モデルを組み込むこととした。

AQUAは多セルモデルによりガスの熱流動を計算し、エアロゾル粒子の空間的な濃度分布を詳細に評価できる。一方、ABC-INTGは1セル内におけるエアロゾル粒子の発生、凝集、壁や床への付着を計算し、エアロゾル粒径分布と濃度を求めることができる。つまり、この両者の長所を組み合わせることによって、エアロゾル特有の挙動計算を行いつつ流体の流れを解析し、エアロゾルの室内での移動を把握しようとするものである。ABC-INTGとAQUAはそれぞれ別途開発されたコードであるため、そのモデル化の違いのためのインターフェイスプログラムが重要になる。組み込みに際して、オリジナルのABC-INTGからの各計算モデルのサブルーチンを抽出・修正・追加し、インターフェイスプログラムを介してAQUAとデータ授受を行いながら過渡計算を行えるように整備した。

本報告書ではエアロゾルモデルとその組み込み手法について述べる。また、試計算として単純な体系の解析を実施し、物理的に妥当な結果を得ることもできた。これにより、AQUAコードにおいてエアロゾルを取り扱うことが可能となり、ナトリウム燃焼時のガスの熱流動とエアロゾルの挙動を連携させた詳細な解析を実施できる見通しを得ることができた。

---

\* 1 安全工学部 プラント安全工学室

\* 2 基盤技術開発部 熱流体技術開発室

## Installation of Aerosol Behavior Model into Multi-Dimensional Thermal Hydraulic Analysis Code AQUA

Naoyuki KISOHARA\*1 Akira YAMAGUCHI\*2

### Abstract

The safety analysis of FBR plant system for sodium leak phenomena needs to evaluate the deposition of the aerosol particle to the components in the plant, the chemical reaction of aerosol to humidity in the air and the effect of the combustion heat through aerosol to the structural component. For this purpose, ABC-INTG (Aerosol Behavior in Containment -INTeGrated Version) code has been developed and used until now. This code calculates aerosol behavior in the gas area of uniform temperature and pressure by 1 cell-model. Later, however, more detailed calculation of aerosol behavior requires the installation of aerosol model into multi-cell thermal hydraulic analysis code AQUA.

AQUA can calculate the carrier gas flow, temperature and the distribution of the aerosol spatial concentration. On the other hand, ABC-INTG can calculate the generation, deposition to the wall and floor, agglomeration of aerosol particle and figure out the distribution of the aerosol particle size. Thus, the combination of these two codes enables to deal with aerosol model coupling the distribution of the aerosol spatial concentration and that of the aerosol particle size.

AQUA and ABC-INTG were developed separately, therefore, several subroutine were modified and composed. Especially, the interface program which exchanges data between these two codes is important to execute transient calculation.

This report describes aerosol behavior model, how to install the aerosol model to AQUA and new subroutine equipped to the code. Furthermore, the test calculations of the simple structural model were executed by this code, appropriate results were obtained. Thus, this code has prospect to predict aerosol behavior by the introduction of coupling analysis with multi-dimensional gas thermo-dynamics for sodium combustion evaluation.

---

\* 1 Safety Engineering Division Plant Safety Engineering Section

\* 2 Advanced Technology Division Thermal-Hydraulics Research

## 目次

1. 緒言 .....	1
2. 計算モデル .....	2
2.1 概要 .....	2
2.2 エアロゾル計算モデル .....	3
2.3 インターフェイスプログラム .....	7
2.3.1 単位変換 .....	7
2.3.2 エアロゾル粒子径のの群数 .....	7
2.3.3 ブラウン運動拡散計数算出 .....	8
2.4 エアロゾル計算モデルの組込 .....	10
3. 試計算 .....	16
3.1 試計算体系 .....	16
3.2 試計算結果 .....	16
4. コードマニュアル .....	20
4.1 入力データ .....	20
4.2 サブルーチン機能説明 .....	20
4.3 変数説明 .....	20
5. 結言 .....	31
謝辞 .....	32
参考文献 .....	33

## 図表リスト

## [表]

表4.1-1	ABC-INTG用入力データ	21
表4.3-1(1/4)	サブルーチン引数の説明	22
表4.3-1(2/4)	サブルーチン引数の説明	23
表4.3-1(3/4)	サブルーチン引数の説明	24
表4.3-1(4/4)	サブルーチン引数の説明 (新規サブルーチン)	25
表4.3-2(1/4)	コモン変数の説明	26
表4.3-2(2/4)	コモン変数の説明	27
表4.3-2(3/4)	コモン変数の説明	28
表4.3-2(4/4)	コモン変数の説明	29

## [図]

図2.1-1	エアロゾル計算モデル概念図	11
図2.1-2	全体フロー図	12
図2.2-2	燃焼による新規発生エアロゾル濃度分布	13
図2.3-1	インターフェイスプログラムの役割	14
図2.4-1	エアロゾル計算モデルの組込	15
図3.1-1	エアロゾルモデル試計算体系	17
図3.1-2	試計算結果1 (縦3セルモデル)	18
図3.1-3	試計算結果2 (横3セルモデル)	19
図4.2-1	エアロゾル計算モデル各サブルーチンの呼び出し系列と計算機能	30

## 1 緒言

ナトリウム漏洩・燃焼時に発生するエアロゾルの挙動を評価するために、従来からABC-INTG (Aerosol Behavior in Containment-INTeGrated Verssion) コードが用いられてきた。ABC-INTGの特長として、エアロゾルの発生、凝集、消滅メカニズムについての物理モデルを有し、粒径を多群分割することによりエアロゾル濃度と粒径分布を精度良く求めることができる。しかし、1セルモデルを採用しているため、均一な雰囲気を仮定したエアロゾルの挙動を計算するものであった。したがって、空間的なエアロゾル濃度の分布や粒径分布の違いを把握するためには多次元モデルを考慮する必要があった。

このため、多次元熱流動解析コードAQUAにABC-INTGで用いられているエアロゾル挙動計算モデルを組み込み、この両者の長所を組み合わせることによって、エアロゾル特有の挙動計算を行いつつ流体の流れを求め、エアロゾルの空間的な位置における粒径分布と濃度分布を解析できるようにした。ここで、エアロゾルモデルの取り扱いにおいて、ABC-INTGは上述したように1セル多群モデルであるのに対し、AQUAは多セル1群モデルである。このため、両者をリンクしデータの授受が行いながら計算させるためには、質量やエネルギーを保存しつつ群数を変換できるインターフェイスが重要になる。

本報告書ではAQUAに組み込んだエアロゾル計算モデルおよびインターフェイスについて記載する。また、これを用いた試計算も実施したのでこの結果についても述べるものとする。

## 2 計算モデル

### 2.1 概要

エアロゾル挙動に関する物理機構は、①エアロゾル粒子の結合による粒子径の増加（凝集）、②壁や床への付着（消滅）、③キャリアガス流等による移動および④燃焼による発生である。おのおのについてはさらに詳細に下に示す様に分類され、ABC-INTGまたはAQUAで計算する。

#### ①凝集計算

- ・ ブラウン運動による凝集 → ABC-INTG
- ・ 重力沈降速度差による凝集 → ABC-INTG
- ・ 乱流による凝集 → ABC-INTG

#### ②消滅計算

- ・ ブラウン拡散による壁および床への沈着 → ABC-INTG
- ・ 熱泳動による壁および床への沈着 → ABC-INTG
- ・ 重力沈降による床への沈着 → ABC-INTG

#### ③移動計算

- ・ キャリアガスによる移動 → AQUA
- ・ ブラウン拡散による移動 → AQUAおよびインターフェイスプログラム
- ・ 重力沈降、熱泳動による移動 → ABC-INTG

#### ④生成計算

- ・ ナトリウム燃焼による生成 → AQUAおよびABC-INTG

AQUAとABC-INTGの計算モデル概念を図2.1-1に示す。AQUAは多セルモデルを用いており、キャリアガス流およびブラウン拡散によるエアロゾルの空間的な移動と濃度分布を計算する。さらに燃焼モデルにより燃焼セルのエアロゾル発生重量を算出する。一方、AQUAの過渡計算において各セルごとにABC-INTGを呼び、1セル内でのエアロゾルの凝集、熱泳動や重力による壁や床への付着および隣接セルへのエアロゾル移動を計算する。ABC-INTGは1セルモデルであるが、エアロゾルの凝集、床、壁への付着を詳細に計算するため、エアロゾル粒子径の分布を考慮した群分割モデル（径を複数に分割して各群のエアロゾル濃度変化を計算する）を採用している。このため、AQUAとデータのやり取りについては以下の変換を行うインターフェイスを作成する必要がある。

- ・ AQUA → 多セル 1群モデル
- ・ ABC-INTG → 1セル 多群モデル

AQUAにABC-INTGを組み込んだ全体フロー図を図2.1-2に示す。AQUAおよびABC-INTGの入力データの読み込みおよびこれに基づいた初期条件設定を最初に行う。その後、AQUAの初期収束（定常）計算を経て過渡計算を実施し、この時間ループの中で毎回ABC-INTGを呼びエアロゾル挙動計算を行う。

2.2節、2.3節にABC-INTGモデルおよびインターフェイスについて記す。また、エアロゾルモデル組み込みの計算フローを2.4節で述べる。



## 2.2 エアロゾル計算モデル

エアロゾルの①凝集、②消滅、③移動および④発生に関しては以下に示す計算をABC-INTGにて行う。

### ①凝集計算

エアロゾル粒子の衝突、合体、成長による凝集機構についてはブラウン運動、重力沈降速度差および乱流による凝集の3つのモデルを用いた。この計算はAQUAのすべての計算セルに対して行われる。それぞれによる凝集係数基礎式を以下に示し、全体の凝集係数はこれら3つの和として表される。また、粒径変化概念を図2.2-1に示す。

#### ・ブラウン凝集係数 $\beta_B$

2粒子(添字*i,j*)間のブラウン運動による凝集係数 $\beta_B(\text{cm}^3/\text{sec})$ は2.2-1式で示される。

$$\beta_B = 4\pi(D_i + D_j) \cdot (r_i + r_j) \frac{\gamma}{\chi} \quad (2.2-1式)$$

$$D = \frac{k_0(T_g + 273)}{6\pi\mu_g \bar{r}} (1 + A \cdot \text{Kn}) \quad (2.2-2式)$$

$$A = 1.257 + 0.40 \exp\left(-\frac{1.10}{\text{Kn}}\right) \quad (2.2-3式)$$

$$\text{Kn} = \frac{\ell}{\bar{r}} \quad \bar{r} = \frac{r_i + r_j}{2} \quad (2.2-4式)$$

$k_0$  : Boltzmann定数 ( $\text{g} \cdot \text{cm}^2/\text{sec}^2 \cdot \text{K}$ )     $\mu_g$  : キャリアガス粘性係数 ( $\text{g}/\text{cm} \cdot \text{sec}$ )  
 $A$  : Cunningham補正係数     $\ell$  : 平均自由行程 (cm)  
 $\text{Kn}$  : Knudsen数     $\gamma$  : 凝集形状係数 (-)  
 $T_g$  : 温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )     $\chi$  : 形状係数 (-)  
 $r$  : エアロゾル粒子半径 (cm)

#### ・重力凝集係数 $\beta_G$

異なる粒径を持つ2粒子間(添字*i,j*)では重力沈降速度差による凝集が発生するが、この時の凝集係数 $\beta_G(\text{cm}^3/\text{sec})$ は2.2-5式で表される。

$$\beta_G = \pi(r_i + r_j)^2 \cdot |V_{s,i} - V_{s,j}| \cdot \gamma^2 \cdot \varepsilon \quad (2.2-5式)$$

$$V_s = \frac{2\rho_a g}{9\mu_g} r^2 \cdot (1 + A \cdot \text{Kn}) \frac{1}{\chi} \quad (2.2-6式)$$

$V_s$  : 粒子の沈降速度 (cm/sec)     $g$  : 重力加速度 ( $\text{cm}/\text{sec}^2$ )  
 $\varepsilon$  : Fuchsの重力衝突効率     $\rho_a$  : エアロゾル個体密度 ( $\text{g}/\text{cm}^3$ )  
 $\mu_g$  : キャリアガス粘性係数 ( $\text{g}/\text{cm} \cdot \text{sec}$ )  
 $r$  : エアロゾル粒子半径 (cm)

・乱流凝集係数  $\beta_T$

乱流速度場では渦や速度変動成分のために粒子間の凝集が発生する。この時の凝集係数  $\beta_T$ (cm<sup>3</sup>/sec)は2.2-7式で表される。

$$\beta_T = \beta_{T,1} + \beta_{T,2} \quad (2.2-7式)$$

$$\beta_{T,1} = \left( \frac{8\pi\rho_g}{15\mu_g} \varepsilon_T \right)^{1/2} (r_i + r_j)^3 \cdot \gamma^3 \cdot \varepsilon \quad (2.2-8式)$$

$$\beta_{T,2} = \frac{4\rho_a\sqrt{2\pi}}{9\mu_g} \cdot \left( \frac{1.69 \cdot \varepsilon_T^3 \cdot \rho_g}{15\mu_g} \right)^{1/4} \cdot |r_i(r_i + A_i \ell) - r_j(r_j + A_j \ell)| \cdot (r_i + r_j)^2 \cdot \frac{\gamma^2}{\chi} \cdot \varepsilon \quad (2.2-9式)$$

A : Cunningham補正係数 (2.2-3式)

$\rho_g$  : キャリアガス密度 (g/cm<sup>3</sup>)

$\varepsilon_T$  : 乱流エネルギー散逸率 (cm<sup>2</sup>/sec<sup>3</sup>)

②消滅計算

消滅とはエアロゾル粒子の壁および床への付着を言う。付着の駆動力としては重力、ブラウン拡散および壁、床とセルの温度差による熱泳動である。床、壁に接していないセルは消滅計算を行わず、隣接セルへのエアロゾル移動計算を行う。

・熱泳動沈着速度  $V_T$

冷却壁面の近傍では温度境界層において壁面に向かう負の温度勾配が生じることからエアロゾル粒子が熱泳動効果によって壁面に移動、付着する。この時の粒子の移動速度  $V_T$  (cm/sec)は2.2-10式で示される。

$$V_T(r) = \frac{3\mu_g}{2\rho_g(T_g + 273)} \times \frac{1 + A \cdot Kn}{1 + 3C_m Kn} \times \frac{\frac{k_g}{k_a} + Ct \cdot Kn}{1 + 2\frac{k_g}{k_a} + 2Ct \cdot Kn} \times \frac{T_g - T_w}{\delta_T} \frac{1}{\chi} \quad (2.2-10式)$$

$$C_m = 1.0$$

$$C_t = 3.32$$

$k_g$  : キャリアガス熱伝導率 (g · cm<sup>2</sup>/sec<sup>2</sup> · K)

$k_a$  : エアロゾル粒子熱伝導率 (g · cm<sup>2</sup>/sec<sup>2</sup> · K)

$T_g$  : キャリアガス温度 (°C)

$T_w$  : 壁温度 (°C)

$\delta_T$  : 温度境界層厚さ (cm)

・重力沈着速度  $V_s(v)$

粒子の重力沈着速度  $V_s$ は2.2-6式のStokesの式で表される。

・ブラウン拡散沈着速度 $V_d$

粒子はブラウン運動によって壁面に沈着するが、その時の沈着速度 $V_d$ (cm/sec)はFickの拡散式で表される(2.2-11式)。

$$V_d(r) = \frac{D}{\delta_d} = \frac{k_0(T_g + 273)}{6\pi\mu_g r \delta_d} (1 + A \cdot Kn) \frac{1}{\chi} \quad (2.2-11式)$$

$k_0$ : Boltzmann定数 ( $g \cdot cm^2/sec^2 \cdot K$ )	$\mu_g$ : キャリアガス粘性係数 ( $g/cm \cdot sec$ )
$A$ : Cunningham補正係数 (2.2-3式)	$\ell$ : 平均自由行程 (cm)
$Kn$ : Knudsen数 (2.2-4式)	$\delta_d$ : 拡散境界層厚さ (cm)
$T_g$ : 温度 ( $^{\circ}C$ )	$\chi$ : 形状係数 (-)
$r$ : エアロゾル粒子半径 (cm)	$D$ : エアロゾル粒子拡散係数 ( $cm^2/sec$ )

③移動計算

壁、床に接していないセルに存在するエアロゾル粒子は重力または熱泳動によって隣接セルへ移動する。重力によるエアロゾル移動は直下のセルのみであり、熱泳動は直方体のセルの6面すべてについて隣接セルとの温度差によって移動する。

熱泳動速度は消滅計算時と同様に2.2-10式を、また重力沈着速度については2.2-6式を用い、エアロゾルの移動に伴うセル内エアロゾルの増減はセルからの各面(6面)の移動速度、面積およびタイムステップ $dt$ により求めた。

$$V_{cell} \cdot \frac{dq(r)}{dt} = S_s \cdot V_s(r) + \sum_{m=1}^6 S_m \cdot V_{T(r),m} \quad (2.2-12式)$$

$\uparrow$   
 重力沈着による移動

$\uparrow$   
 熱泳動による移動

$V_{cell}$  : セル容積 ( $cm^3$ )

$q(r)$  : 粒径 $r$ のエアロゾル体積濃度 ( $cm^3/cm^3$ ) (注)

$m$  : 面番号 ( $m=1 \sim 6$ ) 図A-1および図A-2参照

$S_m$  : セル各面の面積 ( $cm^2$ )

$V_{T(r),m}$  : 粒径 $r$ のエアロゾルの $m$ 面を横切る熱泳動速度 ( $cm/sec$ )

$V_s(r)$  : 粒径 $r$ のエアロゾル下面を横切る重力降下速度 ( $cm/sec$ )

(注) 体積濃度 : エアロゾル粒子体積とセル容積の比

なお、ブラウン拡散による移動については、拡散係数をインターフェイスプログラムで求め、移動はAQUAで計算する。拡散係数の詳細は2.3.3節で述べる。

## ④生成計算

AQUAにおいて燃焼セルでのエアロゾル発生重量 $G_{aero}$ を計算し、この値をABC-INTGに引き継ぐ。ABC-INTGでは新規に発生するエアロゾルは粒径に対して対数正規分布を仮定しており、初期の粒子総数を $N_0$ とすると、初期粒子分布 $n(r)$ は2.2-13、2.2-14式で表される。

$$n(r) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi} \cdot \ln \sigma_g} \cdot \exp \left\{ -\frac{\left( \ln \frac{r}{r_g} \right)^2}{2(\ln \sigma_g)^2} \right\} \cdot \frac{1}{r} \quad (2.2-13式)$$

$$N_0 = \frac{C_0}{\frac{4}{3} \pi r_g^2 \rho_a \exp \left\{ 4.5 (\ln \sigma_g)^2 \right\}} \quad (2.2-14式)$$

$\sigma_g$  : エアロゾル粒径の対数標準偏差 (—)  
 $r$  : エアロゾル粒子半径 (cm)  
 $r_g$  : エアロゾル粒子幾何的平均半径 (cm)  
 $\rho_a$  : エアロゾル粒子個体密度 (g/cm<sup>3</sup>)  
 $C_0$  : 初期エアロゾル濃度 (g/cm<sup>3</sup>)

新規発生エアロゾル重量を体積濃度に換算し、入力データより与えられた対数標準偏差値に基づいてその濃度分布を求め、図2.2-2に示すように、この値を前ステップのエアロゾル濃度分布に加算する。

$$V_{cell} \cdot \frac{dq(r)}{dt} = \frac{G_{aero}}{\rho_a V_{cell}} \times SOC(r) \quad (2.2-15式)$$

$$\left( SOC(r) = \frac{n(r)}{N_0}, \int_{r_{min}}^{r_{max}} SOC(r) dr = 1 \right)$$

$q(r)$  : 粒径 $r$ のエアロゾル体積濃度 (cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>)  
 $G_{aero}$  : セル内新規発生エアロゾル重量 (g)  
 $\rho_a$  : エアロゾル粒子個体密度 (g/cm<sup>3</sup>)  
 $V_{cell}$  : セル容積 (cm<sup>3</sup>)  
 $SOL(r)$  : 半径が $r$ となるエアロゾルの確率密度 (—)

## 2.3 インターフェイスプログラム

AQUAとABC-INTGは、単位、計算モデルの違いにより、インターフェイスプログラムの介在が必要となる。このプログラムの役割は次の3つである。

- ①単位変換
- ②エアロゾル粒子径の群数変換
- ③ブラウン運動拡散係数算出

以下にそれぞれについての詳細を記す。また図2.3-1に説明図を示す。

### 2.3.1 単位変換

ABC-INTGはcgs単位系であるのに対して、AQUAはSI単位系であるため、この変換を行う。

### 2.3.2 エアロゾル粒子径の群数

ABC-INTGはエアロゾルの挙動を詳細に計算するため、その粒子径をグループ分けした多群モデルを採用しており、これに対してAQUAでは群分割を行っていない（1群モデル）。したがって、両者のエアロゾル濃度データをやり取りする際には1群⇔多群の変換が必要である。

ABC-INTG→AQUAへデータ転送する場合（多群→1群変換）においては、各群のエアロゾル体積濃度の総和を求めて1群化する（2.3-1式）。一方、AQUA→ABC-INTGへデータ転送する場合（1群→多群）にはAQUAによるエアロゾル体積濃度の新旧ステップの濃度変化比を旧ステップの各群エアロゾル濃度分布に乗じることによって求める（2.3-2式）。これは、1群→多群においてエアロゾルの総和を保ちつつ、ガスの流れ(AQUA)においてはエアロゾル粒子径分布は変化しない、すなわち、各々の粒子径のエアロゾルは同じ速度を持つことを仮定したものである。

- ・多群→1群（ABC-INTG→AQUA）

$$Q(t) = \sum_{L=1}^{LK} q(L, t) \quad (2.3-1式)$$

- ・多群←1群（ABC-INTG←AQUA）

$$q(L, t+dt) = \frac{Q(t+dt)}{Q(t)} \times q(L, t) \quad (2.3-2式)$$

$Q(t)$ ：1群化したエアロゾル体積濃度（AQUAで用いる）

$q(L, t)$ ：L群エアロゾル体積濃度（ABC-INTGで用いる）

LK：エアロゾル粒子径の群数

## 2.3.3 ブラウン運動拡散係数算出

ブラウン拡散については、ABC-INTGで算出した各群エアロゾル濃度と粒子径を用いてインターフェイスプログラムにより1群化した拡散係数を計算する。AQUAではこの値を用いてブラウン拡散によるセル間のエアロゾル移動を求める。

セル内各群粒子数 $N(L)$ はABC-INTGのエアロゾル体積濃度 $Q(L)$ から求められる。

$$Q(L) = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \cdot N(L) \cdot \frac{4}{3} \pi r(L)^3$$

$$\therefore N(L) = Q(L) V_{\text{cell}} \frac{3}{4 \pi r(L)^3} \quad (2.3-3式)$$

$Q(L)$  : L群エアロゾル体積濃度 (-)

$V_{\text{cell}}$  : 1セル容積 (cm<sup>3</sup>)

$N(L)$  : L群エアロゾル粒子数

$r(L)$  : L群エアロゾル粒子径 (cm)

セル内の全エアロゾル体積濃度 $\bar{Q}$ および全エアロゾル粒子数 $\bar{N}$ は、各群の和をとって、

$$\sum_{L=1}^{KL} Q(L) = \bar{Q} \quad (2.3-4式)$$

$$\sum_{L=1}^{KL} N(L) = \bar{N} \quad (2.3-5式)$$

KL : 群数

したがって、エアロゾル平均体積濃度は、

$$\bar{Q} = \frac{1}{V} \cdot \bar{N} \cdot \frac{4}{3} \pi \bar{r}^3 \quad (2.3-6式)$$

$\bar{r}$  : エアロゾル粒子平均半径

よって、2.3-6式よりエアロゾル粒子平均半径 $\bar{r}$ は次のように求められる。

$$\bar{r} = \sqrt[3]{\frac{3 \bar{Q} V}{4 \pi \bar{N}}} \quad (2.3-7式)$$

この平均半径を用いて、Stokes-Einstienの式より1群化した拡散係数 $D$ を計算する。

$$D = \frac{k_0(T_g + 273)}{6 \pi \mu_g \bar{r}} (1 + A \cdot Kn) \quad (2.3-8式)$$

$$A = 1.257 + 0.40 \exp\left(-\frac{1.10 \bar{r}}{\ell}\right) \quad (2.3-9式)$$

$$Kn = \frac{\ell}{\bar{r}} \quad (2.3-10式)$$

$$\ell = \frac{3\mu_g}{2\sqrt{2}\rho_g} \sqrt{\frac{1.1 \times 10^{-6}}{T_g + 273}} \quad (2.3-11式)$$

$k_0$  : Boltzmann定数

A : Cunningham補正係数

Kn : Knudsen数

$T_g$  : 温度 (°C)

$\mu_g$  : キャリアガス粘性係数 (g/cm · sec)

$\ell$  : 平均自由行程 (cm)

$\rho_g$  : キャリアガス密度 (g/m<sup>3</sup>)

## 2.4 エアロゾル計算モデルの組込

概要で述べたように、過渡計算において毎時間ごとにすべてのAQUA側の計算セルに対してABC-INTGを呼び、エアロゾルの挙動計算を行う。エアロゾルモデルの計算手順を図2.4-1に示し、以下の①～⑦は図中の同じ番号に対応する。

### ①ナトリウム燃焼計算

AQUAで各セルごとに化学反応によるエアロゾル発生重量を計算する。

### ②エアロゾル濃度1群→多群

AQUAで計算したエアロゾル濃度（1群）は、インターフェイスプログラムにより多群化される。（この際、同時に各種引数の単位変換も行われる。）

### ③新規エアロゾル発生

エアロゾル濃度は多群化した状態でABC-INTGに引き渡される。ABC-INTGではまず、AQUAで計算した化学反応が行われているセルの新規発生エアロゾル重量に基づいてエアロゾル粒子の対数正規分布を計算し、セル内の旧来のエアロゾル濃度分布に加算する。（新規発生エアロゾルのないセルは計算しない。）

### ④1セル内エアロゾル挙動計算

1セル内のエアロゾルの凝集および壁、床への付着（消失）を計算する。エアロゾル付着重量は各セルごとに積算され、主要機器等への移行重量を評価できる。

### ⑤隣接セル間エアロゾル移動計算

熱泳動、重力による隣接セルへの移動を計算する。

### ⑥エアロゾル濃度多群→1群

ABC-INTGで計算したエアロゾル濃度（多群）をAQUAに引き渡すため、インターフェイスプログラムにより再度1群化する。同時にAQUAでブラウン拡散を計算するのに必要な拡散係数を算出する。（②と同様に、各種引数の単位変換も行われる。）

### ⑦流動計算

新しいエアロゾル濃度データはAQUAに引き継がれ、キャリアガス流およびブラウン拡散による移動が計算される。



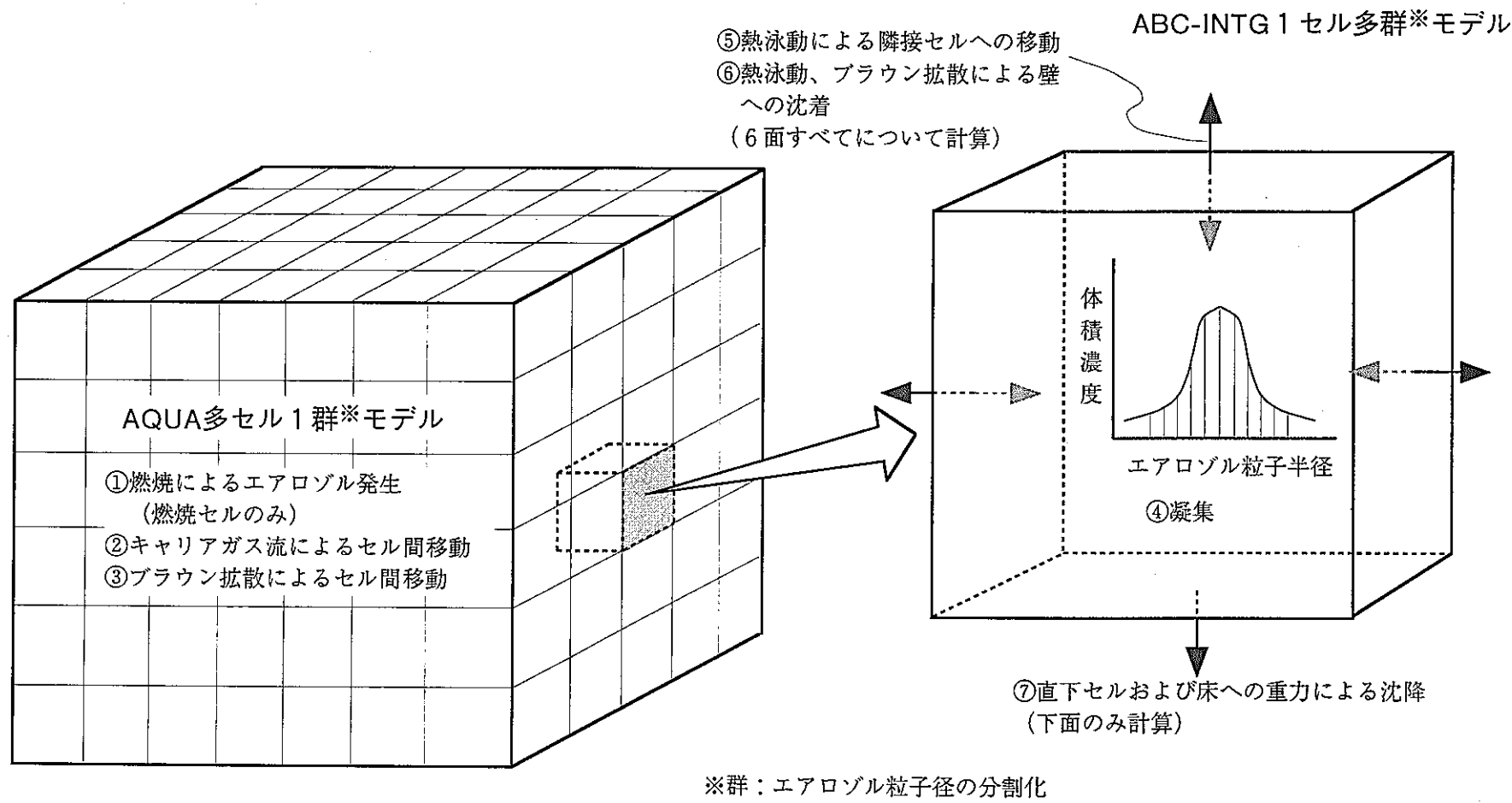


図2.1-1 エアロゾル計算モデル概念図

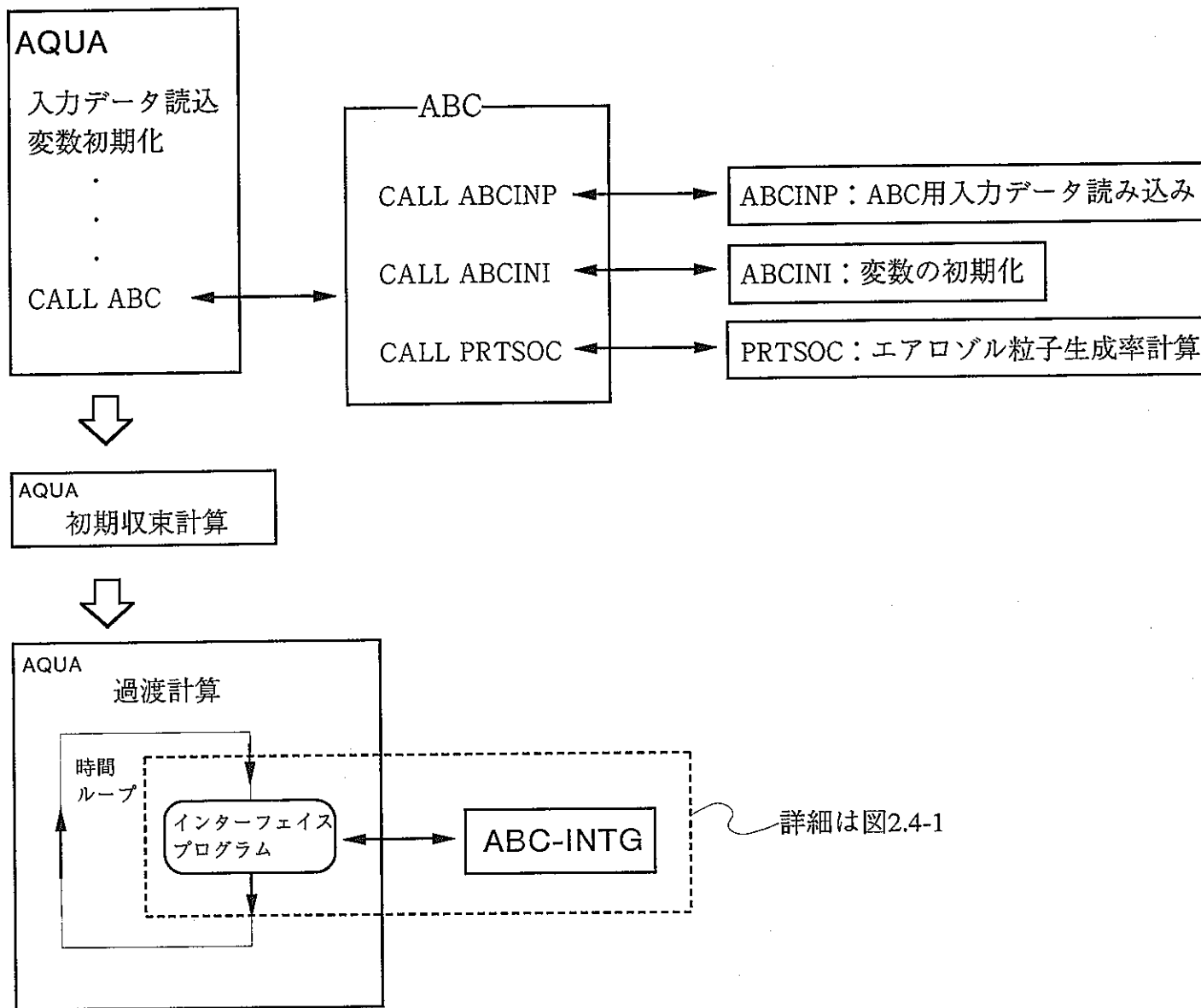


図2.1-2 全体フロー図

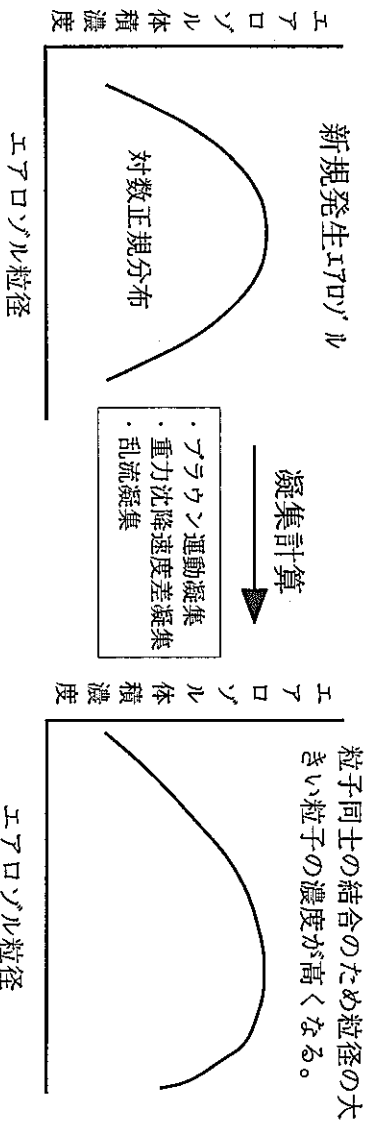


図2.2-1 エアロゾル粒子凝集モデル概念図

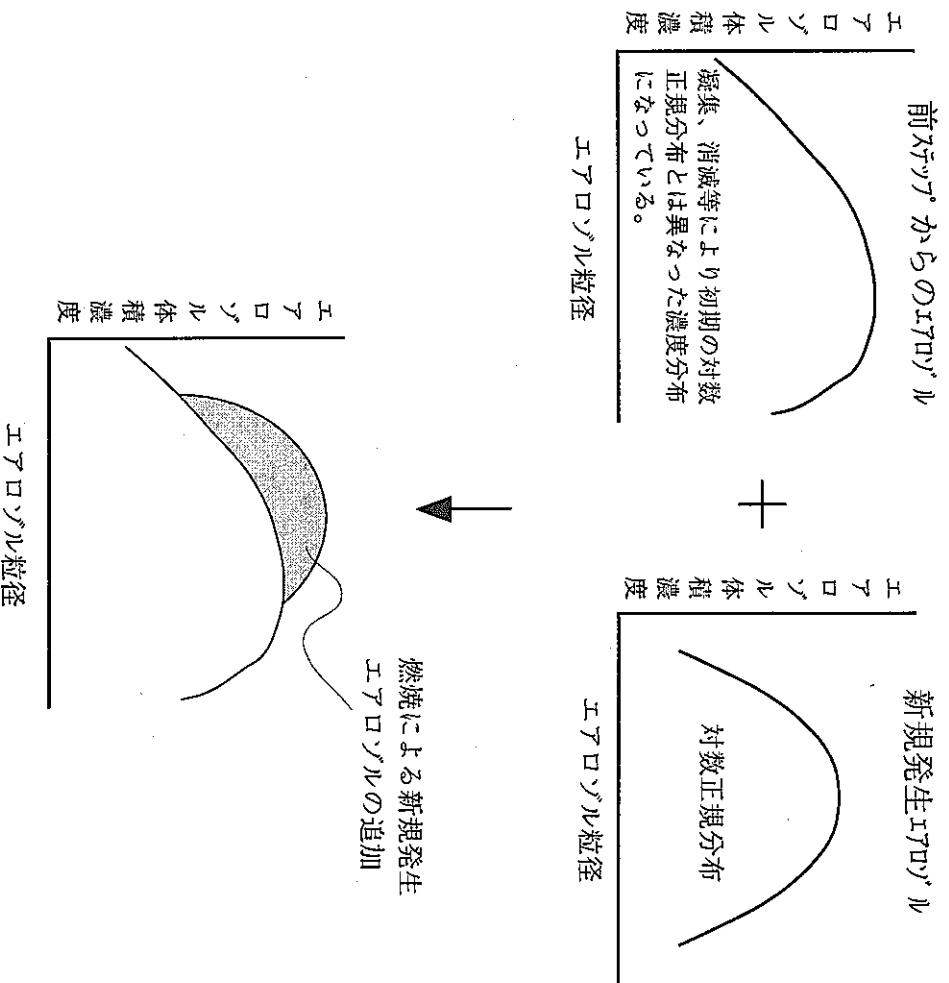


図2.2-2 燃焼による新規発生エアロゾル濃度分布

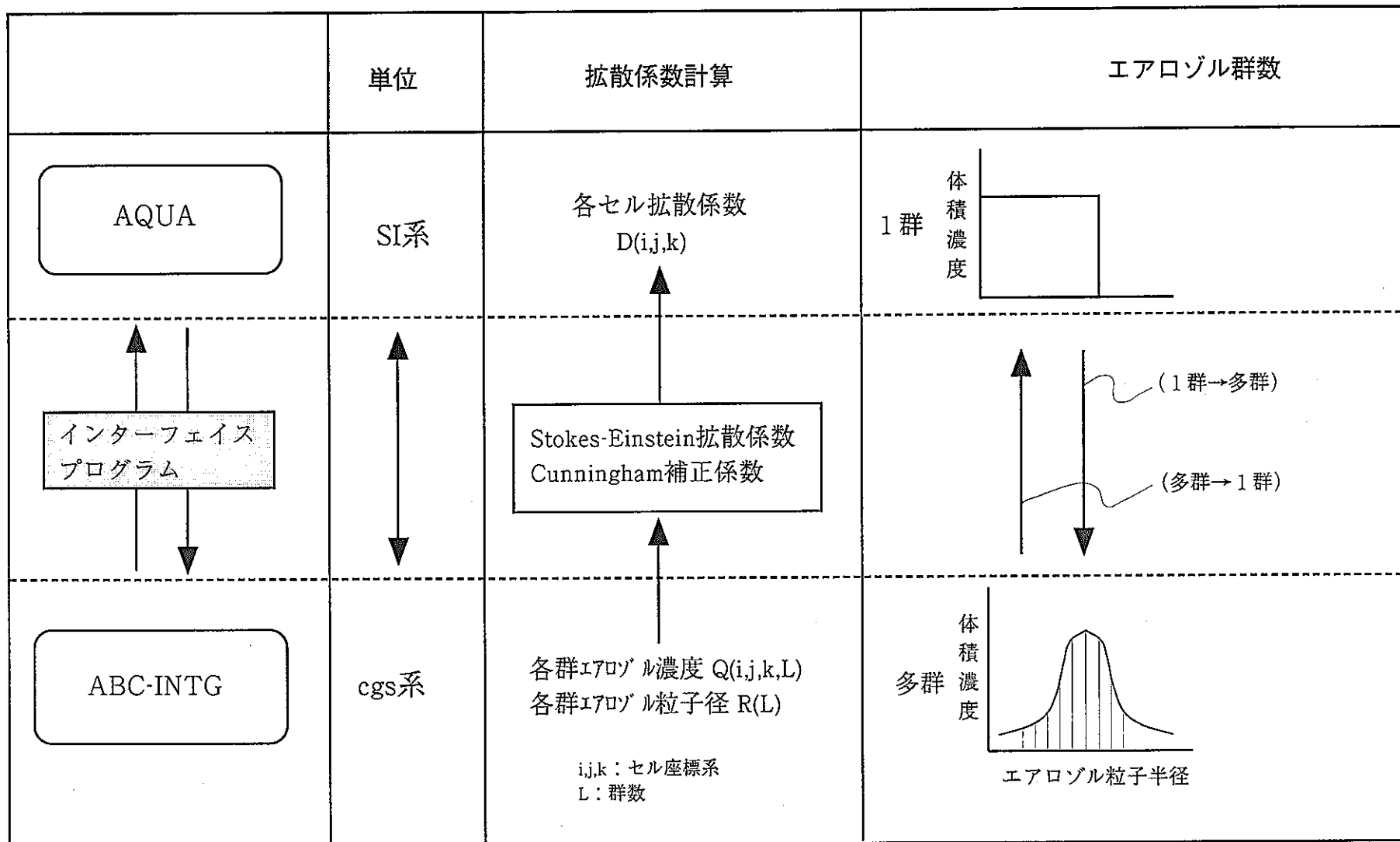


図2.3-1 インターフェイスプログラムの役割

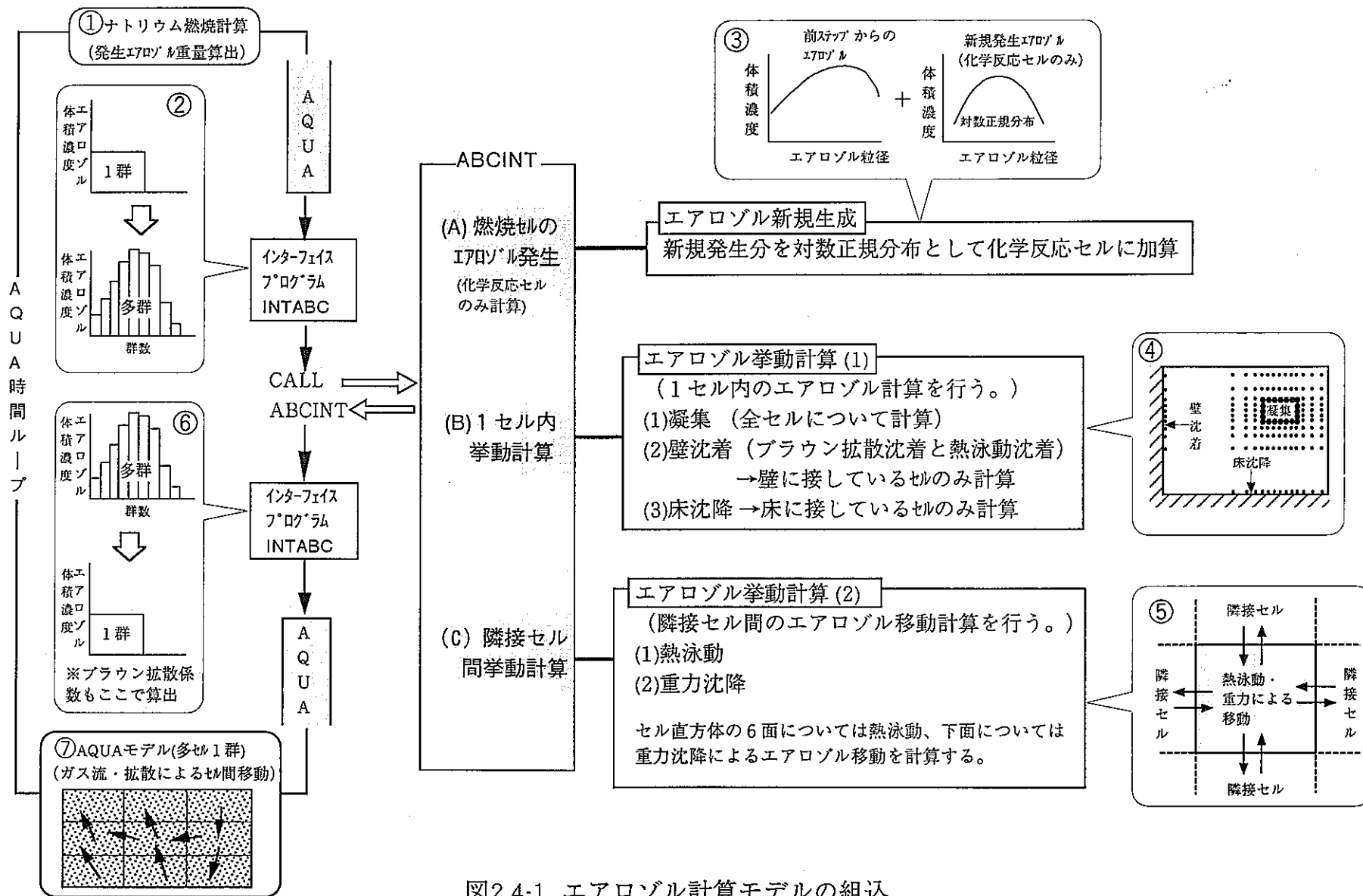


図2.4-1 エアロゾル計算モデルの組込

### 3. 試計算

エアロゾル挙動評価モデルの粒子の凝集、重力沈降および熱泳動による隣接セルへの移動や壁、床への付着がAQUAに組み込まれた状態において正しく計算されていることを確認するために実施した。ここでは、エアロゾルモデルについての2つの簡単な体系を基に試計算を行った。以下に詳細を示す。

#### 3.1 試計算体系

凝集についてはエアロゾル分布形状、重力沈降・熱泳動については隣接セルのエアロゾル濃度、消滅については壁、床への付着量に着目することによって計算結果の妥当性を検討する。

試計算体系1（図3.1-1）は、一辺が10cmの立方体セルから構成される縦3セルモデルであり、最上セルで初期においてのみエアロゾルが発生し、凝集、付着計算を行いながら、重力により下のセルへエアロゾルが順次、移動する。なお、セル温度は同一のため熱泳動による影響はない。一方、試計算体系2（図3.1-1）は横3セルモデルであり、左のセルで継続的にエアロゾルが発生し、凝集、壁床への付着とともにセル間温度差によって順次、右側のセルに熱泳動する。

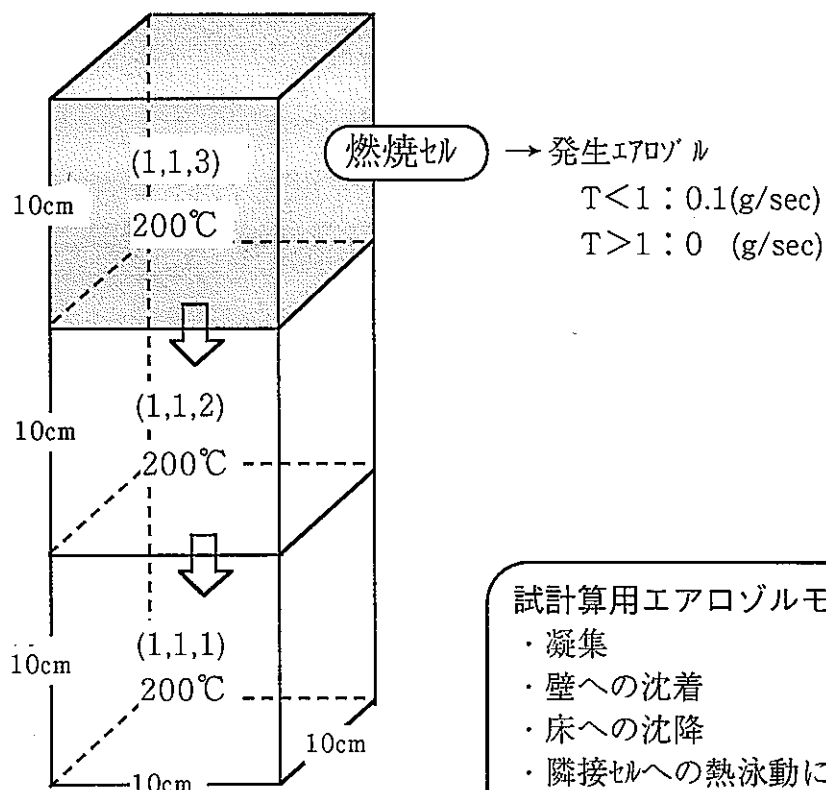
#### 3.2 試計算結果

試計算体系1および試計算体系2の結果をそれぞれ図3.2-1、図3.2-2に示す。

前者については、最上セルにおいては、凝集により時間とともにエアロゾル粒径が大きくなっている。さらに重力により大きい粒子が下のセルへ降下するため、濃度が低くなっていることが確認できる。なお、エアロゾルは初期に存在するのみで継続して発生しないため、最上セルのエアロゾル濃度は上昇しない。一方、その下のセルでは、重力により上からエアロゾルが降下するため、時間とともに濃度が上昇する。降下する速度は粒径が大きいほど大きく、かつ凝集のため、濃度分布曲線はやや右に偏っている。また、合わせて同図中に壁、床に付着するエアロゾル総重量を示すが、時間とともにエアロゾルが消失していく様子が確認できる。

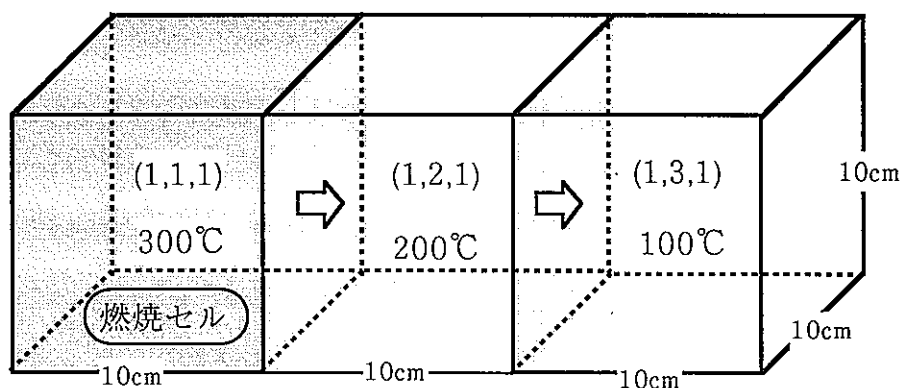
後者については、左のセルにおいてエアロゾルが継続的に発生するため、濃度が上昇するとともに、凝集により最大濃度を示す粒径は大きくなっていく。中央のセル、右側のセルにおいては、温度差によって徐々に左のセルからエアロゾルが熱泳動し、濃度が上昇している。

以上により、エアロゾルモデル組込において、凝集、重力沈降、熱泳動による移動および消滅が妥当であることを確認した。



試計算体型 1  
(縦 3 セルモデル)

- 試計算用エアロゾルモデル
- ・凝集
  - ・壁への沈着
  - ・床への沈降
  - ・隣接セルへの熱泳動による移動
  - ・直下セルへの重力沈降による移動



発生エアロゾル : 0.2 (g/sec)  
 → 継続して発生

試計算体型 2  
(横 3 セルモデル)

図3.1-1 エアロゾルモデル試計算体型

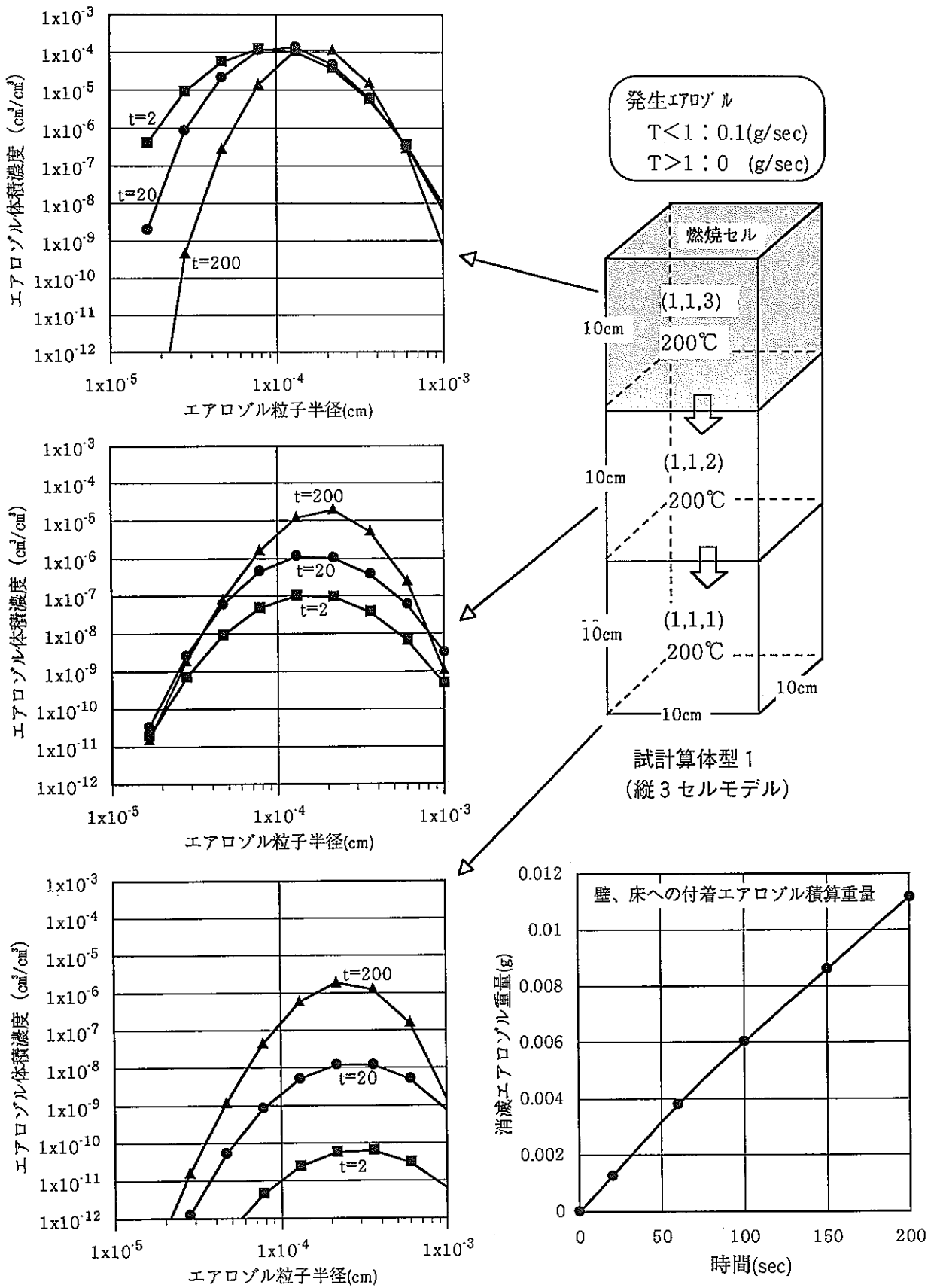


図3.1-2 試計算結果1 (縦3セルモデル)



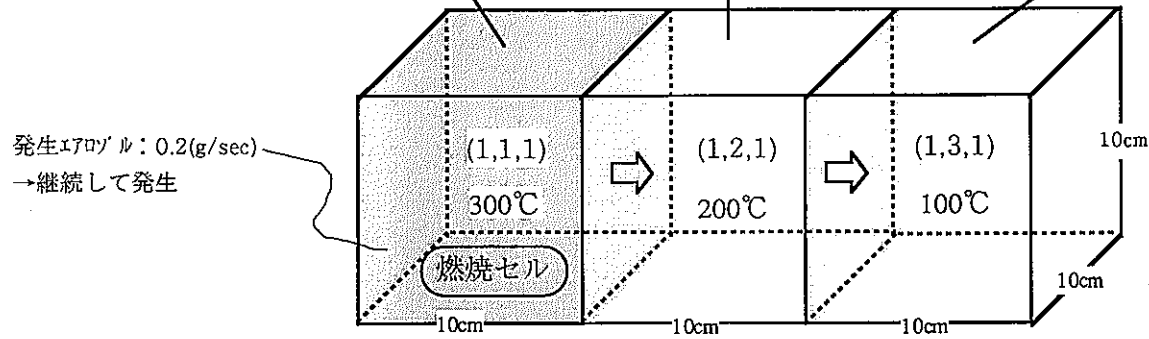
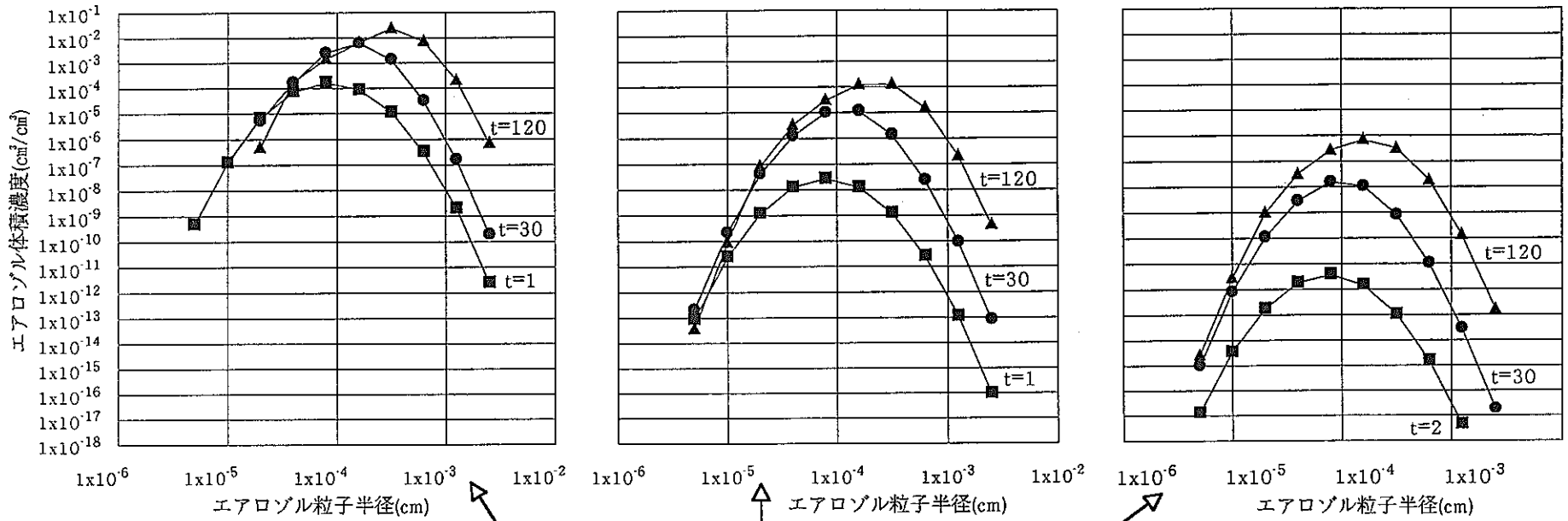


図3.1-3 試計算結果2 (横3セルモデル)

## 4 コード・マニュアル

### 4.1 入力データ

エアロゾル挙動計算のための入力データおよびその参考値を表4.1-1に示す。

### 4.2 サブルーチン機能説明

サブルーチンの階層構造およびその計算機能を図4.2-1に示す。今回のABC-INTGのAQUAへの組み込みに際した追加サブルーチンは着色部分である。

### 4.3 変数説明

サブルーチン引数およびコモン変数をそれぞれ表4.3-1、表4.3-2に示す。

表4.1-1 ABC-INTG用入力データ

変数名	本文中で用いられた記号	コード内で用いられた記号	単位	参考値
エアロゾル粒子群数	KL	KL	—	10
初期エアロゾル分布の幾何平均半径	—	RGABC	cm	$5 \times 10^{-5}$
初期エアロゾル分布の幾何標準偏差	—	SIGG	—	1.7
エアロゾル分布の最小半径	$r_{\min}$	RMIN	cm	$5 \times 10^{-6}$
エアロゾル分布の最大半径	$r_{\max}$	RMAX	cm	$2.5 \times 10^{-3}$
エアロゾル分布の凝集計算最小濃度	—	CMIN	g/cm <sup>3</sup>	$1.0 \times 10^{-10}$
エアロゾル粒子の固体密度	$\rho_a$	RO	g/cm <sup>3</sup>	0.3
容器ガスとエアロゾル粒子の熱伝導率の比	kg/ka	AKGP	—	0.0369
重力凝集係数に乗じるファクター	$\gamma$	EPSKG	—	0.0
重力沈降形状係数	$\varepsilon$	FKAI	—	1.0
凝集形状係数	$\chi$	FGAM	—	1.0
(壁面との) 温度境界層厚さ	$\delta T$	DELD	cm	0.1

表 4.3-1 (1/4) サブルーチン引数の説明

引数	内容	サブルーチン名
KL	エアロゾル粒子群番号	COABC
X	エアロゾル粒子半径 (対数半径)	COABC
V	エアロゾル粒子体積	COABC
Q	エアロゾル粒子体積濃度	COABC
C	Legendre-Gauss 法による体積計算ワークエリア	COABC
S	粒子生成速度	COABC
ICL	Aセル番号	COABC
L	エアロゾル粒子群番号	CODEPO
KL	エアロゾル粒子群番号	CONT
ICL	Aセル番号	CONT
IOPTB	凝集計算制御変数	CONT
C	Legendre-Gauss 法による体積計算ワークエリア	CONT
XN	エアロゾル粒子体積濃度	CONT
DQDT	エアロゾル粒子体積濃度時間微分値	CONT
V	エアロゾル粒子体積	CONT
RLN	対数半径 $\log_{10}R$	CONT
SRCE	粒子生成速度	CONT
L	粒子群数	DEPOST
HC	壁面での熱伝達係数 ( $\text{cal}/\text{cm}^2\text{sec}$ )	DEPOST
PG	キャリアガスの圧力 ( $\text{dyne}/\text{cm}^2$ )	DEPOST
TG	キャリアガスの温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )	DEPOST
TWALL	壁面温度	DEPOST
VSNNN	重力沈降速度 (未使用)	DEPOST
VDNNN	ブラウン拡散速度 (未使用)	DEPOST
VTNNN	熱泳動拡散速度	DEPOST
Q	エアロゾル粒子体積濃度	DIFFUN
DQDT	エアロゾル粒子体積濃度時間微分	DIFFUN
C	積分用ワークエリア	DIFFUN
S	粒子生成速度	DIFFUN
KL	エアロゾル粒子群番号	DIFFUN
X	エアロゾル粒子半径 (対数半径)	FUN

表 4.3-1 (2/4) サブルーチン引数の説明

引数	内容	サブルーチン名
FUN	積分計算結果	GAUS8
A	ガウス積分の下限値	GAUS8
B	ガウス積分の上限値	GAUS8
ERR	積分計算打ち切り誤差	GAUS8
ANS	積分計算結果	GAUS8
IERR	ガウス積分計算エラー指標	GAUS8
RPSIZ	初期エアロゾル粒子濃度	PSIZE
KL	エアロゾル粒子群番号	PSIZE
SOC	粒径分布の対数正規分布	PRTSOC
KL	エアロゾル粒子群番号	PRTSOC
FUN	Legendre-Gauss 法による積分計算結果	QNC7
A	積分区間の始め	QNC7
B	積分区間の終わり	QNC7
ERR	積分計算打ち切り誤差	QNC7
ANS	積分計算結果	QNC7
IERR	積分計算エラー指標	QNC7
C	Legendre-Gauss 積分計算用ワークエリア	TRNABC
XN	各粒子群の体積濃度	TRNABC
GDQDT	各粒子群の体積濃度の時間微分	TRNABC
CONC	全粒子群の体積濃度	TRNABC
PL	Aセルのガス圧力	TRNABC
T	Aセルのガス温度	TRNABC
GEP	Aセルの乱流エネルギー消失率	TRNABC
LEP	k-ε乱流モデル使用フラッグ	TRNABC
NYNX	Aセル数	TRNABC
NNBLK	Sセルに対応するAセルの番号	ABCINP
IIL	Aセル内のSセルのx方向の終わりのセル番号	ABCINP
JJF	Aセル内のSセルのy方向の始まりのセル番号	ABCINP
JJL	Aセル内のSセルのy方向の終わりのセル番号	ABCINP
KKF	Aセル内のSセルのz方向の始まりのセル番号	ABCINP
KKL	Aセル内のSセルのz方向の終わりのセル番号	ABCINP
NABC	Aセルの総セル数	ABCINP
NX	Sセルのx軸方向のセル数	ABCINP

表 4.3-1 (3/4) サブルーチン引数の説明

引数	内容	サブ routine 名
NY	Sセルの y 軸方向のセル数	ABCINP
NZ	Sセルの z 軸方向のセル数	ABCINP
L	粒子の群番号	ABCVS
PGX	キャリアガスの圧力	ABCVS
TG	キャリアガスの温度	ABCVS
VSNNN	重力沈降速度	ABCVS

表4.3-1(4/4) サブルーチン引数の説明 (新規サブルーチン)

引数	内容	サブルーチン名
AERONE	燃焼セルでの新規エアロゾル発生重量	ABCINT
PG	ガス圧力	
TG	ガス温度	
GEP	乱流エネルギー散逸率	
Q	エアロゾル体積濃度	
TWALL	壁温度	
HC	壁面での熱伝達係数	
TEMPW	隣接セル温度	
GCON	キャリアガス熱伝導率	
BUF	凝集計算用積分変数	ABCDRV
Q	エアロゾル体積濃度	
PG	ガス圧力	
TG	ガス温度	
GEP	乱流エネルギー散逸率	
TWALL	壁温度	
ARAWLL	壁との接触面積	
ARAFLR	床との接触面積	
HC	壁面での熱伝達係数	
VCELL0	1セル容積	
GGCON	キャリアガス熱伝導率	
DT	時間ステップ	INTABC
NO	AQUAで用いる領域番号	
IY	AQUAで用いる物質成分番号	
DT0	タイムステップ	
AQQ	燃焼セルでの新規エアロゾル発生重量	

表 4.3-2 (1/4) コモン変数の説明

コモン変数	内容	ラベル・コモン名
INTVAR	入力データファイルからABC-INTG読み込むときの インデックス番号	COMI 1
C0	初期エアロゾル粒子分布質量 (g/cm <sup>3</sup> )	COMI 1
RGABC	初期エアロゾル分布の幾何平均半径 (cm)	COMI 1
SIGG	初期エアロゾル分布の幾何標準偏差 (-)	COMI 1
RMIN RMAX	エアロゾル分布の最小半径 (cm) エアロゾル分布の最大半径 (cm)  解法上次式を満足しなければならない $\left(\frac{RMAX}{RMIN}\right)^{\frac{3}{KL-1}} \geq 2$	COMI 1
CMIN	エアロゾル分布の凝集計算最小濃度 (g/cm <sup>3</sup> )	COMI 1
R0	エアロゾル粒子密度	COMI 1
AKGP	キャリアガスとエアロゾル粒子の熱伝導率の比	COMI 1
HH	容器高さ (未使用)	COMI 2
VV	容器体積 (未使用)	COMI 2
SS	容器表面積 (未使用)	COMI 2
DELD	壁面または床での拡散境界層の厚さ	COMI 2
PR	キャリアガスのプラントル数	COMI 2
EPSKG	重力凝集系に乗じるファクター (= -1.0 の時は Fuchs reaction, = -2.0 の時は Harm reaction)	COMI 2
SIGA		COMI 2
FKAI	重力沈降係数	COMI 2
FGAM	凝集形状係数	COMI 2
EPST	乱流エネルギー消費量 (乱流凝集を考慮するとき必要)	COMI 2
FTR(31,3)	未使用	COMI 4
RX	エアロゾル粒子半径	COMR 2
RAI	(2.2-9式) で $r_i(r_i + A_i l)$	COMR 2
RI2	$RX^2$	COMR 2
VX	エアロゾル粒子体積	COMR 2
NBTYBE	沈着タイプ (ブラウン運動、熱泳動、重力)	COMR 2
VGX	2.2-6式で $r^2(1 + A_l/r)$	COMR 2



表 4.3-2 (2/4) コモン変数の説明

コモン変数	内容	ラベル*コモン名
CF	ブラウン凝集確立計算用変数 $\frac{4k_0(T_g + 273)}{6\mu_g}$	COMR 3
RAM	平均自由行程	COMR 3
GRA	2.2-5式で $\frac{2\rho_a g}{9\mu_g}$	COMR 3
TX	未使用	COMR 3
FMI	キャリアガスの粘性係数	COMR 3
ROO	キャリアガスの密度	COMR 3
DELT	壁面近傍でのガスと壁の温度勾配	COMR 3
TUB	2.2-5式での係数	COMR 3
OPIN(6)	基礎式中、各項(凝集、ブラウン沈着、熱泳動沈着、重力沈降沈着、リーク率)のスイッチ(=0:off,=1:on)の入力変数	COMR 3
OP(6)	上記スイッチ	COMR 3
PREF	基準圧力	COMR 3
FK0	キャリアガスの熱伝導率	CONST
G	重力加速度	CONST
PI	$\pi$	CONST
PI43	$4\pi/3$	CONST
OT	$1/3$	CONST
A1	初期分布計算用補助変数 $1/\sqrt{2\pi \ln \sigma_g}$ 生成時と同じ	CONST
A2	初期分布計算用補助変数 $2(\ln \sigma_g)$ 生成時と同じ	CONST
FN0	初期分布計算用の2.2-15式の分母	CONST
NB2A	凝集計算用変数アドレス	LSTART
NB2B	凝集計算用変数アドレス	LSTART
NB3	凝集計算用変数アドレス	LSTART
NB4	凝集計算用変数アドレス	LSTART
NDFPST	凝集計算用変数アドレス	LSTART
NEWCOF	凝集計算用変数アドレス	LSTART
R(31)	エアロゾル粒子半径	PGROUP
V(31)	エアロゾル粒子体積	PGROUP
RLN(31)	$\log_{10}R$	PGROUP
SRCE(31)	エアロゾル生成速度	PGROUP
XNO(31)	エアロゾル体積濃度 ( $a \text{ cm}^3 / \text{cm}^3$ )	PGROUP
KL	エアロゾル粒子群番号	COABC

表 4.3-2 (3/4) コモン変数の説明

コモン変数	内容	ラベル*コモン名
X	エアロゾル粒子半径 (対数半径)	COABC
V	エアロゾル粒子体積	COABC
Q	エアロゾル粒子体積濃度	COABC
C	Legendre-Gauss 法による体積計算ワークエリア	COABC
S	粒子生成速度	COABC
L	エアロゾル粒子群番号	CODEPO
VS	重力沈降速度 (未使用)	CODEPO
VD	ブラウン拡散速度 (未使用)	CODEPO
VT	熱泳動拡散速度 (未使用)	CODEPO
KL	エアロゾル粒子群番号	CONT
IOPTB	凝集計算制御変数	CONT
C	Legendre-Gauss 法による体積計算ワークエリア	CONT
XN	エアロゾル粒子体積濃度	CONT
DQDT	エアロゾル粒子体積濃度時間微分値	CONT
V	エアロゾル粒子体積	CONT
RLN	対数半径 $\log_{10}R$	CONT
SRCE	粒子生成速度	CONT
L	粒子群数	DEPOST
HC	壁面での熱伝達係数 ( $\text{cal}/\text{cm}^2\text{sec}$ )	DEPOST
PG	キャリアガスの圧力 ( $\text{dyne}/\text{cm}^2$ )	DEPOST
TG	キャリアガスの温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )	DEPOST
TWALL	壁面温度	DEPOST
VSNNN	重力沈降速度 (未使用)	DEPOST
VDNNN	ブラウン拡散速度 (未使用)	DEPOST
VTNNN	熱泳動拡散速度	DEPOST
Q	エアロゾル粒子体積濃度	DIFFUN
DQDT	エアロゾル粒子体積濃度時間微分	DIFFUN
C	積分用ワークエリア	DIFFUN
S	粒子生成速度	DIFFUN
KL	エアロゾル粒子群番号	DIFFUN
X	エアロゾル粒子半径 (対数半径)	FUN
FUN	積分計算結果	GAUS8
A	ガウス積分の下限値	GAUS8

表 4.3-2 (4/4) コモン変数の説明

コモン変数	内容	ラベル*コモン名
B	ガウス積分の上限値	GAUS8
ERR	積分計算打ち切り誤差	GAUS8
ANS	積分計算結果	GAUS8
IERR	ガウス積分計算エラー指標	GAUS8
RPSIZ	初期エアロゾル粒子濃度	PSIZE
KL	エアロゾル粒子群番号	PSIZE
SOC	粒径分布の対数正規分布	PRTSOC
KL	エアロゾル粒子群番号	PRTSOC
FUN	Legendre-Gauss 法による積分計算結果	QNC7
A	積分区間の始め	QNC7
B	積分区間の終わり	QNC7
ERR	積分計算打ち切り誤差	QNC7
ANS	積分計算結果	QNC7
IERR	積分計算エラー指標	QNC7
C	Legendre-Gauss 積分計算用ワークエリア	TRNABC
XN	各粒子群の体積濃度	TRNABC
GDQDT	各粒子群の体積濃度の時間微分	TRNABC
CONC	全粒子群の体積濃度	TRNABC
PL	Aセルのガス圧力	TRNABC
T	Aセルのガス温度	TRNABC
GEP	Aセルの乱流エネルギー消失率	TRNABC
LEP	k-ε乱流モデル使用フラッグ	TRNABC
L	粒子の群番号	ABCVS
PGX	キャリアガスの圧力	ABCVS
TG	キャリアガスの温度	ABCVS
VSNNN	重力沈降速度	ABCVS

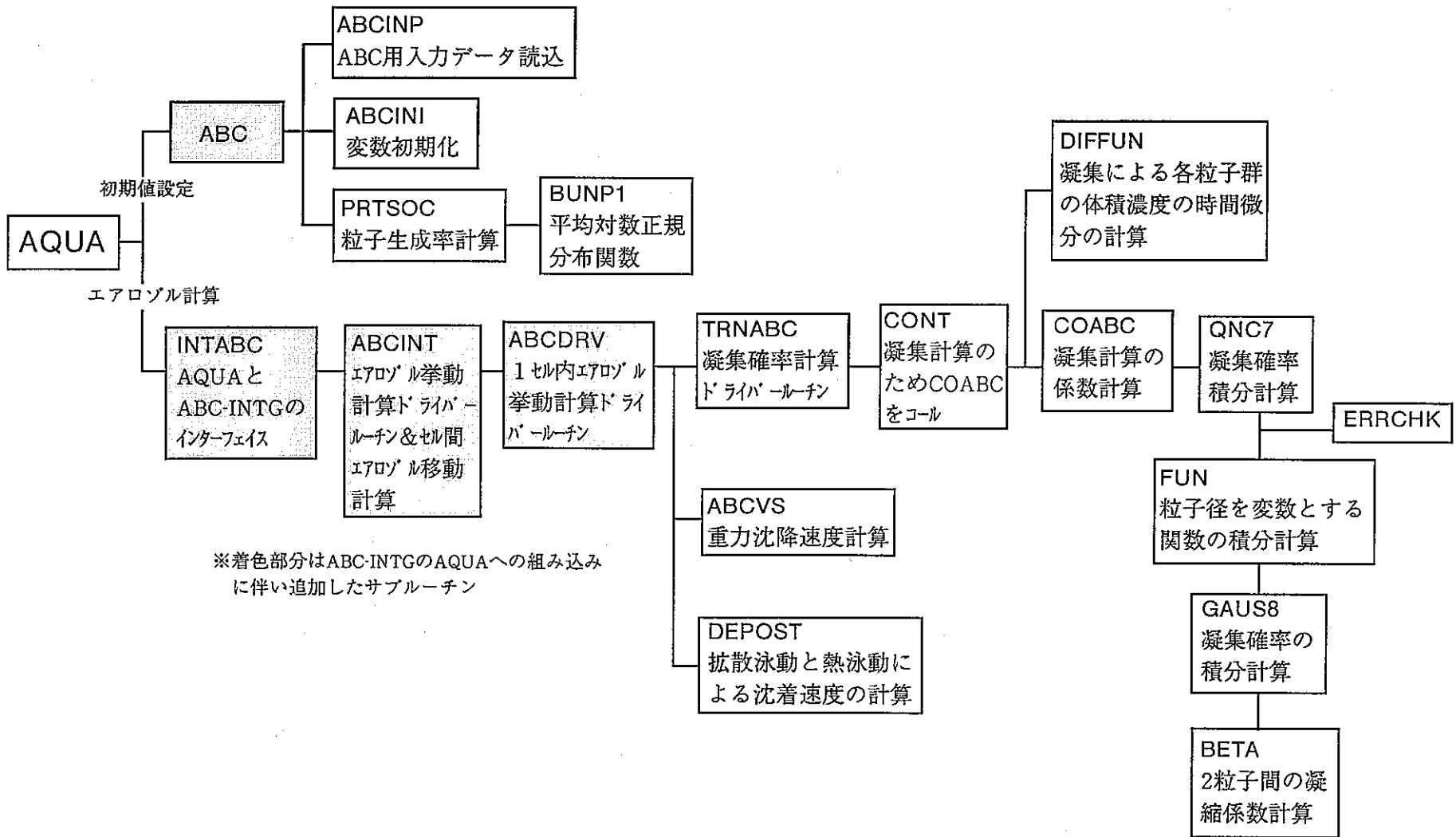


図4.2-1 エアロゾル計算モデル各サブルーチンの呼び出し系列と計算機能

## 5 結言

多次元熱流動解析コードAQUAにエアロゾル挙動モデル(ABC-INTG)を組み込み、エアロゾルの浮遊する多次元熱流動解析を考慮したナトリウム燃焼解析機能を整備した。そして、試計算として単純な体系の解析を実施し、エアロゾル挙動が正常に計算され物理的に妥当な結果が得られていることを定性的に確認した。これにより、AQUAコードにおいてエアロゾル挙動を取り扱うことが可能となり、ナトリウム燃焼時のガスの熱流動とエアロゾルの挙動を連携させた詳細な解析を実施できる見通しを得ることができた。

## 謝辞

エアロゾルモデルをAQUAに組み込むに当たり、川崎重工業(株)の前川勇氏、高田孝氏、(株)エヌ・デー・デーの橋本昭彦氏、原子力システム(株)の長沢一嘉氏および検査開発(株)の松木卓夫氏にはサブルーチンの作成および作成補助をしていただいた。よって、ここに感謝の意を表する。

参考文献

- [1] 高橋幹二  
基礎エアロゾル工学 養賢堂  
1982年 11月