

MPS 法の改良と VULCANO VF-U1 実験の解析による
MCCI の理解の深化

Deepening Understanding of MCCI through Development of MPS
Method and Analysis of VULCANO VF-U1 Experiment

2023 年 2 月

福田 貴斉
Takanari FUKUDA

MPS 法の改良と VULCANO VF-U1 実験の解析による
MCCI の理解の深化

Deepening Understanding of MCCI through Development of MPS
Method and Analysis of VULCANO VF-U1 Experiment

2023 年 2 月

早稲田大学大学院
先進理工学研究科および東京都市大学大学院総合理工学研究科
共同原子力専攻 原子炉物理学特殊研究

福田 貴斉
Takanari FUKUDA

要旨

本研究では、原子炉過酷事故時に起こり得る溶融炉心・コンクリート相互作用 (MCCI) を模擬した VULCANO VF-U1 実験後のデブリ中において金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布していた理由を Moving Particle Semi-implicit (MPS) 法の改良と解析により示すことで明らかにし、MCCI の現象理解を深めることを目的とした。新界面張力モデル (CFP モデル) の開発と混合モデルの追加考慮を通して改良した MPS 法の解析の結果、同実験のデブリ成分の分布は、実験の中盤以降に炉心燃料物質を模擬した酸化物成分が半溶融／凝固状態になった後もコンクリートの溶融浸食と金属成分の流動が継続していた結果もたらされたことを示した。

第 1 章では本研究の背景、必要性と目的を述べる。原子力エネルギーの持続可能な利用のためには、軽水炉過酷事故時の現象理解の深化が必要である。特に、溶融炉心が原子炉圧力容器から格納容器コンクリート床上に放出された場合に生じる MCCI に係る現象理解は、放射性物質の閉じ込めと環境への放出挙動の評価及び対策の観点から重要である。MCCI は炉心酸化物・金属、床コンクリート等の多成分が、それぞれ異なる温度域で熱分解・溶融・凝固するため、気・液・固の相変化とそれらの間の複雑な多成分多相界面が形成される伝熱流動現象である。しかし従来は、実験や数値解析能力の制約からそのような多成分多相界面の形成は考慮できず、限られた経験則を多用してガス発生やコンクリート侵食の挙動を評価することに留まっていた。MCCI の評価の信頼性を向上するには、機構論的な数値解析により現象の理解を深める必要がある。

従来の実験と異なり、実機事故と同様に炉心金属物質に近い高密度の模擬酸化物燃料 ($\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$) を用いた MCCI 実験 (VULCANO VF-U1 実験) では、実験後のデブリ中の酸化物成分と金属成分は単純に密度差で成層化せず、密度が最も高い金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布した。先行する数値解析研究では、コンクリート熱分解により発生する気泡やそれによる溶融物の対流が影響した可能性が指摘されているが、同研究では実験開始後 10 秒間しか解析していない上、固液相変化が考慮できていない。実験後のデブリ成分の分布は MCCI の多成分多相伝熱流動履歴の結果であるため、個々の影響因子と酸化物・金属・コンクリートの異なる温度域における溶融・流動・凝固の相互作用、さらにそれらの結果もたらされる多成分多相界面を伴う伝熱流動履歴とを包括的に考慮する解析により同実験後のデブリ成分のような分布に至った履歴を示せば、MCCI の現象理解を深められる。離散点が流れと共に移動する Lagrange 式記述の Moving Particle Semi-implicit (MPS) 法は、界面を明示的に解かず伝熱や固液相変化を伴う多成分間界面を容易に追跡できるため、そのような解析に適しているが、上記のような MCCI 解析のためには溶融物の凝固直前までの固-液及び液-液界面を正確且つ容易に実用的な解析コストで追跡することが課題である。

以上を背景に、本研究は MPS 法の改良と解析により VULCANO VF-U1 実験の溶融金属成分がコンクリート側壁に沿って分布し、凝固するまでの固液相変化を伴う伝熱流動現象の履歴を示し、MCCI の現象の理解を深化することを目的とした。

第 2 章では MPS 法の既存手法を組み合わせた解析により溶融金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布し、凝固するまでの伝熱流動現象の履歴を示すために、必要な物理現象モデルとその精緻化のレベルを検討した。まず、溶融物が凝固により流動が停止する直前までの固-液及び液-液界面を正確に追跡するために、非圧縮性よりも粘性による速度拡散精度を優先したアルゴリズムを採用した。このとき、非圧縮性が厳密に保証されないことで計算点 (粒子) の分布が不均一になり数値安定性が低下するのを防ぐため、粒子分布の均一性を回復する Particle Shifting 法を用いた。また、複雑な液-液界面を簡便に低コストで解析するために、界面形状は求めずに粒子間引力が異成

分溶融物間では異なることを利用した界面張力モデル（ポテンシャルモデル）を用いた。このような三次元 MCCI 解析により、以下のような解析結果と現象の理解を深めるための課題を得た：

先ず、誘導加熱により炉心燃料物質を模擬した酸化物と金属が溶融すると、溶融金属成分は溶融酸化物成分との密度差によりコンクリート底部に沈降した。次に、コンクリートの溶融が開始し、低密度の溶融コンクリートが溶融物中を上昇し始めると、溶融金属成分もその上昇流に随伴する様子が見られた。この際、暫定的に定めた溶融酸化物成分との間の界面張力を小さくすると、溶融金属成分は分散して広がった。その後、誘導加熱の出力が低下してコンクリート壁近傍の溶融酸化物成分の凝固とコンクリート壁の溶融が同時に進行するようになると、溶融金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布するようになり、そのまま金属成分が凝固して実験結果と同様な分布が再現された。これらの結果から、MCCI の現象理解を深めるにはコンクリート底部から側壁に沿って分布する溶融金属成分周囲のコンクリート壁の溶融、溶融酸化物成分の凝固、異成分溶融物間及び溶融物-凝固物間の密度差に起因する浮力や流れ、これらの影響を受ける固-液及び液-液界面の正確な追跡が重要であると考えた。そして、以下の解析モデルの精緻化が課題と考えた：

- 凝固酸化物成分とコンクリート壁間に形成するミリメートルスケールの液-液、固-液界面の計算能力の向上。
- 浮力や流れに影響を及ぼす、溶融物間の混合に伴う密度や固液相線温度の変化の考慮。

第 3 章では、第 2 章で示した課題を解決するために新たに開発した界面張力モデルと追加考慮した溶融物間の混合モデルについてまとめる。MCCI の履歴とその後に残留したデブリ中の成分分布の関係を論じるには、溶融物が凝固する直前までの流動と複雑に形成される固液界面を正確に計算できる必要がある。そのためには、以下の条件を満たす実用的な界面張力モデルが必要である：

- 界面形状を明示的に求める必要がない
- モデル中のパラメーターを恣意的に調節する必要がない
- 壁面の濡れ性を考慮できる
- 低密度液相中の高密度液滴の自重沈降等の解析に求められる基本的な数値計算能力を有する

一般的な界面張力モデルは界面形状を明示的に求める必要がある上に壁面の濡れ性が考慮できないため、MCCI 解析には適さない。従来の MPS 法のポテンシャルモデルは全ての粒子間に引力を作用させ、異成分粒子間の引力の差を利用して界面形状を求めずに界面張力や壁面の濡れ性を模擬できる。しかし、粒子が不自然に凝集し、圧力が過大評価されたり流動が阻害されたりする問題や、界面張力を恣意的に決める必要があった。そこで、異成分粒子間のみ斥力を作用させ、新たな界面形成に伴う仕事量から界面張力を導出する新界面張力モデル（Cohesion-Free Potential (CFP) モデル）とその濡れモデルを開発した。そして、その妥当性を、液体中の異成分液滴沈降挙動、Laplace 圧力の評価、剪断流中の液滴変形、接触角の評価等により検証した。このような実用的な CFP モデルにより、MCCI の履歴がデブリ成分の分布に及ぼす影響を論じることができるようになった。

また溶融コンクリート成分と炉心酸化物成分の混合に伴う密度や固液相線温度の変化を考慮するため、両者の粒子に仮想的にコンクリート成分濃度を与え、MPS 法の拡散モデルで粒子間を拡散させた。ただし、粒子径以下のスケールの対流や気泡上昇による溶融物の対流に伴う拡散の促進の影響は考慮できないため、拡散係数を感度解析変数とした。また、固液相線温度にはコンクリート成分濃度に応じた実験データを用いた。

第 4 章では、第 3 章で開発・追加考慮した界面張力モデルと混合モデルを統合した改良 MPS 法を用いて VULCANO VF-U1 実験の二次元解析を従来よりも高解像度で（粒子径を 7.5 mm から 2.0 mm に低減して）実施し、同実験の溶融金属成分がコンクリート側壁に沿って凝固するまでの伝熱流動現象の履歴の現象理解を以下のように深めた：

誘導加熱出力が高い初期には、第2章に示した結果と同様に、溶融金属成分はコンクリート底部に沈降した。その後、誘導加熱の出力が低下し、コンクリート底部から側壁の近傍の酸化物成分が内側の溶融酸化物成分を覆うように凝固してクラスト層を形成し始めた。この状態でも、コンクリート底部の溶融浸食とそれに伴う溶融・凝固物全体の沈降は継続した。その結果、底部に沈積していた溶融金属成分は酸化物クラスト層とコンクリート側壁の間の流路に押し出されるように分布した。その後、溶融金属成分はコンクリート側壁付近の上部から凝固し、コンクリートの下方浸食から取り残されて軸方向に引き伸ばされるように分布した。一方、酸化物成分の固液相線温度を仮想的に低減して、酸化物成分が金属成分と同時期に凝固するようにした感度解析ではそのような分布に至らず、酸化物層の下に金属層が密度成層化した。これらの解析結果から、VULCANO VF-U1 実験後に残ったデブリ中において金属成分がコンクリート側壁に沿って分布した理由を次のように理解できた。すなわち、酸化物成分が冷えて半溶融／凝固状態となり、流動性が失われた後もコンクリートの下方への浸食が継続した結果、半溶融／凝固状態の酸化物層の沈降から押しのけられるように溶融金属成分がコンクリート側壁に沿って分布し、その後上部から凝固した結果もたらされたと理解できた。

第5章では本研究の結論と今後の課題・展望を示す。本研究では、VULCANO VF-U1 実験後のデブリ中において金属成分がコンクリート側壁に沿って分布していた理由を MPS 法の改良と MCCI 解析により示した。そのためには、MCCI に伴う液-液及び固-液界面の計算能力の向上が必要と考え、複雑な多成分間の界面張力を容易且つ安定的に考慮できる CFP モデルを開発した。また、溶融物間の混合に伴う密度や固液相線温度の変化の履歴を拡散理論に基づく混合モデルにより考慮した。そして、これらを統合した改良 MPS 法により解析を実施した。その結果、同実験のデブリ成分の分布は、酸化物成分が冷えて半溶融／凝固状態になった後もコンクリートの溶融浸食と金属成分の流動が継続していた結果もたらされたことを示した。以上により、従来はコンクリート熱分解等に伴うガス発生履歴や、コンクリート侵食進展を示す熱電対温度履歴等から深められてきた MCCI の理解に対して、新たに MCCI 実験後に残留したデブリの成分分布を手掛かりに、溶融物が凝固する過程における MCCI の理解を深める手法を確立した。ただし、コンクリートの化学反応や熱分解及びそれに伴い溶融物中に生じる気泡がコンクリート浸食に及ぼす影響等の考慮は今後の課題である。

本研究では従来の典型的な MCCI 実験や数値流体解析で想定されていた条件に比べてコリウムの崩壊熱と温度が大きく低下した後の MCCI の理解を深めることができた。このような理解は例えば、原子炉停止後相当程度の時間が経過して崩壊熱が低下した後に生じる MCCI や、福島第一原子力発電所（1F）の事故のように燃料デブリの不十分な冷却が長期間継続する場合を想定した安全研究の発展を支える基盤研究として貢献することが期待される。

目次

1	背景と目的	1
1.1	原子炉過酷事故	1
1.2	東京電力福島第一原子力発電所（1F）事故と MCCI	3
1.3	MCCI の一般的な理解と特徴	4
1.3.1	MCCI の一般的な理解	4
1.3.2	MCCI の理解に重要なコンクリートの特徴	5
1.3.3	MCCI の理解に重要なコリウムの特徴	7
1.4	コンクリートの侵食に着目した MCCI 実験	10
1.5	コンクリート侵食に着目した解析	15
1.5.1	流動を解かない MCCI 解析	15
1.5.2	流動を解く MCCI 解析	16
1.6	VULCANO VF-U1 実験の概要と実験後のデブリの特徴	17
1.7	VF-U1 実験後のデブリの特徴についての先行研究の理解	22
1.8	MPS 法による VF-U1 実験の解析から MCCI の理解を深めるための課題	23
1.9	本研究の目的と方針	24
2	MPS 法と既存手法の組み合わせによる VF-U1 解析	25
2.1	MPS 法の概要と本研究に用いる既存手法	25
2.1.1	MPS 法の概要	25
2.1.2	MPS 法の高精度化・安定化・多成分化	29
2.1.3	粘性流動停止アルゴリズムと粘性急昇モデル	34
2.1.4	従来の表面張力・界面張力モデル	37
2.2	VF-U1 実験の詳細な条件とその 3 次元解析	44
2.2.1	実験条件	44
2.2.2	解析条件	47
2.3	解析結果と考察	50
2.3.1	解析結果の概要	50
2.3.2	コンクリート侵食	51
2.3.3	金属成分分布	53
2.4	考慮が必要な物理現象モデルとその精緻化のレベル	54
3	追加実装した既存モデルと開発した新モデル	56
3.1	混合モデル	56
3.1.1	MPS 法における混合モデル	56
3.1.2	本研究の解析への適用	57
3.2	Cohesion-Free Potential（CFP）モデル	58

3.2.1	MPS法の従来の界面張力モデルとその課題.....	58
3.2.2	CFPモデルの着眼点と理論.....	68
3.2.3	CFPモデルの検証.....	74
4	改良MPS法によるVF-U1実験の解析.....	88
4.1	解析条件.....	88
4.1.1	解析体系.....	88
4.1.2	解析で仮定する物性値と加熱履歴.....	89
4.1.3	考慮できていない現象と本解析のスコープ.....	90
4.2	結果と考察.....	90
4.2.1	酸化物とコンクリートの混合の感度解析.....	90
4.2.2	金属成分の分布.....	91
4.2.3	コンクリート侵食.....	93
4.2.4	金属成分分布の影響因子の分析.....	95
4.2.5	金属が液相のままコンクリート側壁近傍を上昇するメカニズムの提案.....	99
4.2.6	金属成分に関わる現象履歴の提案.....	101
5	結論と今後の展望・課題.....	103
5.1	結論.....	103
5.2	今後の展望と課題.....	104
5.2.1	MCCI研究の今後の展望.....	104
5.2.2	1Fの燃料デブリ取り出しへの追加的知見.....	104
5.2.3	コンクリート分解ガス気泡の影響の考慮.....	105
6	付録 111	
6.1	VBS実験シリーズの概要.....	111
6.2	数値流体解析の発展の歴史と粒子法.....	113
6.3	MPS法の離散化モデルの導出.....	117
6.4	VF-U1実験の誘導加熱による酸化物成分と金属成分への入熱量.....	119
6.5	界面張力の基礎理論.....	122
6.6	JUPITER.....	124

図表一覧

図 1-1 過酷事故時に想定される現象 [4].....	2
図 1-2 1F 1 - 3 号機における燃料デブリ分布の推定 [9]	3
図 1-3 MCCI の現象を概念化したスケッチ.....	4
図 1-4 軽水炉の過酷事故において溶融が生じる温度、化学反応の開始温度と原子炉を構成する主な物質の融点 [17]	8
図 1-5 炉心酸化物と溶融コンクリートが混合した（混合）酸化物の固液相線温度 [19].....	10
図 1-6 CCI-2 実験後のコンクリートと凝固したコリウム [22].....	12
図 1-7 CCI-2 実験後の実験体系のスケッチ [22].....	13
図 1-8 CCI-3 実験後のコンクリートと凝固したコリウム [22].....	13
図 1-9 CCI-3 実験後の実験体系のスケッチ [22].....	14
図 1-10 MOCKA1.7 実験後のコンクリートと凝固したコリウム [5].....	15
図 1-11 VF-U1 実験の初期状態 [47].....	18
図 1-12 VF-U1 実験のコンクリート容器のスケッチ（左）と、容器上部に据え付けられたジルコニアチューブ [45].....	19
図 1-13 VF-U1 実験のコンクリート侵食形状 [45].....	19
図 1-14 VF-U1 実験の凝固物の外観	20
図 1-15 VF-U1 実験の凝固物の各部分の特徴 [47].....	20
図 1-16 VBS-U3 実験後の金属成分の分布.....	21
図 1-17 VOF 法による溶融金属成分・溶融酸化物成分・気泡の 3 相流解析（0 秒から 0.54 秒まで）	22
図 1-18 VOF 法による溶融金属成分・溶融酸化物成分・気泡の 3 相流解析（6 秒から 10 秒まで）	23
図 1-19 VF-U1 実験の凝固金属成分分布をもたらした伝熱流動の現象履歴	24
図 2-1 重み関数のグラフ形状.....	27
図 2-2 PS における粒子の移動方向のイメージ [60].....	32
図 2-3 オリジナルの MPS 法による高粘性流体の漏洩の解析 [67].....	34
図 2-4 オリジナルの MPS 法と粘性流動停止アルゴリズムにおける計算フローチャート	35
図 2-5 粘性流動停止アルゴリズムを用いた高粘性流体の漏洩の解析 [67].....	36
図 2-6 溶融・凝固過程における粘性の変化.....	37
図 2-7 表面張力（surface tension）と界面張力（interface tension）	38
図 2-8 非混和な水と油 [74].....	38
図 2-9 Kondo モデルのポテンシャル（CAKondo = 1, rb = 1.5を仮定）	39
図 2-10 Kondo による粒子間ポテンシャル係数CAKondoの決定方法	40
図 2-11 壁面の濡れ.....	41
図 2-12 Kondo モデルにおける流体と壁面との粒子間ポテンシャル係数の決定方法	41
図 2-13 Zhu らによる粒子間ポテンシャル係数CZhuの決定方法.....	42
図 2-14 Zhu モデルにおける界面張力のモデル方法	43
図 2-15 2 成分での界面壁面濡れ.....	43
図 2-16 VF-U1 実験の初期条件の断面図	44
図 2-17 誘導加熱による溶融プールの形成と崩壊熱の模擬.....	45
図 2-18 VF-U1 実験の（上）誘導加熱の加熱履歴と（下）熱電対の温度履歴 [45].....	46
図 2-19 本研究で基づく VF-U1 実験の加熱履歴	47

図 2-20 初期粒子配置 (a) 全体俯瞰; (b) 断面図; (c) 金属とコンクリートのみ可視化.....	48
図 2-21 表面張力・界面張力をチューニングせずに Zhu モデルを適用した際に発生する不自然な流動 阻害.....	49
図 2-22 本研究の解析で与える VF-U1 実験の加熱履歴.....	50
図 2-23 3次元 VF-U1 解析のスナップショット.....	51
図 2-24 3次元解析でのコンクリート侵食割合の時間進展.....	52
図 2-25 3次元解析と実験のコンクリート侵食形状の比較.....	52
図 2-26 (左図) MPS 法による 3次元解析の解析終了時の断面図; (右図) VF-U1 実験後の凝固物の 成分分布のスケッチの比較.....	53
図 2-27 VF-U1 実験の解析における界面張力の影響の感度解析 ($t = 1500$ s).....	53
図 2-28 VF-U1 実験の加熱履歴と固液相変化の現象履歴、及び異成分間の相互作用.....	54
図 3-1 Chai モデルにおける酸化物粒子の取り扱い.....	57
図 3-2 炉心酸化物と各種コンクリートとの混合に伴う固液相線温度の変化 (単位は $^{\circ}\text{C}$) [84] [41]..	57
図 3-3 本研究における混合モデルの実装.....	58
図 3-4 CSF モデルとポテンシャルモデルの対比.....	59
図 3-5 Zhu モデルによる Laplace 圧力のベンチマーク解析.....	62
図 3-6 MPS 法における Laplace 圧力の振動とその時間平均の取り方.....	63
図 3-7 粒子の集団に粒子間力が働いた後の粒子分布のイメージ.....	64
図 3-8 圧力を過大評価してしまうポテンシャルモデルのアルゴリズム.....	64
図 3-9 ポテンシャルモデルでチューニングが必要になることを示すベンチマーク解析の解析体系..	65
図 3-10 Eötvös 数 (Eu) が落下する液滴の形状に及ぼす影響 [101].....	66
図 3-11 ポテンシャルモデルで液滴の落下を異なる粒子径で解析した結果.....	67
図 3-12 Zhu モデルを用いた時の粒子の配置の拡大図.....	67
図 3-13 チューニング係数を変化させた際の液滴の落下.....	68
図 3-14 従来のポテンシャルモデルと CFP モデルで作用する力のイメージの対比.....	69
図 3-15 CFP モデルのポテンシャルの形 ($CBCFP = 1$ 、 $rb = 1.510$ を仮定).....	70
図 3-16 平衡点をもつポテンシャルと持たないポテンシャルを用いた際の界面付近の粒子分布の対比	71
図 3-17 界面付近の粒子に作用する正味の力の分布.....	71
図 3-18 平衡点距離が界面付近の粒子分布に与える感度の解析.....	72
図 3-19 CFP モデルにおけるポテンシャル係数 $CBCFP$ の決定方法.....	73
図 3-20 2成分での壁面の濡れ.....	74
図 3-21 CFP モデルにおける流体と壁面間の粒子間ポテンシャル係数の決定方法.....	74
図 3-22 異なる液滴半径で CFP モデルにより評価された Laplace 圧力.....	75
図 3-23 CFP モデルによる流動阻害の解決.....	75
図 3-24 CFP モデルを用いた時の粒子の配置の拡大図.....	76
図 3-25 Taylor の剪断流.....	77
図 3-26 Taylor の剪断流の解析体系.....	77
図 3-27 Taylor の剪断流の解析で仮定する壁面の速度 (中央の破線円は界面).....	78
図 3-28 $t = 100$ s における解析体系.....	78
図 3-29 $t = 100$ s における速度場.....	78
図 3-30 CFP モデルと Zhu モデルによる Taylor 剪断流の解析結果.....	79
図 3-31 界面壁面濡れの解析体系.....	80

図 3-32 界面壁面濡れの異なる接触角での解析結果.....	81
図 3-33 (a) 成層化実験の実験体系 [105] ; (b) 成層化実験の解析体系 (手前のガラス壁は可視化していない)	83
図 3-34 実験と解析による成層化実験の模擬.....	85
図 3-35 CFP モデルと Zhu モデルの解析結果の $t = 6 \text{ s}$ における圧力分布.....	86
図 3-36 CFP モデルと Zhu モデルによる成層化実験の解析の軸方向圧力と静水圧の比較	86
図 3-37 CFP モデルで界面の圧力が微小に過小評価される理由の考察.....	87
図 4-1 2次元解析の解析体系.....	88
図 4-2 混合拡散係数の感度解析.....	91
図 4-3 金属成分分布に関わる現象履歴の概要.....	92
図 4-4 実験と解析の金属成分の最終分布の比較.....	93
図 4-5 2次元解析で3次元解析の侵食割合を見積もる方法.....	94
図 4-6 コンクリート侵食割合の進展.....	94
図 4-7 コンクリートの最終侵食形状.....	95
図 4-8 酸化物成分の固液相線温度の感度解析.....	96
図 4-9 酸化物の密度の感度解析.....	97
図 4-10 溶融コンクリートの上昇の感度解析.....	98
図 4-11 金属-酸化物界面のコンクリート壁との接触角の感度解析	99
図 4-12 提案する金属成分の上昇メカニズム.....	100
図 4-13 金属成分の上昇のための酸化物密度の条件.....	100
図 4-14 提案する金属成分に関わる現象履歴.....	102
図 5-1 溶融物粒子と気泡粒子の間の加速度の大きなジャンプ.....	106
図 5-2 気泡粒子の飛散による数値低不安定性.....	106
図 5-3 気泡の通過が液-液界面に与える影響	107
図 5-4 気泡に作用する浮力と重力の和に対する気泡の密度の感度.....	108
図 5-5 気泡密度が液-液界面の擾乱に与える影響感度の JUPITER による確認の解析体系	109
図 5-6 気泡密度が液-液界面の擾乱に与える影響感度の JUPITER による確認.....	110
図 6-1 VBS 実験施設概略図.....	111
図 6-2 VBS 実験のコンクリート容器.....	111
図 6-3 VBS-U3 実験の 2 時間 45 分経過時点でのコンクリート侵食と温度分布 [49].....	112
図 6-4 VBS-U3 実験後のコリウムとコンクリートの様子 [49]	113
図 6-5 VBS-U3 実験後のコリウムの成分分布 [117].....	113
図 6-6 流体解析の歴史.....	114
図 6-7 格子法による移流方程式の離散化に伴う課題.....	116
図 6-8 格子の種類 [133].....	117
図 6-9 正方格子上の粒子配置.....	119
図 6-10 典型的な誘導加熱の体系.....	120
図 6-11 VF-U1 実験中の溶融物の構成の仮定	121
図 6-10 Laplace 圧力の導出	123
表 1-1 各種コンクリートの組成 [16].....	6
表 1-2 異なる温度でのコンクリートの挙動と関連する化学反応 [15]	7
表 1-3 各種コンクリートの固液相線温度と分解エンタルピー [16].....	7

表 1-4 PWR における典型的な炉容器外コリウムの初期組成 [1]	9
表 1-5 BWR における典型的な炉容器外コリウムの初期組成 [18].....	9
表 1-6 従来の MCCI 実験 [5].....	11
表 1-7 機械的工法による燃料デブリの取出し方法の検討に対する提言 [47].....	21
表 2-1 VF-U1 実験の模擬炉心材料の組成 [46].....	45
表 2-2 3次元 VF-U1 解析で適用した物性値 [73] [51]	48
表 2-3 3次元 VF-U1 解析で暫定的に適用した表面張力・界面張力係数.....	49
表 3-1 Zhu モデルによる Laplace 圧力のベンチマーク解析で仮定した物性値	62
表 3-2 Zhu モデルによる Laplace 圧力と理論値との比較.....	63
表 3-3 Zhu モデルの圧力過大評価の表面張力係数への依存	64
表 3-4 ポテンシャルモデルでチューニングが必要になることを示すベンチマーク解析の物性値.....	65
表 3-5 R = 30 cm の時の Laplace 圧力の CFP モデルと Zhu モデルによる評価	74
表 3-6 Taylor の剪断流の解析で用いる物性値	77
表 3-7 界面壁面濡れの解析の物性値.....	80
表 3-8 成層化実験の解析の物性値 [105].....	84
表 4-1 2次元解析で初期に適用した物性値 [73] [51]	89
表 4-2 2次元 VF-U1 解析で暫定的に適用した表面張力・界面張力係数.....	89
表 5-1 JUPITER 解析で適用する界面張力係数	109
表 6-1 VBS 実験シリーズの実験条件	112
表 6-2 VF-U1 実験の加熱条件	120
表 6-3 誘導加熱に関わる UO ₂ の物性 [83]	121
表 6-4 誘導加熱に関わる SUS304 の物性 [140].....	121
表 6-5 酸化物成分と金属成分への入熱量とそれらの比.....	121
表 6-2 JUPITER が基づく Fractional-step アルゴリズム	124

1 背景と目的

1.1 原子炉過酷事故

人類社会にとって原子力エネルギーの継続的な利用は、脱炭素と経済発展の両立等の観点から重要である。過去には重大な事故：「原子炉過酷事故」（あるいは単に「過酷事故」）が起こる度に、その全容と原因の解明、及び対策を経て、社会は原子力エネルギーの利用を受け入れてきた。例えば、チョルノービリ（チェルノブイリ）発電所4号機の事故（1986年）[1]は一般的には黒鉛減速炉特有の反応度フィードバック特性に対する同原子炉の設計に欠陥があったことと、旧ソ連の安全文化の欠如がもたらしたと考えられ、現在は同様な事故は起こり得ないと考えられている。スリーマイル・アイランド原子力発電所2号機（TMI-2）事故（1979年）[1]は機器の故障と運転員の判断ミス（あるいは適切な判断を難しくしたヒューマンマシンインターフェイス）に起因しているが、炉心への注水が回復したことで事故は終息した。したがって、設計の改良、事故対応手順の改善、運転員の訓練等により、環境に甚大な被害を及ぼすような事故が起こる可能性は極めて低いと考えられている。しかし、東京電力福島第一原子力発電所（1F）事故 [1] [2]は過去の過酷事故に比べ事象が複雑でその全容が解明されていない。しかも、同様な事故は原理的には世界の原子力発電の主流である全ての軽水炉で起こり得るため、1F事故がもたらした影響は過去の過酷事故に比べて大きい。事故の原因は概ね理解されているが、その対策の結果もたらされるプラント挙動の評価には大きな不確かさが伴い、その原因の一つに、事象そのものの複雑さが挙げられる。したがって、1F事故の全容を解明し、その対策の有効性の評価の信頼性を向上し、人類が今後も原子力エネルギーを持続的に利用していくには、過酷事故に伴う現象の理解を深める必要がある。

過酷事故は燃料棒が大規模に損傷する事象として定義されるため、原子炉の多重障壁の第一、第二の障壁である燃料ペレットと燃料被覆管は損傷する場合を前提とする。そして、熔融炉心が原子炉圧力容器（Reactor Pressure Vessel: RPV）下部に移行した後も除熱が十分になされなかった場合、第三の障壁である RPV も破損する可能性がある。したがって、過酷事故時に放射性物質の環境放出を防ぐためには、事前の安全設計や過酷事故対策を通して原子炉格納容器（Primary Containment Vessel: PCV）の健全性を保つことが極めて重要である。また、仮に放射性物質の環境放出に至ったとしても、その放出による環境への影響を最小限に抑制する必要がある。これらを目的として、過酷事故時に PCV において発生する現象の理解が進められてきた [3]。図 1-1 に代表的な現象を図示し、以下にその概要を示す。

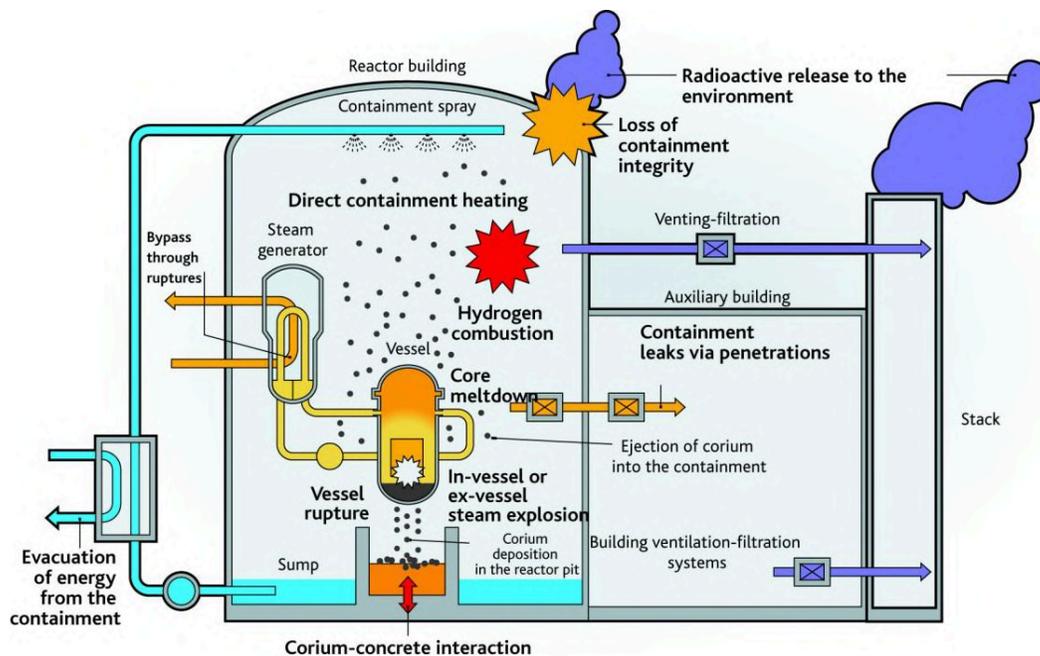


図 1-1 過酷事故時に想定される現象 [4]

軽水炉において過酷事故が発生し、RPV 外に溶融炉心が放出された場合に PCV を破損するリスクのある現象は、その発生タイミングにより早期 PCV 破損に係る現象と後期 PCV 破損に係る現象とに分類される [4]。早期 PCV 破損に係る現象には、高温の溶融炉心が冷却材と接触することで発生する水蒸気爆発、金属材料の酸化に伴い発生する水素が酸素と結合することで起きる水素爆発、さらには、減圧されていない RPV から噴射された溶融炉心が PCV 中に分散することで溶融炉心に触れた PCV や内部の気相が加熱される PCV 直接加熱 (Direct Containment Heating: DCH) 等が挙げられる。一方で、後期 PCV 破損に係る現象としては、溶融炉心と PCV 床コンクリートとの熱的相互作用に伴い発生するコンクリート分解ガス (H_2O , CO_2) による PCV の圧力上昇やそれらが金属に還元されることで発生する可燃性ガス (H_2 , CO) の爆発、及び PCV 床コンクリートのメルトスルー (melt-through) が挙げられる [5]。

特に、PCV 下部に移行した溶融炉心が長期的に安定化されず床コンクリートをメルトスルーした場合、土壌や地下水の甚大な放射能汚染につながりうる。このような溶融炉心と PCV 床コンクリートとの熱的相互作用は「溶融炉心・コンクリート相互作用 (Molten Core-Concrete Interaction: MCCI)」と呼ばれ、数多くの実験により重点的な研究が実施されてきた。これらの実験を通して、MCCI に伴うコンクリートの侵食の程度やその形状、コンクリート分解ガスやそれに伴う放射性エアロゾルの放出挙動といった、放射性物質の閉じ込め機能が評価された。また、これらの評価に基づいて実際のプラントの安全の評価、事故対策の評価をするために、MCCI を数値的に解析する MCCI 解析コードが研究開発されてきた。これらの MCCI 解析コードによる設計や対策の妥当性の評価の信頼性は、MCCI の基礎的な現象理解に基づいているため、MCCI の実験データから MCCI 中に起きている複雑な現象をよりよく理解することが、人類が今後も原子力エネルギーを持続的に利用していくために重要な課題である。

1.2 東京電力福島第一原子力発電所（1F）事故と MCCI

2011年3月、1Fの1-3号機では福島県沖の地震により外部からの送電を喪失し、地震に起因する津波による浸水により非常用ディーゼル発電機を喪失した。その後、津波の被害を免れた一部の直流電源（バッテリー）もやがて枯渇し、全電源喪失に至った。これにより、原子炉停止後のRPVへの注水ができなくなり、炉心が空焚き状態になり、燃料の温度が上昇して、水素が大量に発生し、燃料の溶融、RPVの損傷、PCVの損傷、環境への放射性物質の放出に至った。またその過程において、原子炉建屋中に水素が漏洩し、原子炉建屋の水素爆発をもたらした[2]。ただし、2号機は燃料の多くはRPV内に残留していると考えられている。3号機はRPV破損時にペDESTALには多量の水があり、プラントデータ等からは仮にMCCIがあったとしても限定的なものであったのではないかと推定されている[6]。1号機は比較的短時間に多量の高温の炉心物質がペDESTALに移行して顕著なMCCIが生じた可能性がある[7]。

1Fの廃炉作業では『福島第一原子力発電所の廃止措置等に向けた中長期ロードマップ』[8]に基づき、汚染水対策、使用済燃料プールからの燃料取り出し、燃料デブリ取り出し、廃棄物対策等が進められている。特に燃料デブリの取り出しのためには、ロボットによる光学的観察やデブリサンプルの分析によりPCV内部で燃料デブリがどこにどのように分布しているかを調査した上で段階的に取り出しの規模を拡大していくことが予定されている[9]。図1-2は現時点までに推定されている燃料デブリの分布の概略図である。2022年現在までに得られている燃料デブリの性状や分布により、まずはRPVからPCVに放出された燃料デブリの量が少ない2号機から試験的な燃料デブリ取り出しを漸次的に実施していくとされている[10]。



図 1-2 1F 1 - 3 号機における燃料デブリ分布の推定 [9]

2号機の試験的な取り出しを経て今後本格化していく燃料デブリの取り出しに際して重要となるのが燃料デブリの性状の把握である。固化した燃料デブリの取り出しに向けにそれらを自由に動かせる状態にするためには、アクセス装置の先端に取り付ける装置により機械的に破碎する等の工程が必要になるが、その検討のためには燃料デブリの表面や、それよりの深い位置でのデブリの機械的強度や物理的・化学的性状を把握しておくことが望まれる[11]。現在までにミュオン透過測定法によるおおよその位置の情報とロボットやサンプリングによる表面の性状の情報及び事故進展の解

析による推定等から多くの知見が蓄積しているが、一方で、燃料デブリの内部でどのような物質がどのような性状で分布しているのかは未だに明らかになっていないため、その理解を深めるためにも、燃料デブリが形成されるまでに経た MCCI の理解を深めることは重要である。

1.3 MCCI の一般的な理解と特徴

1.3.1 MCCI の一般的な理解

軽水炉の過酷事故時に RPV から PCV 下部へ移行する溶融炉心物質はコリウム (corium)、あるいは RPV 内に残留するコリウムと分けて明示する場合には炉容器外コリウム (ex-vessel corium) と呼ばれる。コリウムは崩壊熱を伴う燃料 (UO_2)、燃料被覆管の Zr やその酸化物である ZrO_2 、さらには構造材のステンレス合金 (Fe, Cr, Ni 等) 等により構成される。中でも特に UO_2 の融点は 3120 K 程度 [12] であり、核分裂に伴う組成変化や ZrO_2 との混合によりその液相線温度は 2800 K 程度まで低下する [13] が、それでもなお典型的なコンクリートの固液相線温度 (1300-1600 K) [14] より 1000 K 近く高い。そのため、RPV から放出されるコリウムとコンクリートとの接触に伴い、コンクリートの溶融を含む様々な現象が起こる。MCCI の現象を概念化したスケッチを図 1-3 に示すが、このように MCCI は、炉心酸化物・金属、床コンクリート等の多成分が、それぞれ異なる温度域で熱分解・溶融・凝固するため、気・液・固の相変化とそれらの間の複雑な多成分多相界面が形成される伝熱流動現象である。これらの伝熱流動現象のうち、本研究との関連性が高い要素現象を以下に列挙する [15] [1]。

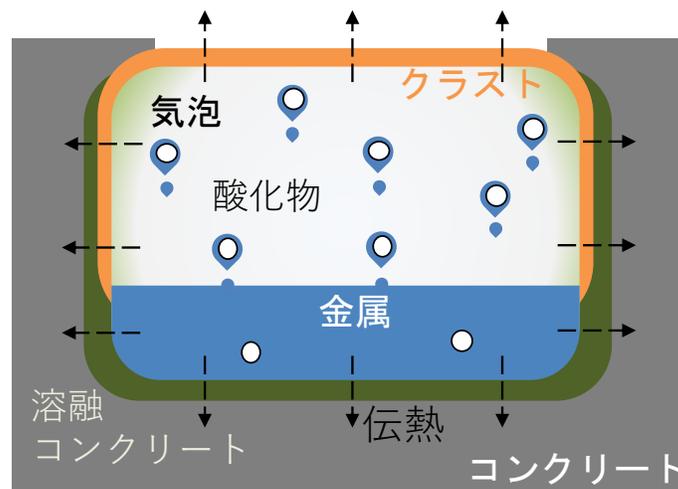


図 1-3 MCCI の現象を概念化したスケッチ

- **コンクリートの侵食**

コンクリートは高温により熱分解・溶融ながら侵食される。コンクリートの密度は 2000-2500 kg/m^3 であるので、密度が 6000-7000 kg/m^3 のコリウムは発生した溶融コンクリートよりも下部に移行することでさらなるコンクリート侵食を継続する。

- **崩壊熱や酸化反応熱による加熱とコンクリート侵食・空気除熱・輻射による冷却**

コリウムは RPV から放出された後も自身の崩壊熱や金属の酸化熱により発熱する。一方で、コンクリートへの伝熱、表面から空気除熱や輻射により冷却される作用もある。これらの加熱と冷却の結果、コリウムの温度の空間分布は時間変化する。

- **物性の温度依存性**

室温から 3000 K 程度まで変化する温度領域の中で、関わる物質の物性が大きく変化する、特に固液相変化を伴う場合はその変化はさらに大きくなる。

- **コンクリート分解ガスの発生とコリウム中の気泡の上昇**

コンクリートの熱分解により発生したコンクリート分解ガスの気泡はコリウム中を上昇し、コリウム内部の流動や成分分布に影響を与える。

- **酸化物・金属の乳濁・分離と成層化**

コリウム内部の UO_2 や ZrO_2 等の炉心酸化物と Fe や Zr 等の未酸化の炉心金属は混ざり合わないため、コリウムの酸化物成分と金属成分が密度成層化する。あるいは、コンクリート分解ガスが十分に溶融物を攪拌すれば、両成分は乳濁 (emulsion) することで、一時的には空間的に一様な物性を示す。

- **酸化還元反応**

金属成分の Fe や Zr が高温コンクリート分解ガス (H_2O , CO_2) により酸化されたり、逆にイオン化傾向が低い Zr がコンクリート中の酸化物の SiO_2 や Fe_2O_3 を還元したりする。また、酸化・還元の際して発生する熱は、崩壊熱と共にコリウムを加熱する。

- **溶融コンクリートと炉心酸化物の混合**

溶融コンクリートは主に SiO_2 または CaO により構成されるため、コリウム内部の酸化物成分の UO_2 や ZrO_2 と部分的に混合し、物性が変化する。RPV から放出された初期のコリウム中の酸化物成分の密度は金属成分のそれに比べて高いが、コンクリートとの混合に伴い酸化物成分の密度は減少し、やがて金属成分よりも密度が低くなると考えられている。

- **クラストとスラグ膜の形成**

炉心酸化物成分は一般に固液相線温度が高いため、表面やコンクリートとの界面から先行的に凝固し薄い膜状の固体相 (クラスト膜) を形成する。比較的に高い剛性をもつクラストが酸化物溶融物を包むため、侵食されるコンクリート壁と酸化物溶融物の間に隙間ができ、この僅かな隙間に溶融コンクリートやコンクリート骨材の膜 (スラグ (slug) 膜) が形成されることで溶融物からコンクリートへの熱伝達が複雑になる。

なお、以上に列挙した要素現象は直接的に観測することは困難であるため、実際の MCCI でこれらの要素現象がいかんして複合的に発現するのかについての知見は蓄積できていない。これらの要素現象の発現の仕方を、実験データから直接的/間接的に導くことが課題である。

1.3.2 MCCI の理解に重要なコンクリートの特徴

MCCI は事故シナリオのみならず、コンクリートとコリウムの物理・化学的な特性の影響を受ける。本項と次項 (第 1.3.3 項) ではコンクリートとコリウムの物性の特徴を示す。コンクリートはセメントの中に骨材 (aggregate) の粒子が埋め込まれている複合材料である。セメントは、石灰 (CaO)、酸化鉄 (Fe_2O_3)、シリカ (SiO_2) やアルミナ (Al_2O_3) 等の原材料を加熱してつくられる混合物で、水と混ぜ合わせることで骨材を結合する結合材の役割を果たす。一方、骨材には主に礫や砂等が用いられるが、コンクリートの主要な構成材料であり、その物性がコンクリートの材料的性質に影響する。原子力発電所で用いられるコンクリートは、骨材の違いから珪酸質コンクリート (siliceous concrete : SIL) と石灰質コンクリート (limestone concrete) に大別される。珪酸質コンクリートを構成する骨材は 70 %以上がシリカ (SiO_2) である。一般的に用いられる玄武岩コンクリート (basaltic concrete) は珪酸質コンクリートの一種と言えるが、珪酸質コンクリートに比べて SiO_2 の含有率が 20 wt%ほど少なく、代わりに Al_2O_3 や MgO 、 Fe_2O_3 の含有率が高いのが特徴である。一

方、石灰質コンクリートの骨材の主成分は CaCO_3 や MgCO_3 等の炭酸塩である。多くの発電所で使用されている石灰石・砂コンクリート (Limestone/Common Sand concrete : LCS) も石灰質コンクリートに分類されるが、シリカの含有率が 20 wt%程度高く、炭酸塩の含有率が 10wt%程度低い。また、これらの2種とは別に、蛇紋岩鉱 ($\text{Mg}_3\text{Si}_2\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) に多量の水を含む蛇紋岩 (serpentine) コンクリートが旧ソビエト連邦の黒鉛減速沸騰軽水圧力管型原子炉 (RBMK) やロシア型加圧水型原子炉 (VVER) の原子炉発電所に使用されている。蛇紋岩鉱物は化学結合水を多く含むため、コンクリートが加熱されると水蒸気が放出される。各種コンクリートの代表的な組成を表 1-1 に示す [16]。

表 1-1 各種コンクリートの組成 [16]

Composition	Siliceous	Basaltic	Limestone	LCS	Serpentine
SiO_2	69.00	54.84	3.60	35.80	33.50
CaO	13.50	8.82	45.40	31.30	7.00
MgO	0.70	6.16	5.67	0.48	29.30
Al_2O_3	4.00	8.32	1.60	3.60	N/A
Fe_2O_3	1.00	6.26	1.20	1.44	N/A
Na_2O	0.70	1.80	0.0078	0.082	N/A
K_2O	1.40	5.39	0.68	1.22	N/A
Cr_2O_3	N/A	N/A	0.004	0.014	N/A
MnO	N/A	N/A	0.01	0.03	N/A
TiO_2	0.80	1.05	0.12	0.18	N/A
CO_2	4.23	1.50	35.698	21.154	1.20-1.50
$\text{H}_2\text{O}_{\text{evap}}$	3.10	3.86	3.94	2.70	5.00
$\text{H}_2\text{O}_{\text{chem}}$	3.68	2.00	2.00	2.00	13.80

MCCI の最中、コンクリートは最高で 3000 K を超える高温に晒されるため、高温でのコンクリートの挙動の理解が重要である。表 1-2 に異なる温度でのコンクリートの挙動と関連する化学反応をまとめている [15]。

表 1-2 異なる温度でのコンクリートの挙動と関連する化学反応 [15]

Temperature (K)	Concrete behavior and chemical reactions
373	Evaporation of physically bound water $H_2O(l) + 2258\text{kJ/kg } H_2O \rightarrow H_2O(g)$
373-1123	Dehydration of hydrates $3CaO \cdot 2SiO_2 \cdot 3H_2O \rightarrow 2CaO \cdot SiO_2 + CaO \cdot SiO_2 + 3H_2O(g)$
673-873	Dehydration of calcium hydroxide $Ca(OH)_2 + 1340\text{kJ/kg } Ca(OH)_2 \rightarrow CaO + H_2O(g)$
847	Crystalline transformation from α - to β -quartz $SiO_2(\alpha) + 12\text{kJ/kg } SiO_2 \rightarrow SiO_2(\beta)$
873-1173	Decomposition of calcium carbonate $CaCO_3 + 1637\text{kJ/kg } CaCO_3 \rightarrow CaO + CO_2(g)$
1373-1773	Melting of Portland cement
1735	Decomposition of hematite into magnetite $6Fe_2O_3 + 480\text{kJ/kg } Fe_2O_3 \rightarrow 4Fe_3O_4 + O_2(g)$
1870	Melting of magnetite $Fe_3O_4(s) + 600\text{kJ/kg } Fe_3O_4 \rightarrow Fe_3O_4(l)$
1973-2073	Melting of 13-quartz $SiO_2(s) + 130\text{kJ/kg } SiO_2 \rightarrow SiO_2(l)$

また、骨材の熱的特性は高温下でのコンクリートの挙動に影響する。例えば、珪酸質骨材の溶融温度は高い（約 2000 K）ため、MCCI の進展中も分解されにくく、そのまま残る可能性がある。一方、石灰質骨材は約 870 K を超えると分解し、珪酸質骨材に比べて多くの二酸化炭素ガスを発生する。

さらに、コンクリートの種類によって固液相線温度や分解エンタルピー（コンクリートを室温から侵食されたと見なされる温度まで加熱するのに必要なエンタルピー）は表 1-3 のように異なる [16]。石灰質コンクリートは、珪酸質コンクリートよりも固液相線温度範囲と分解エンタルピーが大きい。これらの特性の違いは、コリウムの状態だけでなく、MCCI の進展にも大きな影響を与える。

表 1-3 各種コンクリートの固液相線温度と分解エンタルピー [16]

Concrete	Solidus temperature (K)	Liquidus temperature (K)	Decomposition enthalpy (MJ/kg)
Siliceous	1403	1523	1.6-2.7
Basaltic	1350	1650	1.5-2.3
Limestone	1690	1875	2.9-5.1
LCS	1420	1670	2.3-3.2

1.3.3 MCCI の理解に重要なコリウムの特徴

RPV から放出された直後のコリウムは UO_2 、 ZrO_2 、Zr、Fe、Cr、Ni 等により構成される。図 1-4 に、軽水炉の過酷事故において溶融が生じる温度、化学反応の開始温度と原子炉を構成する主な物質の融点をまとめる [17]。 UO_2 の融点は 3120 K 程度 [12] であるが、中性子照射や燃焼度によ

りその融点は低下する。さらに、融点 2900-3000 K 程度の ZrO_2 との反応により、 UO_2 - ZrO_2 液相線温度は 2800 K 程度まで低下する [13]。一方、金属に注目すると、炉心構造材料であるステンレス鋼の融点は 1750 K 程度、燃料被覆管材料であるジルコニウム合金の融点は 2000 K 程度であるが、より低温においても共晶反応（複数の物質が混在することによって融解が純物質のそれよりも低温で生じる現象）により溶融が起こる。例えば、1400 K 以上ではステンレス鋼と B_4C の共晶反応が、1470 K 以上ではステンレス鋼とジルコニウム合金の共晶反応が生じる [17]。

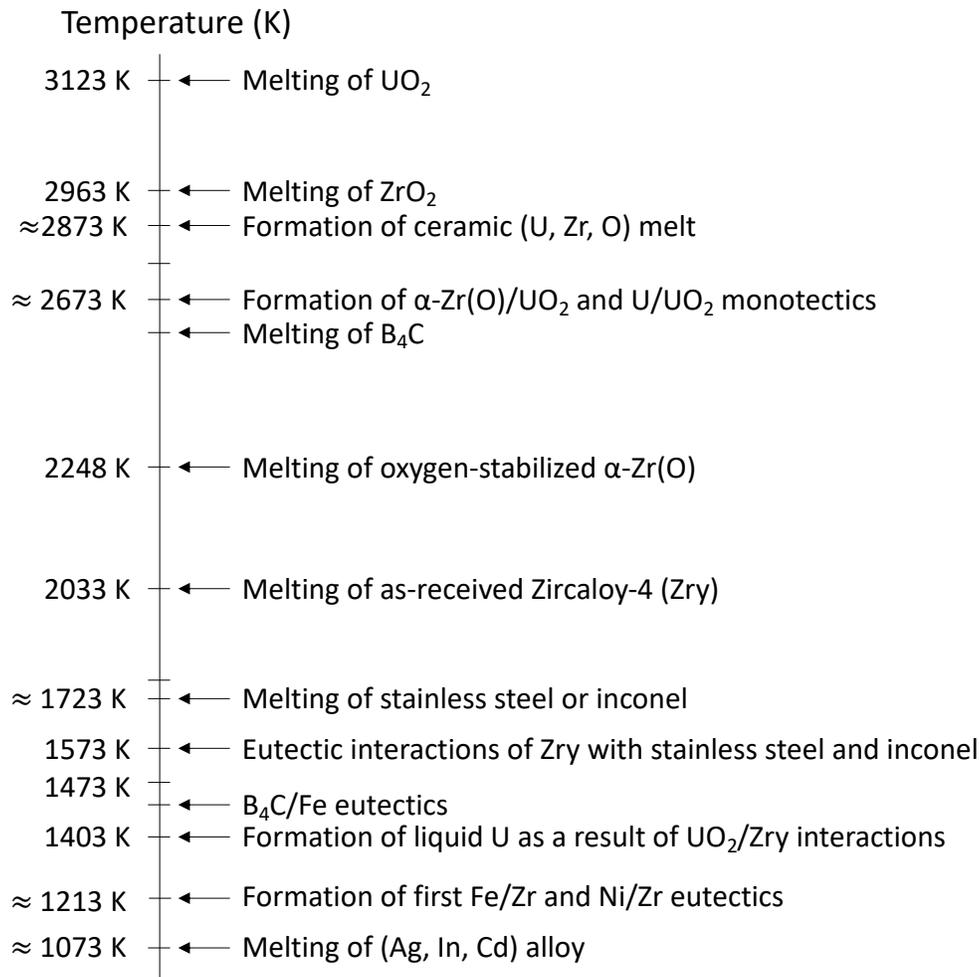


図 1-4 軽水炉の過酷事故において溶融が生じる温度、化学反応の開始温度と原子炉を構成する主な物質の融点 [17]

コリウムの組成は事故進展時の炉心の温度履歴の影響を強く受けるが、炉型によっても異なる。

表 1-4 は、加圧水型軽水炉（Pressurized Water Reactor : PWR）における典型的な炉容器外コリウムの初期組成を示している [1]。このケースでは、150 t のコリウムが RPV から移行してきたと想定されており、そのうち 100 t 以上は酸化物である。残りの約 50 t は金属のままであり、その金属の中でも Fe が 70 % を占めている。

表 1-4 PWR における典型的な炉容器外コリウムの初期組成 [1]

		初期重量 (t)	初期質量流量 (wt%)
酸化物	UO ₂	82	54.2
	ZrO ₂	19.5	12.9
金属	Fe	35	23.1
	Cr	6	4.0
	Zr	4.8	3.2
	Ni	4	2.6

一方で、沸騰水型軽水炉（Boiling Water Reactor : BWR）の典型的な炉容器外コリウムの初期組成を表 1-5 に示す [18]。コリウムの初期金属割合が PWR のそれに比べて高いのは、仮定された事故シナリオの違いにもよるが、PWR に比べ炉心部や炉心下部に金属構造物が多い BWR の設計上の特徴からも理解できる。

表 1-5 BWR における典型的な炉容器外コリウムの初期組成 [18]

		初期重量 (t)	初期質量流量 (wt%)
酸化物	UO ₂	163	42.6
	ZrO ₂	17	4.4
金属	Fe	121	31.7
	Zr	48	12.6
	Cr	23	6.0
	Ni	10	2.6
	B ₄ C	0.3	0.1

また、第 1.3.1 項で述べたように、コリウム中の炉心酸化物の固液相線温度は、PCV 床に放出され MCCI が起きると、コンクリートとの混合に伴い大きく低下する。図 1-5 は、炉心酸化物が珪酸質コンクリート中の酸化物と混合した際の固液相線温度を、溶け込んだコンクリートの質量割合に対して示しており、コンクリートの質量割合の増加に伴い固液相線温度が低下している [19]。特に、混合した酸化物の固相線温度は、10 wt% コンクリートが混合しただけで 1300 K 程度も低下していることがわかる。このような炉心酸化物とコンクリート中の酸化物との混合に伴う物性の変化は固液相線温度に限らず、密度や粘性といった物性にも大きな影響を与える。なお、炉心酸化物とコンクリート中の酸化物の間の混合は、両成分が固体のように接触しているだけであればほとんど発生せず、お互いが液相として対流し接触面積を増やすことで混合が進むと理解されている。特に、その対流が乱流の形態をとる場合は接触面積が劇的に増大し、混合が促進する [20]（対流拡散と呼ばれる）。

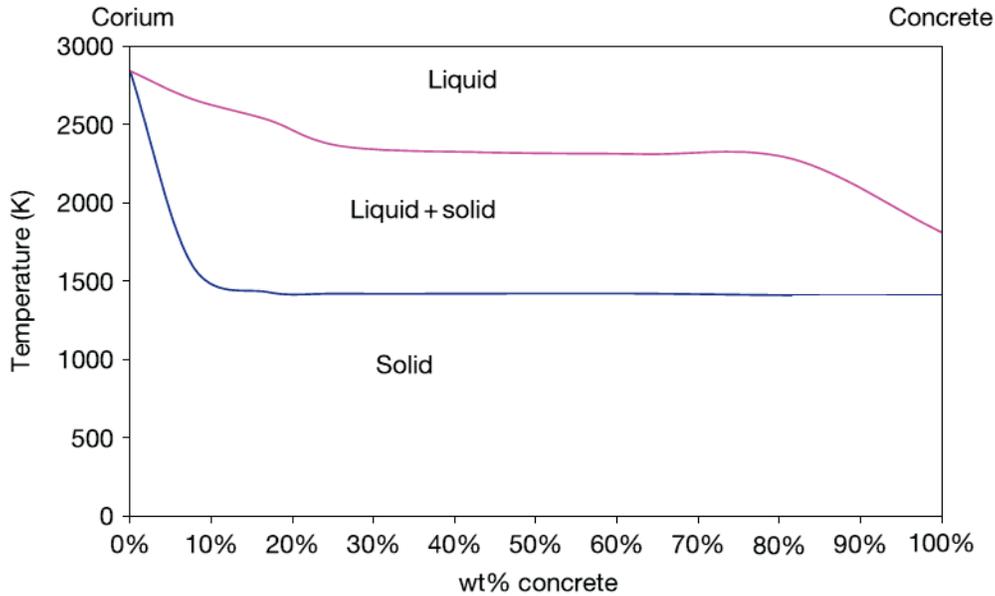
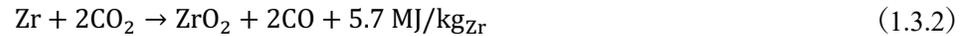
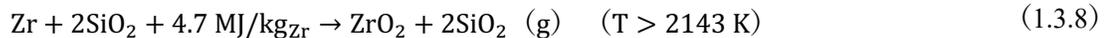
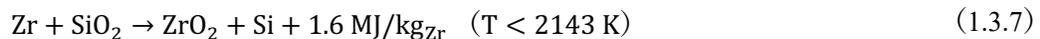


図 1-5 炉心酸化物と溶融コンクリートが混合した（混合）酸化物の固液相線温度 [19]

さらに、コリウム内部の金属成分は蒸気等との反応により酸化する [15]。例えば、水素よりイオン化傾向が強い Zr と Cr が発熱を伴いながら酸化し、一方、鉄は吸熱を伴い酸化する。以下の化学反応式からもわかるように、金属の Zr はその反応性の高さから最も早く酸化し、大きな発熱を伴うだけでなく、可燃性ガスの H_2 を発生するため、MCCI において重要な現象の一つである。



一方、コンクリート中の酸化物成分に含まれる SiO_2 や Fe_2O_3 が Zr により還元されると、金属の Si や Fe に還元される。



1.4 コンクリートの侵食に着目した MCCI 実験

第 1.1 節に述べたように、従来に行われてきた MCCI 実験は MCCI に伴うコンクリートの侵食の程度やその形状、コンクリート分解ガスやそれに伴う放射性エアロゾルの放出挙動といった、放射性物質の閉じ込めに直接関わる事象を評価してきた。実機の過酷事故で発生しうる MCCI は、RPV 破損タイミング、コリウムの量や初期温度、初期組成に大きく依存する。さらに、過酷事故対策の一環として、MCCI の回避または早期終息のために事前に床コンクリート上や床コンクリート内部に冷却水を用意（水張り）しておく場合や、MCCI 進行中に（意図的あるいは偶発的に）冷却水が上部から注水されるような場合では、コリウムが急冷（quenching）するため、注水を伴わない

場合と比べて全く様相の異なる現象が発生する [5]。このような多様な MCCI の状況を模擬し過酷事故の現象理解を深めるため、また原子力発電プラントの安全評価をする数値解析コードの妥当性確認用のデータを取得するため、数多くの実験がなされてきた。表 1-6 には従来に実施されてきた実験とそれぞれに用いられた模擬コリウムとコンクリートの種類、及び着目していた現象をまとめている。表 1-6 のそれぞれの実験は、実際には複数の実験で構成されている場合が多く、同一のシリーズ実験で異なるコンクリート、模擬コリウム組成、加熱密度や加熱時間により実験がおこなわれている。各シリーズ実験の詳細な情報は各文献あるいは [5] を参照されたい。

表 1-6 従来の MCCI 実験 [5]

実験名	体系	コリウム	コンクリート	着目パラメーター
BETA I	2D	Al ₂ O ₃	SIL, LCS	コンクリート侵食, エアロゾル放出
BETA II	2D	Fe, Zr, SiO ₂	SIL, 蛇紋岩	コンクリート侵食, エアロゾル放出
SURC	1D	SUS	SIL, LCS	コンクリート侵食, エアロゾル放出
COMET	2D	Fe, Al ₂ O ₃	SIL	コンクリート侵食形状, エアロゾル放出, デブリ冷却性
MOCKA	2D	Fe, Al ₂ O ₃	SIL	コンクリート侵食, エアロゾル放出
HECLA	2D	SUS	SIL, 酸化鉄	コンクリート侵食
ACE	1D	UO ₂ -ZrO ₂	SIL, LCS, LL, 蛇紋岩	コンクリート侵食, FP 放出
SURC	1D	UO ₂ -ZrO ₂	LCS, 玄武岩	コンクリート侵食, エアロゾル放出
SICOPS	2D	UO ₂ -ZrO ₂	酸化鉄	コンクリート侵食, 耐熱壁の作用
CCI	2D	UO ₂ -ZrO ₂	LCS, SIL	コンクリート侵食
VULCANO VB	2D	UO ₂ -ZrO ₂	LCS, SIL, 酸化鉄	コンクリート侵食形状
VULCANO VBES	2D	UO ₂ -ZrO ₂	LCS, SIL	コンクリート侵食形状
VULCANO VBS	2D	UO ₂ -ZrO ₂ , Fe	LCS, SIL	コンクリート侵食形状, 金属の影響
VULCANO VF	2D	UO ₂ -ZrO ₂ , Fe	玄武岩	コンクリート侵食形状, 金属の影響
SWISS	1D	SUS	LCS	コンクリート侵食形状, エアロゾル放出, デブリ冷却性
WETCOR	1D	Al ₂ O ₃	LCS	コンクリート侵食形状, エアロゾル放出, デブリ冷却性
COTELS	2D	UO ₂ -ZrO ₂	玄武岩	コンクリート侵食形状, デブリ冷却性
MACE	1D, 2D	UO ₂ -ZrO ₂	LCS, SIL	コンクリート侵食形状, デブリ冷却性

表 1-6 からわかるように、全ての実験において実機の事故で想定されるような炉心酸化物と金属の混成溶融物を用いているわけではなく、単成分の溶融物を用いた MCCI 実験も存在する。さらに、酸化物や金属として用いている材料も実験毎に異なる。これらの差異は実験の単純化や、想定する事故シナリオの違いに起因する。本節では、模擬コリウムの組成に着目し、単成分の模擬コリウムを用いた実験と、酸化物と金属の 2 成分の模擬コリウムを用いた実験から代表的なものについて

て、従来の研究の論点をまとめる。尚、本研究で着目する VULCANO VF-U1 実験については別途第 1.6 節で後述する。

単成分の模擬コリウムを用いた MCCI 実験

単成分溶融物による MCCI 実験の代表例として、模擬コリウムに $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ を用いた ANL による CCI 実験シリーズの CCI-2 と CCI-3 を紹介する [21]。両実験では、PWR 炉心燃料を模擬した酸化物の溶融物が異なる種類のコンクリートを侵食した際の浸食形状の違いが注目された。主に $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ で構成された炉心酸化物模擬粉末が、CCI-2 では石灰質コンクリート、CCI-3 では珪酸質コンクリートにより構成された容器に注がれ、テルミット (thermite) 反応と電熱線による直接加熱 (Direct Electrical Heating: DEH) により加熱・溶融され MCCI が模擬された。CCI-2 実験 (石灰質コンクリート) の実験後のコンクリート侵食の分布の写真とスケッチをそれぞれ図 1-6 と図 1-7 に示す。コンクリートが等方的に侵食されていることが伺える。



図 1-6 CCI-2 実験後のコンクリートと凝固したコリウム [22]

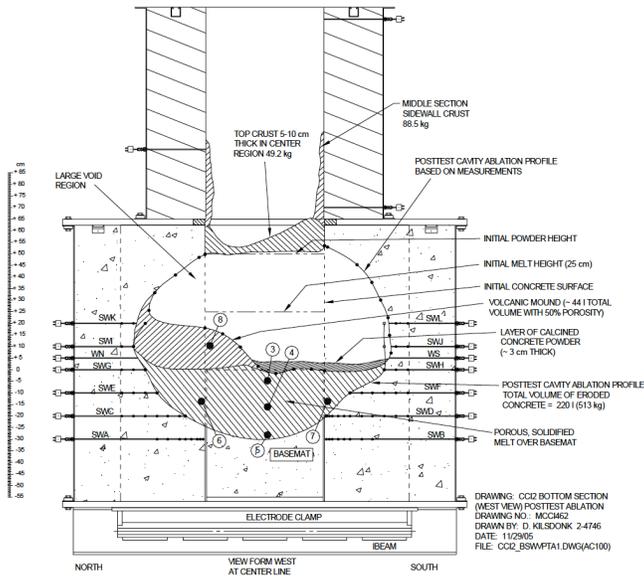


図 1-7 CCI-2 実験後の実験体系のスケッチ [22]

一方、図 1-8 と図 1-9 には CCI-3 実験（珪酸質コンクリート）の実験後のコンクリート侵食の分布の写真とスケッチをそれぞれ示している。CCI-2 実験と対照的に、横方向のコンクリート侵食が軸方向のそれよりも大きく促進されていることがわかる。



図 1-8 CCI-3 実験後のコンクリートと凝固したコリウム [22]

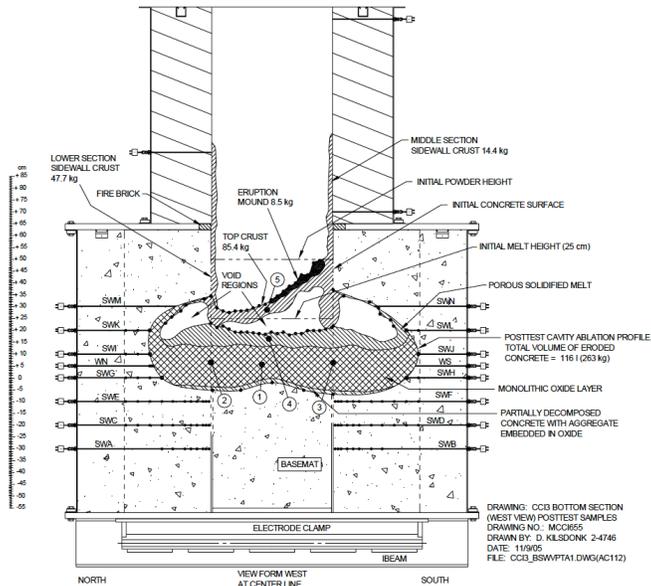


図 1-9 CCI-3 実験後の実験体系のスケッチ [22]

このように単成分の模擬コリウム MCCI におけるコンクリートの侵食形状がコンクリートの種類、すなわち組成に依存することは VULCANO VB 実験シリーズでも同様に観察された [23]。

酸化物成分と金属成分で構成される模擬コリウムを用いた MCCI 実験

次に、酸化物と金属の 2 成分の模擬コリウムを用いた実験から代表的なものとして、KIT による MOCKA 実験シリーズのうち、珪酸質コンクリート容器を用いた MOCKA1.7 実験を例にとる [24] [5]。同実験では、模擬コリウム中の金属成分の一部が MCCI 終息後まで酸化されずに残り、酸化物成分に比べ熱伝導率の高い金属成分の周囲のコンクリート浸食が顕著になったことが報告されている。実験では、直径 25cm のコンクリート容器に 42 kg の金属 (Fe) と 68 kg の酸化物 (56 wt% Al_2O_3 、44 wt% CaO) が用意され、テルミット (テルミット反応を起こす際に利用する酸化鉄と金属アルミニウムの混合物) と金属ジルコニウムをコンクリート容器に投入することでテルミット反応や金属ジルコニウムの酸化反応により崩壊熱を模擬した。

図 1-10 は実験後のコンクリート侵食の様子と凝固したコリウムを示している。図中の赤褐色領域が金属成分、その上部の灰色の領域が酸化物成分を示しており、さらに、緑色の紐が初期のコンクリート容器の形状、赤い線が金属の上面の高さに相当する。テルミットと金属ジルコニウムの継続的な投入により、実験中にコリウムの体積が増加していくことが MOCKA 実験シリーズの特徴である。さらに、溶融したコンクリートが酸化物成分に混入するため、酸化物成分の体積が金属の体積を大きく上回っていることがわかる。密度差により下部に溜まった熱伝導率の高い金属成分からの伝熱により、軸方向の侵食が大きく促進していることがわかる。

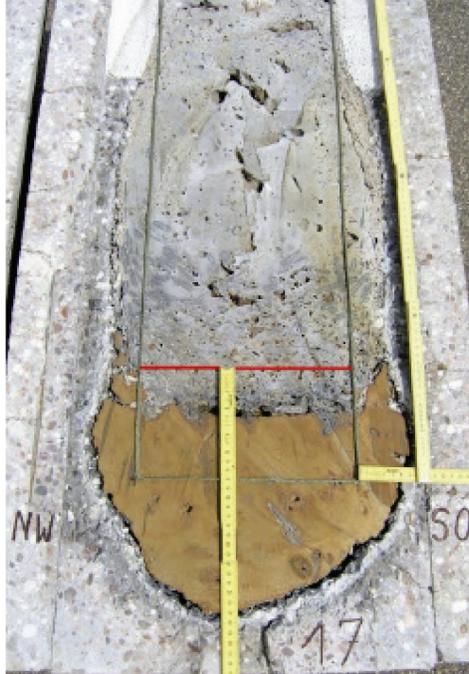


図 1-10 MOCKA1.7 実験後のコンクリートと凝固したコリウム [5]

MOCKA 実験で注意すべき点は、酸化物を模擬しているのは Al_2O_3 と CaO であり、その密度（コンクリート混入前でおおよそ 3680 kg/m^3 ）は実機において想定される酸化物の密度（コンクリート混入前でおおよそ 6000 kg/m^3 ）と比べると半分程度であることである。

1.5 コンクリート侵食に着目した解析

1.5.1 流動を解かない MCCI 解析

前節（第 1.4 節）に述べた MCCI 実験の主要な目的の一つは、原子力発電プラントの安全評価を行う数値解析コードの開発方針や妥当性を確認するために必要なデータを取得することであった。従来行われてきた実験から、MCCI はコンクリートの種類や模擬コリウムの構成（単成分で構成した場合や、金属と酸化物の 2 成分で構成した場合）の違いにより、コンクリートの侵食挙動が異なることが示された [25]。そのため、これまでに開発されてきた MCCI 解析コードのほとんどは以下のように、実験で生じた模擬コリウムや溶融コンクリート等の溶融物の詳細な流動は解かずに、コリウム・コンクリート界面の熱伝達に着目し、界面上の着目点 i におけるコリウムからコンクリートへの熱流束 φ_i を求めることで侵食を推定している [1]。

$$\varphi_i = h_i(T_{bulk} - T_i) \quad (1.5.1)$$

ここで h_i は対流熱伝達係数、 T_i が着目点の温度で T_{bulk} がコリウムのバルク温度である。コリウムからコンクリートへの熱流束 φ_i が与えられることで、界面の点 i における局所的な侵食速度 v_{abl} が

$$\rho v_{abl} \Delta H_{concrete} = \varphi_i \quad (1.5.2)$$

により導かれる。ここで、 ρ がコンクリートの密度、 $\Delta H_{concrete}$ がコンクリートの分解エンタルピーである。これらの式を、熱流束と各点の面積 S_i を掛けた合計が総発熱量 \dot{Q} に等しいという条件：

$$\sum_i \varphi_i S_i = \dot{Q} \quad (1.5.3)$$

と組み合わせ、界面の温度 T_i と熱伝達係数 h_i を別の相関式等から与えれば、各界面の点 i における侵食の速度を求めることができる。

熱伝達率 h_i はコンクリートが触れているコリウムが、熱伝導率が 1W/mK 程度でクラストを形成する酸化物成分なのか、熱伝導率が 10W/mK 程度でクラストを形成しない金属成分なのかに依存するため、これらの解析コードでは酸化物成分と金属成分それぞれについて熱伝達率が評価されている。ただし、MCCI の最中に各成分がいかに関わるかという理解は得られておらず、また上述のようにこれらの解析コードでは流動を解かないため、金属成分と酸化物成分の空間分布は解析対象ではなく、以下のような経験則的な仮定が適用されることが一般的である。

1. MCCI 開始直後、金属成分より重い炉心由来酸化物成分 (UO_2 - ZrO_2) が下部に溜まり両者が密度成層化する。
2. MCCI が進行すると酸化物成分に溶融コンクリート (SiO_2 等) が混ざり込むことで酸化物成分の密度が減少する。酸化物成分の密度が金属成分の密度と同程度になると、コンクリート分解ガスによる攪拌により両成分は概ね乳濁していると仮定され、コード上では単一の成分として扱われる。
3. 溶融コンクリート (SiO_2 等) がさらに酸化物成分中に混ざり込むことで酸化物成分の密度が金属成分の密度を大きく下回り、かつ「成層化条件」を満たせば、金属成分が下層に移行し、初期の密度成層化分布が逆転する。

ここで「成層化条件」とは、酸化物成分と金属成分間が成層化するかどうかをコンクリート分解ガスの発生量で判定するための実験相関式であり、BALISE 相関式 [26] と Epstein [27] 相関式が有名である。

このようなモデルに基づく MCCI 解析コードは、SNL が 1981 年から 1993 年に開発した CORCON [28] と、同様に 1981 年から KIT で開発された WECHSL である [29]。より最近では CEA の TOLBIAC-ICB [30] や Areva の COSACO [31]、Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN: 放射線防護・原子力安全研究所) の ASTEC/MEDICIS [32]、SNL の MELCOR [33] 等が開発されてきた。これらの解析コードは全て上述の伝熱計算モデルを共有しているが、コリウムからコンクリートへの伝熱相関式や仮定する成分分布等が異なり、同じ MCCI 実験を対象とした解析でもコンクリート侵食の予測結果に大きな差異が発生している [1] [34]。

このように、従来の MCCI の数値解析では、断片的な現象理解に基づく経験則により原子力プラントの安全性が評価されており、評価の信頼性を向上するためには、実験データと現象を紐付ける新たな手がかりを元に現象理解を深めること課題である。

1.5.2 流動を解く MCCI 解析

第 1.5.1 項に紹介した多くの解析コードは 1980 年代から 2000 年代初頭にかけて開発されてきた。一方で、2000 年代以降の計算機の能力向上に伴い、流体の支配方程式である Navier-Stokes 方程式 (N-S 方程式) を直接的に解く数値流体力学 (Computational Fluid Dynamics : CFD) が様々な伝熱流動問題に適用できるようになった。これらのことを背景に、流動を直接解く CFD 解析により、MCCI に伴い生じる酸化溶融物や金属溶融物の分布・流動様式やそれらの溶融物からコンクリート壁面への熱流束を仮定せずにコンクリート侵食を予測する試みが 2010 年代から始まった。それらの代表的な研究に、計算点 (粒子) により流体を離散化する粒子法の一つである Moving Particle Semi-implicit (MPS) 法 [35] を用いた解析研究がある。MPS 法は、粒子が流れとともに移動する Lagrange

式記述で流体を離散化することから、固液相変化を伴う異なる成分の間の界面を容易に追跡できる [36]。

早稲田大学の Li らは玄武岩コンクリート床と酸化マグネシウム性（耐熱材）の側壁で構成した体系の 1 次元的なコンクリート床浸食に着目した MCCI 実験である SURC-2 実験と SURC-4 実験を MPS 法により解析し、コンクリート床に沿って形成される溶融物の凝固物層（クラスト層）が断熱層のように働きコンクリート浸食を抑制することを示した [37]。また、コンクリート床と側壁の 2 次元的な浸食に着目した CCI-2 実験と CCI-3 実験を解析し、両者でコンクリート側壁の浸食量が大きく異なったことは、側壁に沿って形成したクラスト層が安定して側壁に固着していたのか、それとも溶融物と共に流れやすかったのかの違いで説明でき、側壁クラストの安定性はコンクリートの種類の違いに起因すると考えられるとした [38]。さらに、コンクリートの 3 次元的な浸食形状に着目した VULCANO VB-U7 実験の解析 [39] と COMET-L3 実験の解析 [40] においても、異なる溶融物のクラストの形成、流動、再溶融等がコンクリートの浸食パターンに強く影響していることを示した。

一方、Li らと同時期に MCCI を MPS 法により解析した東京大学の Chai らは、MCCI の最中の溶融物内部の流動や物性の変化がコンクリート侵食に与える影響に着目した。このとき、コンクリート分解ガスにより生じた溶融物中の気泡の上昇が溶融物を攪拌する効果や溶融したコンクリートが炉心酸化物と混合し酸化物成分の物性が変化すること等をモデル化し、CCI-2 実験と CCI-3 実験の侵食形状をよく再現する結果を得た [41] [42]。特に、コンクリート分解ガスが溶融物内部で局所的な対流熱伝達を促進したことで CCI-3 実験ではコンクリートの非等方的な侵食が進行した可能性を提案した [42]。

より近年には 2019 年から西安交通大学の Chen らや Cai らが HELCA 実験を MPS 法により解析し、溶融物の流入流量がコンクリート侵食形状に与える影響を研究した [43] [44]。Li らの研究と同様に、溶融物の流入流量が小さいと側壁付近のクラストが形成して断熱層のように働くことで伝熱が抑制され、コンクリート横方向の侵食量が小さくなることが示唆された [44]。

このように、近年の CFD に基づくより MCCI 解析は、伝熱相関式や溶融物の分布及び流動様式等を仮定する必要がないため、実験で得られたコンクリートの侵食率や浸食形状と、それらをもたらしした要因をそれ以前の研究に比べて精緻に分析できるようになり、MCCI の現象理解の深化に貢献してきた。

1.6 VULCANO VF-U1 実験の概要と実験後のデブリの特徴

第 1.3.3 項に示したように、実際の過酷事故で発生するコリウムは炉心酸化物 ($\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$) や炉心構造材のステンレス鋼等の金属 (Fe 等) 等から構成され、非均質である。しかし、これまでの実験の多くは、実験設備の制約等により、単成分の模擬コリウムを使用している (例: TURC、ACE、CCI、COMET、VULVANO VB、HELCA)。また、酸化物と金属の 2 成分の模擬コリウムを用いた実験の多くは酸化物に $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ の代わりに $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-CaO}$ 等を用いたり、実験初期からコンクリートが混合した酸化物を用いたりしている (例: BETA、SURC、SICOPS、MOCKA)。そのため、多くの実験で用いられた模擬コリウムの成分は実際の過酷事故のコリウムの成分と大きく異なる。

これらの従来の実験と異なり、VULCANO VBS 実験（以降は「VBS 実験」とする）と VULCANO VF-U1 実験（以降は「VF-U1 実験」とする）は実際の過酷事故で想定されるコリウム成分（酸化物 ($\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$) + 金属 (Fe 等)）を再現している。本研究では、数値解析の計算コストの観点等から実験時間が比較的短い VF-U1 実験に着目する（VBS 実験については付録の第 6.1 節を参照）。以下では VF-U1 実験の概要を紹介するが、詳細な実験条件は第 2.2.1 項を参照されたい。

Bouyer らの CEA のチームと Nakayoshi らの JAEA のチームは、1F の燃料デブリ取り出し手法の検討に資するため、1F の特に 1 号機において発生したと想定される MCCI を模擬し、その際に生

成される凝固物を分析する目的で VF-U1 実験を実施した [45]。模擬コリウム組成は 1F 1号機における炉心物質の平均組成を想定して定められた [46]。一方、コンクリートは、1F 1号機の PCV 床コンクリートの玄武岩コンクリート組成を再現するため、富士川産及び阿武隈川産の骨材を用いて製作された。

同実験では、液体の模擬コリウムがコンクリート容器に注がれていた従来の VULCANO 施設での MCCI 実験と異なり、模擬コリウムを構成する粉末状の炉心模擬物質 (UO_2, ZrO_2, Zr) とステンレス球を円筒状のコンクリート容器に準備し、誘導加熱により昇温し模擬コリウムが生成された。ステンレス以外の成分が粉末状で用意されていたため、加熱を開始し粉末が溶融するまでは体積が大きく、コンクリート容器の上部からはみ出していた (図 1-11)。はみ出していた粉末を保持するため、図 1-12 の右図に示されるようなジルコニア (ZrO_2) 性の円筒が上部に据え付けられた状態で加熱が開始された。

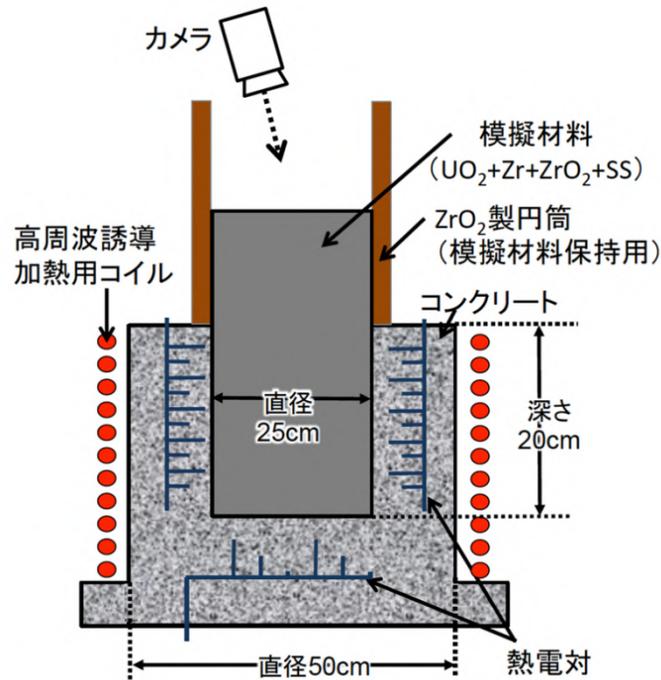


図 1-11 VF-U1 実験の初期状態 [47]

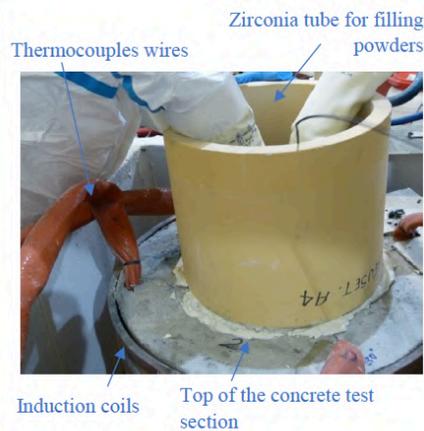
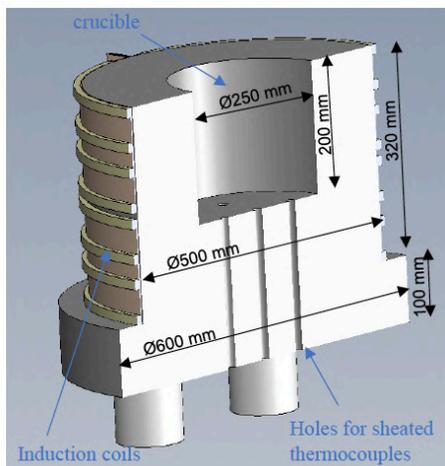


図 1-12 VF-U1 実験のコンクリート容器のスケッチ（左）と、容器上部に据え付けられたジルコニアチューブ [45]

誘導加熱によりコリウムが形成された後、コンクリート内部と模擬粉末中に配置されていた熱電対により MCCI 中の温度分布がモニターされ、MCCI 解析コード TOLBIAC-ICB（第 1.5.1 項参照）により予め評価されていたコンクリート侵食体積（初期コリウム体積の 1.68 倍） [46]に達するまで、崩壊熱を模擬するための誘導加熱が 900 秒程度継続された。最終的なコンクリート侵食形状は、熱電対の破壊履歴や実験後に解体された試験部の観察結果等から図 1-13 のように評価された。

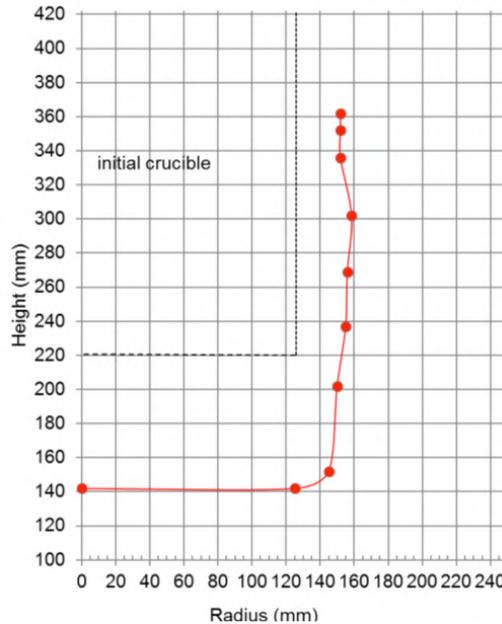


図 1-13 VF-U1 実験のコンクリート侵食形状 [45]

実験後のコンクリート容器の解体作業では、色、光沢、硬さなどから凝固物の性状が観察され、さらに、磁気に反応するか、金属を打ちつけた際に火花が散るかどうかなどで未酸化の金属の分布が探索された [48]。図 1-14 には VF-U1 実験後の凝固物の外観を示しており、図 1-15 は各部分の特徴を説明している。特に、

- 試験部の下部から上部にかけて順に気孔が少ない高密度酸化物、気孔が多い低密度酸化物、クラストが分布していた。
 - コンクリート壁近傍の凝固物には気孔が多かった。
 - 金属成分が数 mm の滴（しずく）のように酸化物中に分布していた
 - 金属成分は単純な密度成層化をせずにコンクリート側壁に沿って軸方向に分布していた
- といった特徴が報告された。

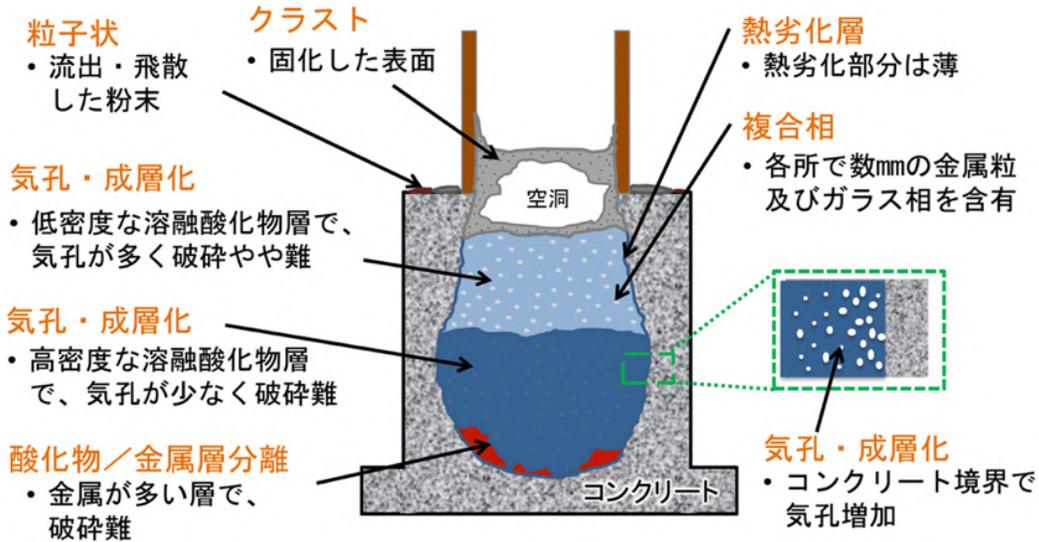
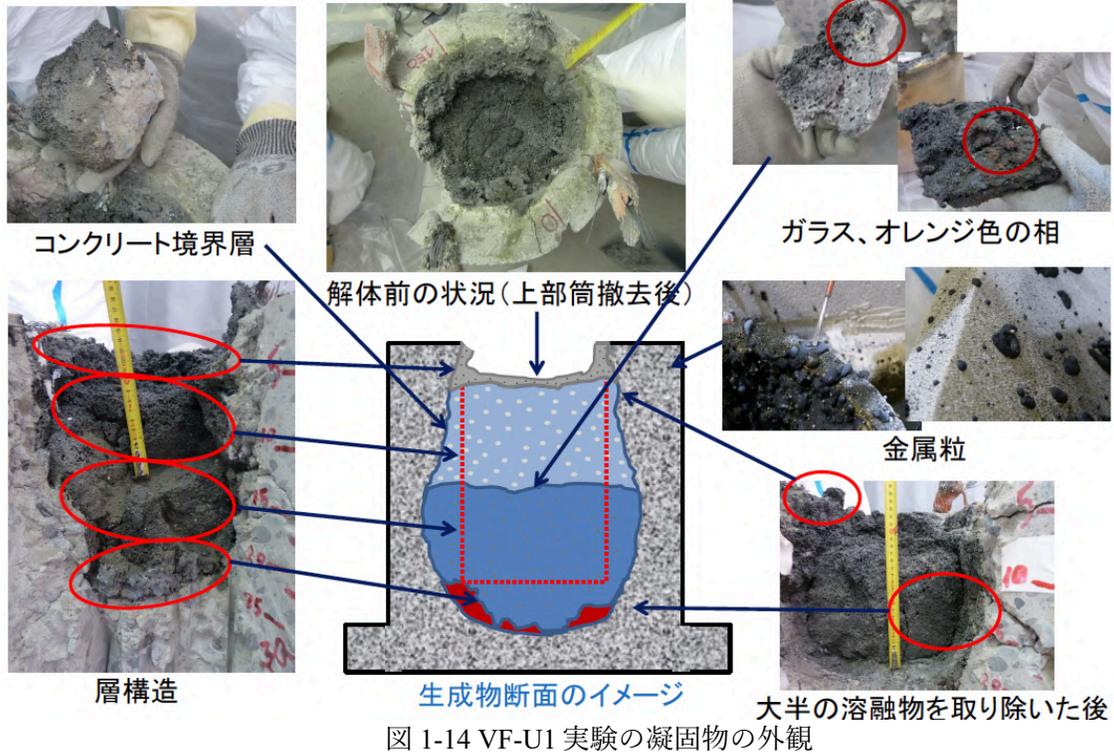


図 1-15 VF-U1 実験の凝固物の各部分の特徴 [47]

これらの特徴から、JAEA の Ikeuchi は、1F1号機における機械的工法による燃料デブリの取出し方法の検討に対する提言を表 1-7 のように取りまとめた。

表 1-7 機械的工法による燃料デブリの取出し方法の検討に対する提言 [47]

解体時の様子	提言
デブリの外観は非常にポーラスで脆く見えるが実際は非常に堅い	外観観察のみの工具選定は不可能
機械的な掘削作業では粉塵が多く発生	急激な視認性低下、放射線モニタへの影響
クラストの確認	とても堅く、打撃などで割れにくい可能性あり
粒子状デブリの確認	ハンドリングツール(吸引、掬い)や水処理系の固液分離の必要性あり
熱劣化コンクリート層の存在	脆いので、把持によるハンドリングに向かない
気孔・成層化の確認	空隙率の違いによる臨界評価への影響を確認する必要性あり
酸化物層と金属層の分離	酸化物と金属を扱う工具が異なる場合は、相の変化を検知する必要性あり

VF-U1 実験はこのように 1F の燃料デブリ取り出し工法の検討に資することを当初の目的としていたが、その一方で、その実験結果の一部は MCCI に関する基礎的な理解を深めるために有用と思われる特徴を示している。前述のように、同実験の溶融物中の異成分は単純に密度成層化をせずに、図 1-15 の凝固物分布のスケッチが示すように、コンクリート側壁に沿って軸方向に分布していた [45]。このような金属成分の分布は、第 1.3.1 項に示した MCCI の従来の理解からは説明できない。同様な金属成分の分布は同様な模擬コリウムを用いた先行実験の VBS 実験でも図 1-16 のように観測され、VBS 実験の結果をまとめた学術論文中では、予期せぬ結果が得られたことが報告されている [49, p. 9068]。

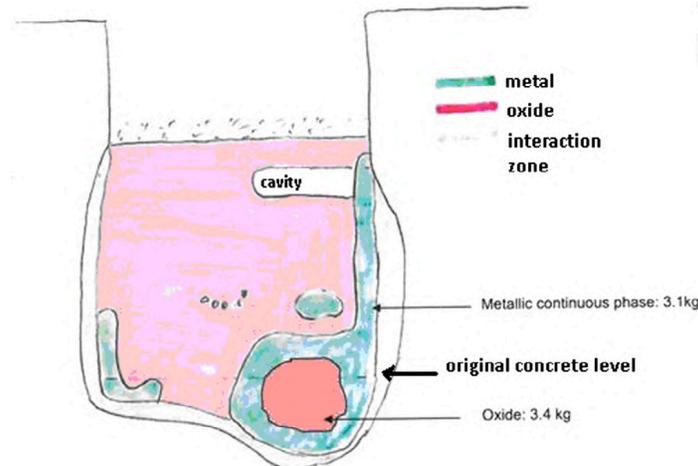


図 1-16 VBS-U3 実験後の金属成分の分布

従来の実験や解析は MCCI の M が "molten" を表していることからわかるように、固相線温度を優位に上回る溶融物の伝熱流動に伴うコンクリートの熱分解、溶融浸食や、それらを停止するための注水作用等が事故対策を念頭に着目され、実験後に凝固残留したデブリ成分の分布は着目されてこなかった。模擬コリウムに酸化物と金属を用いた場合であっても、実際の事故で想定される UO_2-ZrO_2 に比べ密度が低い Al_2O_3-CaO 等が用いられたため、デブリ成分中には金属と酸化物の単純

な密度成層化分布しか現れなかった。VULCANO VF-U1 実験（及び VBS 実験）は初めて実機の事故条件に近い酸化物と金属が用いられた結果、実験後には従来の理解からは予期されぬ酸化物成分と金属成分の分布が生じており、MCCI の後期に溶融物が凝固する履歴がこのような分布に反映されている可能性がある。すなわち、MCCI 後のデブリ成分分布を手掛かりに従来とは異なる視点で MCCI の理解を深められる可能性がある。

1.7 VF-U1 実験後のデブリの特徴についての先行研究の理解

コンクリート側壁に沿う VF-U1 実験の金属分布の発生メカニズムは、実験を実施した CEA の解析チームにより実験直後から着目された。CEA の Boulin らは VF-U1 実験のコンクリート側壁に沿う金属分布のメカニズムを示すため、CFD の一種である Volume Of Fluid (VOF) 法 [50]を用いて溶融金属成分・溶融酸化物成分・気泡の 3 相流解析を実施した [51]。図 1-17 と図 1-18 に示される同解析の結果では、溶融金属成分と溶融酸化物成分は液相と仮定されており、伝熱計算を行わず 10 秒間の間の流動が解かれた。また、Boulin らは、コンクリート側壁に沿う金属分布を溶融金属成分による壁の濡れ性¹ (wetting) により説明できると考え、コンクリートに隣接するセルが金属成分で埋められた場合その金属成分セルは流動を停止する、という人工的な「付着 (adhesion)」モデルを導入した。その結果、気泡により分裂した溶融金属成分が壁に沿い落下するタイミングで壁面に接着することで図 1-18 に示されるように金属成分が壁面に沿い分布した。

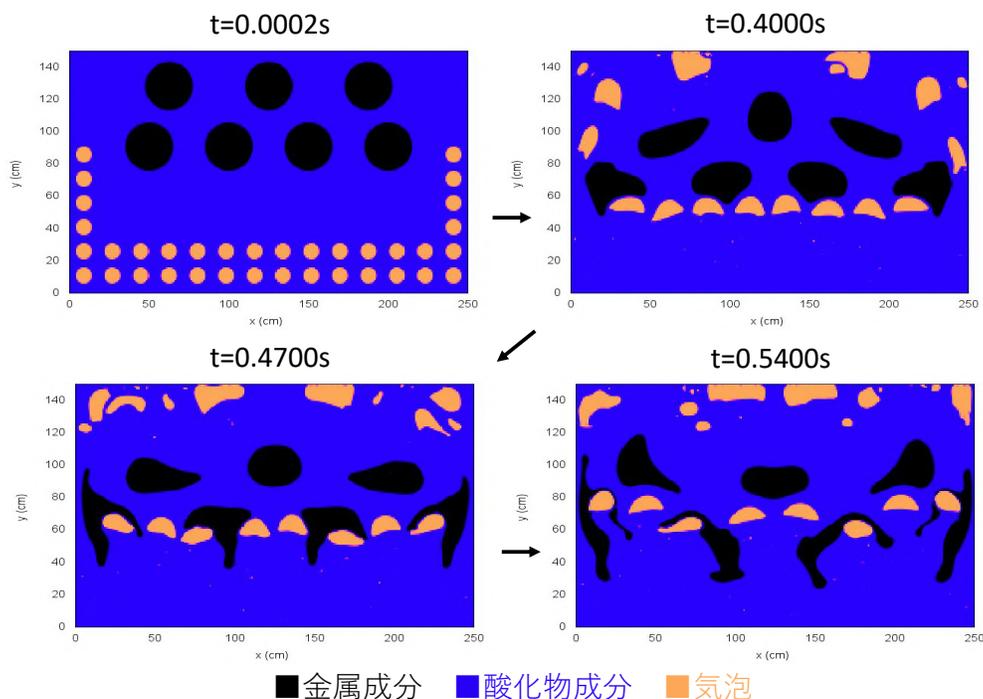


図 1-17 VOF 法による溶融金属成分・溶融酸化物成分・気泡の 3 相流解析 (0 秒から 0.54 秒まで)

¹ 「濡れ性」は工学的な専門用語である。液体が壁面を濡らしやすいか濡らしづらいかは、当該液相とそれを囲む液相及び壁面の 3 相の間の結合力（界面張力/表面張力）により決定される。

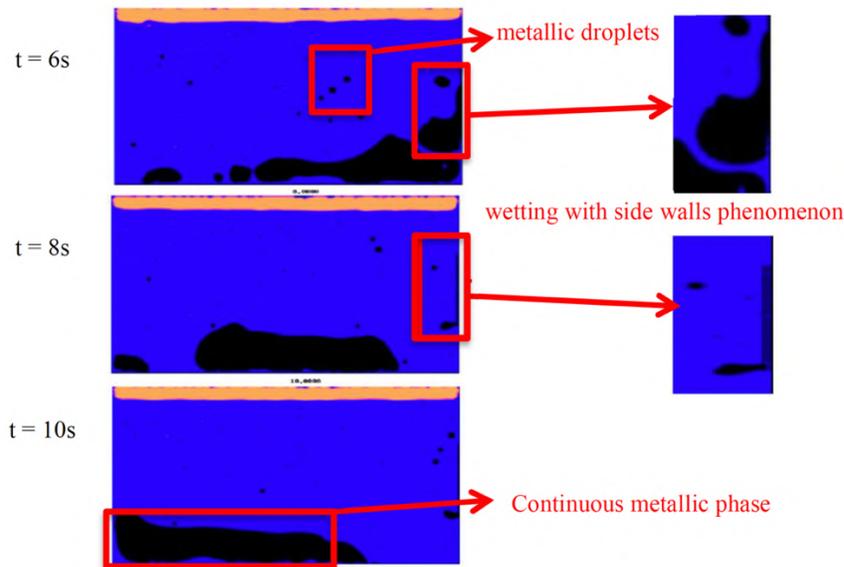


図 1-18 VOF 法による溶融金属成分・溶融酸化物成分・気泡の 3 相流解析（6 秒から 10 秒まで）

Boulin らによる同解析は VF-U1 実験のコンクリート側壁に沿う金属分布を、MCCI の最中の溶融物内部の流動に関連付けて理解することを試みた初めての研究である。ただし、この研究から VF-U1 実験後の金属凝固物分布を理解するには以下のような課題がある。

- 伝熱やコンクリート壁の侵食、溶融物の凝固を考慮していないので、仮に壁の濡れ性が金属成分の分布に影響していたとしても、そのことが実験後に凝固した金属成分の分布の直接的な説明にはならない。
- 解析された 10 秒間の流動から約 900 秒の加熱と冷却時間も含まれる VF-U1 実験の金属成分の分布を説明するのは困難である。
- 金属成分による壁面の濡れモデルが恣意的である。溶融金属成分・溶融酸化物成分・壁面の 3 相の間の界面張力を考慮した濡れモデルを用いる必要がある。

1.8 MPS 法による VF-U1 実験の解析から MCCI の理解を深めるための課題

本研究では Boulin らの解析の課題を解決した解析により MCCI でコンクリート側壁に沿う金属分布に至る履歴を示すことで MCCI の現象理解を深めることを目指す。図 1-19 にイメージを示すように、実験後の凝固物成分の分布は、固相または液相の酸化物・金属・コンクリートという多成分多相流体の伝熱流動の履歴の結果残されたと考えられる。そのため、個々の影響因子と酸化物・金属・コンクリートの異なる温度域における溶融・流動・凝固の相互作用、さらにそれらの結果もたらされる多成分多相界面を伴う伝熱流動履歴とを包括的に考慮する解析により同実験のような分布に至った履歴を示せば、MCCI の現象理解を深められる。

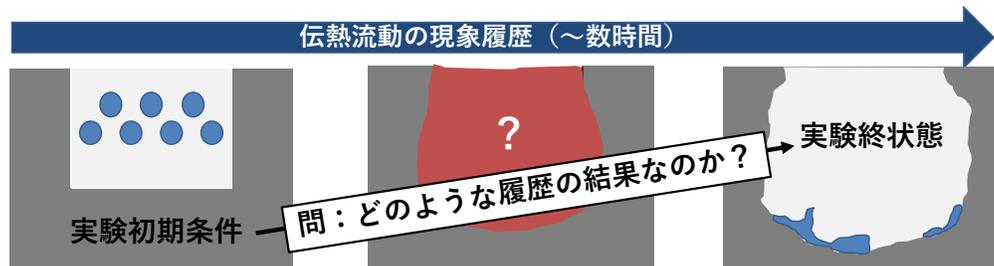


図 1-19 VF-U1 実験の凝固金属成分分布をもたらした伝熱流動の現象履歴

離散点が流れと共に移動する Lagrange 式記述の MPS 法は、界面を明示的に解かずに伝熱や固液相変化を伴う多成分間界面を容易に追跡できるため、MPS 法を改良することで上記のような解析手法を開発することができると考えられる。しかし、MPS 法に基づきこのような MCCI 解析手法を開発するためには、金属成分の分布に影響する現象因子を特定し、それを現実的な解析コストの範疇で可能な限り機構論的に考慮する必要がある。従って、最低限必要と考えられる現象を既存モデルにより考慮した MPS 法により VF-U1 実験を解析し、そのような現象因子の特定とそれらの望ましい模擬の精緻化のレベルを明らかにすることが、MPS 法による VF-U1 実験の解析から MCCI の理解を深めるための第一の課題である。また、特定された現象因子を、望ましい精緻化のレベルで MPS 法により模擬するためのモデルを追加的に実装する、あるいは新規に開発することが第二の課題である。

1.9 本研究の目的と方針

本研究の目的

以上を背景に、本研究では MPS 法の改良と解析により、VULCANO VF-U1 実験の溶融金属成分がコンクリート側壁に沿って分布し凝固するまでの固液相変化を伴う伝熱流動現象の履歴を示し、MCCI の現象の理解を深化することを目的とした。これにより、従来の実験中に得られた限定的なコンクリート浸食挙動データやガス発生履歴から得られた理解に加え、実験後の残留デブリの成分分布を新たな手掛かりに MCCI の現象理解を深める。

本研究の方針

上記の目的を達成するため、まず第 2 章で、最低限必要と考えられる現象を既存モデルにより考慮した MPS 法により VF-U1 実験を解析し、金属成分の分布に影響する現象因子の特定とそれらの望ましい模擬の精緻化のレベルを明らかにする。次に第 3 章で、特定された現象因子を、望ましい精緻化のレベルで MPS 法により模擬するためのモデルを追加的に実装、あるいは新規に開発する。そして第 4 章で、新たなモデルを統合した改良 MPS 法により VF-U1 実験を再度解析し、同実験でコンクリート側壁に沿う金属分布に至る現象履歴を示す。最後の第 5 章では本研究の結論と今後の展望と課題をまとめる。

2 MPS法と既存手法の組み合わせによるVF-U1解析

第2章ではMPS法に既存モデルを組み込んだ解析により、VF-U1実験で溶融金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布し凝固するまでの伝熱流動現象の履歴を示す。第2.1節で本研究に用いるMPS法の概要と基本的なアルゴリズムについて説明し、第2.2節でVF-U1実験の解析条件を示し、第2.3節で解析結果とその考察を示す。このようにして得られたMCCI現象の理解を元に、第2.4節ではその理解をさらに深めるために必要なMPS法の物理現象モデルとその精緻化のレベルを検討する。

2.1 MPS法の概要と本研究に用いる既存手法

2.1.1 MPS法の概要

本研究では、粒子法的一种であるMPS法に基づいたMCCI解析手法を開発する。MPS法はKoshizukaらにより開発された非圧縮性流体のCFDである。特に本項ではKoshizukaらが1996年に開発したオリジナルのMPS法を紹介する。なお、MPS法はもともと、先行していたEuler式記述のCFDの課題、すなわち移流項の離散化と格子の生成に関する困難を解決するべく開発された。格子法の概要とその課題は付録の第6.2節にまとめてあるので、適宜参照されたい。

支配方程式

MPS法で基づく非圧縮流体の支配方程式は以下の連続の式（質量保存の式）、N-S方程式（運動量保存の式）、熱伝導方程式²（熱エネルギー保存の式）である。

$$\frac{D}{Dt}\rho = -\rho\nabla\cdot\mathbf{u} \quad (2.1.1)$$

$$\frac{D}{Dt}\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \frac{1}{\rho}\mu\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{g} \quad (2.1.2)$$

$$\frac{D}{Dt}h = \frac{k}{\rho}\nabla^2 T + \frac{1}{\rho}Q \quad (2.1.3)$$

ここで、 \mathbf{u} は速度、 ρ は密度、 P は圧力、 μ は粘性、 \mathbf{g} は重力加速度、 h は比エンタルピー、 T は温度、 k は熱伝導率、 Q は熱発生密度である。これらの支配方程式中では、時間偏微分項と移流項がLagrange微分（物質微分）で表されている。

$$\frac{D}{Dt}\mathbf{u} \equiv \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} \quad (2.1.4)$$

$$\frac{D}{Dt}h \equiv \frac{\partial}{\partial t}h + (\mathbf{u}\cdot\nabla)h \quad (2.1.5)$$

² なお、厳密には、式(2.1.3)は熱エネルギー保存則と同値ではない。熱エネルギー保存則は厳密には

$$\rho\frac{D}{Dt}h = \nabla\cdot(k\nabla T) + \frac{D}{Dt}P + (\boldsymbol{\tau}\cdot\nabla)\cdot\mathbf{u} + Q$$

で、ここで $\boldsymbol{\tau}$ は応力テンソルである。この厳密な熱エネルギー保存則を、密度や比熱の温度依存性を無視することや、第2項の圧力微分項や第3項の粘性散逸項が非常に高速な流れ等を除き無視できる[146]ことから、式(2.1.3)の式に簡略化している。

粒子法では、計算点である粒子をその点での速度 \mathbf{u} で移動させる操作により流体や温度の移流を表現できるので、プログラム上では Lagrange 微分を通常の微分のように扱って、支配方程式中に移流項 ($(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ や $(\mathbf{u} \cdot \nabla)h$ の項) が陽的に現れない。流体や温度の移流を解くのに複雑なスキームが必要である Euler 式記述の CFD (付録第 6.2 節参照) と比べて、この点が MPS の最大の利点の一つである。

なお、本研究では、比エンタルピー h と温度 T との間の関係は以下の式 (2.1.6) で仮定している。

$$h(T) = \begin{cases} \rho c T & (T < T_s) \\ \rho c T + \rho L \frac{T - T_s}{T_l - T_s} & (T_s < T < T_l) \\ \rho c T + \rho L & (T_l < T) \end{cases} \quad (2.1.6)$$

ここで、 c は比熱、 T_s と T_l はそれぞれ固相線温度と液相線温度、 L は潜熱である。そのため式 (2.1.3) の熱伝導方程式は、実際には

$$\frac{D}{Dt} T = \begin{cases} \frac{k}{\rho c} \nabla^2 T + \frac{1}{\rho c} Q & (T < T_s) \\ \frac{k}{\rho c + \rho L / (T_l - T_s)} \nabla^2 T + \frac{1}{\rho c + \rho L / (T_l - T_s)} Q & (T_s < T < T_l) \\ \frac{k}{\rho c} \nabla^2 T + \frac{1}{\rho c} Q & (T_l < T) \end{cases} \quad (2.1.7)$$

の様に、左辺も右辺も温度を変数とした方程式に変形し解いている。

離散化モデル

格子に基づく CFD ではある計算点がどの計算点とどのような相対位置で近接しているかという関係性 (接続関係という。詳細は [36]参照) が予め指定されているため、差分式の形式が固定されている。一方、粒子法ではそのような関係性が決まっていないため、従来の差分法や有限差分法とは異なった離散化の考え方が必要になる。MPS 法では流体の離散的な計算を、粒子間の相互作用のモデルを通じて行おうと考える [35]。すなわち、支配方程式中に現れるそれぞれの微分演算子が、その物理的な意味を再現するように、当該粒子とその周辺の粒子の持つパラメーターの間の差の和により表現される。

MPS 法では粒子間の相互作用を、図 2-1 のような距離の減少関数である重み関数 (weight function) $w(r)$ に基づいた重み付け平均を計算することで考慮する。重み関数の具体的な式は

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1 & (r \leq r_e) \\ 0 & (r_e < r) \end{cases} \quad (2.1.8)$$

で与えられる。ここで r は粒子間の距離で r_e は粒子間の相互作用の及ぶ範囲に制限を与える影響半径 (effective influential radius) で、経験的に粒子径 l_0 の3倍程度が用いられる (2次元では $r_e = 3.1l_0$ 、3次元では $r_e = 2.7l_0$ が一般的) [35]。影響半径内部にある粒子を近傍粒子 (neighbor particles) と呼ぶ。

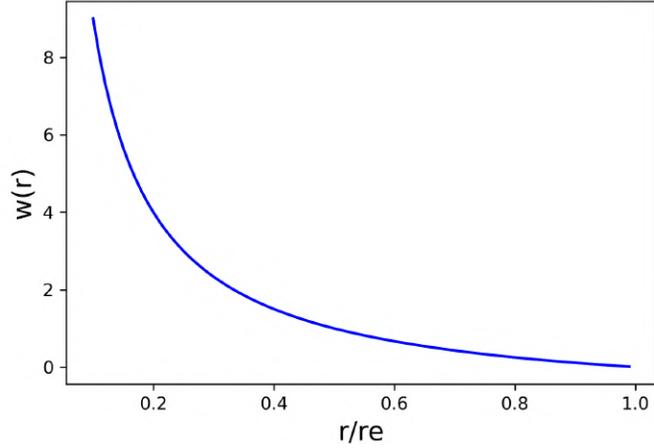


図 2-1 重み関数のグラフ形状

非圧縮流体では、密度が変化しないという条件から圧力を求めるため、密度に相当する量を粒子の位置に基づき定義する必要がある。MPS 法では、ある粒子 i の位置における粒子数密度 (Particle Number Density : PND)

$$n^i = \sum_{j \neq i} w(r_{ij}) \quad (2.1.9)$$

を密度に相当する量として定義する。ここで r_{ij} は粒子 i と j の間の距離である。PND は、影響半径内部に粒子が実際に何個あるかを数えているのではなく、影響半径中にある特に近い粒子には大きな重みを、遠い粒子には小さな重みを付けて平均化することで、着目する粒子の局所的な情報が強く反映されるように工夫がなされている。非圧縮性条件とは初期の PND が変動しない条件として表現されるので、計算開始前の初期粒子配置で PND を予め計算しておき n^0 と記す。

Koshizuka らのオリジナルの MPS 法では粒子 i における勾配 (gradient) 演算子を次でモデル化する。

$$\langle \nabla \phi \rangle_i \equiv \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\phi_j - \phi_i}{r_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} w(r_{ij}) \right] \quad (2.1.10)$$

ここで ϕ は任意のスカラーで d は次元数である。同様に、粒子間相互作用モデルにおいて、発散演算子と Laplacian 演算子は以下でモデル化される (これらの離散化モデルの導出は第 6.3 項を参照)。

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{A} \rangle_i \equiv \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{(\mathbf{A}_j - \mathbf{A}_i) \cdot \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2} w(r_{ij}) \right] \quad (2.1.11)$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i \equiv \frac{2d}{n^0 \lambda^0} \sum_{j \neq i} [(\phi_j - \phi_i) w(r_{ij})] \quad (2.1.12)$$

ここで、 \mathbf{A} は任意のベクトルで、 λ^0 は

$$\lambda^0 = \frac{\sum_{j \neq i} r_{ij}^2 w_{ij}}{\sum_{j \neq i} w_{ij}} \quad (2.1.13)$$

で与えられ、物理的には Laplacian モデルを拡散方程式に適用した際に拡散の理論速度を解析解と一致させるための係数である [36]。

半陰的アルゴリズム

MPS 法では非圧縮性流れの計算アルゴリズムとして、MAC 法の一つ SMAC 法 [52] にほぼ準じた半陰的 (semi-implicit) アルゴリズムを採用している。すなわち、上述の離散式を N-S 方程式に適用する際に、粘性計算と重力項は陽的に、圧力項を陰的に計算するとし

$$\frac{\mathbf{u}_i^{k+1} - \mathbf{u}_i^k}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \langle \nabla P \rangle_i^{k+1} + \frac{1}{\rho} \mu \langle \nabla^2 \mathbf{u} \rangle_i^k + \mathbf{g} \quad (2.1.14)$$

が離散化された支配方程式となる³。

MPS 法の最初のステップでは、粘性項と重力項による陽的計算により「仮の(temporal)速度」 \mathbf{u}_i^* と「仮の位置」 \mathbf{r}_i^* を求める。

$$\mathbf{u}_i^* = \mathbf{u}_i^k + \left[\frac{1}{\rho} \mu \langle \nabla^2 \mathbf{u} \rangle_i^k + \mathbf{g} \right] \Delta t \quad (2.1.15)$$

$$\mathbf{r}_i^* = \mathbf{r}_i^k + \mathbf{u}_i^* \Delta t \quad (2.1.16)$$

この時得られているそれぞれの粒子の仮の位置の分布は、PND 一定の条件、すなわち流体の非圧縮性条件は満たされていないが、実際に出力される k+1 番目のタイムステップには再び非圧縮性が満たされている状態に戻らなければならない。一方で、N-S 方程式だけでは圧力は求まらず、非圧縮条件から決定する必要がある。そこで MPS 法では、圧力項により補正される速度 \mathbf{u}_i^{k+1} とそれにより計算される位置 \mathbf{r}_i^{k+1}

$$\mathbf{u}_i^{k+1} = \mathbf{u}_i^* - \frac{1}{\rho} \langle \nabla P \rangle_i^{k+1} \Delta t \quad (2.1.17)$$

$$\mathbf{r}_i^{k+1} = \mathbf{r}_i^* + \frac{(\mathbf{u}_i^{k+1} + \mathbf{u}_i^k)}{2} \Delta t \quad (2.1.18)$$

が非圧縮条件を満たしているように圧力を計算する、半陰的アルゴリズムを採用している。式 (2.1.17) の両辺の発散を粒子間相互作用で近似すると、

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i^{k+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}_i^* - \frac{1}{\rho^0} \langle \nabla^2 P \rangle_i^{k+1} \Delta t \quad (2.1.19)$$

となるが、非圧縮条件

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (2.1.20)$$

と連続の式 (2.1.1) を組み合わせることで、

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.1.21)$$

を得るので、実際に出力されるタイミングでの速度場の発散は 0 でなければならない (divergence-free condition)。したがって、式 (2.1.19) は

$$\langle \nabla^2 P \rangle_i^{k+1} = \frac{\rho}{\Delta t} \langle \nabla \cdot \mathbf{u} \rangle_i^* \quad (2.1.22)$$

と表現できる。このままの形式でも計算できるのだが、式 (2.1.22) の右辺の仮の速度の発散は「前の位置を基準として」流体が圧縮した際にのみ非ゼロのソースタームとなり圧力分布に反映される。

³ 陽的な計算とは、k+1 番目のタイムステップの物理量を k 番目のタイムステップの物理量から評価する時間進展法のことである。k 番目のタイムステップの物理量は既知なので、陽的計算では代入操作だけで次のタイムステップの物理量を計算でき計算コストを抑えられるが、時間刻み幅を十分小さくしないと計算精度が落ちる上、計算が不安定になることもある。一方、陰的な計算とは k+1 番目のタイムステップの物理量を k+1 番目のタイムステップの物理量を評価する時間進展法である。未知の物理量同士に与えられた方程式を解くという操作が必要であるので単一タイムステップ毎にかかる計算コストは大きくなるが、時間刻み幅に対する制限はない。

しかし、計算誤差等でタイムステップ毎に密度が変動してしまった際に、その密度を初期の密度に戻すことはできない。そこで右辺にある仮の速度の発散を連続の式から

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u} \rangle_i^* = -\frac{1}{\Delta t} \frac{\rho_i^* - \rho}{\rho} \cong -\frac{1}{\Delta t} \frac{n_i^* - n^0}{n^0} \quad (2.1.23)$$

と近似し

$$\langle \nabla^2 P \rangle_i^{k+1} = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n_i^* - n^0}{n^0} \quad (2.1.24)$$

とするのがオリジナルの MPS 法の圧力計算である。この微分方程式は Poisson 方程式と呼ばれる定常拡散方程式の一種である。

Laplacian モデルの具体的な表式 (2.1.12) を代入すると得られる

$$\frac{2d}{n^0 \lambda^0} \sum_{j \neq i} [(P_j^{k+1} - P_i^{k+1}) w(r_{ij})] = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n_i^* - n^0}{n^0} \quad (2.1.25)$$

が各粒子 i に対して成立することを考えると、これは粒子数を N として N 元連立方程式を構成している。オリジナルの MPS 法では不完全コレスキー分解付き共役勾配法 (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient method : ICCG 法) [53] (線形方程式の解を得るための反復解法の一つ) により式 (2.1.25) の圧力 Poisson 方程式を解くことで圧力分布を求める。このようにして求めた圧力を式 (2.1.17) と式 (2.1.18) に代入することで、結局、 k 番目のタイムステップにおける位置と速度から、 $k+1$ 番目のタイムステップにおける位置と速度が求まる。

2.1.2 MPS 法の高精度化・安定化・多成分化

第 2.1.1 項で概説したオリジナルの MPS 法は 1996 年の発表以降多くの改善がなされてきた。本項では、本研究に用いる MPS 法に導入されている改善点のうち、本研究にとって重要なものについて示す (以下では全て 2 次元体系での解析を前提にした表式を用いて説明するが、特にこだわらない限り 3 次元体系であっても同様である)。

離散化精度の向上

付録の第 6.3 節で示しているように、MPS 法では、着目粒子における物理量の微分係数が、その粒子の近傍粒子に分布している物理量を最もよくフィッティングする平面 (一般的には曲面) を与える微分係数であると仮定することで導いた。しかし、オリジナルの MPS 法の離散化モデルの式 (2.1.10)、式 (2.1.11) と式 (2.1.12) は、粒子が正方格子のように等方に分布している時は最適なフィッティングを与えるが、そうでないときには最適なフィッティングから誤差 (異方性 (anisotropy) 誤差) が生まれる [54]。この誤差を低減する目的で用いられるのが corrective matrix である。

付録の第 6.3 節に導出が示されているように、MPS 法におけるスカラー量 ϕ の微分の一般形は

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} & \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} & \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix} \quad (2.1.26)$$

と示される。ここで x_{ij} と y_{ij} は着目粒子とその近傍粒子の間の相対位置 $\mathbf{r}_{ij} = (x_{ij}, y_{ij})^T$ の成分である。この右辺の行列は、正方格子上に粒子が等方に配置されている場合には単位行列の整数倍となるため式 (2.1.26) は式 (2.1.10) と等価であったが、そうでない一般の粒子配置では非自明な行列を示

し、これが2次元体系のMPS法におけるcorrective matrixと呼ばれる行列である。この行列を \mathbf{C}_{ij} で表せばMPS法の勾配モデルと発散モデルは

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij}}{n^0} \frac{\phi_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{C}_{ij} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (2.1.27)$$

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{A} \rangle_i \equiv \frac{1}{n_0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{(\mathbf{A}_j - \mathbf{A}_i)}{r_{ij}} \cdot \left(\mathbf{C}_{ij} \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{r_{ij}} \right) w(r_{ij}) \right] \quad (2.1.28)$$

と表せ、このような異方性誤差の低減は鈴木[55]やKhayyerと後藤[56]により最初に行われた。これらのcorrective matrixは1次のTaylor展開に基づいているためFirst-order Corrective Matrix (FCM)と呼ばれる。しかし、FCMは1階の微分係数を近似する過程で導出されているため、2階の微分係数に基づくLaplacianモデルの異方性誤差は低減できない。そこで、Duanらは、FCMの考え方を拡張し2次のTaylor展開から2次までの微分係数を近似し[54]、その過程でSecond-order Corrective Matrix (SCM)の概念が生まれた。SCMは表式が複雑なので、その物理的意味を明確に示すため、2次元体系におけるSCMの導出[54, p. 272]を以下に示す。

着目粒子 i とその近傍粒子 j の間の物理量 ϕ の差分を相対位置により2次までTaylor級数展開する(=2次曲面によりフィッティングする)と

$$\phi_{ij} \cong \phi_x x_{ij} + \phi_y y_{ij} + \frac{1}{2} \phi_{xx} x_{ij}^2 + \frac{1}{2} \phi_{yy} y_{ij}^2 + \phi_{xy} x_{ij} y_{ij} \quad (2.1.29)$$

である(ϕ_{xx} は x の2階微分、他も同様の記法)が、両辺を r_{ij} で割った上で以下の2つの一般化無次元ベクトル

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} x_{ij} & y_{ij} & x_{ij}^2 & y_{ij}^2 & x_{ij} y_{ij} \\ r_{ij} & r_{ij} & l_0 r_{ij} & l_0 r_{ij} & l_0 r_{ij} \end{pmatrix}^T \quad (2.1.30)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \phi_x & \phi_y & \frac{l_0}{2} \phi_{xx} & \frac{l_0}{2} \phi_{yy} & l_0 \phi_{xy} \end{pmatrix}^T \quad (2.1.31)$$

を定義すると

$$\frac{\phi_{ij}}{r_{ij}} \cong \sum_{k=1}^5 Q_k P_k \quad (2.1.32)$$

と表せる。フィッティングの残差を

$$I(\mathbf{Q}) = \left(\frac{\phi_{ij}}{r_{ij}} - \sum_{k=1}^5 Q_k P_k \right)^2 \frac{w_{ij}}{n^0} \quad (2.1.33)$$

で定義し、最小二乗法の原理に従えば、最も優れたフィッティングは

$$\frac{\partial I(Q_k)}{\partial Q_k} = 0 \quad (\text{for } k = 1, 2, 3, 4, 5) \quad (2.1.34)$$

すなわち

$$\sum_{m=1}^5 \left\{ \left[\sum_{j \neq i} P_k P_m \frac{w_{ij}}{n^0} \right] Q_m \right\} = \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij}}{r_{ij}} P_k \frac{w_{ij}}{n^0} \quad (\text{for } k = 1, 2, 3, 4, 5) \quad (2.1.35)$$

の5元連立方程式の解である。ここで一般化ベクトルの成分の間の積の重み付け平均を

$$(P_m, P_k) \equiv \sum_{j \neq i} P_m P_k \frac{w_{ij}}{n^0} \quad (2.1.36)$$

$$\left(\frac{\phi_{ij}}{r_{ij}}, P_k \right) \equiv \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij}}{r_{ij}} P_k \frac{w_{ij}}{n^0} \quad (2.1.37)$$

で定義すると、式(2.1.35)の5元連立方程式は

$$\begin{pmatrix} (P_1, P_1) & \cdots & (P_1, P_5) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (P_5, P_1) & \cdots & (P_5, P_5) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\phi_{ij}/r_{ij}, P_1) \\ \vdots \\ (\phi_{ij}/r_{ij}, P_5) \end{pmatrix} \quad (2.1.38)$$

という行列方程式で表される。したがって、SCM を左辺の 5×5 行列の逆行列

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} (P_1, P_1) & \cdots & (P_1, P_5) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (P_5, P_1) & \cdots & (P_5, P_5) \end{pmatrix}^{-1} \quad (2.1.39)$$

で定義すれば、物理量 ϕ の 2 次までの微分係数は

$$\begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_5 \end{pmatrix} = \mathbf{C} \begin{pmatrix} (\phi_{ij}/r_{ij}, P_1) \\ \vdots \\ (\phi_{ij}/r_{ij}, P_5) \end{pmatrix} = \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij} w_{ij}}{r_{ij} n^0} \mathbf{C} \mathbf{P} \quad (2.1.40)$$

で表される。SCM を、構成するそれぞれの行ベクトル

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{C}_5 \end{pmatrix} \quad (2.1.41)$$

に分解すると、 \mathbf{Q} の各成分、すなわち求めたい微分係数は

$$\phi_x = \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij} w_{ij}}{r_{ij} n^0} \mathbf{C}_1 \mathbf{P} \quad (2.1.42)$$

$$\phi_y = \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij} w_{ij}}{r_{ij} n^0} \mathbf{C}_2 \mathbf{P} \quad (2.1.43)$$

$$\phi_{xx} = \frac{2}{l_0} \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij} w_{ij}}{r_{ij} n^0} \mathbf{C}_3 \mathbf{P} \quad (2.1.44)$$

$$\phi_{yy} = \frac{2}{l_0} \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij} w_{ij}}{r_{ij} n^0} \mathbf{C}_4 \mathbf{P} \quad (2.1.45)$$

で与えられる。これらを、用いることで、結局、SCM に基づいた MPS 法の離散化モデルは

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} w_{ij} \frac{\phi_j - \phi_i}{r_{ij}^2} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_2 \end{pmatrix} \mathbf{P} \quad (2.1.46)$$

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{A} \rangle_i = \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} w_{ij} \frac{\mathbf{A}_j - \mathbf{A}_i}{r_{ij}^2} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_2 \end{pmatrix} \mathbf{P} \quad (2.1.47)$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2}{n^0} \sum_{j \neq i} w_{ij} (\phi_j - \phi_i) \frac{(\mathbf{C}_3 + \mathbf{C}_4) \mathbf{P}}{l_0 r_{ij}} \quad (2.1.48)$$

で表される。

数値安定化手法

本研究で導入している MPS 法の数値安定化手法は、粒子再配置による安定化と圧力 Poisson 方程式の修正による安定化である。

(1) 粒子再配置による安定化

MPS 法を含む粒子法は Lagrangian 式記述により粒子を移流させられることが最大の特徴であるが、オリジナルの MPS 法のアルゴリズムによってのみ粒子を移動させると、[57]の Fig.1 のように粒子の配置が大きく歪んでしまい、粒子が非常に疎な領域と非常に密な領域が生まれることで、容易に数値不安定性が引き起こされてしまう。そのため本研究では、計算中に粒子の配置に「手を加える」ことで数値安定化を図る Particle Shifting (PS) を採用する。PS は元々 Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法 [58] で Xu らにより導入された手法で、Fick の拡散則のアナロジーにより粒子が密な領域から疎な領域へ粒子を人工的に移動させる手法である [59]。MPS 法には Duan らが 2018 年に初めて導入した [60]。PS は現在でも活発に研究が続けられている [61] [62] ため、確立され

た PS の表式は、筆者が知る限り存在しない。本研究では特に、圧力計算が終了した後の内部粒子の位置を以下のように2つの操作により移動させるような PS を採用している。

$$\delta \mathbf{r}_i^{\text{internal}} = \delta \mathbf{r}_i^{\text{standard}} - \sum_{j \neq i} \delta \mathbf{r}_{ij}^{\text{collision}} \quad (2.1.49)$$

$$\delta \mathbf{r}_i^{\text{standard}} = (\Delta V_{\text{max}} \Delta t) \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{l_0}{r_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} w_{ij} \quad (2.1.50)$$

$$\delta \mathbf{r}_{ij}^{\text{collision}} = \begin{cases} \frac{1}{2} (0.1(0.9l_0 - r_{ij}) - 0.9\Delta V_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \Delta t) \mathbf{r}_{ij} & (r_{ij} < 0.9l_0) \\ 0 & (0.9l_0 < r_{ij}) \end{cases} \quad (2.1.51)$$

このとき、 ΔV_{max} は着目粒子 i の周りで最も大きい相対速度の絶対値であり、 ΔV_{ij} は

$$\Delta V_{ij} = \begin{cases} \mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i & ((\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{r}_{ij} < 0 \Leftrightarrow i \text{ and } j \text{ are approaching}) \\ 0 & ((\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{r}_{ij} \geq 0 \Leftrightarrow i \text{ and } j \text{ are getting more distant}) \end{cases} \quad (2.1.52)$$

と定義される。一つ目の $\delta \mathbf{r}_i^{\text{standard}}$ は全ての粒子に対して作用する一方で、2つ目の $\delta \mathbf{r}_{ij}^{\text{collision}}$ は粒子同士が接近しているかつ $r_{ij} < 0.9l_0$ の時に大きく寄与する項で、粒子同士の剛体的な衝突による反発を模擬した項になっている。粒子が表面付近にある場合は、図 2-2 のように粒子の移動方向が表面に平行を向くように補正される Optimized PS (OPS) [63]

$$\delta \mathbf{r}_i^{\text{surface}} = \delta \mathbf{r}_i^{\text{standard}} - (\mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{r}_i^{\text{standard}}) \mathbf{n} - \sum_{j \neq i} \delta \mathbf{r}_{ij}^{\text{collision}} \quad (2.1.53)$$

が適用され、ここで表面の法線ベクトル \mathbf{n} は

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{N}}{|\mathbf{N}|} \left(\mathbf{N} = \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{1}{r_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} w_{ij} \right) \quad (2.1.54)$$

で見積もられる。

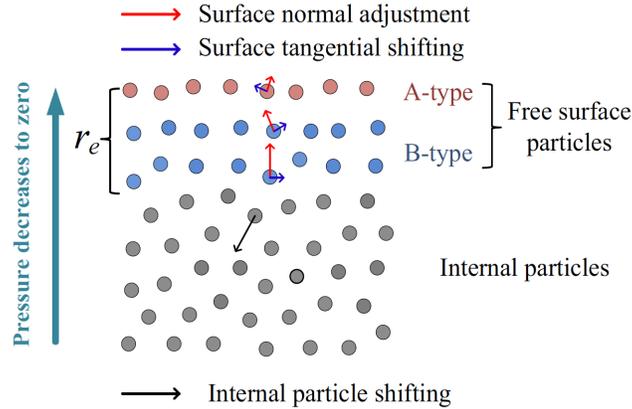


図 2-2 PS における粒子の移動方向のイメージ [60]

PS や OPS によって粒子が移動する際、その粒子が持っていた物理量がそのまま保持されてしまうと、PS や OPS は人工的な操作であるにも関わらず移動後の物理量の分布は移動前のそれとは異なってしまう。そこで、全ての物理量ではないが、特に重要な速度に関しては、速度場の勾配に移動ベクトルをかける Taylor 級数近似により補正する。

$$\mathbf{u}_i \rightarrow \mathbf{u}_i + \sum_{j \neq i} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \frac{w_{ij}}{r_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \cdot \delta \mathbf{r}_i \quad (2.1.55)$$

なお、粒子の再配置という観点では、本研究のコードでは人工粘性モデル [61]等により表面の形状を平滑化しているが、これは必ずしも安定化とは直結しないため、ここでの説明は割愛する。

(2) 圧力 Poisson 方程式の修正

MPS 法で計算が数値的に不安定になる最も典型的なモードは、粒子が近づきすぎてしまうことで局所的に大きな圧力が発生し、粒子が飛散してしまうような場合である。本研究では、前節のように粒子の接近や重なりを防ぐための PS に加え、粒子の接近に対して圧力の応答感を緩和することで計算の安定化を図っている。オリジナルの MPS 法では式 (2.1.24) のように、PND の初期 PND からのズレを圧力 Poisson 方程式のソースタームとしているが、この表式では PND が少しでも初期 PND からずれるだけで圧力が高感度で変動してしまい、数値的安定性の観点では好ましくない。そこで、この圧力 Poisson 方程式を導く過程の表式 (2.1.22) のように、速度場の発散もソースタームに利用することを考える。速度場の発散の項は、前のタイムステップと比較して流体が圧縮した場合のみ非ゼロの値を示すため、初期の PND に戻そうとする PND 項と比べると圧縮に対する応答が小さい。とはいえ、速度場の発散の項だけでは、徐々に流体が圧縮され続けてしまうような状況が発生しうる。そこで、多くの場合、これらの二つの項を適当な比率で組み合わせた圧力 Poisson 方程式が用いられる [64]。

$$\frac{1}{\rho_0} \nabla^2 P = -\gamma \frac{1}{\Delta t^2} \frac{n^* - n^0}{n^0} + (1 - \gamma) \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* + \alpha \frac{1}{\Delta t^2} P \quad (2.1.56)$$

ここで、 γ は PND 項と速度発散項の間の組み合わせの比率で、0 と 1 の間をとる。計算を安定化したい場合は、 $\gamma = 10^{-3}$ のように小さい値にすることもある。本研究では、解析毎にこの比率を調整して解析を実施する。一方、右辺の最後の項は流体の圧縮性を限定的に容認することでさらに数値安定性を改善する項で、人工圧縮性 (artificial compressibility) と呼ばれる。人工圧縮性の大きさを示す α は、本研究では [60] を参考に 1×10^{-7} を用いる。

(3) 多成分流体への拡張

オリジナル MPS 法は単一成分の流体を対象として開発されたが、多成分流体を解析するために以下のような拡張がなされた。すなわち、式 (2.1.2) と式 (2.1.3) の中に現れる空間微分項の離散化モデルは成分の物性値である密度や粘性、熱伝導率、比熱等を含めて再定義されなければならない。(簡単のため、エンタルピーと温度が比例する温度域に限って式 (2.1.3) を示す。)

$$\left\langle \frac{1}{\rho} \nabla P \right\rangle_i = \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{1}{\rho_{ij}} w_{ij} \frac{P_j - P_i}{r_{ij}^2} (\mathbf{C}_1) \mathbf{P} \quad (2.1.57)$$

$$\left\langle \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} \right\rangle_i = \frac{2}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{\mu_{ij}}{\rho_{ij}} w_{ij} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \frac{(\mathbf{C}_3 + \mathbf{C}_4) \mathbf{P}}{l_0 r_{ij}} \quad (2.1.58)$$

$$\left\langle \frac{k}{\rho c} \nabla^2 T \right\rangle_i = \frac{2}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{k_{ij}}{(\rho c)_{ij}} w_{ij} (T_j - T_i) \frac{(\mathbf{C}_3 + \mathbf{C}_4) \mathbf{P}}{l_0 r_{ij}} \quad (2.1.59)$$

これらの離散化モデル中に現れる粒子 i と j の間に設定される仮想的な物性値 ρ_{ij} 、 μ_{ij} 、 k_{ij} や $(\rho c)_{ij}$ は粒子間 (inter-particle) 密度、粒子間粘性、粒子間熱伝導率、粒子間熱容量等とも呼ばれる量で、筆者の知る限りその定義は文献により異なり確立した定義はない。基本的には直感的な相加平均 (arithmetic mean) が用いられるが、粒子間粘性は 2 成分流 Poiseuille 流れのベンチマーク解析から調和平均 (harmonic mean) が利用 [65] され、熱伝導率に関しても 2 粒子の中間点に流入する熱流束

が流出する熱流束と一致するという仮定から調和平均が利用される [66]。したがって、本研究では以下のような粒子間物性を利用することで MPS 法を多成分流体へ拡張をしている。

$$\rho_{ij} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2} \quad (2.1.60)$$

$$\mu_{ij} = \frac{2\mu_i\mu_j}{\mu_i + \mu_j} \quad (2.1.61)$$

$$k_{ij} = \frac{2k_ik_j}{k_i + k_j} \quad (2.1.62)$$

$$(\rho c)_{ij} = \frac{(\rho c)_i + (\rho c)_j}{2} \quad (2.1.63)$$

なお、MPS 法を複数の液相により構成される多成分流体のみならず、液相と気相により構成される多相流に適用し、さらに気相を粒子で表現する場合は、ここで述べた物性の単純な平均化だけでは対応できない。MPS 法で気液多相流に適用する方法やその課題については第 5.2.3 項で述べるため参照されたい。

2.1.3 粘性流動停止アルゴリズムと粘性急昇モデル

本研究では、オリジナルの MPS 法を高精度化・安定化するばかりでなく、MCCI における溶融物の伝熱流動と凝固という特定の現象を解析できるように改良する必要がある。そこで本研究では MPS 法を溶融物の流動解析に最適化するため、粘性による速度拡散の解析精度を向上した Duan らの粘性流動停止アルゴリズムと、溶融物が冷却により粘性を急激に上昇させる凝固モデルを採用する [67]。

溶融物の流動において特徴的なのは、流体の全部または一部が冷却され凝固することに伴う流動の停止である。Duan らは、オリジナルの MPS 法のアルゴリズムではこのような高粘性流体の凝固による流動停止の模擬が困難であることを示した。図 2-3 は、タンクに満たされた流体が右側下部の穴から漏洩するような流体問題を、オリジナル MPS 法で流体の粘性を 4 ケースで変化させて実施した解析の $t=5s$ でのスナップショットである。粘性が $\nu = 100000.0 \text{ m}^2/\text{s}$ のケースでも、粘性が $\nu = 1.0 \text{ m}^2/\text{s}$ のケースと同程度の流体が漏れ出しているのは不自然である。

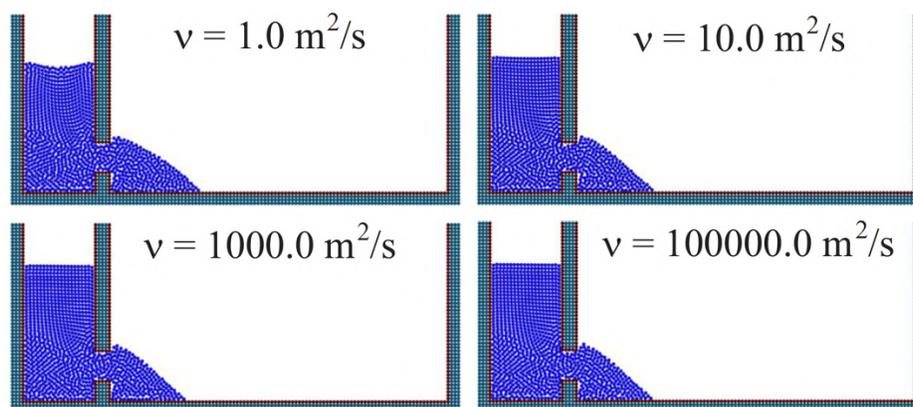


図 2-3 オリジナルの MPS 法による高粘性流体の漏洩の解析 [67]

Duan らは、このような「数値的クリープ (numerical creeping)」の原因を、オリジナルの MPS 法が準拠する半陰的アルゴリズムにあることを明らかにした。図 2-3 の左図よりもわかるよう

に、オリジナル MPS 法のアルゴリズムでは、圧力計算により更新された速度が直接 k+1 番目の速度、及び位置の更新に反映されており、圧力に伴う速度変化 $\Delta\mathbf{u}_p$ が粘性計算により拡散するのは次のタイムステップである。つまり、オリジナル MPS 法のアルゴリズムで高粘性流体の流動を解析すると、粘性計算により一旦は 0 に近づいた速度が、その後の圧力計算で更新され、粒子の位置をも更新してしまう。そこで Duan らは、図 2-3 の右図のように、粘性による速度の拡散を各タイムステップの位置の更新の直前に移動することで、粘性拡散に基づく流動の停止が k+1 番目の最終的な速度、及び位置の更新に反映されるようにした。さらに、計算フローの順序を変更すると同時に、高粘性流体を安定的に解析するために時間刻み幅 Δt を非常に小さくしなければならない事態（時間刻み幅 Δt の間に粘性により速度が拡散する範囲が影響半径を超えると計算が不安定になることから $\Delta t \leq \frac{r_c^2 \rho}{18\mu d}$ が好ましいとされる [68]）を避けるため、粘性計算を陽的から陰的に変更している。

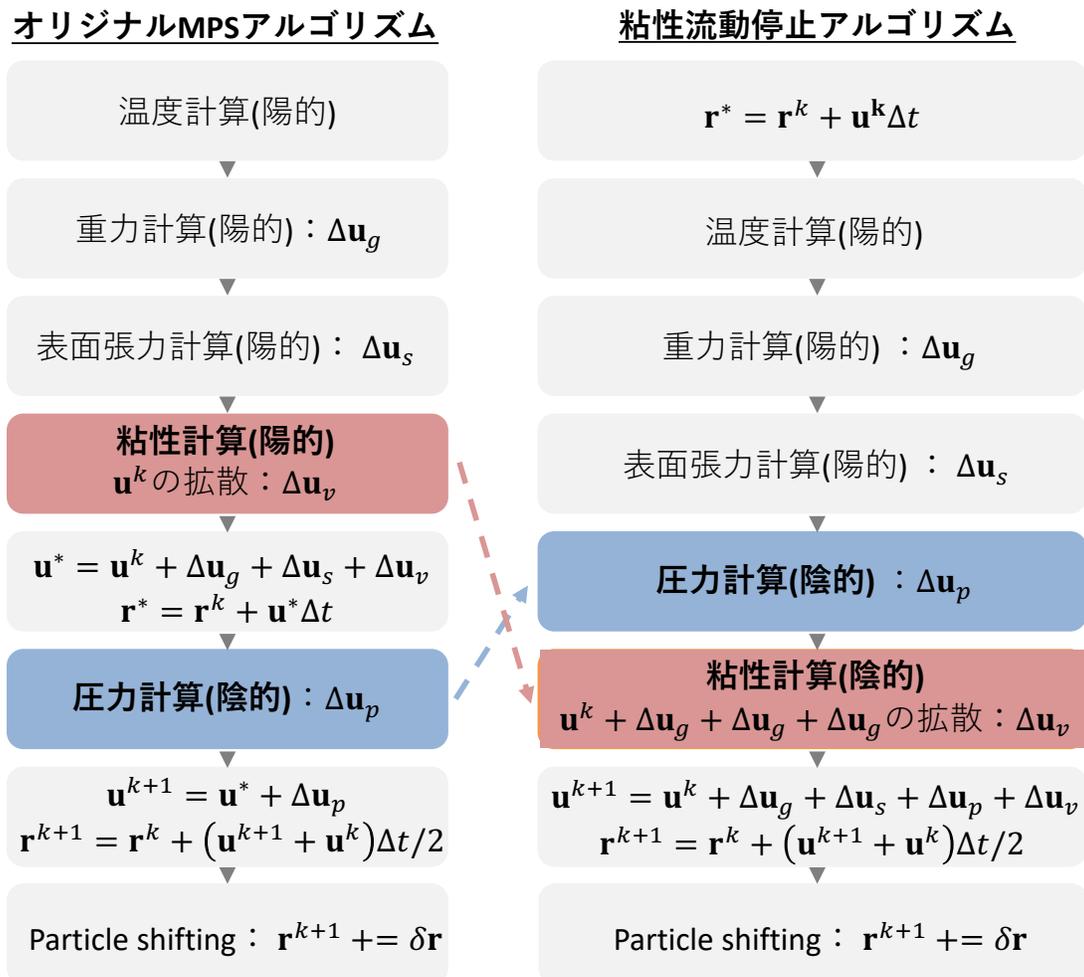


図 2-4 オリジナルの MPS 法と粘性流動停止アルゴリズムにおける計算フローチャート

この粘性流動停止アルゴリズムを用いて、先ほどの高粘性流体の漏洩の解析を実施したのが図 2-5 である。比較的小さな粘性では多少の漏洩が発生していたのに対して、粘性を増大させれば漏洩が抑制されていることがわかる。

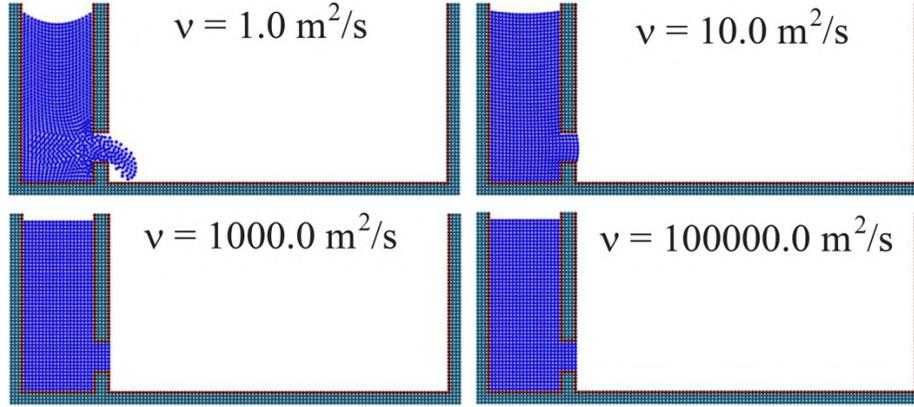


図 2-5 粘性流動停止アルゴリズムを用いた高粘性流体の漏洩の解析 [67]

本研究では、この粘性流動停止アルゴリズムを採用する。ただし、図 2-4 からわかるように、このアルゴリズムでは圧力計算の結果が直接粒子の位置に反映されないため、非圧縮性が厳密には保たれないことに注意が必要である。

本研究では、上述の粘性流動停止アルゴリズムに加えて、Duan らのモデル [67]を参考に以下の凝固モデルを利用する。流体が液相線温度と固相線温度の間（いわゆる *mushy zone*）にある場合、その流体は体積の一部が固体で他の部分が液体という固液の混在状態となっている。そこで、流体中の固体部分の体積割合を固相率（*solid fraction*） γ と呼び、*mushy zone* にある流体の粘性が固相率により整理されてきた。固相率の温度依存性は実験相関式で与えられる場合もあるが、VF-U1 実験のコリウムではそのような相関式は得られていないため、本研究では暫定的に温度の線形関数と仮定している。

$$\gamma = \begin{cases} 1 & (T < T_s) \\ \frac{T_l - T}{T_l - T_s} & (T_s \leq T \leq T_l) \\ 0 & (T_l < T) \end{cases} \quad (2.1.64)$$

ここで、 T_s と T_l はそれぞれ固相線温度と液相線温度である。与えられた固相率に対して流体の粘性は Ramacciotti 相関式 [69]

$$\mu(\gamma) = \mu_{liq} \exp(2.5C\gamma) \quad (2.1.65)$$

に従い指数関数的に上昇する。ここで、 μ_{liq} は固相率 0 の液体時の粘性で、 C は 4 から 8 の間で決定されるべきフィッティング係数である。本研究では、Journeau らによるコリウムの Spreading 実験である VULCANO VE-U7 実験 [70]を ANL の数値解析コード [71]で解析する際に適用された $C = 7.58$ を暫定的に採用した。

一方で、VULCANO VE-U7 実験により、コリウムの先端が凝固することで流動が停止するのは固相率が 1、すなわち固相線温度に達した時ではなく、非自明な 0 と 1 の間の固相率で流動が停止することが報告された [70]。与えられた固相率に達すると流動抵抗が急激に増大することを模擬するため、Duan らは、固相率がある閾値を超えると粘性が急激に上昇させる手法を提案した [67]。本研究でもその手法に倣い、下式、あるいは図 2-6 の赤線のように粘性と固相率を与えた。

$$\mu(\gamma) = \begin{cases} \mu_l \exp(2.5C\gamma) & (\gamma \leq \gamma_T^{\text{melt}}) \\ M\mu_l & (\gamma_T^{\text{melt}} < \gamma) \end{cases} \quad (2.1.66)$$

すなわち、コリウムの粘性は固相率 γ が閾値 γ_T に達するまでは Ramacciotti 相関式に従い指数関数的に上昇し、閾値 γ_T^{melt} に達すると適当な大きな係数 M を用いた超高粘性 $M\mu_{liq}$ にジャンプする、と仮定した。さらに、固相率が閾値を超え超高粘性となると、速度が急激に低下し流動がほとんど停止す

ると考えられる。このように超高粘性により流動がほとんど停止することを、以降の時刻でも再現なく流動計算を解くことで再現し続けると、計算負荷が過大になる恐れがある。そこで、粒子の速さがある閾値 u_T を下回ったら、その粒子はそれ以上流動することはないと見なされ、その粒子の位置座標は固定され、数値的な処理である Particle Shifting 以外では移動しなくなる。なお、ここで用いる係数 D は結果に影響が現れないように十分に大きく、速度閾値 u_T は結果に影響が現れないように十分に小さく設定する必要がある（すなわち、本来 M は大きければ大きいほど好ましく、速度閾値 u_T は 0 が好ましいが、その場合計算負荷がかだいでになってしまう。）。本研究の解析では、合理的な計算負荷で十分な計算精度を実現する値を調査し、 $M = 10^5$ 、 $u_T = 0.002$ m/s という組み合わせを採用し解析を実施した。また、固相率閾値に関しても、VF-U1 実験のコリウムに対する実験値は存在しないため、別の spreading 実験である SPREAD 実験 [72]でコリウムが停止した際の固相率 $\gamma_T^{\text{melt}} = 0.55$ を採用した。

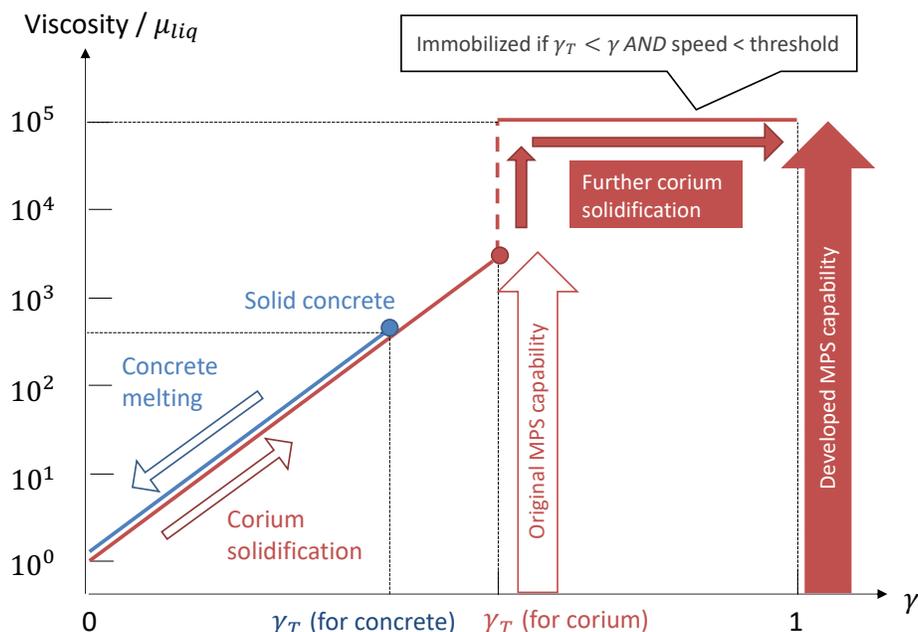


図 2-6 溶融・凝固過程における粘性の変化

なお、コンクリートの溶融は次のように模擬される。図 2-6 の青線で示されるように、固体だったコンクリート粒子は、別途予め決められていた固相率閾値 $\gamma_T^{\text{concrete}}$ を下回ると流動を開始し、その際の粘性は Ramacciotti の相関式に従う。この際、Ramacciotti の係数 C は溶融物と同じく $C = 7.58$ を暫定的に利用し、玄武岩コンクリートの実効的な融点（第 1.3.2 項参照）から $\gamma_T^{\text{concrete}} = 0.33$ を仮定した [16] [73]。

2.1.4 従来の表面張力・界面張力モデル

本研究では溶融物の内部での金属・酸化物のような多成分流体の流動に特に着目しているが、混ざり合わない（非混和=immiscible）な異成分の間には、液相と気相の間に働く表面張力（surface tension）と同じメカニズムで、界面張力（interface tension/interfacial tension）が作用する（図 2-7）。すなわち、混ざり合わない成分の間の界面の面積をできるだけ小さくする作用が働くため、両成分はお互いに分散するよりも、図 2-8 のように同成分同士で集まろうとする。



図 2-7 表面張力 (surface tension) と界面張力 (interface tension)



図 2-8 非混和な水と油 [74]

Kondo モデル (表面張力のみを模擬するポテンシャルモデル)

第 2 章の MPS 法解析で適用する界面張力モデルは、Zhu らによるポテンシャルに基づいた界面張力モデル (以降、「Zhu モデル」) である [75] が、Zhu モデルは Kondo によるポテンシャルに基づいた表面張力モデル (以降「Kondo モデル」) [76] を界面に適用することで開発されたので、まずは Kondo モデルを概説する。Kondo モデルにおいて、表面張力を導くために粒子に導入される力 $\mathbf{f}^{\text{Kondo}}$ は

$$\frac{D}{Dt} \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{g} + \frac{1}{\rho} \mathbf{f}^{\text{Kondo}} \quad (2.1.67)$$

というように、N-S 方程式に体積力として追加され、重力項の次に陽的に計算される。ここで、体積力とは作用する力が体積に比例するような力で、例えば重力は体積が増えればそれに比例して力が増えるので体積力の一種である。一方、表面張力は本来、体積のない表面に作用する「表面力」であるので、表面張力を体積力で模擬すること自体がモデル化である。ただし、Brackbill が表面張力を体積力で模擬する手法を確立 [77] してから、このような体積力による表面張力の取り扱いには CFD では一般的な取り扱いである。

Kondo は、Shirakawa らの先行研究 [78] を参考に、表面張力を導くための力を粒子間 (inter-particle) に存在する仮想的なポテンシャル力: $-\nabla E_{ij}^{ST}(\mathbf{r}_{ij})$ で表現した。

$$\mathbf{f}_i^{\text{Kondo}} = \frac{1}{l_0^3} \sum_{j \neq i} [-\nabla E_{ij}^{\text{Kondo}}(\mathbf{r}_{ij})] \quad (2.1.68)$$

表面張力は液体を構成する分子間に実際に存在する分子間力により発生するので、Shirakawa らや Kondo らのモデルは粒子により分子間力を模擬したものとなっている。粒子間ポテンシャル E_{ij}^{Kondo} の具体系は、液体を A でラベルし、

$$E_{ij}^{\text{Kondo}}(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} -\frac{C_A^{\text{Kondo}}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 & (r_{ij} \leq r_e) \\ 0 & (r_e \leq r_{ij}) \end{cases} \quad (2.1.69)$$

で与えられる（Kondo の原著論文では式 (2.1.69) のマイナスの符号がついていないのだが、これは誤りである。実際に、後に Kondo も共著者として著した書籍 [79] ではマイナスの符号をつけて同モデルが紹介されている。）。ここで C_A^{Kondo} はポテンシャルの大きさを決める係数で、 r_b は平衡点距離（balance point distance）と呼ばれる。特に $C_A^{\text{Kondo}} = 1, r_b = 1.5l_0, r_e = 3.1l_0$ とした時の形を図 2-9 に示す（ $\frac{r_{ij}}{l_0} < 1$ となるような粒子は、非圧縮条件により稀であり、近傍粒子のほとんどが $l_0 < r_{ij} < r_e$ に収まっているため、図の横軸は $r_{ij}/l_0 = 1$ から開始している。）。最小値をとる $r = r_b$ の平衡点距離よりも小さい r_{ij} で粒子間力は斥力となり、大きい値では引力を示すことがわかる。（Kondo の原著論文 [76] では $r_b = l_0$ とされていたが、その後 Chen らにより $r_b = 1.5l_0$ 程度が粒子同士の重なりを防ぐために有効であると報告された [80] ので、本研究では $r_b = 1.5l_0$ を採用する）

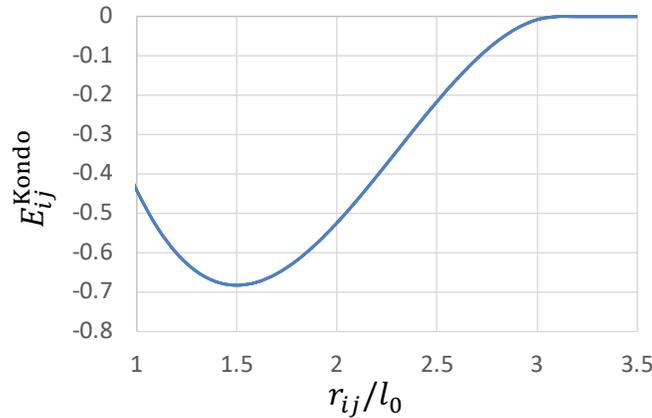


図 2-9 Kondo モデルのポテンシャル ($C_A^{\text{Kondo}} = 1, r_b = 1.5$ を仮定)

Kondo らは粒子間ポテンシャルの係数 C_A^{Kondo} を決定するため、以下のような独創的な方法を考案した。ある仮想的な正方（立法）格子状の粒子配列において、図 2-10 の左図のように A 成分を表す粒子が配列しており、その中の図中の粒子グループには a_1, a_2 というラベルをつけておく。この時、同図の右図のように、粒子グループ a_1 を粒子間ポテンシャルによる引力に逆らいながらその下側の粒子群から遠ざけることで表面 S を 2 つ作るような仮想的な操作を考えると、その時に必要な仕事は

$$\sum_{i \in a_2, j \in a_1} \frac{C_A^{\text{Kondo}}}{3} \left(r_{ij}^0 - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij}^0 - r_e)^2 \quad (2.1.70)$$

で表せる（ここで、 r_{ij}^0 は格子幅 l_0 の仮想的な正方（立法）格子状の粒子配置における粒子 i と j との粒子間の距離を表しており、流動が進むにつれて時間的に変化する r_{ij} とは意味が異なることを注意されたい。 r_{ij}^0 は時間変化しないので、式 (2.1.70) は定数である。）。このことと、液体成分 A の表面張力係数 σ_A が単位表面に存在する界面エネルギーを表すという熱力学上の定義（付録の第 6.4 項を参照）を組み合わせれば、エネルギー保存則より

$$\sum_{i \in a_2, j \in a_1} \frac{C_A^{\text{Kondo}}}{3} \left(r_{ij}^0 - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij}^0 - r_e)^2 = 2l_0^2 \sigma_A \quad (2.1.71)$$

という等式をえる。ここで、総和の計算は粒子の配置の幾何形状だけから決定する因子であるので、

$$G = \sum_{i \in a_2, j \in a_1} \frac{1}{3} \left(r_{ij}^0 - \frac{3}{2} r_b + \frac{1}{2} r_e \right) (r_{ij}^0 - r_e)^2 \quad (2.1.72)$$

とおけば、係数 C^{Kondo} は

$$C_A^{\text{Kondo}} = \frac{2l_0^2 \sigma_A}{G} \quad (2.1.73)$$

で求められるので、これを式 (2.1.69) に代入すれば、表面張力を表す体積力を決定できる。

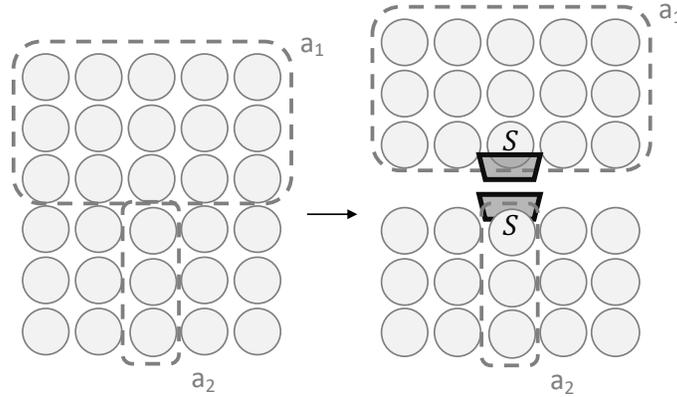


図 2-10 Kondo による粒子間ポテンシャル係数 C_A^{Kondo} の決定方法

Kondo モデルは自由表面に働く表面張力を模擬するばかりでなく、与えられた接触角で壁面を濡らす液相を模擬する壁面濡れ (wall wetting) モデルも実装されている。すなわち、図 2-11 のように A 成分が接触角 θ_A で壁面を濡らしている状況を再現できる。そのためにまず Kondo らは、液体成分 A と壁 W との間にも式 (2.1.69) と同様のポテンシャルが存在すると仮定し、そのポテンシャルの係数を C_{AW}^{Kondo} とした。次にこの係数 C_{AW}^{Kondo} を決定するため、図 2-10 に似た別の仮想的な粒子配置：図 2-12 を想定した。図 2-12 左図のように、A 成分と壁面 W が向かいあっていると考え、グループ a_1 と w_2 とラベリングする。先ほどと同様、A 成分と B 成分を引き離し、同図の右図のように A 側の表面 S_a と W 側の表面 S_w を形成することを考えるのだが、ここで注意しなければならないのは、同図の左図の時点で A-W 界面 S_{aw} が存在することである。したがって、同図の右図の操作に必要な仕事は S_a と S_w に存在するエネルギーから界面 S_{aw} に存在するエネルギーを差し引いた差分に等しいはずである。したがって、

$$C_{AB}^{\text{Kondo}} G = l_0^2 (\sigma_A + \sigma_W - \sigma_{AW}) \quad (2.1.74)$$

すなわち

$$C_{AB}^{\text{Kondo}} = \frac{l_0^2 (\sigma_A + \sigma_W - \sigma_{AW})}{G} \quad (2.1.75)$$

を得る。

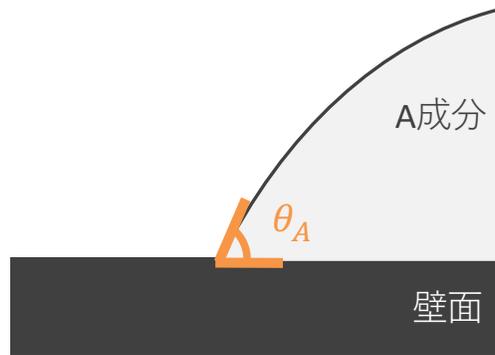


図 2-11 壁面の濡れ

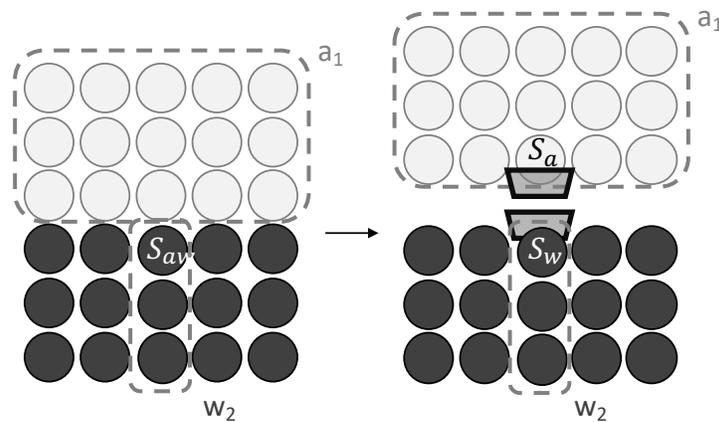


図 2-12 Kondo モデルにおける流体と壁面との粒子間ポテンシャル係数の決定方法

さらに、接触角に対する Young の法則：

$$\sigma_w - \sigma_{AW} - \sigma_A \cos \theta_A = 0 \quad (2.1.76)$$

が知られているので式 (2.1.73)、式 (2.1.75) と式 (2.1.76) を組み合わせることで、

$$C_{AW}^{\text{Kondo}} = \frac{1 + \cos \theta_A}{2} C_A^{\text{Kondo}} \quad (2.1.77)$$

を得る。 C_A^{Kondo} は既知であるので、 C_{AW}^{Kondo} を式 (2.1.77) のように与えれば、成分 A は壁面の上で所与の接触角 θ_A を実現する。

Zhu モデル (表面張力と界面張力の両方を模擬するポテンシャルモデル)

Zhu らは、Kondo モデルの理論を異成分界面にも拡張することを考えた。すなわち、式 (2.1.69) の係数が、着目粒子ペアが同じ成分に属するかそうでないかにより変化すると考え、着目粒子ペアが異なる成分に属している際の係数の決定方法を、Kondo モデルの壁面濡れモデルを参考に以下のように示した。図 2-13 左図のように、A 成分と B 成分が向かいあっていると考え、グループ b_1 と a_2 をラベリングする。先ほどと同様、A 成分と B 成分を引き離し、同図の右図のように A 側の表面 S_a と B 側の表面 S_b を形成することを考えるのだが、Kondo の壁面濡れモデルの導出時同様に注意しなければならないのは、同図の左図の時点で A-B 界面 S_{ab} が存在することである。したがっ

て、同図の右図の操作に必要な仕事は S_a と S_b に存在するエネルギーと界面 S_{ab} に存在するエネルギーの差分と等しいはずである。よって

$$C_{AB}^{Zhu} G = l_0^2 (\sigma_A + \sigma_B - \sigma_{AB}) \quad (2.1.78)$$

である。ここで、 C_{AB}^{Zhu} は界面張力に対する粒子間ポテンシャルの係数で、 σ_B は B 成分の表面張力係数、 σ_{AB} は A と B の間の界面張力係数である。結局、式 (2.1.73) と似た下式を得る。

$$C_{AB}^{Zhu} = \frac{l_0^2 (\sigma_A + \sigma_B - \sigma_{AB})}{G} \quad (2.1.79)$$

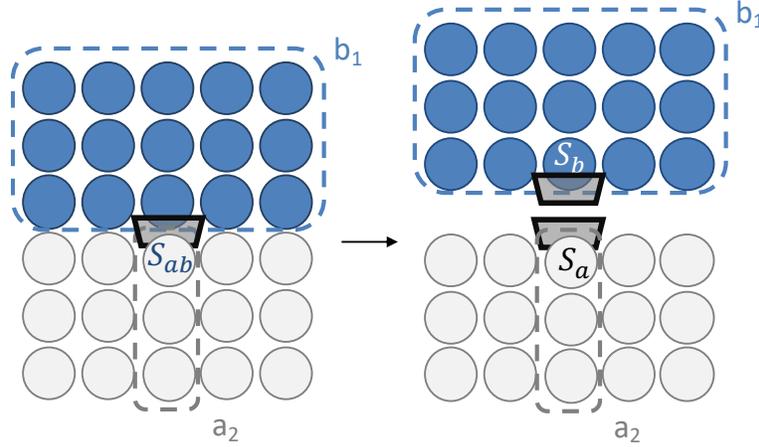


図 2-13 Zhu らによる粒子間ポテンシャル係数 C^{Zhu} の決定方法

まとめると、Zhu モデルは、式 (2.1.80) のような体積力 \mathbf{f}_i^{Zhu} を N-S 方程式に追加することで、自由表面に作用する表面張力と異成分界面に作用する界面張力を同時に考慮できるモデルである。Zhu モデルが優れているのは、粒子が異成分界面付近以外に存在するときは Kondo モデルと全く同等の機能を与えながら、粒子が界面に存在する場合は界面張力も模擬できる力を自動的に作用させられることである。そのようなモデルがどのようにして可能なのかを次に示す。Zhu モデルでは、式 (2.1.82) に示すように、界面張力の係数 C_{ij}^{Zhu} が粒子ペアの所属する成分の組み合わせにより異なる。この際、現実の非混和成分の組み合わせであれば、同成分の粒子ペア間の C_{ij}^{Zhu} よりも異成分の粒子ペア間の C_{ij}^{Zhu} の方が小さくなるため、同成分の粒子ペアの方が強く凝集し、異なる粒子ペアは相対的に凝集が弱くなる。すると、図 2-14 の左図のように、界面の付近の粒子は正味、同成分の粒子が多く存在する方向に合力が作用する。Zhu モデルでは、このような界面付近における粒子間力の差を利用して界面張力を模擬した。

$$\mathbf{f}_i^{Zhu} = \frac{1}{l_0^3} \sum_{j \neq i} [-\nabla E_{ij}^{Zhu}(\mathbf{r}_{ij})] \quad (2.1.80)$$

$$E_{ij}^{Zhu}(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} -\frac{C_{ij}^{Zhu}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2} r_b + \frac{1}{2} r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 & (r_{ij} \leq r_e) \\ 0 & (r_e \leq r_{ij}) \end{cases} \quad (2.1.81)$$

$$C_{ij}^{\text{Zhu}} = \begin{cases} \frac{2l_0^2\sigma_A}{G} & (i \text{ and } j \text{ belong to component A}) \\ \frac{2l_0^2\sigma_B}{G} & (i \text{ and } j \text{ belong to component B}) \\ \frac{l_0^2(\sigma_A + \sigma_B - \sigma_{AB})}{G} & (i \text{ and } j \text{ belong to different components}) \end{cases} \quad (2.1.82)$$

$$G = \sum_{i \in a_2, j \in a_1} \frac{1}{3} \left(r_{ij}^0 - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij}^0 - r_e)^2 \quad (2.1.83)$$

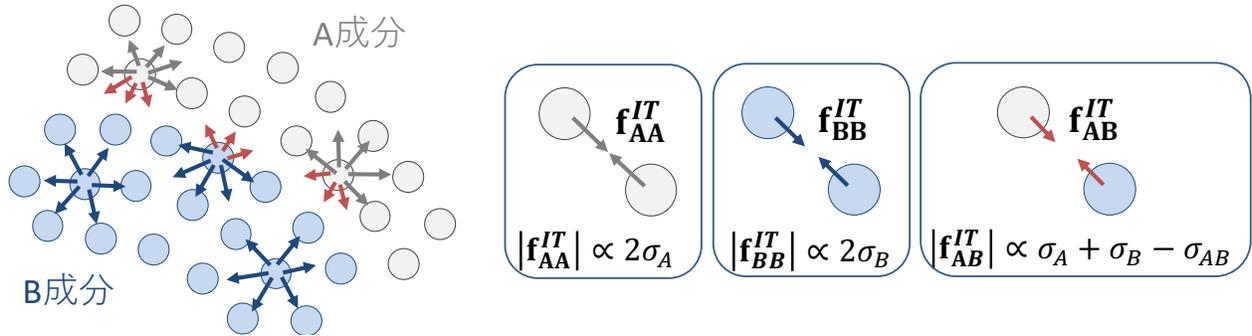


図 2-14 Zhu モデルにおける界面張力のモデル方法

さらに、Zhu モデルは、図 2-15 に示すように、ある成分が別の成分中で壁面を濡らす「界面壁面濡れ」（呼称が存在しないため筆者による命名）も模擬できる。ただし、Zhu モデルでは表面張力係数 σ_A 、 σ_B と界面張力 σ_{AB} を入力として与えなければならず、この3つの値が定まっているときには接触角 θ_{AB} も確定するため、Kondoモデルの際の接触角を自由に与えることはできない。 σ_A 、 σ_B 、 σ_{AB} といったパラメーターからどのように接触角 θ_{AB} が確定するかは、Zhu らの元論文を参考されたい [75]。

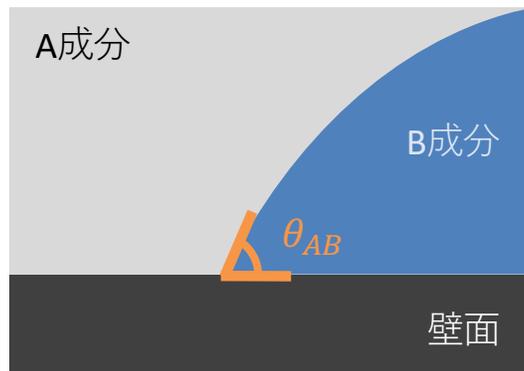


図 2-15 2 成分での界面壁面濡れ

本章では、Zhu モデルを用いて界面張力と表面張力を模擬する。ただ、この Zhu モデルには重大な課題がある。すなわち、表面張力・界面張力を Zhu モデルにより模擬すると、同種粒子同士が強く凝集し合い流動が阻害（hindrance）されてしまう等の問題があることが筆者の解析を通して明らかになった [81]。しかし、本章での 3 次元解析は既存手法の組み合わせにより VF-U1 実験で金属がコンクリートに沿って凝固するまでを試行的に解析することで重要な現象を把握することにあるので、表面張力・界面張力を正確に模擬することが必ずしも必須ではない。そこで、本章の解析では暫定的に、Zhu モデルで用いる表面張力・界面張力を恣意的にチューニングすることで、同種粒子

の不自然な凝集を一時的に回避した。Zhu モデルの課題を本質的に解決するモデルの考案とその適用は次章以降に示す。

2.2 VF-U1 実験の詳細な条件とその 3 次元解析

本節では、第 2.1 節で示した MPS 法と既存手法（ただし凝固モデルに部分的に独自の修正含む）の組み合わせによる VF-U1 実験の解析を示す。

2.2.1 実験条件

実験体系

本項では VF-U1 実験の詳細な実験条件を示す [45]。図 2-16 は VF-U1 実験体系の寸法を示す断面図である。外直径 500 mm、内直径 250 mm、高さ 200 mm の円筒容器が初期の模擬コリウムが形成される空間である。円筒容器の下部にも 120 mm のコンクリートが存在するので、径方向と軸方向にともな概ね 100 mm 程度までは侵食できるように設計されている。円筒部とその下部 120 mm の周りには誘導加熱用のコイルが巻かれているので、コリウムが下部方向のコンクリートを侵食してもコリウムの誘導加熱が継続できる。ステンレス以外の成分は粉末状で用意されていたため、加熱を開始し粉末が熔融するまでは体積が大きく、コンクリート容器の上部からはみ出していた。はみ出していた粉末を保持するため、ジルコニア (ZrO_2) 性の円筒が上部に据え付けられた状態で加熱が開始された。誘導加熱が開始し模擬物質が熔融することで底面から 150 mm 程度の高さの液体のコリウムが形成される（ただし気泡が発生している最中は空隙が多く存在するので、表面高さは 150 mm よりも高いと思われる。）。また、ステンレスの金属球は、初期の粉末状の模擬物質の中に、底面から 70 mm 以上の高さに配置されていた。

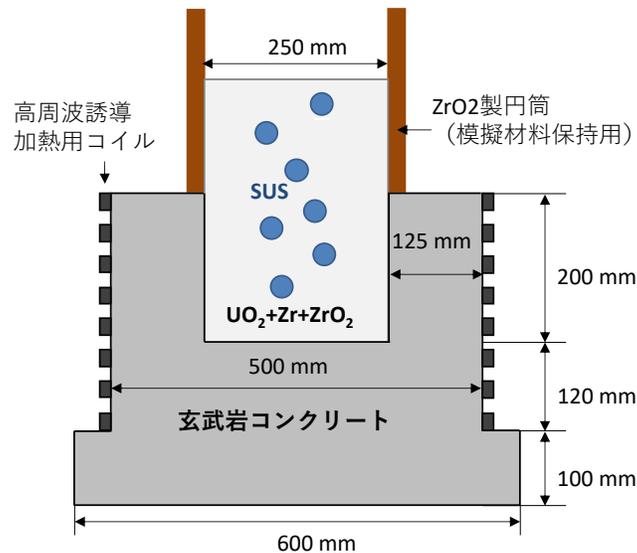


図 2-16 VF-U1 実験の初期条件の断面図

実験で利用された材料

模擬コリウムの組成は 1F1 号機における炉心物質の平均組成を想定して表 2-1 のように定められた [46]。これらのうち UO_2 、 ZrO_2 と Zr は全て粉末状で用意され、ステンレスは直径 3cm 程度の球場で粉末中に配置された。

表 2-1 VF-U1 実験の模擬炉心材料の組成 [46]

	UO ₂	ZrO ₂	Zr	ステンレス
質量割合 (wt%)	58.8	16.2	11.8	13.2

一方、コンクリートは、1F1号機の PCV 床コンクリートの玄武岩コンクリートの組成を再現するため、富士川産及び阿武隈川産の骨材を用いて製作された。

誘導加熱と加熱の履歴

VF-U1 実験では、誘導加熱により粉末状模擬物質とステンレス球を溶融しコリウムと金属溶融物を形成し、さらに、実機 MCCI で想定される崩壊熱も誘導加熱により模擬した。図 2-17 にその模擬の方法を示している。誘導加熱は磁場を高周波で変動させることで物体中に誘導電流を発生させ、そのジュール熱で物体を加熱する技術である [82]。常温では、電気抵抗が小さいため誘導電流が流れやすい金属は容易に加熱できる一方、粉末状の酸化物模擬物質は電気抵抗が大きすぎるため誘導電流が流れず加熱されない [45]。そのため、常温の初期状態から誘導加熱を開始すると、ステンレス級と粉末の Zr が最初に加熱され溶融する。しかし、金属からその周囲の酸化物成分への熱伝導により酸化物が加熱され温度が上がると、酸化物成分の電気抵抗が大きく減少し（例えば UO₂ は常温から融点付近に温度が上昇すると電気抵抗率が 10^{-5} 倍程度になる [83]）、酸化物成分は誘導加熱により直接加熱されるようになる。さらに、粉末が溶融し空隙がなくなると加熱量が増大する（酸化物成分と金属成分への入熱量のより定量的な議論は付録の第 6.4 節を参照）。これらの結果、酸化物溶融物が形成されるような高温時にはほとんど（「95%以上」 [48]）の誘導加熱が酸化物に集中して入熱していたと考えられている [45]。このことは、実機 MCCI でもほとんどの崩壊熱は酸化物相で発生することを適切に模擬している。

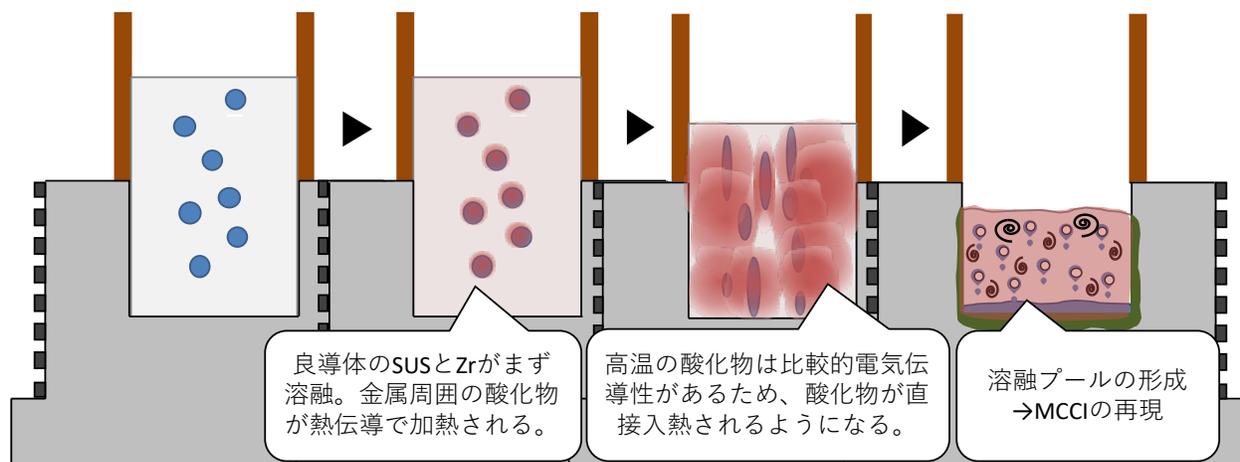


図 2-17 誘導加熱による溶融プールの形成と崩壊熱の模擬

図 2-18 は VF-U1 実験における誘導加熱の加熱履歴と熱電対の温度履歴を示している。横軸は実験が実施された 2017 年 1 月 19 日の時刻である。図中の TCconv146, TCconv147, TCconv148 は金属球付近に位置していた熱電対、TCconv137, TCconv138 は容器底部に位置していた熱電対の温度を示している。9:26 に誘導加熱が開始し、金属球付近の温度が徐々に上がっていることがわかる。9:26、

9:35、9:52 の 3 回、予備的な加熱が実施され 10:15 から本格的な加熱が開始した。10:26 頃には金属球付近の熱電対が破壊し、概ね金属球が完全に溶融したと推定されている。そこからさらに加熱密度を上昇させ 10:28:42 には上部のカメラの観測から、(少なくとも表面付近では) 溶融部が形成されたと判断された。その後 200~240 kW 程度の加熱が 2 分程継続し、10:30:56 から、目標値に向けて加熱が調整された。調整後、10:43:29 までの間に平均 38 kW の加熱がなされ、この 745 秒間の間が、実験者が “Representative MCCI”、すわわち 1F 1 号機で実験者らが想定している熱流束が再現されている期間とした。なお、同図の上図の青線で示される “Injected power” (= 溶融物模擬物質への入熱量) は、コイルに流す電流やその周波数、溶融物模擬物質の物性や形状等から見積もられている量であり、実験者が精密に制御したり観測したりした量ではない。実際には、被加熱体の溶融物模擬物質の物性やその内部分布が温度により変動し、特に、電気的特性が全く異なる酸化物成分と酸化成分の相対的な分布が変動するため、図中の入熱量の見積もりは現実と異なる可能性がある(同様の指摘は VBS 実験の論文でもなされている [49])。ただし、最終的なコンクリート侵食量と推定された表面放熱量との和により全入熱量を評価し、それと見積もられた入熱量履歴を実験時間を通して積分し求められた全入熱量とを比較することで、図中の見積もられた入熱量の履歴の評価は現実とは大きくは異なることが確認されている [48]。

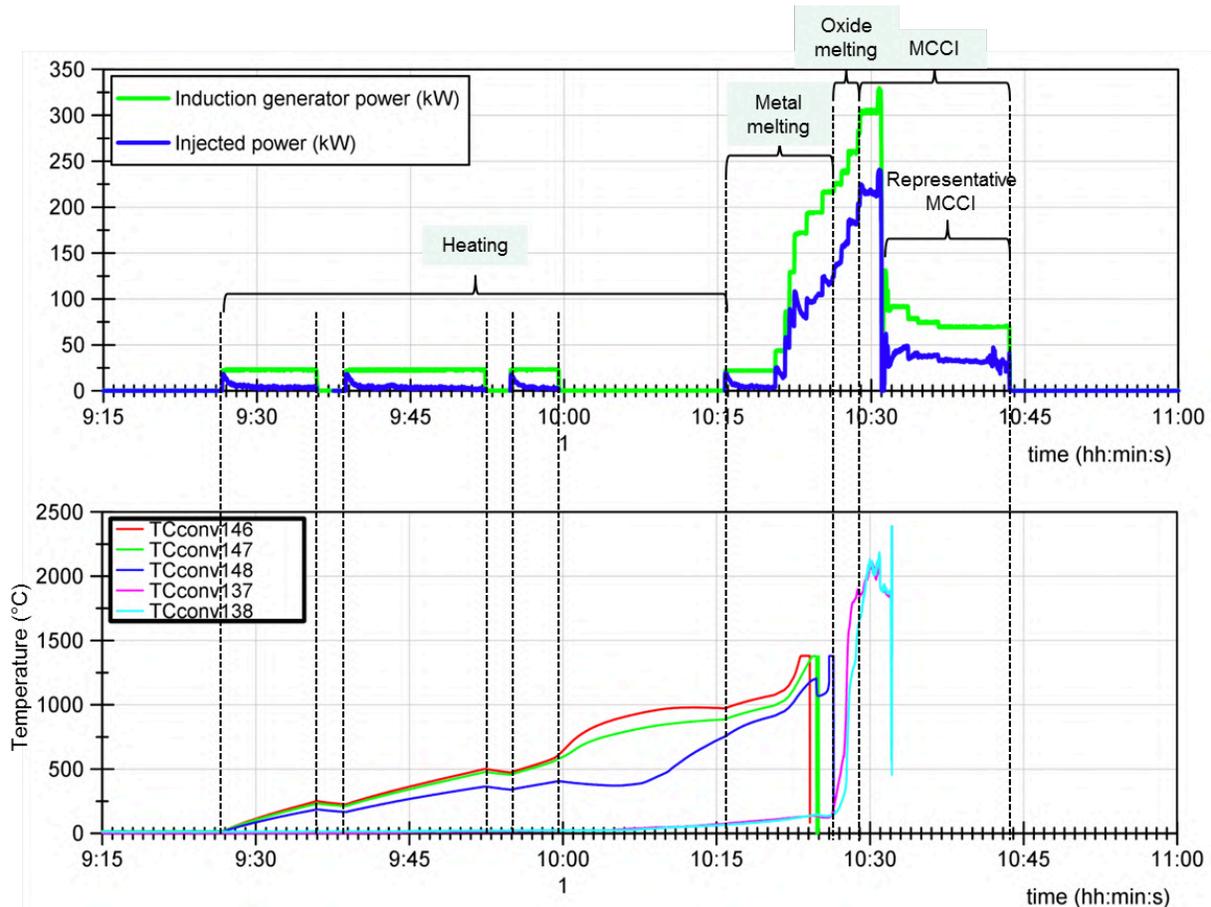


図 2-18 VF-U1 実験の (上) 誘導加熱の加熱履歴と (下) 熱電対の温度履歴 [45]

なお、9:26 から始まり 10:43:29 に終わる 1 時間以上は、模擬物質は粉末状で流動は発生しないため、加熱密度の履歴を解析で再現する必要は必ずしもないと思われる。そこで本研究では図 2-19

のように、本格的な加熱が開始された 10:18 を改めて $t = 0$ s と表現し、そこからの経過時間で加熱履歴を表示することで、計算コストの節約し、かつ加熱履歴の表示を簡略化した。その上で、 $t = 0 \sim 600$ s を予熱期間 (preheating period)、 $t = 600 \sim 750$ s を高加熱期間 (high-power period)、 $t = 750 \sim 1500$ s を低加熱期間 (low-power period)、 $t = 1500$ s ~ を加熱停止期間 (cooling period) と呼ぶこととする。

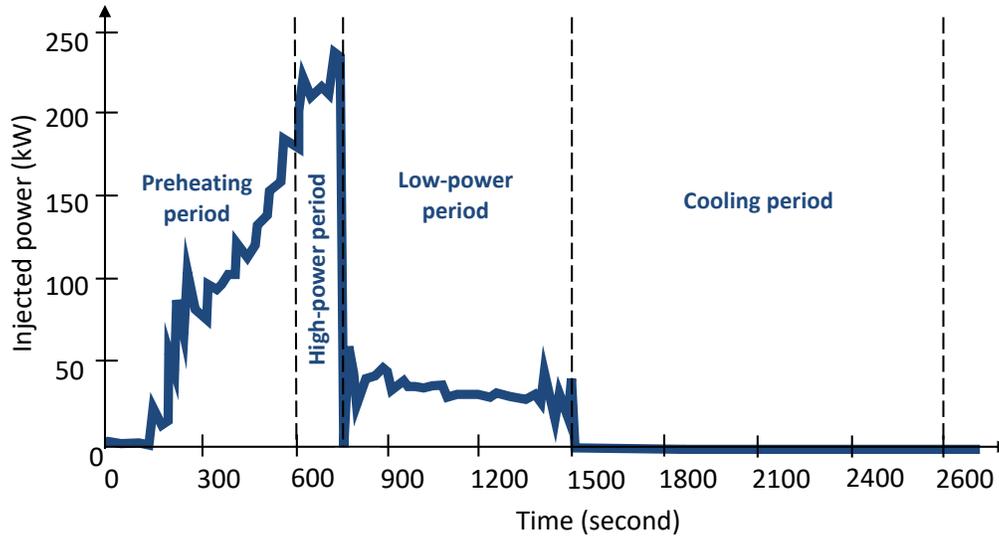


図 2-19 本研究で基づく VF-U1 実験の加熱履歴

2.2.2 解析条件

解析体系

次に、MPS 法による解析の条件を示す。図 2-20 は図 2-16 を再現した初期粒子配置を示しており、溶融物の大域的な流動とコンクリートの侵食に着目しながら現実的な計算コストで計算を実施するため、直径 7.5mm の粒子により計算体系を構成した。粉末が溶融し巨視的な密度変化させながら溶融物を形成する過程は非圧縮性流体を扱う MPS 法での模擬は困難であり、また、溶融物の形成過程は容器底部の金属成分の凝固分布には影響は小さいと思われるため、計算初期から全ての粒子は液体相当の密度を持っていると仮定している。また、図 2-20 において、実験のコリウム模擬粉末 ($\text{UO}_2\text{-ZrO}_2\text{-Zr}$) をコリウム酸化物成分で表しているのは、以下の理由がある。第 1.3.3 項で示したように、金属の中でも Zr は Fe と比べて反応性が高く、実験を通してほぼ全量が酸化する [45] [84]。一方で、SUS を主に構成する Fe は比較的酸化しづらく、実験後のサンプルの化学分析を通してその 90%程度が未酸化で残存したことが報告されており、コンクリート壁に沿う金属分布もほぼ全てが SUS 金属球由来の Fe であった [84]。そこで本研究では、Zr は最初から酸化されていたと仮定して、その体積は酸化物成分に含めている。空間・時間的に局在する酸化に伴う酸化熱の発生等は本研究では模擬できていない。

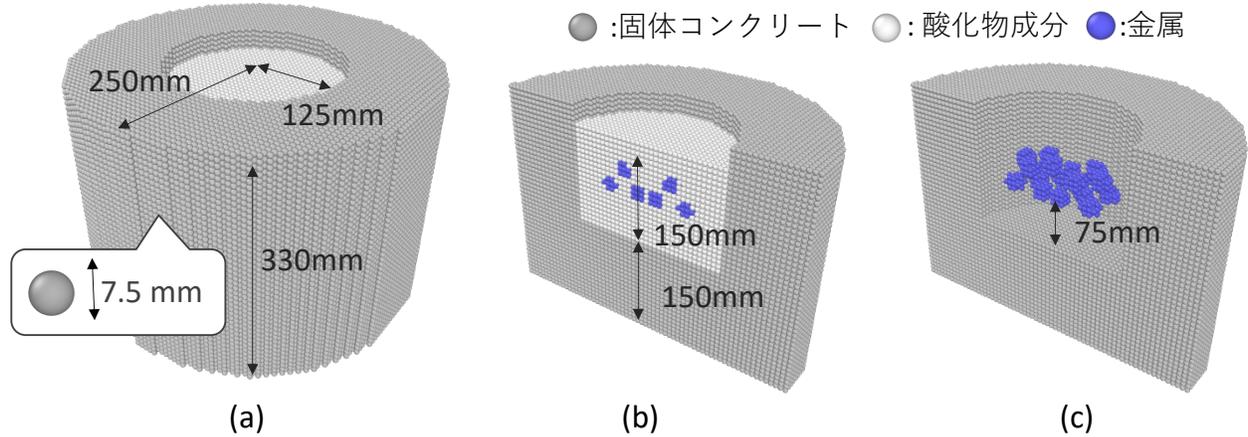


図 2-20 初期粒子配置 (a) 全体俯瞰; (b) 断面図; (c) 金属とコンクリートのみ可視化

仮定した物性値

表 2-2 は本章の 3 次元解析で適用した物性値のうち、表面張力・界面張力係数以外の物性値をまとめている。本研究の MPS 法では、第 2.1.3 項で示したように、コンクリート粒子が固相率閾値 $\gamma_T^{\text{concrete}} = 0.33$ を下回ると熔融コンクリート粒子という別物性をもつ粒子に変化する。本章の 3 次元解析では、熔融コンクリートは酸化物粒子とは別タイプの粒子として表現する。

表 2-2 3 次元 VF-U1 解析で適用した物性値 [73] [51]

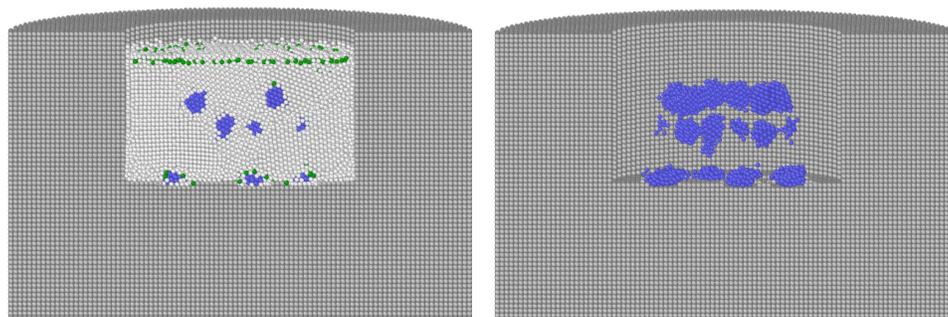
	酸化物	金属	固体 コンクリート	熔融 コンクリート
密度[kg/m ³]	6312	6461	2400	2400
粘性[Pa·s] * ¹	1.94×10^{-2}	4.75×10^{-3}	-	1.94×10^{-2} * ²
熱伝導率[W/mK]	1.5	25	1.5	1.5
比熱 [J/kgK]	498	600	950	498 * ²
固液相線温度[K]	2127/2673	1673/1723	1350/1650	-
潜熱[J/kg]	3.67×10^5	2.80×10^5	5.18×10^5	-

*¹完全に液体（固相率 $\gamma = 0$ ）の状態における粘性。

*²文献値が知られていないため、酸化物と同様に与える。

一方、VF-U1 実験中に存在する物性の表面張力・界面張力係数に関しては、CEA が保有するデータベースから物性値が示されている [51]。しかし、第 2.1.4 項で述べたように、本章の解析で利用している Zhu モデルで実際の物性値を用いると、同種粒子が不自然に凝集し定量的な表面張力・界面張力の模擬ができない上に、図 2-21 のように高密度の熔融金属が低密度の熔融酸化物中で保持されるといった数値的な流動の障害が発生する。

●/●:固体/液体 コンクリート ○:酸化物成分 ●:金属



断面図

固体コンクリートと金属のみ可視化

図 2-21 表面張力・界面張力をチューニングせずに Zhu モデルを適用した際に発生する不自然な流動阻害

そこで本章の解析では、定量的な表面張力・界面張力の模擬は断念し、定性的にでもこれらを考慮して解析を実施するため、流動は阻害されないが成分間が異常に分散することもないように恣意的にチューニングされた表 2-3 のような表面張力・界面張力係数を利用した。

表 2-3 3次元 VF-U1 解析で暫定的に適用した表面張力・界面張力係数

	金属	酸化物	MC*1	金属- 酸化物	酸化物- MC	MC- 金属
表面張力・界面張力 σ (N/m) [1]	1.79	0.58	0.58	0.25	0	0.25
チューニング後の 表面張力・界面張力 σ (N/m)	1.5	0.1	0.5	0.5	0.5	1.0

*1 MC = 溶融コンクリート

誘導加熱とその履歴の模擬

誘導加熱は一律な加熱密度を全ての溶融物に与えることで模擬した。また、与えられコンクリートの侵食に伴い溶融コンクリートが発生しても、本章の解析では酸化物と金属にのみ加熱を与え続けた。実際には溶融コンクリートにも誘導加熱が与えられるため、その模擬は第 4 章で実施する。実験では、溶融プールの形成の段階や成分、位置によって、誘導加熱で加えられる加熱には差があるが、その模擬は複雑であるため本研究では実施していない。なお、一律な加熱を仮定すると、酸化物にはその体積割合の 85~95%程度の加熱が与えられる。一方で、完全な溶融プールが形成された後は、実験では 95%以上の加熱が酸化物に与えられているとされている [48]。従って、酸化物成分に投入される熱エネルギーは、解析で最大 10%程度過小評価してしまっている。より精緻な加熱密度分布の模擬は今後の課題であるといえる。

次に、溶融物の温度履歴の模擬について説明する。図 2-18 によると、本解析での初期状態に相当する 10:18 頃、金属球付近の温度は 1300 K 程度であったことがわかる。そこで本研究では、解析の初期条件としては金属粒子に対して 1300 K を与え、そのほかの粒子は全て 300 K と仮定した（金属以外の粒子を全て常温と仮定するのは低温すぎるため、第 4 章の解析では 600K 程度に修正される。本章の解析では暫定的にこの温度を利用している。）。実験では、予熱期間の加熱出力は図

2-19 のように振動を伴いながら概ね線形に上昇していた。しかし、この期間の熱はコリウム模擬粉末を溶融するため比熱及び潜熱として物質に吸収されているので、与えられていた熱の総量が重要であり、その具体的な履歴は考慮の必要はないと思われる。そこで予熱期間の加熱出力は、図 2-22 のように、コリウムに投入された正味の熱の総量が等しくなるように時間平均化した一定出力の加熱を与えた。さらに、予熱期間は主に固体を液体に溶融する期間で、流動が可能な部分はあったとしても限定的と考えられるので、この期間は流動を計算せずに伝熱計算のみを実施（図 2-4 の右図の熱計算以外の全ての計算ステップをスキップする）することで更なる計算コストの低減を図った。

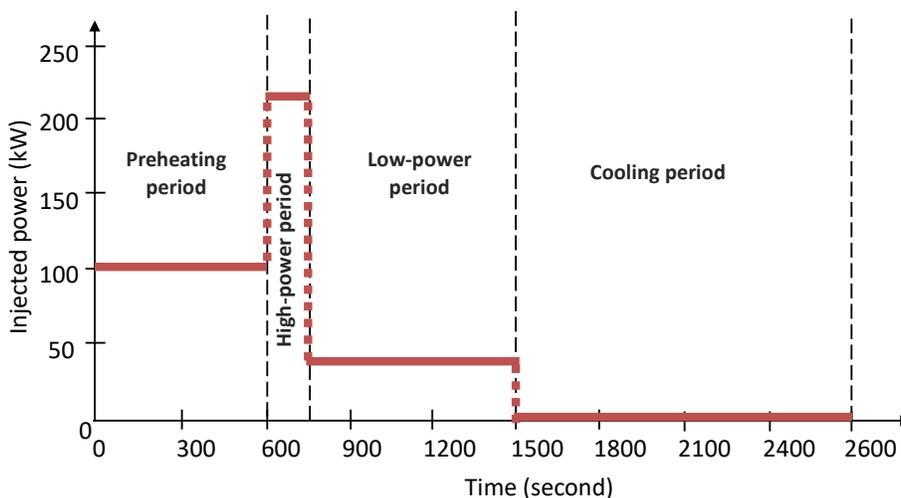


図 2-22 本研究の解析で与える VF-U1 実験の加熱履歴

2.3 解析結果と考察

2.3.1 解析結果の概要

本項で3次元のVF-U1解析の結果を示し、その結果から以降の現象理解のための課題を導く。図 2-23 は解析結果の重要な局面のスナップショットを断面図、金属とコンクリートのみ可視化した断面図、温度分布、固相率分布の4つの視点で整理した図である。まず、予熱期間を終え流動解析を開始した直後の最初の10秒間で溶融金属成分が下方に移動してコンクリート容器底部に堆積した。 $t = 750$ s頃からは、溶融コンクリートの発生を伴うコンクリートの侵食により溶融物の流れが活発化した。同時に、コンクリートに触れている酸化物成分も液相線温度以下になり粘性を増しながら徐々に凝固しを開始した。このように、コンクリートの溶融と酸化物の凝固が同時に進行するようになると、金属成分がコンクリート側壁に沿って分布をする様子が確認された。このような金属成分に分布はそれ以降も概ね保持され、 $t = 1900$ s以降になると酸化物成分と金属成分はともに流動を停止し、空間分布を保ったままコンクリート壁への熱伝導により凝固した。これらの解析結果を以降の項で考察していく。

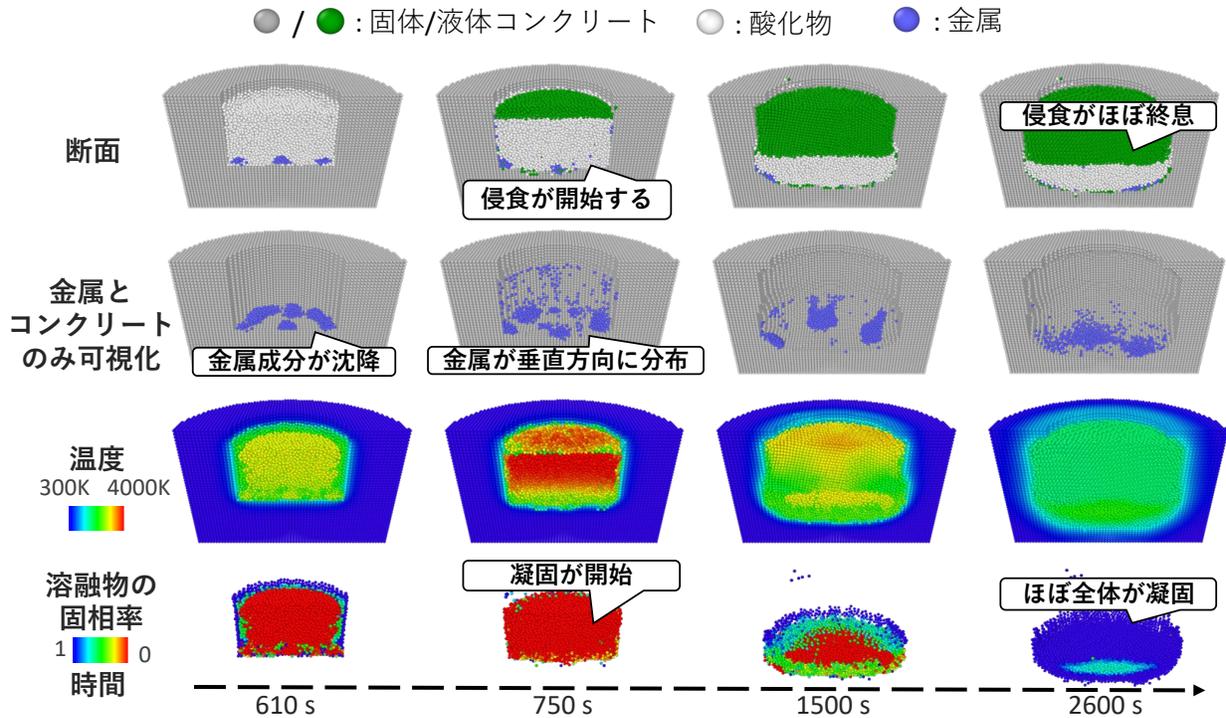


図 2-23 3次元 VF-U1 解析のスナップショット

2.3.2 コンクリート侵食

解析のコンクリート侵食の履歴と実験の履歴を比較しているのが図 2-24 である。図 2-24 の縦軸はコンクリート侵食割合で、 $(\text{溶融したコンクリートの体積}) / (\text{溶融物の初期体積})$ で定義される。実験中のコンクリート侵食の進展は熱電対によりモニターされ、高加熱期間が終了するタイミングと、実験後の 2 点における侵食体積が公開されている [51] [45]。一般に MCCI 実験では正確に加熱条件や徐熱条件を制御することができず、また、どのような加熱状態・徐熱状態であったのかを正確に確認することもできない。そのような実験の性質上、加熱条件や徐熱条件を入力値として与えなければならない数値解析によりコンクリートの侵食量を正確に整合させることは困難であり、本研究の主要な目的でもない。そのような前提を踏まえて解析と実験と侵食進展を比較すると、公開されている侵食割合とは比較的よく一致していると考えて良い。さらに、出力に応じて侵食割合の増大の勾配が変化することも示されている。

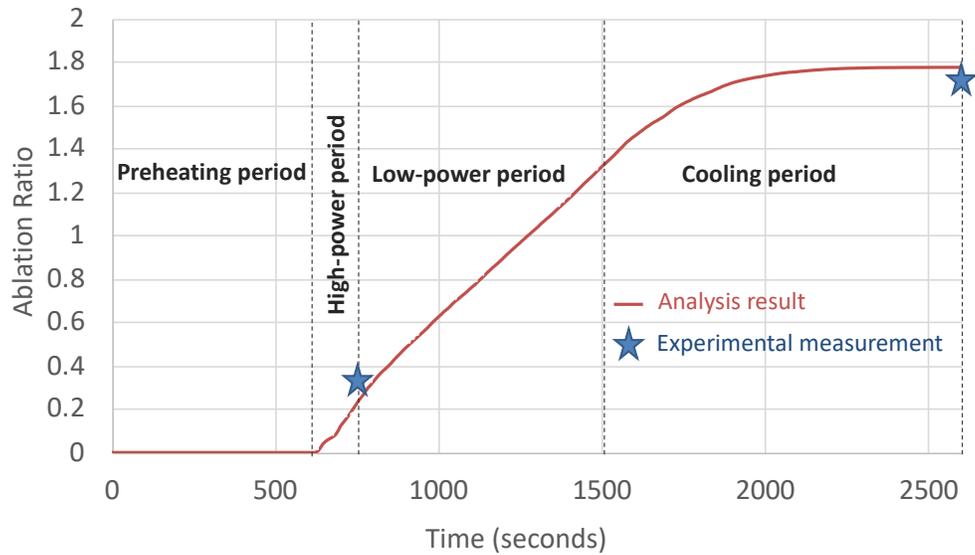


図 2-24 3次元解析でのコンクリート侵食割合の時間進展

一方、図 2-25 は実験と解析のコンクリートの最終形状の比較である。解析結果の方が少し丸みを描いて大きく侵食しているが、実験との侵食距離の差は大きくても数粒子分である。ただし、侵食形状を実験のそれと完璧に整合させることは現在の解析モデルだけでは不足があり、1.5.2 で紹介した Li らや Chai らの先行研究のように、侵食形状を整合させるために入念に現象が考察され開発されたモデルを用いる必要があると思われる（例：スラグ膜モデル等）。

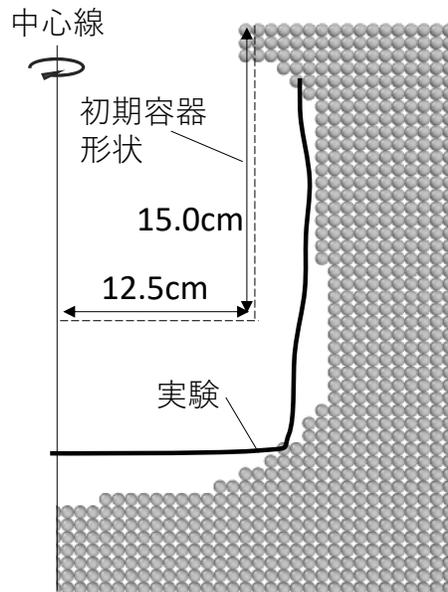


図 2-25 3次元解析と実験のコンクリート侵食形状の比較

2.3.3 金属成分分布

図 2-26 は MPS 法による 3 次元解析の解析終了時の断面図と VF-U1 実験後の凝固物の成分分布のスケッチの比較を示している。コンクリート壁に沿う凝固金属成分の分布という観点では、解析結果は実験の分布を定性的に再現している。解析では、図 2-23 が示すように、コンクリートが活発に溶融しさらに酸化物の凝固が周辺部から開始したタイミングから、金属成分がコンクリート壁に沿って分布し、この時期に形成された分布が保持されたまま酸化物と金属が凝固することで、図 2-26 のような分布が残された。ただし、この解析の解像度（粒子径 7.5 mm）では、金属成分が 1 粒子程度の膜で表現されている上に、表面張力・界面張力係数がチューニングされているために、金属がコンクリート壁に沿って分布した理由の言及は困難である。

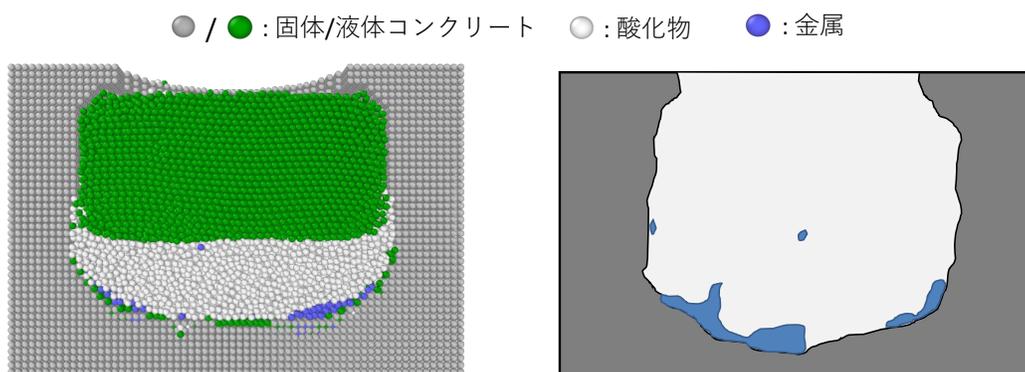


図 2-26 (左図) MPS 法による 3 次元解析の解析終了時の断面図；(右図) VF-U1 実験後の凝固物の成分分布のスケッチの比較

Zhu モデルでは、表面張力・界面張力係数がチューニングされているため、定量的な議論を行うことができないが、定性的には界面張力の効果を再現している。そこで、表面張力・界面張力係数を全て 0 とすることで、酸化物成分と金属成分の間に働く界面張力を無効化した結果を示しているのが、図 2-27 である。界面張力が作用しない場合では金属成分が酸化物成分中で分散しており、質的に異なる分布が示されている。このことから、金属成分の分布に関わる現象履歴に対して、界面張力が大きな影響を及ぼしていることがわかった。

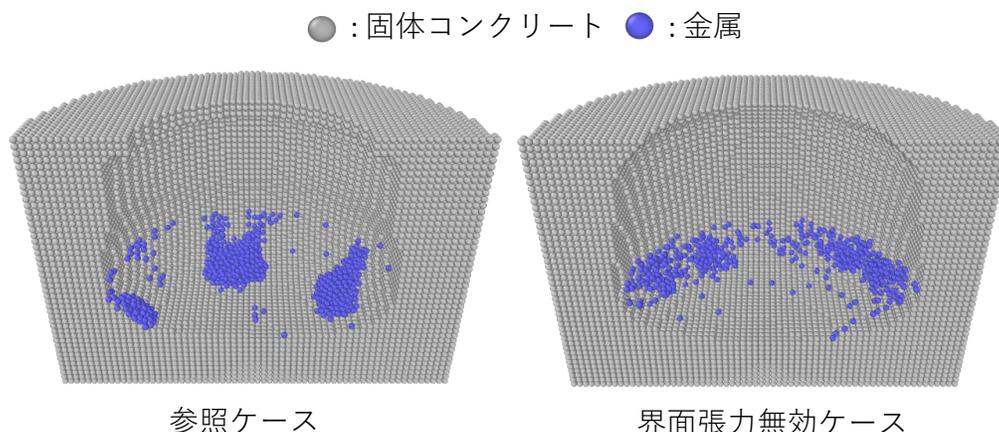


図 2-27 VF-U1 実験の解析における界面張力の影響の感度解析 ($t = 1500 \text{ s}$)

2.4 考慮が必要な物理現象モデルとその精緻化のレベル

本節では、第2章で示した既存のMPS法解析モデルを用いたVF-U1実験の解析結果から得られたMCCI現象の理解をさらに深めるために必要なMPS法の物理現象のモデルとその精緻化のレベルを論じる。

本章の解析結果だけからは詳細なメカニズムの言及は困難であったが、金属成分のコンクリート壁に分布は、酸化物成分の凝固やコンクリートの溶融、それに伴う固液/液-液界面を介した異成分間の相互作用の結果によりもたらされたのであり、Boulinらが主張するように単純な流動現象だけで説明できる(第1.7節参照)のではないことが示唆された。すなわち、金属成分の凝固分布は、図2-28に示すよう、与えられた加熱履歴に基づいて異なる温度域で固液相変化する酸化物・金属・コンクリートとの間の相互作用を考慮することで初めて説明ができるようになると考えられる。そのような異成分間の相互作用のうち、特に重要と思われる以下の物理現象を、本解析よりも詳細な解像度で、かつ数時間スケールのMCCIの現象履歴に組み込めるような精緻さで模擬することが課題である。

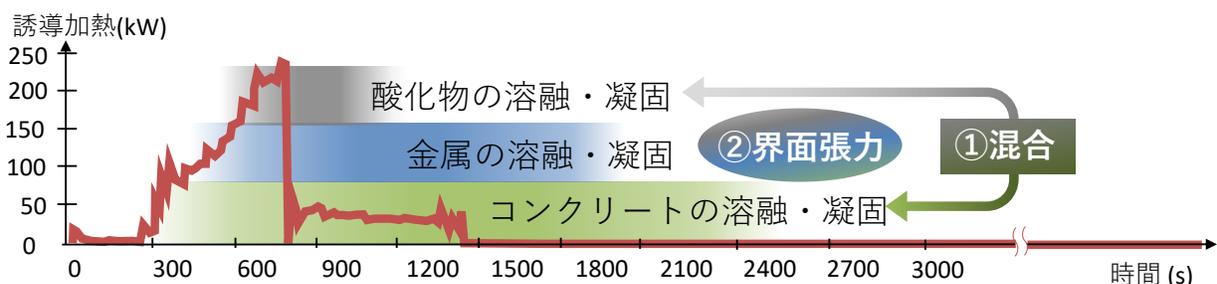


図 2-28 VF-U1 実験の加熱履歴と固液相変化の現象履歴、及び異成分間の相互作用

① 浮力や流れに影響を及ぼす、溶融物間の混合に伴う密度や固液相線温度の変化の考慮

本章の解析では、溶融コンクリートと炉心酸化物成分とは混合せず、溶融コンクリート成分は密度差に伴い炉心酸化物成分の上部に密度成層化していた。しかし、第1.3.1項に述べたように、炉心酸化物(UO_2 や ZrO_2 等)は溶融コンクリート(主に SiO_2 や CaO)とは混合することで物性が変化する。一方で、溶融コンクリートは酸化物成分中で瞬時に酸化物成分に混ざり合うのではないため、両者が混合した(混合)酸化物成分は空間的に非一様な物性値の分布を有する。このことに伴い、酸化物成分の中でも特に金属と酸化物とが接する下部と自由表面付近の上部とでは酸化物の物性が異なる可能性がある。特に、金属成分付近の酸化物成分の密度や固液相線温度の分布は、金属成分に作用する浮力や流動の様式に大きな影響を及ぼすと考えられる。そこで、溶融コンクリート成分が酸化物成分中に混ざり合うことで酸化物成分の物性値、特に密度と固液相線温度の分布が時間的に進展することを模擬できる必要がある。

② 流動阻害やチューニングを伴わないミリメートルスケールの界面張力や濡れ性の考慮

本章の解析を通して、ミリメートルスケールの金属成分と他成分との間に作用する界面張力は金属成分の分布に関わる現象履歴に大きな影響を及ぼすことが改めて確認された。本章の解析では、界面形状を明示的に求めることなく安定的かつ容易に多成分界面に作用する界面張力を

考慮する事ができる Zhu モデルを利用したが、同モデルでは流動が不自然に阻害されるために恣意的なチューニングが必要になることが明らかになった。界面張力は金属成分の分布に関わる現象履歴に本質的な影響を与えるため、このような恣意的なチューニングを伴う Zhu モデルを用いた解析は好ましくない。そこで、Zhu モデル同様に複雑な多成分界面に安定的かつ容易に適用できながら、流動阻害やチューニングを伴わないで界面張力や濡れ性を考慮できるような界面張力の考慮が必要である。

次章では、本節で示された考慮が必要な物理現象モデルとその精緻化のレベルに基づき、追加的に実装したモデル、及び新たに開発したモデルについて記述する。

3 追加実装した既存モデルと開発した新モデル

本章では、第2章で示した課題を解決するために新たに追加考慮した溶融物間の混合モデルと、新たに開発した界面張力モデルについてまとめる。

3.1 混合モデル

3.1.1 MPS法における混合モデル

異なる成分を構成する分子の間の分子間力が同じ成分を構成する原子・分子同士の分子間力と同程度であれば、明瞭な界面が形成されず、両成分は混合する。MCCIにおいて、金属と酸化物との間には界面が形成され界面張力の考慮が必要になるが、炉心酸化物（ UO_2 や ZrO_2 ）と溶融コンクリートの酸化物（主に SiO_2 と CaO ）とは、共に酸化物であるために混合する⁴。本項では、炉心酸化物と溶融コンクリートの酸化物の間の混合をMPS法で扱うChaiの混合モデルを示す。

MPS法では原子や分子の運動を直接模擬するのではなく、N-S方程式が成立する程度のスケールで流体を離散化する。したがって、MPS法の粒子径のスケールでは原子や分子が熱運動により入り乱れて混合する現象をありのままに表現することはできない。一方で、MPS法の粒子ではアボガドロ数程度の原子や分子が表現されているため、原子・分子の運動の結果生じる現象を統計的に取り扱うことができる。すなわち、ある成分の別の成分中の濃度 c はFickの法則により支配され、このことから、成分濃度が拡散方程式

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(\mathbf{u})\nabla^2 c \quad (3.1.1)$$

に従うことが知られる。ここで、 $D(\mathbf{u})$ は拡散の程度を表す係数であり、流体の速度場に依存してその大小が変化する（特に、流動が乱流である場合は拡散が大きく促進される。）。本研究ではこの係数を対流拡散係数と呼ぶ。

Chaiらは、図3-1のように、1つの酸化物粒子がコンクリート成分と炉心酸化物成分の2成分を表現しているとみなし、1つの酸化物粒子に占めるコンクリート成分の体積割合、すなわちコンクリート成分濃度 c が拡散方程式(3.1.1)を満たすと仮定することでMCCI解析を実施した[41]。同式中のラプラシアンは、MPS法のラプラシアン離散化モデル(2.1.12)により離散化された。なお、対流拡散係数の速度場への依存性は一般的に未知であり、加えて、MPS法では粒子径スケールより小さいスケールの対流による拡散の促進は考慮することはできないため、Chaiらは対流拡散係数として暫定的な定数を与えた。

⁴ 厳密には、混和する成分の間にも界面張力は作用する。異成分間の混合（拡散）と界面張力とは、異成分を構成する原子・分子との間の結合の程度がマクロなスケールに現れている現象を異なる側面で捉えているに過ぎず、両者は本質的には共存している。これらの現象は、化学ポテンシャルを用いて熱化学的に統一的に取り扱うこともできる[147]。しかし、溶融コンクリートと炉心酸化物の間では混合の側面が支配的であり、一方、酸化物と金属の間では界面張力の側面が支配的であることから、本研究ではどちらか一方しか考慮しない。

溶融酸化物粒子

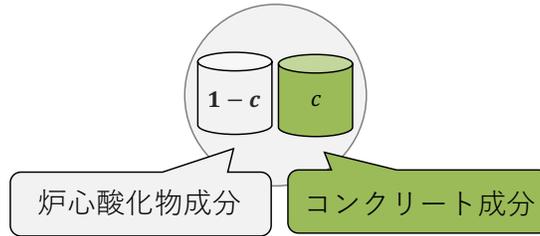


図 3-1 Chai モデルにおける酸化物粒子の取り扱い

なお、コンクリート成分濃度 c が 0 より大きい溶融酸化物粒子は、コンクリート成分濃度 c が 0 の純粋な溶融酸化物粒子の物性値と、溶融コンクリートの物性値との間の中間的な値をとる。Chai らは特に、密度と固液相線温度をコンクリート成分濃度 c の関数として表現することで、物性値の依存性をモデル化した。すなわち、コンクリート成分濃度 c をもつ溶融酸化物粒子の密度は、その定義から

$$\rho = \rho_{concrete}c + \rho_{oxide}(1 - c) \quad (3.1.2)$$

で与えられるとし、固液相線温度のコンクリート成分濃度依存性は図 3-2 に示す Spengler による相関式 [85] [41] を複数の一次関数で近似した近似式を利用した。

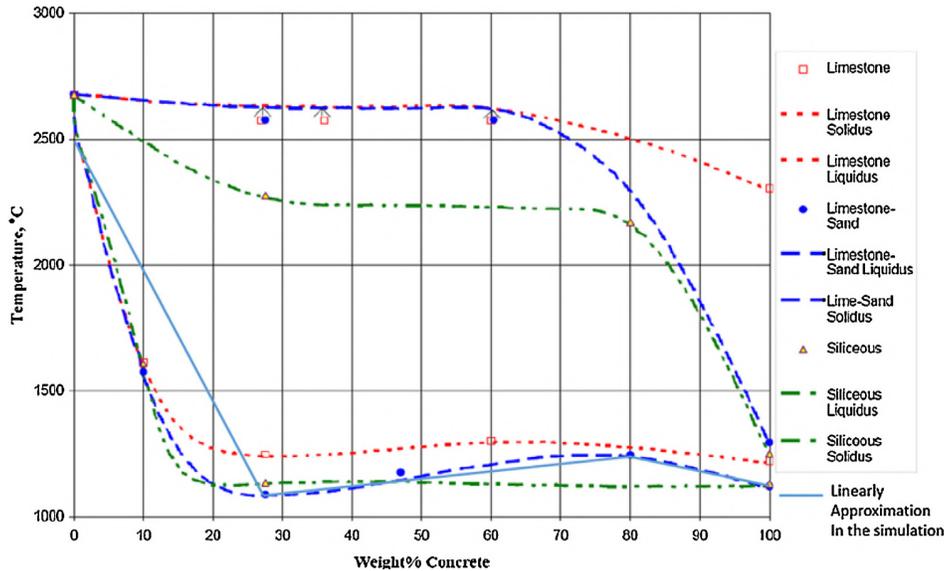


図 3-2 炉心酸化物と各種コンクリートとの混合に伴う固液相線温度の変化（単位は°C） [85] [41]

3.1.2 本研究の解析への適用

図 3-3 は本解析における混合モデルの実装方法を示している。本解析では Chai と同様に、すべての溶融酸化物粒子にコンクリート成分濃度 c を新たな変数として与える。初期状態では、溶融酸化物粒子は $c = 0$ である。一方、第 2.1.3 項に示したように、固体コンクリート粒子の温度が上昇し固相率の閾値を下回ると、溶融コンクリート粒子という別の粒子タイプに変化する。次に、座標固

定が無効となり流動を開始した溶融コンクリート粒子の影響半径内の粒子の半数以上溶融酸化物粒子であった場合、溶融コンクリート粒子は溶融酸化物粒子に変化する。この際、溶融コンクリート粒子が有していた物性値はそのまま保持されるが、新たにコンクリート成分濃度が $c = 1$ に初期化され与えられる。体系内の溶融酸化物粒子は $0 \leq c \leq 1$ の範囲で変化可能なコンクリート成分濃度をラプシアンモデルにより粒子間で相互に受け渡す。これにより、巨視的には溶融酸化物成分中でコンクリート成分濃度が拡散していく。

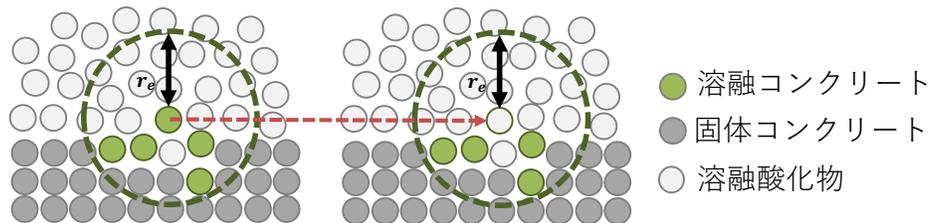


図 3-3 本研究における混合モデルの実装

溶融酸化物粒子の密度は Chai らと同様に式 (3.1.2) で与えられる。また、VF-U1 実験で利用する玄武岩コンクリートは珪酸質 (siliceous) コンクリートの一種であるので、基本的には Spengler の相関式 [85] [41] の“siliceous”の固液相線温度の濃度依存性を適用し、それを次式のような複数の一次関数により近似した。(ただし、 $c = 0$ の純粋に炉心酸化物の粒子と $c = 1$ の純粋に溶融コンクリートでは、それぞれ VF-U1 実験のコリウム及び玄武岩コンクリートに対して得られている文献値 [45] [73]を適用した。)

$$T_{solidus} \begin{cases} 2790 - \frac{2790 - 1350}{0.15} c & (0 < c < 0.15) \\ 1350 & (0.15 < c < 1) \end{cases} \quad (3.1.3)$$

$$T_{liquidus} \begin{cases} 2790 - \frac{2790 - 2500}{0.3} c & (0 < c < 0.3) \\ 2500 & (0.3 < c < 0.8) \\ 1650 + \frac{2500 - 1650}{0.2} (1 - c) & (0.8 < c < 1) \end{cases} \quad (3.1.4)$$

また、本研究でも、対流拡散係数は速度場に依存しない定数として与える。すなわち、本研究の混合拡散係数は、粒子系スケール以下の対流や気泡による対流等の影響を一つのパラメーターに落とし込んだ感度解析係数であり、実際には空間的・時間的なバラつきがあるが、その考慮は本研究では実施していない。本研究ではこの定数を変化させることで溶融コンクリートと溶融炉心酸化物との間の混合の程度を変化させ、その MCCI の現象履歴への影響を確認した。

3.2 Cohesion-Free Potential (CFP) モデル

本節では、本研究の解析の鍵となる新たな界面張力モデルの開発について詳細に示す。界面張力に関する基礎的な理論は別途、付録の第 6.4 節にまとめてあるので、必要であれば適宜参照されたい。

3.2.1 MPS 法の従来の界面張力モデルとその課題

MPS 法では、界面張力を模擬するために大きく分類して Continuous Surface Force (CSF) モデルとポテンシャルモデルの 2 つのタイプのモデルが開発されてきた (図 3-4)。本項ではこれらのモデルの長所、短所を簡潔にまとめる。なお、表面張力は界面張力の特別な場合ともいえ、両者は多

くの場合区別されずに開発がされてきた背景がある。そこで、従来の研究を紹介する本項では、特に断らない限り表面と界面は区別せずに、共に「界面」と呼ぶ。

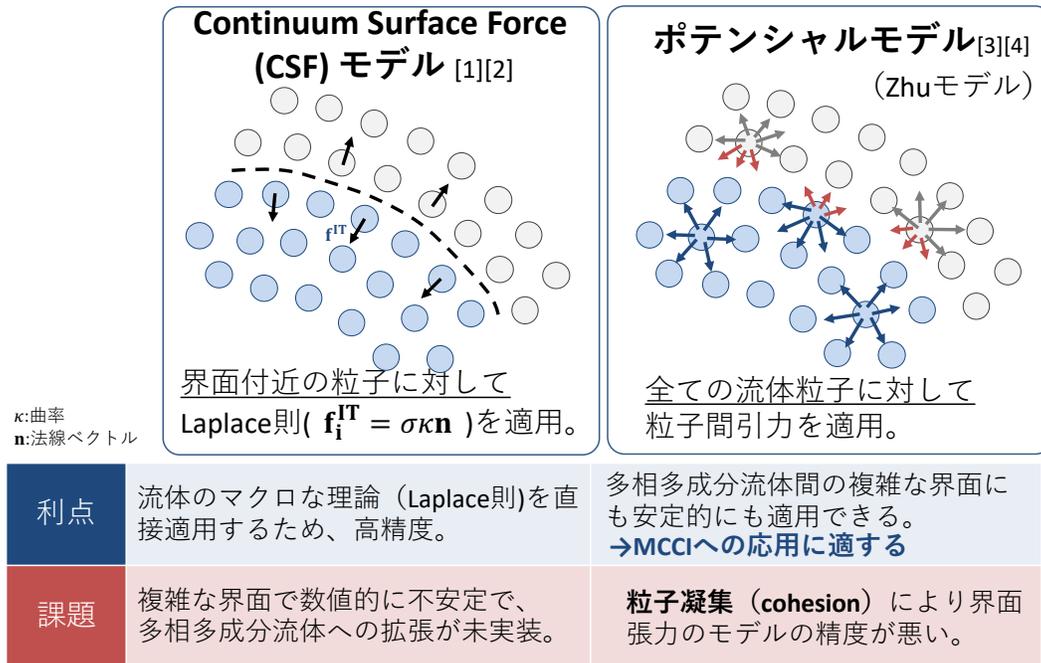


図 3-4 CSF モデルとポテンシャルモデルの対比

一つ目の CSF モデルは、局所的な界面の形状と Laplace 圧力 (第 6.4 節参照) との関係に準拠するモデルであり、元々は格子法において Brackbill らが考案した [77]。CSF モデルでは、

$$\frac{D}{Dt} \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{g} + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa \delta \mathbf{n} \quad (3.2.1)$$

のように、N-S 方程式に Laplace 圧力に起因する力の項を人工的に追加することで界面張力を模擬する。ここで、 δ は理論的には界面にのみ力が作用することを模擬するためのデルタ関数で、 \mathbf{n} は界面の法線ベクトルである。CSF モデルは界面の形状を明示的に把握する格子法 (特に front-tracking 法 [86] や level-set 法 [87]) と特に相性が良く、格子法に基づく CFD では CSF モデルやその派生モデルを使うことが主流となっている。一方、MPS 法では、Nomura らが初めて MPS 法に CSF モデルを導入し液滴振動を再現 [88] してから改良が重ねられ、液滴の崩壊 (break-up) [89] や液滴の合体 (coalescence) [90]、液面の跳ね (splash) [91]、気泡の上昇 [92] 等多数のベンチマーク問題が解析された。CSF モデルは液体の界面に作用するマクロな界面張力、すなわち Laplace 圧力を局所的な曲率や法線ベクトルから直接計算するためモデルの精度が高く、単純なベンチマーク解析であれば理論解や実験相関式等とほぼ完全に一致させることができる。

しかし、MPS 法の CSF モデルでは界面の局所的な幾何形状 (曲率や法線ベクトル) を粒子配置から見積もることが一般に容易でないことから、モデルが複雑になる上に、界面が大きな変形を伴う流動では数値的な不安定性が発生する可能性がある [93]。さらに、MPS 法が Lagrange 式記述であり、それゆえに界面の形状を明示的に計算しなくても安定的に界面の時間発展を追跡できるという強みを持っていたことを踏まえると、CSF モデルの利用はその MPS 法の利点を部分的に失ってしまうことを意味する。加えて、筆者の知る限り、現時点までに MPS 法の CSF モデルには 2 成分あるいは 2 相以上の多成分多相界面での界面張力のモデルや壁面濡れのモデルが実装されていない (後

藤も著書にて、MPS法のCSFモデルには壁面濡れモデルが存在しないと記している。[94])。したがって、CSFモデルが適用されるのは、理論解や実験相関式が得られており、かつ多成分界面や壁面の濡れ性を考慮しない、単純なベンチマーク解析に集中しており、工学的な課題への応用は未だに難しい。特に、本研究で着目するMCCIは、固液相が混在する酸化物成分・金属成分・熔融コンクリートによる複雑な多成分多相界面が形成される現象であるため、CSFモデルの適用は実質的に不可能である。

もう一方の界面張力モデルであるポテンシャルモデルは、既に第2.1.4項で述べたように、粒子間距離が粒子径付近以内で斥力、それより遠距離で引力を与える粒子間力を粒子間に仮定することで界面張力を模擬している[78][76][75]。主にShirakawaやKondoらにより確立されたMPS法のポテンシャルモデルのアプローチは、界面張力の発生機構である原子・分子間のミクロな相互作用(付録の第6.4節参照)を粒子間に仮定することで、機構論的に界面張力を模擬したものである。ポテンシャルモデルの最大の利点は、粒子配置から界面の形状を求めることなく、粒子間の相互作用により自動的に界面張力を模擬できる点である。これにより、モデルが簡単になる上に、複雑な界面変化にも安定的に適用できる。また、界面張力を粒子間の相互作用で再現することは、粒子間の相互作用によりN-S方程式の各微分項を離散化するMPS法の基本方針とも相性がいいと言える。さらに、ポテンシャルモデルは、多成分多相流体間の界面張力もシームレスに適用できる上、液体による固体の濡れ性を容易に再現できる[76]。このような簡素さと安定性、汎用性から、ポテンシャルモデルは多くの複雑な工学的課題に適用されてきた[95][96][81]。多成分の溶融物が壁面と相互作用しながら複雑な界面を形成するMCCI解析に対しても、ポテンシャルモデルはその最低条件を満たしていると言える。

しかしながら、ポテンシャルモデルはCSFと比べるとベンチマーク問題の解析精度が悪く、高い精度が求められる計算には不向きであることが複数の文献で指摘されている[97][94]。まず、ポテンシャルモデルでは界面張力が粒子径に依存し、粒子径毎に界面張力の強さをチューニングする必要があると指摘されている[98]。また、ポテンシャルモデルは圧力を理論値より過大評価してしまう[76][75]。さらに、筆者は、ポテンシャルモデルに基づく界面張力モデルでは、流体の流動が不自然に阻害されることを示した[99]。ただし、ポテンシャルモデルにおけるこのような課題は複数の文献で指摘されながらも、具体的な解析結果とともにその問題が体系的に示されている例は存在しない。そこで本研究ではまず、ポテンシャルモデルの課題を明示するため、表面だけではなく界面にも適用できるポテンシャルモデルであるZhuモデル[75]を用いてこれらの課題を体系的に示す。

ポテンシャルモデルで界面張力のチューニングが必要になることの確認

まず、「ポテンシャルモデルで界面張力が粒子径に依存し、粒子径毎に界面張力の強さをチューニングする必要がある」、とのAdamiらによる指摘[98](原文は(前略) *the resulting surface tension needs to be calibrated. Furthermore, with given parameters, the surface tension is resolution-dependent and does not converge to a fixed value with increasing resolution.* (後略)[98])の意味を明確にする。第2.1.4節で示したポテンシャルモデル(Zhuモデル)の具体的な式を再度明示すると、

$$\frac{D}{Dt} \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{g} + \frac{1}{\rho} \mathbf{f}^{\text{Zhu}} \quad (3.2.2)$$

$$\mathbf{f}_i^{\text{Zhu}} = \frac{1}{l_0^3} \sum_{j \neq i} \left[-\nabla E_{ij}^{\text{Zhu}}(\mathbf{r}_{ij}) \right] \quad (3.2.3)$$

$$E_{ij}^{\text{Zhu}}(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} -\frac{C_{ij}^{\text{Zhu}}}{3} \left(r_{ij}^0 - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 & (r_{ij} \leq r_e) \\ 0 & (r_e \leq r_{ij}) \end{cases} \quad (3.2.4)$$

$$C_{ij}^{\text{Zhu}} = \begin{cases} \frac{2l_0^2\sigma_A}{G} & (i \text{ and } j \text{ belong to component A}) \\ \frac{2l_0^2\sigma_B}{G} & (i \text{ and } j \text{ belong to component B}) \\ \frac{l_0^2(\sigma_A + \sigma_B - \sigma_{AB})}{G} & (i \text{ and } j \text{ belong to different components}) \end{cases} \quad (3.2.5)$$

$$G = \sum_{i \in A_2, j \in A_1} \frac{1}{3} \left(r_{ij}^0 - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij}^0 - r_e)^2 \quad (3.2.6)$$

である。式 (3.2.6) から遡って式 (3.2.3) まで代入していき、 r_{ij}^0 、 r_{ij} 、 r_b 、 r_e はどれもせいぜい l_0 の 1~3 倍程度であることを使って、粒子間力 $\mathbf{f}_i^{\text{Zhu}}$ (体積力 (N/m³)) の絶対値のオーダーを見積もると、 l_0 の 2 乗に反比例していることがわかる。

$$|\mathbf{f}_i^{\text{Zhu}}| = O(l_0^{-2}) \quad (3.2.7)$$

つまり、粒子径を変化させた際、N-S 方程式 (3.2.2) に現れる界面張力以外の項は、流体の単位体積に作用する力は変化しないのに対して、界面張力だけがその寄与を l_0 の 2 乗に反比例して変化させるのである。これが、Adami らが、「ポテンシャルモデルでは界面張力が粒子径に依存する」と指摘した内容であると思われる。流動の挙動は N-S 方程式の各項の間の関係性で決定されるのであるから、粒子径の小さい/大きい解析体系で界面張力が相対的に大きな/小さな寄与を持ち、再現される流動現象は異なるものになってしまう。

ポテンシャルモデルにおいて粒子間力が粒子径に依存することが明瞭になったため、Adami らの指摘通り、自然な解析結果を得るためには粒子間力のチューニングが必要である。実際、

$$\mathbf{f}_i^{\text{Zhu}} \rightarrow a\mathbf{f}_i^{\text{Zhu}} \quad (3.2.8)$$

のように粒子間力にチューニング係数 a を与えることで自然な見た目の解析結果を得る、という操作は一般的に行われている。しかし、どのチューニング係数 a を適用すれば正しい結果を得られるか、という理論は存在せず、現状では見た目が自然な解析結果になるように恣意的に決定する他ないため、モデルの定量性が失われる。このことが、Adami らが指摘したポテンシャルモデルの重大な課題である。

なお、従来のモデルがこのような粒子径への依存性を有しているのは、Kondo や Zhu らによる着想や定式化に誤りがある為ではなく、本質的に体積を持たない界面上にのみ作用する界面張力を、有限の体積をもつ粒子に働く体積力で模擬していることが原因である (詳細は付録の第節を参照されたい)。したがって、この依存性自体は、界面張力モデルを体積力で表す他のモデル (CSF モデル等) でも同様に発生する (例えば [90] の r_s のように、CSF モデルでは「界面厚さ」を恣意的に決定する必要があり、これがポテンシャルモデルのチューニング係数に相当する。)。それでいてなお Kondo や Zhu のモデルではこの依存性が顕著に課題になるのは、このような依存性がある体積力を、界面だけでなく全ての粒子間に作用させることで、依存性の影響が解析結果に顕在化してしまうためである。そのような顕在化の別の例が、以降に示される圧力の過大評価や流動の阻害によく現れている。

ポテンシャルモデルの圧力の過大評価に関するベンチマーク解析

ポテンシャルモデルで圧力が過大評価されてしまうことを示すため、図 3-5 の解析体系と表 3-1 の物性値を用いて Laplace 圧力を評価する 2次元の MPS 解析を実施した。図 3-5 の R は液滴の半

径で、この解析では 0.3 m とする。また、異成分界面間の Laplace 圧力を計算するためには連続相と液滴の表面張力係数（それぞれの成分と気相あるいは真空との間の界面張力係数）は理論的に必要なく、むしろそれらの値が Laplace 圧力に影響してしまってはならないのであるが、Zhu モデルでは (2.1.82) のように、自由表面が存在するか否かにかかわらず表面張力係数を入力しなければならない。そこで連続相と液滴の表面張力係数を暫定的に 1 N/m と 2 N/m とした。

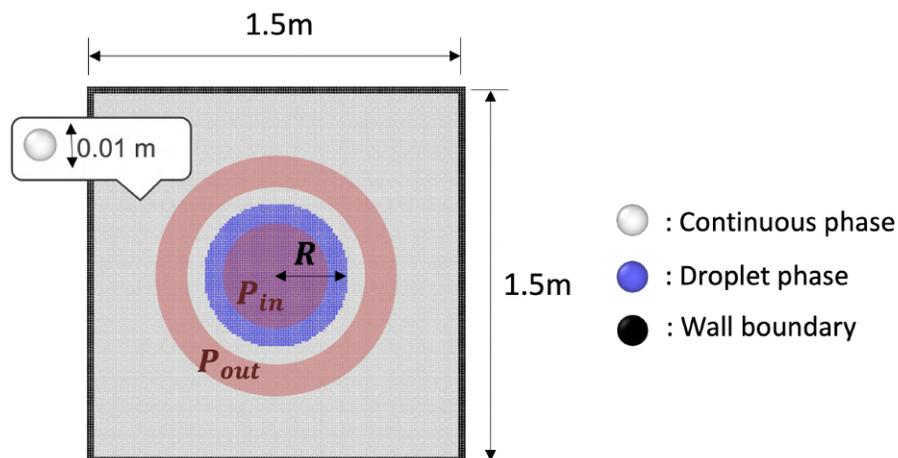


図 3-5 Zhu モデルによる Laplace 圧力のベンチマーク解析

表 3-1 Zhu モデルによる Laplace 圧力のベンチマーク解析で仮定した物性値

	Continuous	Droplet
Density (kg/m ³)	1	1
Viscosity (Pa · s)	0	0
Surface tension coefficient (N/m)	1	2
Interface tension coefficient (N/m)	1	

本ベンチマーク解析では重力は考慮しないため、液滴は体系の中央に停止したまま、液滴の内外の圧力差、すなわち Laplace 圧力が評価された。MPS 法では空間的・時間的に圧力が数値的に振動することが知られている [100] ので、先行研究 [101] を参考に、図 3-5 の液滴の内側と外側の赤い色の領域で圧力の空間平均をとりそれぞれを P_{in} 、 P_{out} とし、 $\Delta P = P_{in} - P_{out}$ の値を時間的に平均した。 ΔP の時間平均の取り方は図 3-6 のように、時間的な振動の中心が概ね平衡に達した時刻から 0.1 秒間の平均を取った。

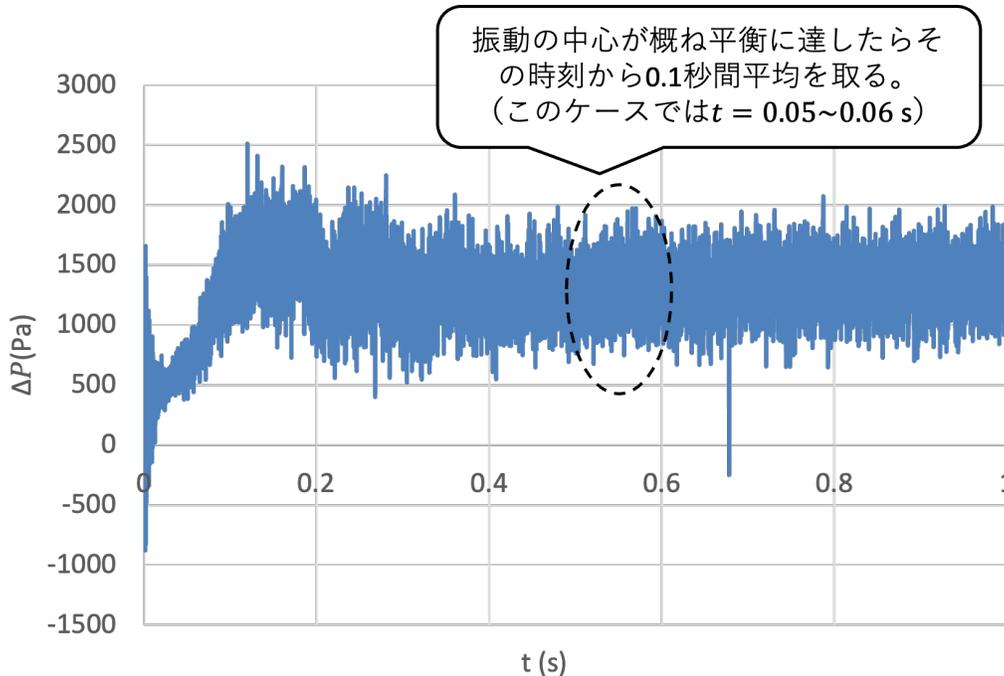


図 3-6 MPS 法における Laplace 圧力の振動とその時間平均の取り方

この体系で Zhu モデルを利用した時の Laplace 圧力と理論値との比較を表 3-2 に示す。Laplace 圧力に非常に大きな誤差が発生してしまっていることがわかる。

表 3-2 Zhu モデルによる Laplace 圧力と理論値との比較

	理論値	Zhu モデル
ΔP (Pa)	3.33	1290.97

この過大評価の原因を以下で考察する。まず、ポテンシャルモデルに基づいている粒子間力は、図 2-9 に示すように粒子間距離が粒子径の 1.5 倍程度（平衡点距離）までは斥力で、それより遠方では引力を示す。つまり、粒子同士の間働く力は距離によって斥力にも引力にもなり得るため、多くの粒子がこの粒子間力で相互作用した際にどのような分布を示すのかは容易にはわからない。そこで、簡易的な数値計算により粒子の分布の変化を示したのが図 3-7 である。同図は、粒子径 l_0 の粒子が格子幅 l_0 の正方格子から少しだけずれた位置に配置している状態を初期条件として、それらの粒子群がポテンシャルモデルの粒子間力でどのように移動するか計算し可視化したものである。ここでは簡単のため式 (2.1.81) において $c_{ij}^{Zhu} = 1$ とし、圧力、粘性、重力等を全く考慮せず、粒子間力のみが作用した場合に $\Delta t = 1$ s 秒後に粒子がどこにいるかを示している。この図から、粒子は局所的には疎密ができるが、粒子の集団の総体としては圧縮されていることがわかる。実際の MPS 法では図 3-8 のように粒子間力により凝集し圧縮した粒子は続く圧力計算により元の PND に戻っている必要があるため、その分余計に流体の圧力が上昇してしまう。（ポテンシャルモデルの開発者の一人である Kondo 自身も、この圧力の過大評価を指摘している。[76]）このように、非物理的に圧力が上昇してしまうことは、界面付近以外の内部粒子にも粒子間力を作用させる既存のポテンシャルモデルでは本質的に回避できない。

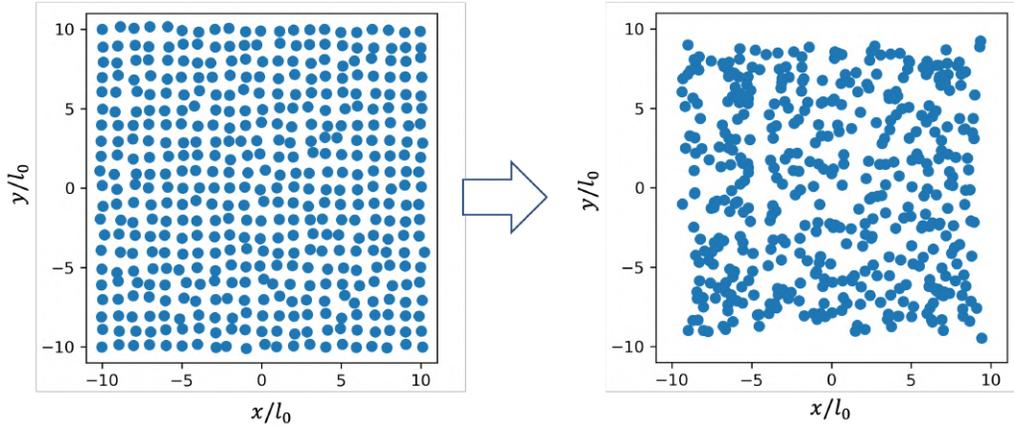


図 3-7 粒子の集団に粒子間力が働いた後の粒子分布のイメージ

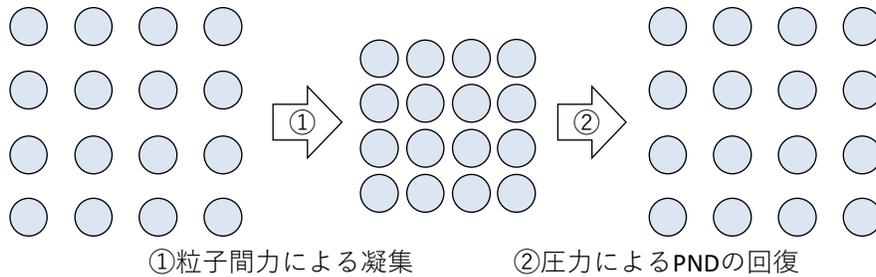


図 3-8 圧力を過大評価してしまうポテンシャルモデルのアルゴリズム

さらに、このベンチマーク解析の初めに、本来は必要ない表面張力係数を暫定的に仮定した、と述べたが、その表面張力係数 $\sigma_{\text{continuous}}$ と σ_{droplet} は Laplace 圧力に影響してしまっていることもわかる。表 3-3 は Zhu モデルで表面張力係数 σ_{droplet} だけを変化させた時の圧力過大評価の程度が液滴の表面張力係数に依存していることを示している。この原因は、圧力の過大評価が粒子間力に起因しており、その粒子間力が式 (2.1.82) に示すように表面張力係数で決定されるためである。

表 3-3 Zhu モデルの圧力過大評価の表面張力係数への依存

	Theoretical	Zhu Model ($\sigma_{\text{continuous}} = 1, \sigma_{\text{droplet}} = 2$)	Zhu Model ($\sigma_{\text{continuous}} = 1, \sigma_{\text{droplet}} = 4$)
ΔP (Pa)	3.33	1290.97	1935.08

ポテンシャルモデルで流動が不自然に阻害されることを示すベンチマーク解析

次に、ポテンシャルモデルでは流動が不自然に阻害されることをベンチマーク解析により示す。図 3-9 に示す解析体系のように、重力が下向きに働く体系の中に円形の液滴が連続相の中に配置されているとする。また表 3-4 に示すように液滴の密度は連続相の密度より 1%だけ大きく、両成分には粘性が働かない。

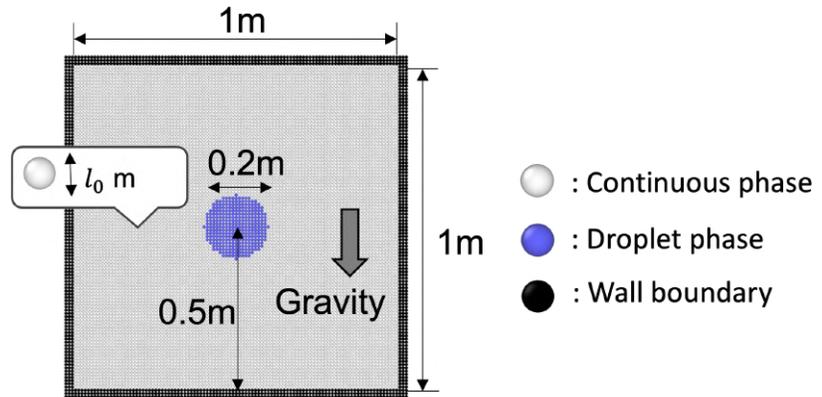


図 3-9 ポテンシャルモデルでチューニングが必要になることを示すベンチマーク解析の解析体系

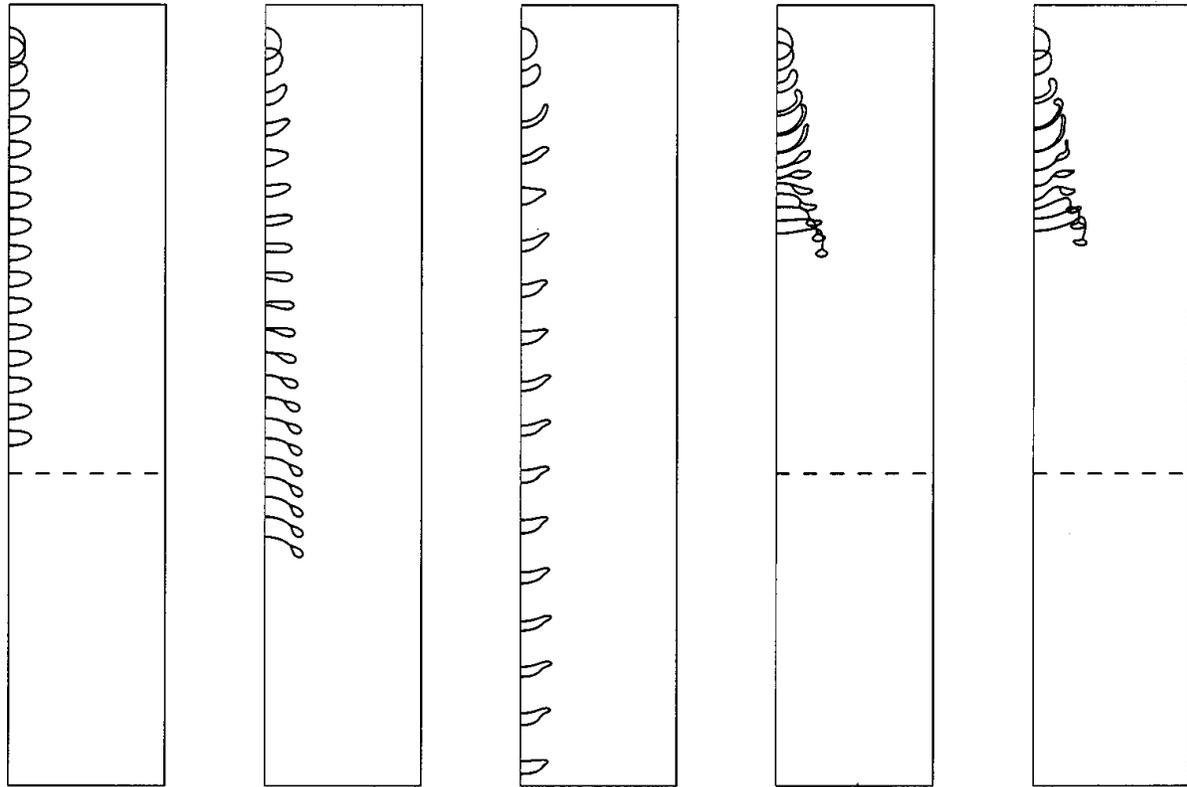
表 3-4 ポテンシャルモデルでチューニングが必要になることを示すベンチマーク解析の物性値

	Continuous	Droplet
Density (kg/m ³)	100	101
Viscosity (Pa · s)	0	0
IT coefficient (N/m)	0.1	

液滴は 1%の密度差で連続相より重いいため、理論的に液滴は重力により落下するべきである。さらに、先行研究により、連続相中を液滴が落下する際の液滴の形状は Han と Gréтарにより Eötvös 数 (Eo)

$$Eo = \frac{\Delta\rho g L}{\sigma} \quad (3.2.9)$$

で図 3-10 のように整理されている [102]。ここで $\Delta\rho$ は連続相と液滴の密度差、 L は系に特徴的な長さである。特徴的な長さとして液滴半径を採用すれば、図 3-9 の液滴の Eötvös 数は 9.8 であるので、液滴は図 3-10 の (a) のケースのように楕円型に変形して落下することが期待される。



(a) $Eo = 12$

(b) $Eo = 24$

(c) $Eo = 48$

(d) $Eo = 96$

(e) $Eo = 144$

図 3-10 Eötvös 数 (Eo) が落下する液滴の形状に及ぼす影響 [102]

このことを踏まえ、解析結果を示す。本項の最初に示されたように、ポテンシャルモデルの界面張力は粒子径に依存するので、異なる粒子径でこの液滴の落下を解析したのが図 3-11 である。粒子径 l_0 を $l_0 = 0.01 \text{ m}$ 、 0.02 m 、 0.03 m 、 0.04 m の 4 ケースに変更して解析を実施したが、 $l_0 = 0.04 \text{ m}$ のケース以外には液滴があまり落下しておらず、粒子径が小さくなるほど落下の幅は小さくなり、 $l_0 = 0.01 \text{ m}$ の最も小さい粒子径のケースでは液滴はほとんど落下していない。また、どのケースでも液滴はおおむね円形のままであり、Han と Grétar の経験則とも一致しない。

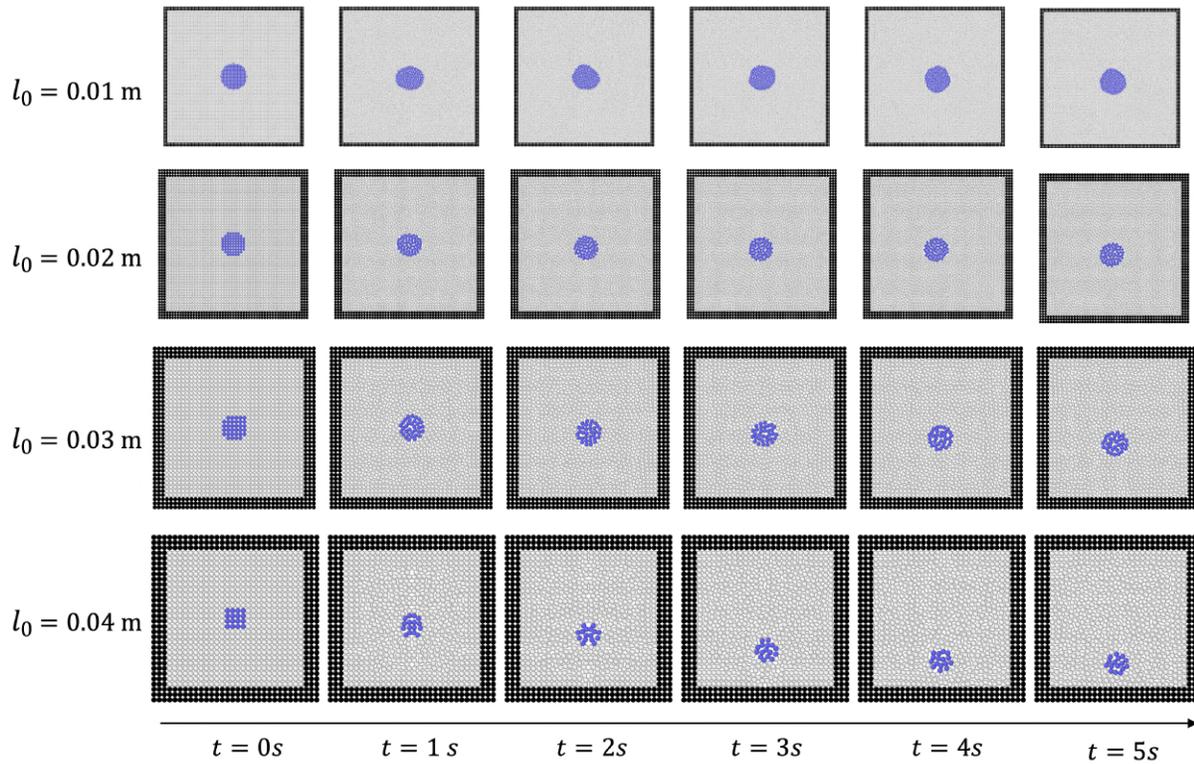


図 3-11 ポテンシャルモデルで液滴の落下を異なる粒子径で解析した結果

小さい粒子径で液滴の落下が妨げられることは次のように解釈できる。図 3-12 は図 3-11 の $l_0 = 0.01 \text{ m}$ のケースの $t = 5 \text{ s}$ のスナップショットとその一部の拡大図である。拡大図を見ると、粒子同士がランダムに分布しているというより、粒子がまるで結晶格子のように規則性を持って配列していることがわかる。さらに、この分布は時間的にほとんど変化しない。つまり、本来落下すべき液滴が落下しないのは、液滴を構成する粒子に問題があるというより、それを取り囲む連続相の粒子がまるで結晶格子のように配列し、流動するよりもエネルギー的に安定な状態に達することで、流動が阻害されてしまったため、と言える。図 3-12 のように粒子が結晶構造のように配列し動かなくなってしまうことは、界面張力が他の寄与（圧力、粘性、重力）より支配的になったことの極端な例である。

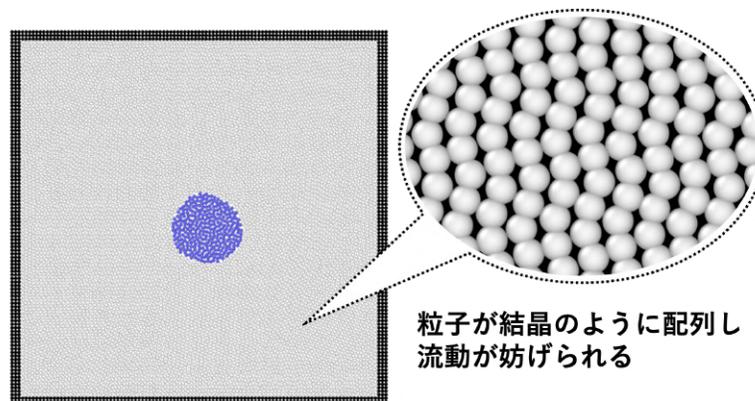


図 3-12 Zhu モデルを用いた時の粒子の配置の拡大図

Adamiらの指摘通り、自然な解析結果を得るためには粒子間力のチューニングが必要であるので

$$\mathbf{f}_i^{\text{Zhu}} \rightarrow a\mathbf{f}_i^{\text{Zhu}} \quad (3.2.10)$$

のように粒子間力にチューニング係数 a を与えて、この係数を変化させて図 3-11 の $l_0 = 0.01 \text{ m}$ のケースの解析を実施した結果を図 3-13 に示す。 a を 1、0.1、0.01 と小さくすることで界面張力が他の寄与と比べて小さくなり、粒子が結晶上に配列することもなくなり、少なくとも液滴の落下は再現することができるようになる。だが、現状では見た目が自然な解析結果になるように恣意的に決定する他ないため、モデルの定量性は失われてしまっている。

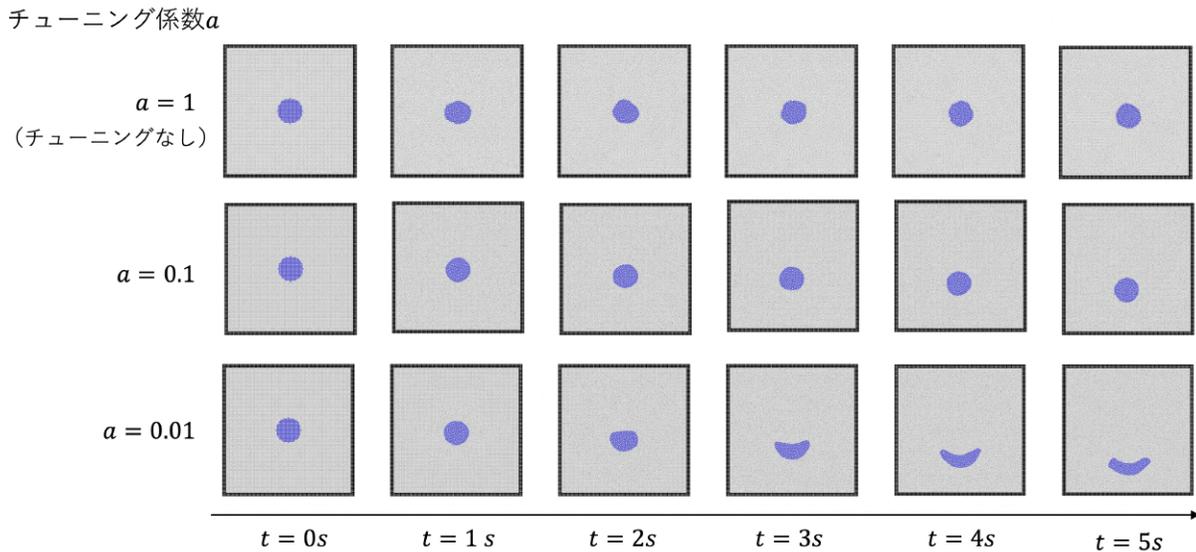


図 3-13 チューニング係数を変化させた際の液滴の落下

3.2.2 CFP モデルの着眼点と理論

CFP モデルの着眼点

ここまでに述べた従来のポテンシャルモデルの課題を改めてまとめる。

- チューニングの必要性**
 ポテンシャルモデルでは粒子径の 2 乗に反比例する粒子間力が体系の全ての液体粒子に作用することから、流動の挙動が粒子径に強く依存する。このことを回避するために恣意的に粒子間力の大きさをチューニングする必要があり、このことでモデルの定量性が失われる。
- 圧力の過大評価**
 全ての粒子ペアの間に粒子間力が作用することで粒子が凝集し、非圧縮性を保つために圧力が上昇してしまう。またこの粒子凝集は、自由表面が存在しなければ本来は流体に影響を与えるべきではない表面張力係数に依存する。
- 不自然な流動の阻害**

粒子径が特に小さい体系では粒子間力が過大になることで界面以外の粒子も強く凝集し、結晶のように配置し固定化されてしまう。このことを回避するために、小さい粒子径では上述の恣意的なチューニングが不可欠となってしまう。

これらの課題が顕在化する根本的な原因は、全ての流体粒子が粒子間力により凝集 (cohesion) することである。流体粒子の凝集を解決できれば、流体流体の凝集を補正するために圧力が上昇したり、凝集の結果粒子が結晶格子状に配列したり、それらを避けるために粒子間力をチューニングして定量性を失うことはなくなる。筆者らは、体系に自由表面がなく界面だけが存在する「界面流れ」 (interfacial flow) に限っては、粒子凝集を回避しながら界面張力を模擬できることに着想し、Cohesion-Free Potential (CFP) モデルを考案・開発した [99] [103]。CFP モデルの着眼点と理論を本項に示す (なお、CFP モデルの対象とする流れは界面張力のみを伴う界面流れなので、比較対象となるべき従来のポテンシャルモデルは、界面張力を模擬する Zhu モデルである。自由表面の表面張力のみを模擬する Kondo のモデルの課題は CFP モデルでは解決できないことを注意されたい。)

まず、Zhu モデルでの界面張力の模擬の方法を振り返る。Zhu モデルでは式 (2.1.82) に示すように、界面張力の係数 c_{ij}^{Zhu} が粒子ペアの所属する成分の組み合わせにより異なる。この際、現実の非混和液相の σ_A 、 σ_B と σ_{AB} の組み合わせであれば、同成分の粒子ペア間の c_{ij}^{Zhu} よりも異なる成分の粒子ペア間の c_{ij}^{Zhu} の方が小さくなるため、同成分の粒子ペアの方が強く凝集し、異なる粒子ペアは相対的に凝集が弱くなる。これにより、図 3-14 の左図のように、界面付近の粒子は正味、同成分の粒子が多く存在する方向に合力が作用する。Zhu モデルではこのような界面付近における粒子間力の差を利用して界面張力を模擬したのだが、その課題は界面から離れた内部粒子も粒子間力により凝集してしまうことであることは、前項で示した通りである。そこで筆者らは、図 3-14 の右図のように、内部粒子には力を与えず、それでいて界面付近の粒子のみが自身と同成分の粒子が多く存在する方向に力を受けるように粒子間力を再定義できる可能性を着想した。すなわち、粒子ペアが同成分に属している場合は力を与えず、一方で、粒子ペアが別成分に属している際には (主に) 斥力が作用するように粒子間力を定義すればよい。このような粒子間力が定義されていると、界面付近の粒子は対面する別成分の粒子から反発されて自身と同成分の粒子が多く存在する方向に力を受ける。この力の向きは、Zhu モデルの界面付近の粒子が受ける正味の力と似ており、それでいて、この粒子間力に基づいている限り内部粒子には力が全く作用しないため、粒子の凝集やそれに伴う従来のポテンシャルモデルの課題を回避できると期待できる。以下ではこの着想に基づいた CFP モデルを具体的に定式化する。

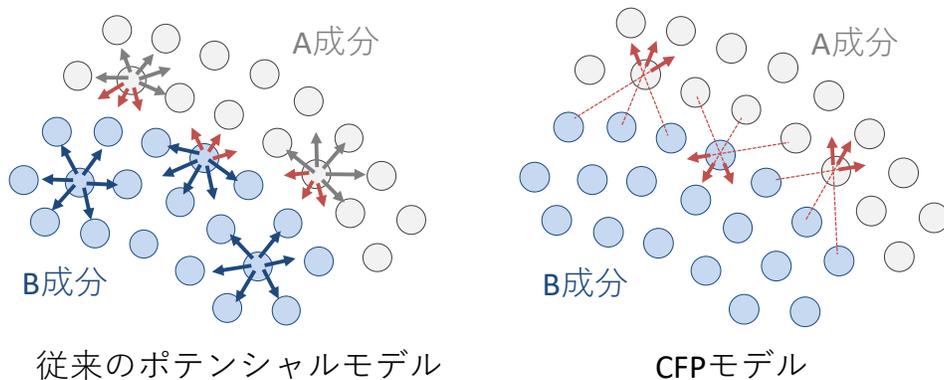


図 3-14 従来のポテンシャルモデルと CFP モデルで作用する力のイメージの対比

CFP モデルにおける界面張力の模擬

CFP モデルにおいて、粒子間力は従来のポテンシャルモデルと同様にあるポテンシャル $E_{ij}^{\text{CFP}}(r_{ij})$ の負の勾配で与える。

$$\mathbf{f}_i^{\text{CFP}} = \frac{1}{l_0^3} \sum_{j \neq i} [-\nabla E_{ij}^{\text{CFP}}(r_{ij})] \quad (3.2.11)$$

一方で、ポテンシャルの具体的な形は従来と異なり、粒子ペアが異成分に属していない（かつ距離が影響半径内）場合にのみ 0 でないポテンシャルを返すように定義する。さらに、そのポテンシャルが生み出す粒子間力は Kondo や Zhu のモデルの凝集と逆の、異成分粒子間の反発を誘起するものである必要がある。そこで筆者らは、CFP モデルで採用するポテンシャルとして、Kondo らのポテンシャルの正負を反転させた関数を採用することとした。すなわち、

$$E_{ij}^{\text{CFP}}(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} \frac{C_{AB}^{\text{CFP}}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 & (\text{particle } i \text{ and } j \text{ belong to different phases and } r \leq r_e) \\ 0 & (\text{else}) \end{cases} \quad (3.2.12)$$

と与える。ここで C_{AB}^{CFP} は C_A^{Kondo} や C_{AB}^{Zhu} と同様にポテンシャルの係数で、後述の方法で決定される正の値である。図 3-15 に示す CFP モデルのポテンシャルの形は、図 2-9 の Kondo モデルのポテンシャルの正負を逆転した形になっていることが確認できる。

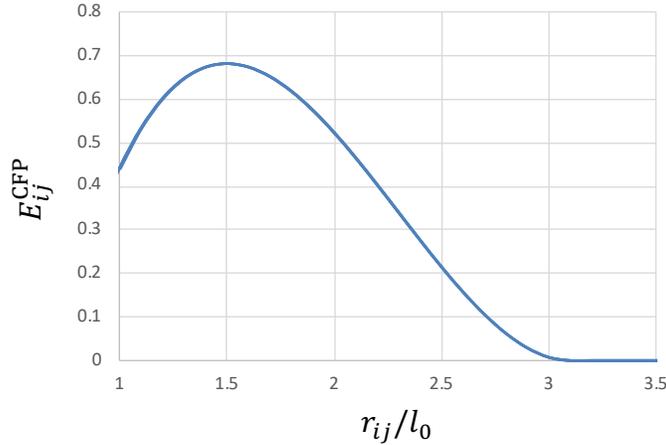


図 3-15 CFP モデルのポテンシャルの形 ($C_{AB}^{\text{CFP}} = 1$ 、 $r_b = 1.5l_0$ を仮定)

CFP モデルにおいて、Kondo モデルのポテンシャルの符号を逆転したポテンシャルを用いたことには 2 つの理由がある。一つ目には、Kondo モデルのポテンシャルが元々持っている利点を継承し活用するためである。Kondo モデルのポテンシャルは空間的に滑らかで微分可能である上に、導関数が

$$\nabla \left[\frac{C_{AB}^{\text{CFP}}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 \right] = C_{AB}^{\text{CFP}} (r_{ij} - r_b) (r_{ij} - r_e) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (3.2.13)$$

という単純な多項式になるためにプログラムが容易になる。二つ目の理由は、異成分粒子の過剰な反発の抑制である。谷型の Kondo モデルのポテンシャルに対して、CFP モデルのポテンシャルは山形であるが、いずれも導関数が 0 になる、すなわち粒子間力が作用しない平衡点が $r = r_b$ 存在する。

筆者らは数種類のポテンシャルの形状を試みたが、平衡点を持たずに全ての位置で斥力を与えるようなポテンシャルでは、隣接する異成分粒子間の斥力が強くなりすぎることによって異成分に属する粒子が離れてしまい、図 3-16 のように界面に粒子が存在しないギャップができてしまうことがわかった。そして、平衡点を持たないポテンシャルでは、このギャップがおそらく原因となり、界面張力の模擬も成功しなかった。一方、Kondo モデルのポテンシャルの符号を逆転したポテンシャルでは、そのようなギャップは発生しない。なぜならば、このポテンシャルでは、 r_b をうまく調整すれば隣接する異成分粒子に作用する粒子間引力と、それよりさらに奥にある異成分粒子からの斥力とがちょうど打ち消し合うように作用することで、図 3-17 に示すように隣接する粒子同士には斥力や引力はほぼ働かない状況を作れるからである。（したがって、図 3-14 で隣接する異成分同士に斥力が働いているのは厳密には実態と異なる。同図は、内部粒子には力が作用しないことを示すイメージ図であることを留意されたい）

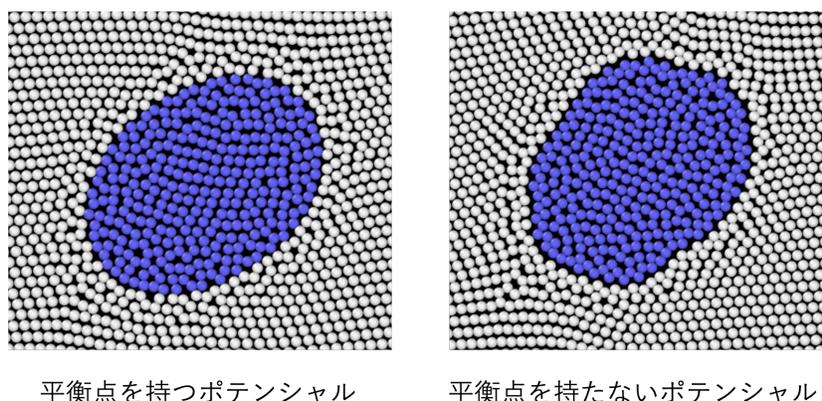


図 3-16 平衡点をもつポテンシャルと持たないポテンシャルを用いた際の界面付近の粒子分布の対比

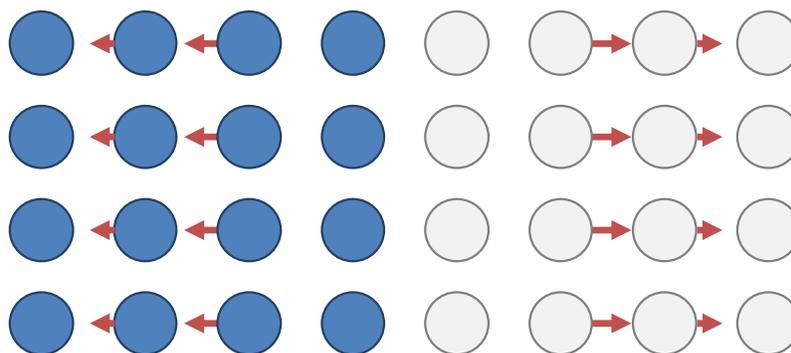


図 3-17 界面付近の粒子に作用する正味の力の分布

次に、CFP モデルで適用する平衡点の距離 r_b に関してだが、これは、図 3-17 のように界面で隣接する異成分粒子同士に正味の力がほぼ働かないように決定した。その距離は、Kondo モデルで一般的に適用される [80] と同じ、 $r_b = 1.5l_0$ である。実際、 r_b を変化させて感度解析をすると、図 3-18 に示すように、 r_b が小さすぎると平衡点が存在しないポテンシャルと同様に界面にギャップができてしまい、逆に r_b が大きすぎると異成分粒子同士が界面付近で交わり合ってしまう。図 3-18 の中央の図で示すように、 $r_b = 1.5l_0$ のケースが最も明瞭な界面を示しているため、本研究でも経験的に $r_b = 1.5l_0$ を利用することにした。

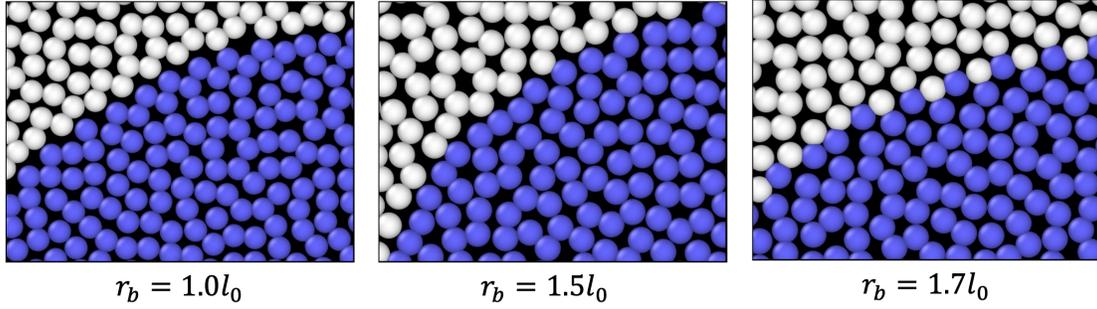


図 3-18 平衡点距離が界面付近の粒子分布に与える感度の解析

CFP モデルのポテンシャル係数の決定方法

続いて、ポテンシャル係数 C_{AB}^{CFP} の決定方法を示す。CFP モデルは自由表面がなく界面のみが存在する界面流れに適用するために開発するので、 C_{AB}^{CFP} にそれぞれの成分の自由表面に関する情報（表面張力係数）が含まれるのは不合理で、異成分間の界面の情報（界面張力係数）だけから決定されるのが望ましい。しかし、その場合、Kondo らや Zhu らの利用した図 2-10 や図 2-13 のような思考実験は直接的に流用できない。なぜなら、これらの思考実験ではいずれも、仮想的に流体を二分することで新たな自由表面を生み出すための仕事を評価しているため、本質的に表面張力係数が関係するためである。そこで筆者らは、これらの思考実験を参考にしつつ、異なるアプローチで C_{AB}^{CFP} を決定する、以下の方法を考案した。

図 3-19 は CFP モデルにおけるポテンシャル係数 C_{AB}^{CFP} の決定方法を示した図である。Kondo らや Zhu らの利用した図 2-10 や図 2-13 の思考実験と似ているが、図 3-19 は、左図にも右図にも、自由表面が現れてないことに注意されたい。同図の左図では、A 成分に属する粒子グループ a_1 と a_2 が対面している。 a_1 と a_2 は同じ成分であるため、界面は存在しない。次に粒子グループ a_2 の位置は固定したまま、粒子グループ a_1 が離れていき、代わりに粒子グループ b_1 が遠方（新たに設定される界面から影響半径以上離れた場所）から接近し、最終的に同図の右図のように配置された、という仮想的な粒子の移動を考える。同図の右図の状況では、粒子グループ a_2 と粒子グループ b_1 の間に異成分界面 S_{ab} が存在する。このような粒子配置の変化に伴い、粒子グループ b_1 は粒子グループ a_2 から受ける（主に）斥力に逆らって接近する必要がある。その時の仕事は、Kondo や Zhu らの思考実験において粒子グループ同士を引力に逆らって引き離すのに必要であった仕事と同じ表式である

$$\sum_{i \in a_2, j \in b_1} \frac{C_{AB}^{CFP}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 \quad (3.2.14)$$

で与えられる。そして、図 3-19 の粒子配置の変化の前後で新たに形成された界面エネルギーは $l_0^2 \sigma_{AB}$ である。したがって、エネルギー保存則より

$$\sum_{i \in a_2, j \in b_1} \frac{C_{AB}^{CFP}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 = l_0^2 \sigma_{AB} \quad (3.2.15)$$

が満たされる。式 (3.2.14) の C_{AB}^{CFP} を除いた部分は、粒子の配置のパターンだけに依存する、式 (2.1.72) と全く同じ量の因子なので、同じ文字 G

$$G = \sum_{i \in a_2, j \in b_1} \frac{1}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2}r_b + \frac{1}{2}r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 \quad (3.2.16)$$

で表せば、結局、CFP モデルのポテンシャル係数 C_{AB}^{CFP} は

$$C_{AB}^{CFP} = \frac{l_0^2 \sigma_{AB}}{G} \quad (3.2.17)$$

で与えられることがわかる。なお、図 3-19 の粒子配置の変化の間に粒子グループが辿った移動経路はポテンシャル係数の導出には影響を与えない。なぜなら、ポテンシャルの導関数で与えられる粒子間力は、その定義から保存力であり、保存力中で粒子グループを移動させるときに必要なエネルギーは、その途中の経路には依存せず、変化の前と後の状態だけに依存するためである（仕事の原理）。

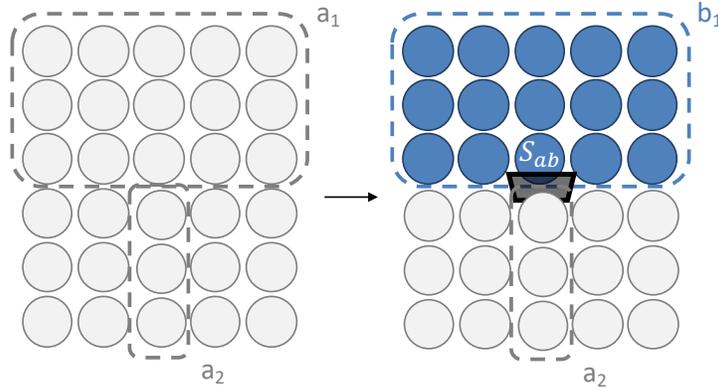


図 3-19 CFP モデルにおけるポテンシャル係数 C_{AB}^{CFP} の決定方法

CFP モデルの界面壁面濡れの模擬

最後に、Zhu モデルでも模擬された、ある成分が別の成分中で壁面を濡らす界面壁面濡れ（図 3-20）を CFP モデルの枠組みでも模擬する方法 [103] を示す。A 成分と B 成分の粒子はそれぞれ壁面 W の粒子と粒子間力により相互作用していると考え、その時のポテンシャルは式 (3.2.12) と同様だが、A 成分と壁面 W の間には係数 C_{AW}^{CFP} を、B 成分と壁面 W の間には係数 C_{BW}^{CFP} を仮定する。図 3-21 の左図のように壁 W の粒子と A 成分の粒子の界面 S_{aw} が存在する仮想的な粒子配置を考え、B 成分が接近し A 成分を置換することで、同図の右図のように新たな界面 S_{bw} が形成されるとする。遠方にあった B 成分の粒子を壁面からの斥力に逆らいながら移動するのに必要な仕事は

$$\sum_{i \in W, j \in b_1} \frac{C_{BW}^{CFP}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2} r_b + \frac{1}{2} r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 \quad (3.2.18)$$

で、この仕事は粒子配置の変化に伴い上昇した界面エネルギーに等しいはずなので、

$$\sum_{i \in W, j \in b_1} \frac{C_{BW}^{CFP}}{3} \left(r_{ij} - \frac{3}{2} r_b + \frac{1}{2} r_e \right) (r_{ij} - r_e)^2 = (\sigma_{BW} - \sigma_{AW}) l_0^2 \quad (3.2.19)$$

が満たされる。式 (3.2.16) を用いれば

$$C_{BW}^{CFP} = \frac{l_0^2 (\sigma_{BW} - \sigma_{AW})}{G} \quad (3.2.20)$$

がである。同様に、図 3-21 の A 成分と B 成分を入れ替えた場合を考えれば、

$$C_{AW}^{CFP} = \frac{l_0^2 (\sigma_{AW} - \sigma_{BW})}{G} \quad (3.2.21)$$

である。ただし、これらの式に現れる壁と液体との間の界面張力、 σ_{AW} や σ_{BW} は一般的には物性値としては与えられないので、これらをより一般的な物性値である接触角により表すため、式 (3.2.17)、式 (3.2.20) と式 (3.2.21) に接触角に関する Young の法則

$$\sigma_{AW} - \sigma_{BW} - \sigma_{AB} \cos \theta_{AB} = 0 \quad (3.2.22)$$

を組み合わせ、

$$C_{AW}^{CFP} = C_{AB}^{CFP} \cos \theta_{AB} \quad (3.2.23)$$

$$C_{BW}^{CFP} = -C_{AB}^{CFP} \cos \theta_{AB} \quad (3.2.24)$$

を得る。つまり粒子ペアが液体と壁面に所属している場合、既存の C_{AB}^{CFP} と与えられる接触角 θ_{AB} を用いて式(3.2.23)と式(3.2.24)のようにポテンシャルの係数を決定すれば、与えた接触角が実現される

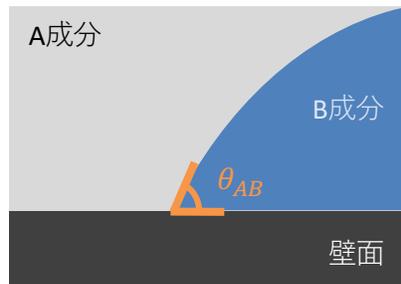


図 3-20 2 成分での壁面の濡れ

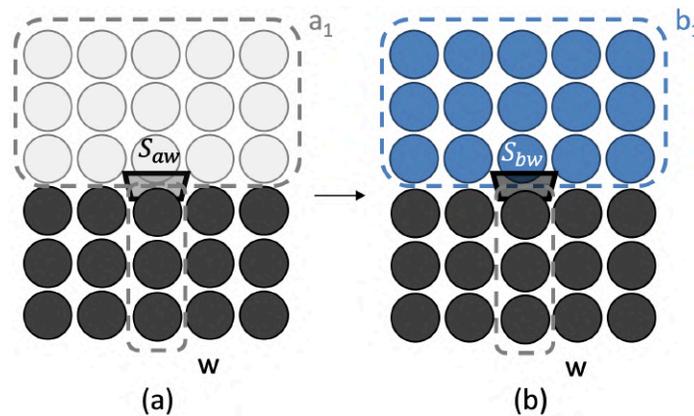


図 3-21 CFP モデルにおける流体と壁面との粒子間ポテンシャル係数の決定方法

3.2.3 CFP モデルの検証

Laplace 圧力

CFP モデルにおいては従来の界面張力のポテンシャルモデルで過大評価していた圧力を正確に評価できることを示すため、第 3.2.1 項の図 3-5 の体系と表 3-1 の解析条件を用いて Laplace 圧力を再度評価した。表 3-5 は $R = 30 \text{ cm}$ の時の Laplace 圧力の CFP モデルと Zhu モデルによる評価を示しているが、理論値の 400 倍近い過大評価をしている Zhu モデルと比べて、CFP モデルでは理論値と +10% 以内の誤差で収まっている。

表 3-5 $R = 30 \text{ cm}$ の時の Laplace 圧力の CFP モデルと Zhu モデルによる評価

	理論値	Zhu モデル	CFP モデル
$\Delta P \text{ (Pa)}$	3.33	1290.97	3.55

別の液滴半径 R を用いて同じく Laplace 圧力を評価したのが図 3-22 である。この図を見ても、CFP モデルは Laplace 圧力を正確に模擬できていることがわかる。さらに、Zhu モデルでは表 3-3 のように圧力の過大評価の度合いが、理論的には Laplace 圧力には影響しない表面張力係数に依存していたが、CFP モデルではそもそも表面張力係数がモデル内に現れないため、このような依存は発生しない。

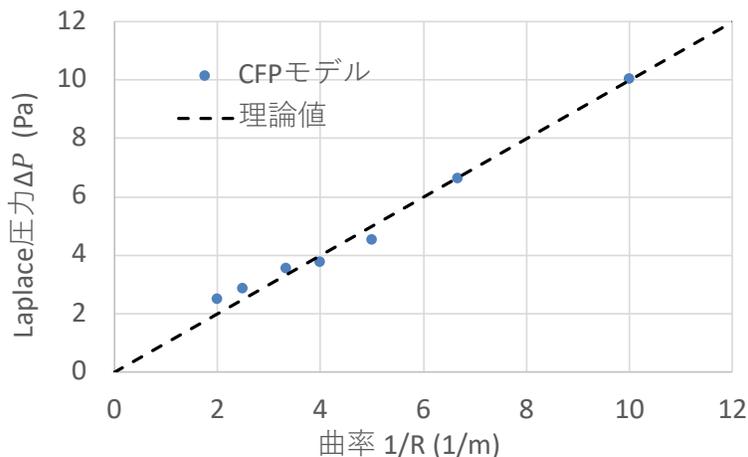


図 3-22 異なる液滴半径で CFP モデルにより評価された Laplace 圧力

流動阻害の解決

次に、CFP モデルでは内部粒子の凝集が回避されることで流動が阻害されなくなることを確認するため、図 3-9 の体系と表 3-4 の物性値を用いて再度液滴の落下の解析を実施した。図 3-23 は $l_0 = 0.01$ m を用いて従来の Zhu モデルと CFP モデルとで液滴の落下の解析を比較している。解析結果から、CFP モデルでは液滴が連続相中を自然に落下していることがわかる。さらに、Zhu モデルを用いると図 3-12 のように粒子がまるで結晶格子上に固定化されていたのに対し、CFP モデルを用いると図 3-24 のように粒子はランダムに分布しており、これらの位置は絶えず変化している。このことから、CFP モデルを用いれば流動の阻害は発生しないことがわかる。

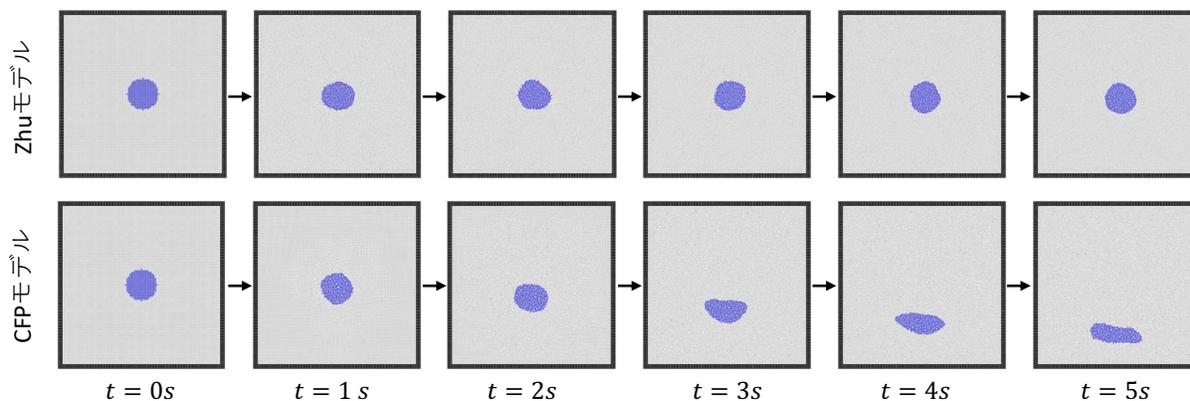


図 3-23 CFP モデルによる流動阻害の解決

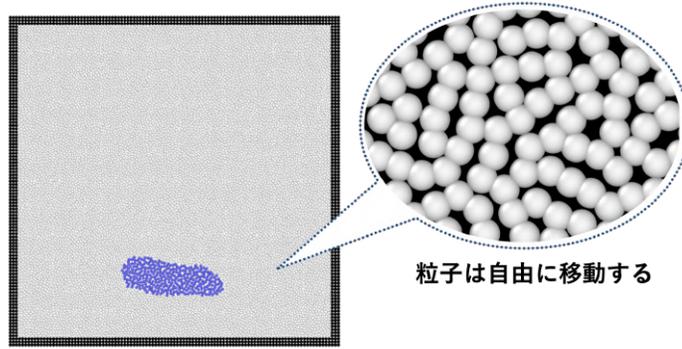


図 3-24 CFP モデルを用いた時の粒子の配置の拡大図

また、落下中の液滴は概ね楕円形であり、このことは Eötvös 数に対する落下液滴の形状を整理した Han と Grétar の経験則とも一致する (図 3-10) [102]。

Taylor の剪断流における液滴変形

液滴の落下を CFP モデルで模擬できることは、言い換えれば、N-S 方程式の界面張力の項と重力の項との相対関係を正しく模擬できていることを示している。そこで次に、CFP モデルは界面張力の項と粘性力の項との相対関係をも正しく模擬できるかを検証する。図 3-25 に示すのは、無限に長い壁面の間に連続相があり、対面する壁面の中間 (壁面からの距離 h) に連続相と非混和な液滴を配置した体系である。この体系で、2つの無限長壁面がそれぞれ逆方向に速さ u_w でスライドすると、粘性により連続相の中に剪断方向の応力が作用し、連続相中に剪断流れ (shear flow) が発生する。液滴はこの剪断流れによる剪断応力と界面張力とのつりあいで円形からの変形の程度が決定される。同図のオレンジの破線で示しているように、変形後の液滴の短径を B 、長径を L とすると、

$$\frac{L - B}{L + B} \quad (3.2.25)$$

で定義される変形割合 (deformation ratio) は連続相と液滴それぞれの粘性 μ_f と μ_d 、液滴の初期半径 r_0 、連続相と液滴の間の界面張力係数 σ を用いて

$$\frac{L - B}{L + B} = \frac{19\mu_d + 16\mu_f}{16\mu_d + 16\mu_f} Ca \quad (3.2.26)$$

$$Ca = \frac{u_w r_0 \mu_f}{h \sigma} \quad (3.2.27)$$

で表せること Taylor により導かれている [104]。式 (3.2.27) は capillary 数で、界面張力と粘性の間の比を表す無次元数である。本研究はこの Taylor の剪断流を用いて、CFP モデルの界面張力が粘性との相対関係を正しく模擬できることを示す。

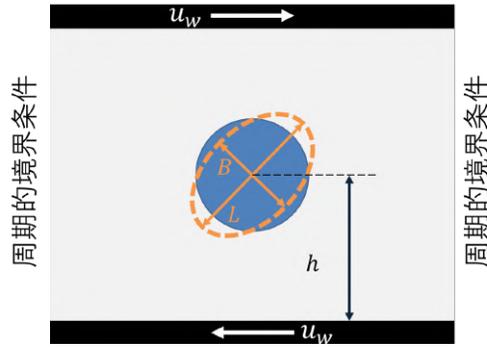


図 3-25 Taylor の剪断流

表 3-6 Taylor の剪断流の解析で用いる物性値

	Continuous	Droplet
Density (kg/m ³)	1000	1000
Viscosity (Pa · s)	1.35	0.675
IT coefficient (N/m)	0.0017	

図 3-26 は本ベンチマーク解析で基づく解析体系である。Taylor の剪断流は原理的には無限長の壁面に挟まれているが、本解析では液滴半径の 30 倍の長さの解析体系を利用することで、左右両端の壁の影響は無視できるようにした。また、Taylor の剪断流は、無限長の壁面が移動すると仮定されているが、MPS 法で壁面を実際に移動させてしまうと解析が複雑になるため、本解析では図 3-27 に示すように、中央の 0.32 m に速度を数値的に与えることでこのことを模擬した。(ここで、壁面に数値的に速度を与えるとは、連続相は壁面が実際に移動しているのと同様の粘性相互作用により剪断応力を受けるが、壁面の位置は実際には移動せず空間に固定されている、という操作を指す)

○ : 連続相 ● : 液滴 ● : 壁

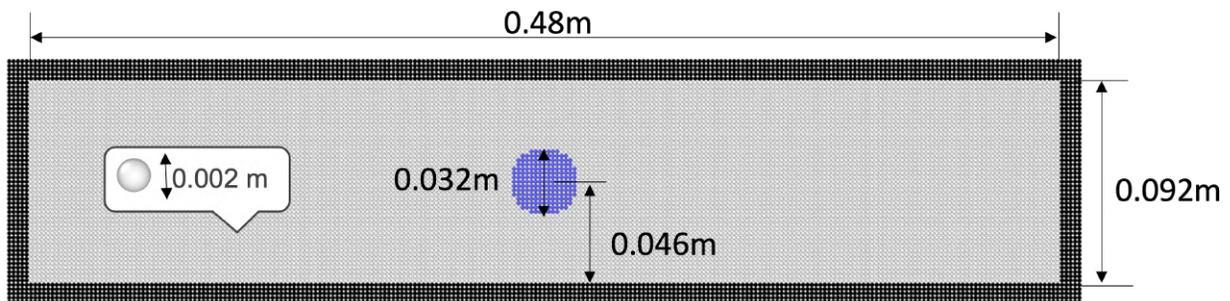


図 3-26 Taylor の剪断流の解析体系

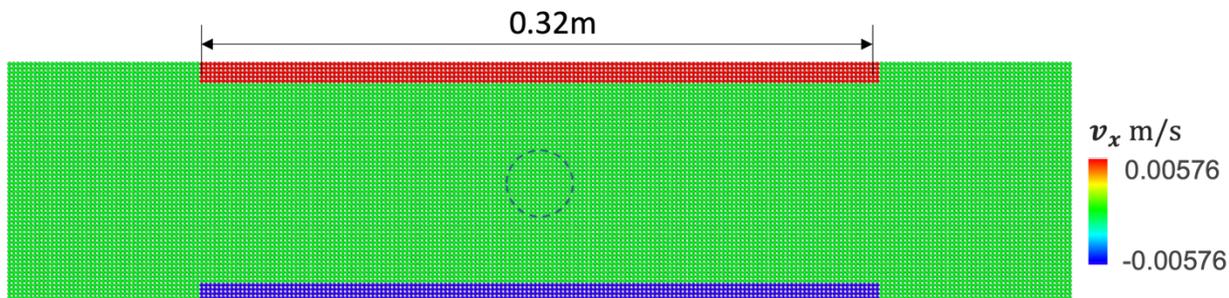


図 3-27 Taylor の剪断流の解析で仮定する壁面の速度（中央の破線円は界面）

図 3-28 と図 3-29 は、それぞれ解析を開始して $t = 100 \text{ s}$ における解析体系とその速度分布である。液滴は壁面による剪断応力に誘起された剪断流により楕円形に変形していることがわかる。

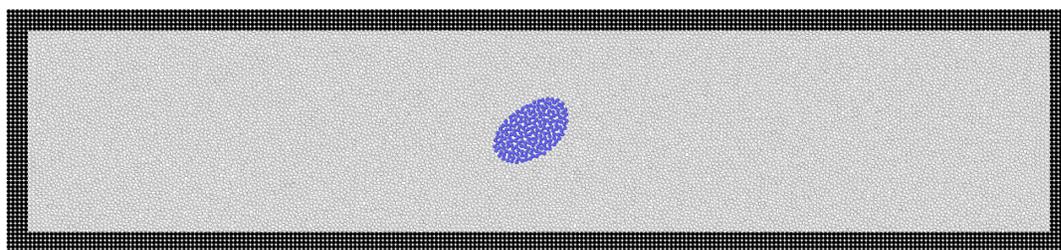


図 3-28 $t = 100 \text{ s}$ における解析体系

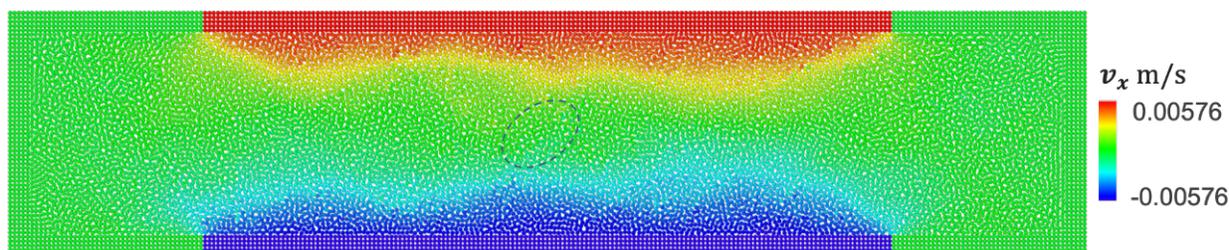


図 3-29 $t = 100 \text{ s}$ における速度場

この液滴の変形割合を時間に対して示したのが図 3-30 である。CFP モデルと併記している Zhu モデルの解析ケースでは別途表面張力係数が必要なので、 $\sigma_{\text{continuous}} = 0.1 \text{ N/m}$, $\sigma_{\text{droplet}} = 0.2 \text{ N/m}$ と仮定した。これらの値は式 (3.2.26) と式 (3.2.27) には現れないため、本来は変形割合に影響は与えないが、第 3.2.1 項で示したように、Zhu モデルでは粒子径や表面張力係数によっては全ての粒子に強い凝集力が作用してしまうため、実効的に界面張力が強く働き、変形割合は理論値より大きく下回っている。一方で、CFP モデルの変形割合は、 $t = 10 \text{ s}$ 程度までオーバーシュートした後、振動をしながらではあるが理論値付近の値を示している。すなわち CFP モデルは、Zhu モデルのようにチューニングをしなくても、変形割合の理論値の概ね $\pm 30\%$ 程度を再現できることがわかった。この意味で CFP モデルは、Zhu モデルよりは Taylor の剪断流を、すなわち界面張力が粘性との相対関係を模擬できることがわかった。

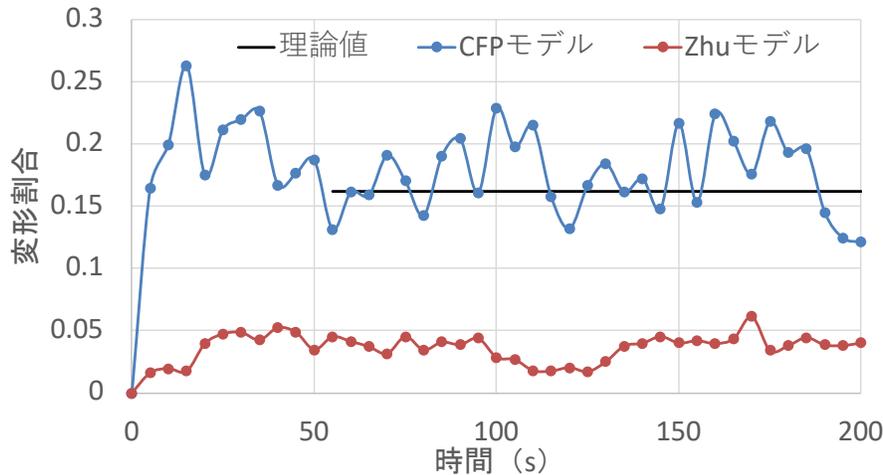


図 3-30 CFP モデルと Zhu モデルによる Taylor 剪断流の解析結果

しかし、図 3-30 の結果は、図 3-22 の Laplace 圧力の結果と比べると、理論値の再現精度が低い。このことの原因は、解明しきれておらず、この再現精度の改善は今後の課題の一つである。しかし、明示的に求めた曲面（曲線）形状の曲率からマクロな流体要素に働く界面張力を高精度に評価することでこのようなシンプルなベンチマーク解析に特化している CSF モデルの評価結果（[90] の Fig.17）であっても、変形割合には $\pm 10\%$ から $\pm 15\%$ 程度の誤差が生じている。したがって、この解析では、界面の形状を明示的に求めないポテンシャルモデルであっても、CFP モデル（ポテンシャルモデルの一種）を利用すれば、ある程度は現実的な解析が可能であることを示すことができた。

界面壁面濡れの接触角

次に、第 3.2.2 項で開発した、ある成分が別の成分中で壁面を濡らす界面壁面濡れのモデルの検証を実施する。図 3-31 の解析体系と表 3-7 の物性値を仮定し、界面壁面濡れのモデルが実装された CFP モデルを適用し、無重力を仮定し解析を実施した。初期には直角に壁面を濡らしている半円状の液滴は、計算が開始すると壁面上で変形し、接触角を変化させる。連続相と液滴の間の界面が壁面と交差する接触角 θ は 0° 、 30° 、 60° 、 90° 、 120° 、 150° 、 180° の 7 通りで与えた。（Zhu モデルでは表面張力係数 σ_A 、 σ_B と界面張力 σ_{AB} 、及びそれぞれの成分の真空での接触角 θ_A 、 θ_B の 5 つの値が定まっているときには連続相と液滴の間の界面が壁面と交差する接触角 θ も確定するため、Zhu モデルでは θ は入力値ではなく、結果の一部である。一方、CFP モデルでは、表面張力係数 σ_A 、 σ_B やそれぞれの成分の真空での接触角 θ_A 、 θ_B はモデルに現れず、異性分界面間に界面張力 σ_{AB} を与えるのみであるので、界面と壁面とが交差する接触角を模擬したい場合は、ユーザーが新たに入力する必要があることに注意されたい）。解析は、それぞれの接触角のケースで液滴の変形が収束し定常状態に落ち着くまで継続された。

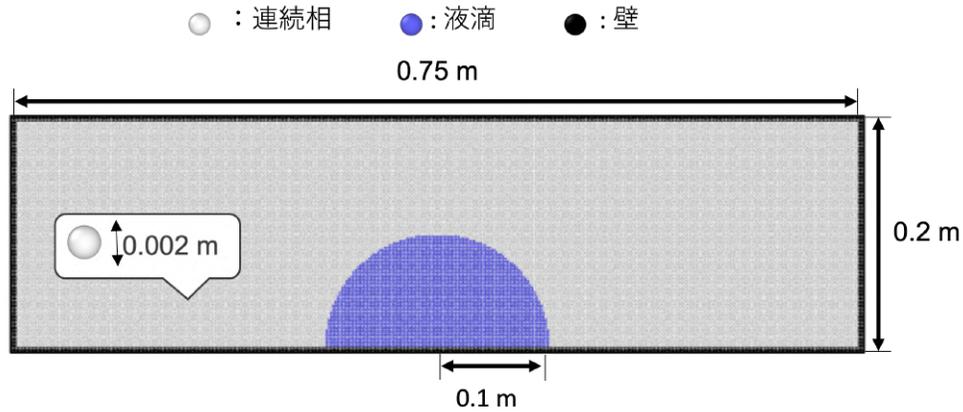


図 3-31 界面壁面濡れの解析体系

表 3-7 界面壁面濡れの解析の物性値

	連続相	液滴
密度(kg/m ³)	1000	1000
粘性 (Pa · s)	0.1	0.1
界面張力係数(N/m)	0.001	

図 3-32 には 7 つの接触角の入力値に対する定常状態の液滴の形状と、その時の粒子配置から 5°刻みで測定された接触角が示されている。入力値と測定値の間の誤差は限定的であり、CFP モデルは定量的に界面壁面濡れの接触角を再現できることが検証された。なお、 $\theta = 0^\circ$ のケースでは液滴は壁面上を拡大し続け左右両端の壁面に到達してしまっているため接触角は計測できていないが、液滴が際限なく薄く広がるという $\theta = 0^\circ$ のケースの理論解の傾向を示している解析結果であると言える。ところで、このモデルの検証では、液滴はバルクとしては移動せず、ほぼ解析体系中央から移動しないような条件を仮定した。重力の影響等により液滴がバルクとして移動するような状況 [105]での接触角の再現の可能性については本モデルでは検証できておらず、今後の課題である。

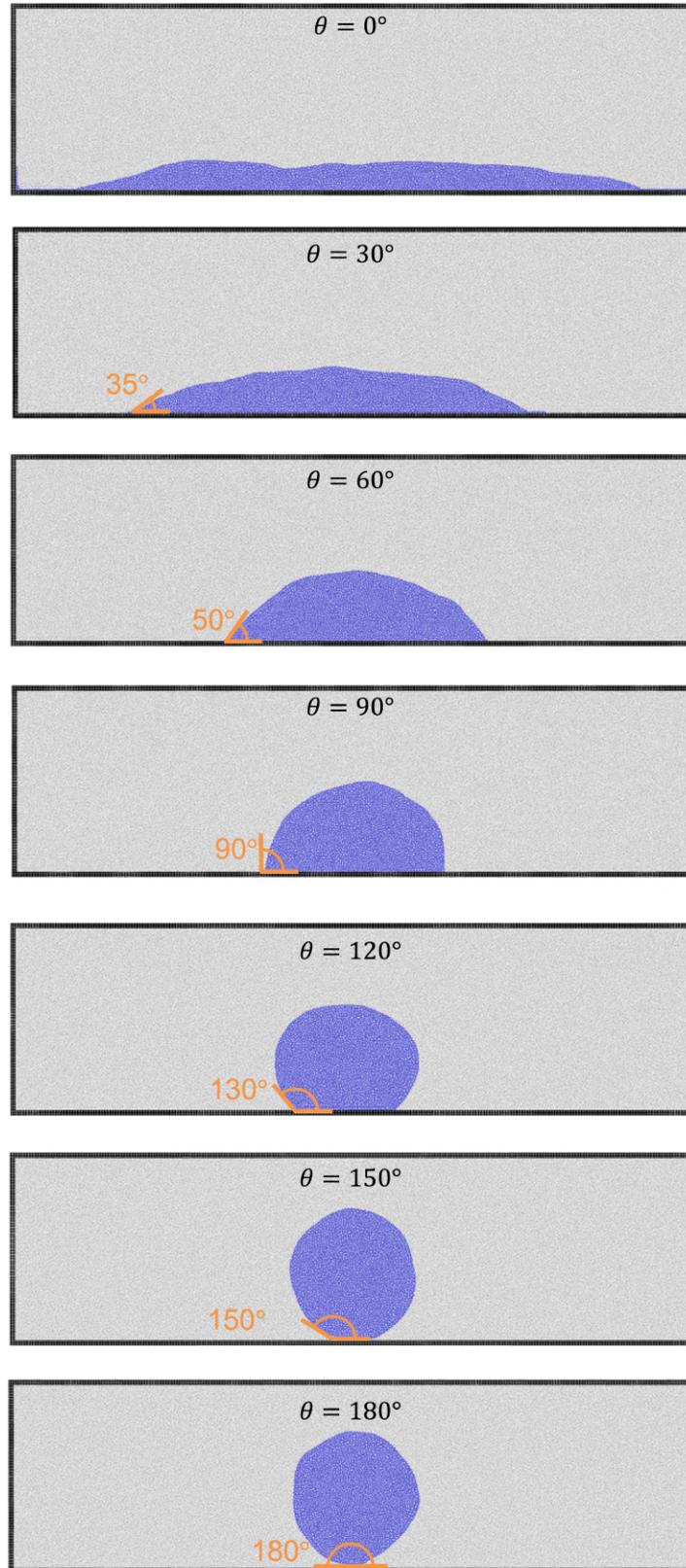


図 3-32 界面壁面濡れの異なる接触角での解析結果

密度成層化実験の再現

最後に、CFPモデルが現実の3次元の実験の結果を再現できるかを確かめるため、Liらによる非混和2成分の成層化実験[106]をCFPモデルにより解析する。同実験は、青色の色素により着色された塩水がそれより低密度のシリコンオイルに液面上に高さから流し込まれる実験で、体系は図3-33の(a)で示される[106]。MPS法の解析では、同実験を実寸大で模擬した図3-33(b)の解析体系を用いた。この際、解析における塩水の流入境界の高さは、同研究[106]中のMPS法解析と同様に、実験におけるそれよりも0.020 m (2 cm) 低く設定してある。この理由は、MPS法では粒子の流入境界において粒子がゼロより大きい有限の速度を持っている必要があるためであり、解析では0.020 m (2 cm) 落下した際に落下する塩水が持っている速度を力学的エネルギー保存則から求め、鉛直下向きに0.63 m/sの速度を与えて解析を実施している。また、解析で利用する物性値は[106][107]を参考に

表 3-8 のように与えた。また、シリコンオイルと塩水との界面とガラス壁との間の接触角は暫定的に 90° で与えた。

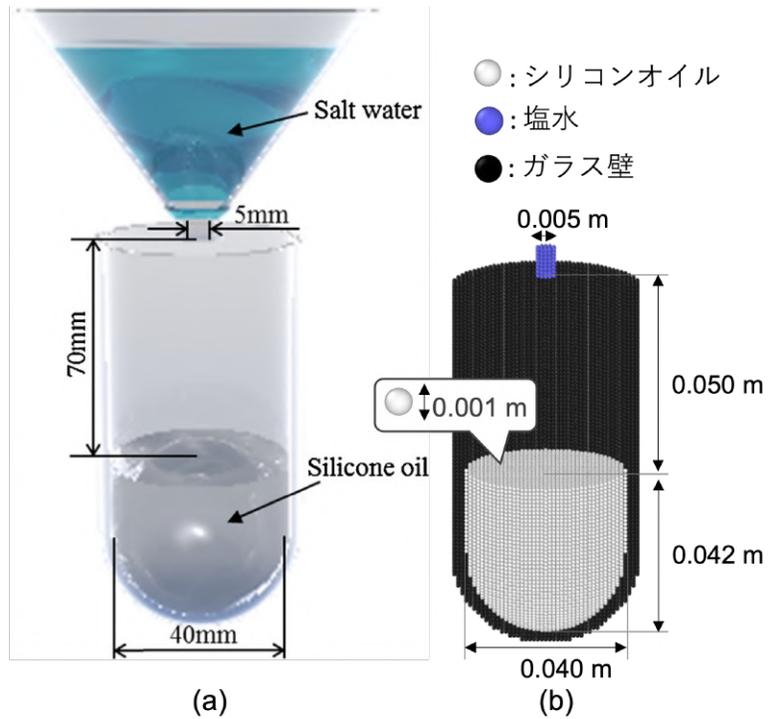


図 3-33 (a) 成層化実験の実験体系 [106] ; (b) 成層化実験の解析体系 (手前のガラス壁は可視化していない)

表 3-8 成層化実験の解析の物性値 [106]

	シリコンオイル	塩水
密度 (kg/m ³)	971	1075
粘性 (Pa·s)	0.194	0.00126
総質量 (kg)	0.043	0.056
流量 (kg/s)	-	0.011
界面張力係数 (N/m)	0.020 [108]	0.065 [109] [110]
界面張力係数 (N/m)	0.024 [107]	

図 3-34 は 5 秒間の実験の結果と、CFP モデルに基づく MPS 法、Zhu モデルに基づく MPS 法、及び界面張力モデルを伴わない MPS 法の 3 種類の解析結果を、手前のガラス壁を表示せずに並べて示している。まず、最下段の、界面張力を考慮しない解析の結果が参考のため示されているが、この結果では塩水がシリコンオイル中で分散しており、実験結果とは定性的に異なる状況が再現されている。一方、Zhu モデルの解析結果は、界面張力を考慮しない解析結果と比べると、実験結果をよく再現している。しかし、実験結果を注視すると、塩水は流入の勢いにより跳ねて分散し、その一部がガラス壁上に付着している様子が見てとれるのに対して、Zhu モデルだと両成分は明瞭な界面により分け隔てられている。これは、第 3.2.1 項で示した理由により見た目の界面張力が強く作用してしまっているためである。それに対して CFP モデルの解析結果では、界面張力を考慮しない解析結果と比べれば明確な界面が形成されているが、Zhu モデルと比べるとその界面は乱れており、実験における塩水界面の乱れを定性的に再現できている。

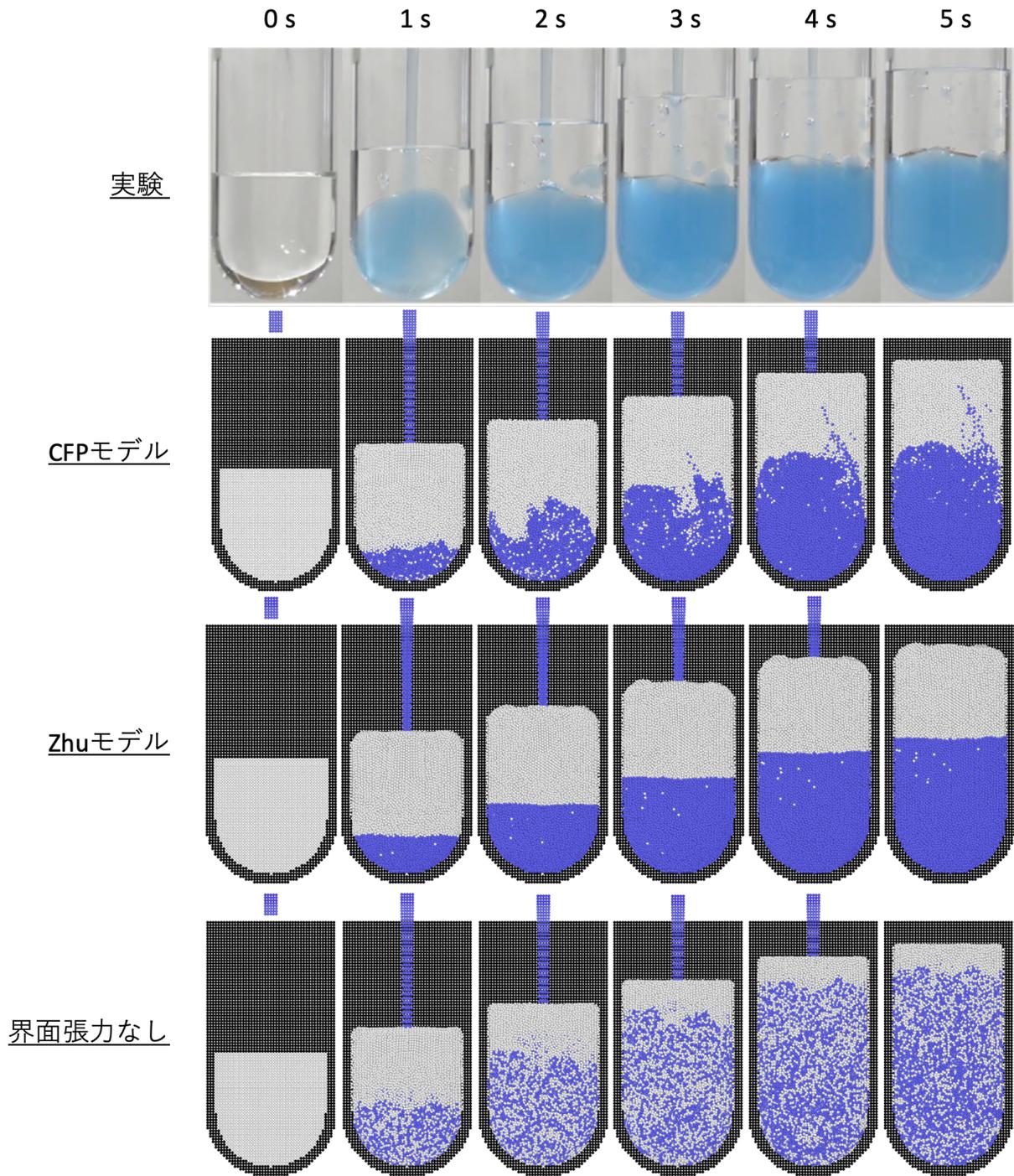


図 3-34 実験と解析による成層化実験の模擬

なお、これは Li らの実験により計測されたのではないが、重力のみが作用していて平衡状態にある液柱の軸方向の圧力は静水圧分布

$$P(h) = \int_h^H \rho(z)g dz \quad (3.2.28)$$

にあることが理論的に知られている [111]ので、この成層化実験を模擬した解析結果の圧力分布と静水圧との比較を行うこととした。ここで、 h は試験管底部から着目している面までの高さであり、 H は底部から液面の高さである。平衡状態を得るため、塩水の流入が終わって1秒以上経過した $t=6\text{ s}$ のタイミングの解析結果の圧力分布図 3-35 を利用した。そして、3次元の圧力分布を各高さの水平面上で平均して示しているのが図3-36である。同図より、Zhu モデルは Laplace 圧力と同様に静水圧も同じメカニズムで過大評価していることが確認できる。一方、CFP モデルの軸方向圧力は、静水圧の理論値：式 (3.2.28) とほぼ完全に一致していることがわかる。

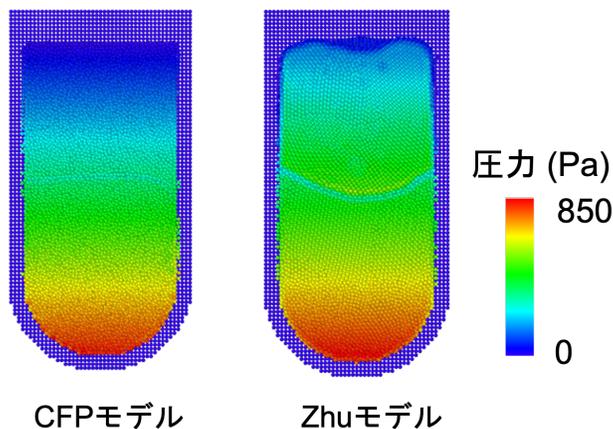


図 3-35 CFP モデルと Zhu モデルの解析結果の $t=6\text{ s}$ における圧力分布

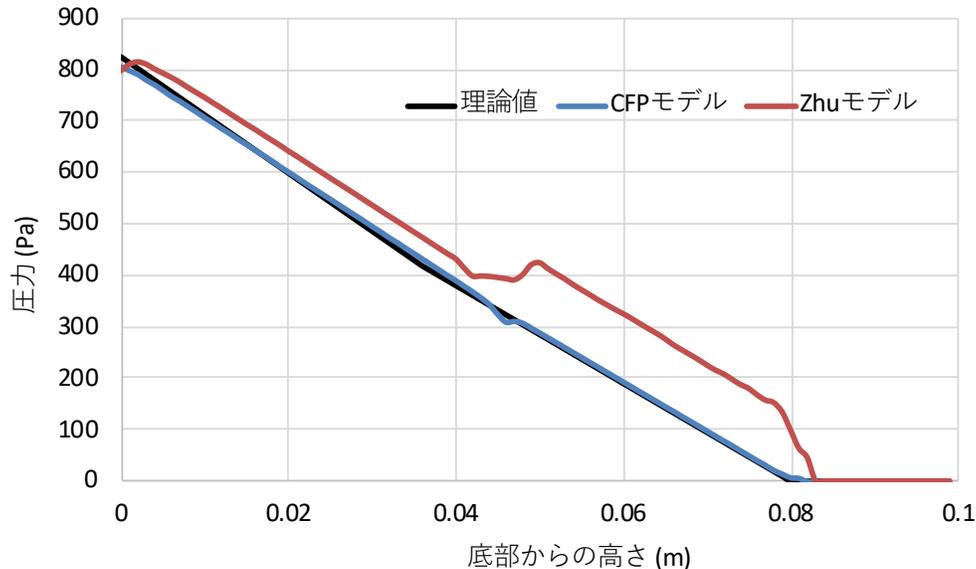


図 3-36 CFP モデルと Zhu モデルによる成層化実験の解析の軸方向圧力と静水圧の比較

ただし、図 3-36 の CFP モデルの圧力分布において、界面（高さ $0.04 - 0.05\text{ m}$ ）付近で少し圧力が過小評価されているのは、次の理由によると考えられる。図 3-37 は、図 3-17 と同様に界面付近の粒子に作用する正味の力の分布のイメージを示している。CFP モデルでは、厳密には、界面において異成分粒子と隣接する粒子同士にはほとんど正味の力が作用しないように粒子間ポテンシャルが定義されている。すると、図 3-37 の赤破線の領域は粒子が疎となるため、PND を保存するために

界面張力項の計算に続く圧力計算においてこの部分の圧力が下がる。このことは、粒子間引力により凝集した粒子を引き離すために圧力が数値的に増大する、という Zhu モデルの圧力過大評価のメカニズム（第 3.2.1 項参照）に対応する、数値的な誤差の発生機構である。その意味では、CFP モデルも Zhu モデルと同様に、粒子間力を仮定することで圧力の誤差が生まれる。しかし、図 3-36 からわかるように、CFP モデルによる圧力過小評価の誤差は界面付近のみに限定しており、程度も小さいため、解析体系全体に無視できない誤差を生み出す Zhu モデルとは、誤差の規模が本質的に異なると言える。

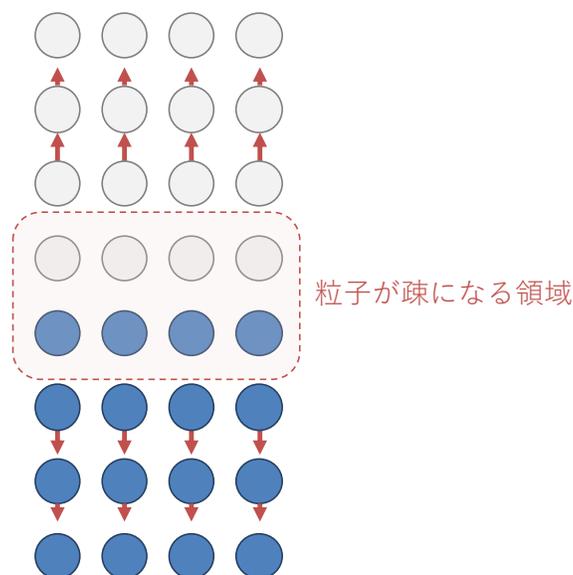


図 3-37 CFP モデルで界面の圧力が微小に過小評価される理由の考察

以上の検証から、自由表面における表面張力を考慮せず界面張力のみを考慮する解析では、CFP モデルは界面張力を模擬する有効なモデルであることが示された。第 2.4 節でまとめたように、本研究では、MCCI において金属成分が容器側壁付近で酸化物成分中を流動、局在する過程の模擬が特に重要であり、その一方で酸化物成分の自由表面は必ずしも緻密に再現する必要がないため、CFP モデルを用いて多成分流体の解析を行う。

4 改良 MPS 法による VF-U1 実験の解析

本章では、前章で示した Chai らの混合モデルと新開発した界面張力モデル（CFP モデル）を実装した改良 MPS 法を用いて VF-U1 実験を再解析する。

4.1 解析条件

4.1.1 解析体系

第 2 章の解析結果から、VF-U1 実験の金属成分は、凝固を開始した酸化物成分と溶融するコンクリート壁との間のミリメートルスケールの領域を上昇し凝固することが示唆された。第 2 章で利用した粒子の粒子径は 7.5 mm であったため、このままでは解像度が不十分である。また、3次元解析により、金属成分は溶融物中の 3 次元的な大域的対流により分布するのではなく、凝固を開始した酸化物成分と溶融するコンクリート壁との間を軸方向に上昇する様子が示されたため、金属分布の背後にある現象は容器の径方向と高さ方向の 2 次元の現象に落とし込めると考えられる。そこで本章の解析では、解像度を向上するため、粒子径 2.0 mm の粒子を用いた 2 次元解析を実施した。

（ただし、MPS 法では粒子の位置座標を円筒座標で示すことはできないので、本来は (r, z) 座標を用いるべきところ、本解析では (x, z) 座標を用いる。この近似の影響の考察は今後の課題である。）

図 4-1 は 2 次元解析の体系を示す。図 1-12 の実験体系を参考にしたが、図 1-13 の侵食結果は下方に侵食が促進されたことを示しているので、側壁のコンクリートは実験より薄くすることで計算コストを節約した。また第 2.2.2 項で記したように、粉末が溶融し巨視的な密度変化させながら溶融物を形成する過程は非圧縮性流体を扱う MPS 法での模擬は困難であり、また、溶融物の形成過程は容器底部の金属成分の凝固分布には影響は小さいと思われるため、計算初期から全ての粒子は液体相当の密度を持っていると仮定している。さらに、第 2 章の解析から、自由表面で起きている現象は容器底面付近の金属成分の分布への影響は小さいことが示唆されたので、計算コストや数値不安定性改善の観点から、断熱壁で自由表面を覆うことで自由表面粒子が存在しないように体系を構成した。

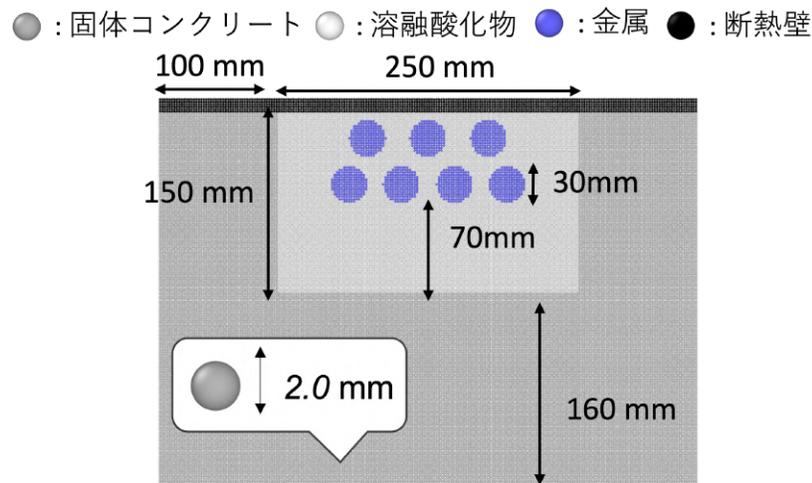


図 4-1 2次元解析の解析体系

4.1.2 解析で仮定する物性値と加熱履歴

表 4-1 は本章の 2 次元解析で適用した物性値のうち、界面張力係数以外の物性値をまとめている。

表 4-1 2 次元解析で初期に適用した物性値 [73] [51]

	酸化物	金属	固体 コンクリート	溶融 コンクリート
密度[kg/m ³]	6312	6461	3000	3000
粘性[Pa・s] * ¹	1.94× 10 ⁻²	4.75× 10 ⁻³	-	1.94× 10 ⁻² * ²
熱伝導率[W/mK]	1.5	25	1.5	1.5
比熱 [J/kgK]	498	600	950	950
固液相線温度[K]	2790/2790	1673/1723	1350/1650	1350/1650
潜熱[J/kg]	3.67× 10 ⁵	2.80× 10 ⁵	5.18× 10 ⁵	N/A

*¹完全に液体（固相率 $\gamma = 0$ ）の状態における粘性。

*²文献値が知られていないため、酸化物と同様に与える。

また、表 4-2 は酸化物、金属、溶融コンクリートという 3 相の間の界面張力係数を示している。本解析では自由表面は存在せず、さらに、開発した CFP モデルは界面張力係数のみを与えれば界面張力を模擬できるため、本解析では各相の表面張力係数を与える必要はない。液体成分と固体コンクリート壁との間の接触角は文献値が知られていないため、暫定的に全て 90° と設定した。

表 4-2 2 次元 VF-U1 解析で暫定的に適用した表面張力・界面張力係数

	金属-酸化物	酸化物-溶融コンクリート	溶融コンクリート-金属
表面張力・界面張力 σ (N/m)	0.25	0	0.25

さらに、2 次元解析でも、第 2.2.2 項と同様に $t = 0 \sim 600$ s の予熱期間、 $t = 600 \sim 750$ s の高加熱期間、 $t = 750 \sim 1500$ s の低加熱期間、 $t = 1500$ s への加熱停止期間で構成される加熱履歴を与えた。ただし、本解析は 2 次元の解析であるので、与える加熱密度は 3 次元のそれを変換する必要がある。なぜなら、2 次元では、溶融物の体積（面積）と溶融物/コンクリート壁との間の面積（長さ）との間の比が 3 次元の実験と異なるので、コンクリートへの平均的な熱流束に齟齬が生まれてしまうためである。そこで、既知である 3 次元の加熱密度 P_{3D} W/m³ から、2 次元で与える加熱密度 P_{2D} W/m³ を、

$$\frac{P_{2D}V_{2D}}{S_{2D}} = \frac{P_{3D}V_{3D}}{S_{3D}} \quad (4.1.1)$$

を満たすように決定し、両者で熱流束が一致するようにした。ここで、 V_{3D} と S_{3D} はそれぞれ実験の溶融物の体積と溶融物/コンクリート壁との間の面積であり、 V_{2D} と S_{2D} はそれぞれ 2 次元解析の溶融物の面積と溶融物/コンクリート壁との間の接触線の長さである。実際には侵食が進展するに従い、

V_{3D} 、 S_{3D} 、 V_{2D} と S_{2D} といった値は変化するため、変換の係数も変化するが、本解析では暫定的に初期の変換係数をそのまま利用し続けた。

4.1.3 考慮できていない現象と本解析のスコープ

本解析ではコンクリート分解に伴い発生するコンクリート分解ガス気泡が溶融物の流動に与える影響は考慮できていない。特に、気泡による対流で金属成分と酸化物成分が乳濁していた時期を考慮することができていない。これら考慮が、本研究のような複雑な MPS 法の解析では困難である理由は第 5.2.3 項にまとめている。気泡の発生や上昇は溶融物の対流に相当な影響を与えることが知られているため、この考慮は本研究の更なる発展のための重要な課題である。例えば、気泡の上昇による溶融物中の激しい対流や金属成分と酸化物成分間の乳濁の履歴は、第 1.6 節に示した直径数 mm 程度の金属の滴（しずく）の形成に影響を与えていると思われる。一方、本研究では、MCCI 進展時の気泡の発生や上昇が MCCI 終息時の最終的な金属成分の分布に与える影響は小さいことを仮定して、乳濁が解消し金属成分と酸化物成分とが概ね密度成層化した以降において、なぜ金属成分が最終的にコンクリート壁に沿って凝固したのかを論じる。

本研究では MCCI 終息時のコンクリート底部から側部にかけての溶融物の凝固過程に着目するが、将来的には MCCI 全体の理解を深めるために本研究で着目していない範囲も含めた包括的な MCCI の理解深化が課題と考えられる。例えば、事故進展中の対応の観点からは MCCI を抑制・停止するために上部から注水することが考えられており、これらによる溶融物上面の冷却特性に影響する現象の理解の深化は引き続き MCCI の重要な研究課題と考えられる。

4.2 結果と考察

4.2.1 酸化物とコンクリートの混合の感度解析

炉心酸化物とコンクリートとの間の混合は、酸化物の物性の分布を変化させ、それに伴い金属成分の分布に大きな影響を与えられられる。そこで、まず、感度解析係数としていた炉心酸化物とコンクリートとの間の混合拡散係数を見積もる。図 4-2 は、混合拡散係数を比較的小さく $D = 5 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ と設定した解析と、比較的大きく $D = 5 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ と設定した解析の結果を比較している。混合拡散係数を小さく設定した解析では、比較的早い段階から酸化物成分のクラスト膜が形成され、それに伴い金属成分がコンクリート側壁に沿って上昇し、その分布が最終分布にまで残っている様子が確認できる。このように早い段階から酸化物成分のクラスト膜が形成されたのは、炉心酸化物とコンクリートとの混合が比較的限定的であったために、上部にコンクリート主体の酸化物、上部に $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ 主体の炉心酸化物と概ね密度成層化し、酸化物の下部の固液相線温度が高いままに保たれることで高い温度領域で凝固を開始しクラスト膜を形成したためである。一方で、混合拡散係数を比較的大きく設定した解析では、クラスト膜が MCCI 後期まで形成されず、金属成分が凝固を開始するのとほぼ同じタイミングで酸化物も凝固を開始している様子が確認できる。これは、コンクリートが炉心酸化物成分とよく混ざり合うことで酸化物全体の固液相線温度が低下し、クラスト膜の形成が遅れているためである。

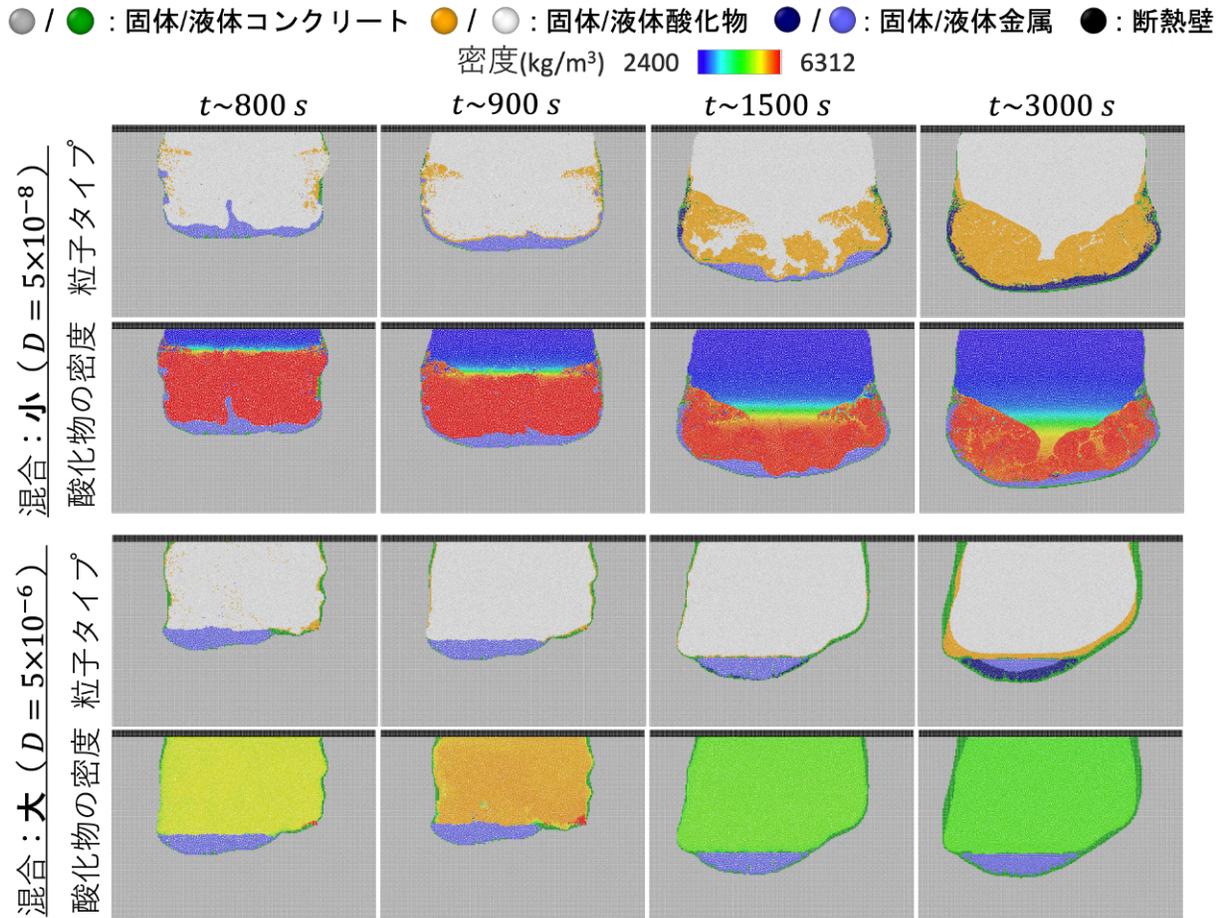


図 4-2 混合拡散係数の感度解析

この感度解析を通して、金属がコンクリート壁に沿って分布するためには、炉心酸化物とコンクリートとの混合がある程度限定的である必要が示唆された。そこで本研究では暫定的に、混合拡散係数として $D = 5 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ を利用したケースを参照ケースとし、以降の考察を実施した。ただし、この混合拡散係数はコンクリート分解ガス気泡による溶融物の対流の影響などが一つのパラメーターに落とし込まれた係数であるので、その空間・時間依存性などをより精緻に考慮することは重要な今後の課題である。

4.2.2 金属成分の分布

図 4-3 は 2 次元の MPS 法解析により明らかになった金属成分分布に関わる現象履歴の概略を示している。 $t = 600 \text{ s}$ から流動解析が開始された後 $t = 800 \text{ s}$ 頃までは、酸化物成分も金属成分も共に高温かつ低粘性であった。そのため、酸化物成分と金属成分の間の界面は溶融コンクリートのような軽い成分の通過に伴い擾乱していることがわかる（実際の MCCI では、コンクリート分解ガスの気泡の上昇により、酸化物成分と金属成分の間の界面は、本解析の結果よりも一層大規模に擾乱し、条件が満たされれば両成分は乳濁していたことが予想される。）。 $t = 900 \text{ s}$ 頃になると、酸化物成分のうち炉心酸化物主体の酸化物成分は、コンクリート壁や金属成分との界面近くで凝固を開始し、クラスト膜が形成されるようになる。このタイミングで、金属成分が液相のままコンクリ

ート壁とクラスト膜との間を上昇していることが示された（このメカニズムは第 4.2.5 項で詳細に言及する）。その後、金属成分の分布は概ね相似的に保たれたままコンクリート侵食とクラスト膜の成長が持続するが、 $t = 1500 \text{ s}$ 頃になると金属成分のうち、溶融コンクリート主体で比較的低温の酸化物成分に近い上部から凝固する。しかし、金属成分の上部が凝固してからも、下方へのコンクリート侵食は継続するため、凝固した金属成分が下方侵食から取り残されることで、金属成分がコンクリート壁に沿う分布がより促進された。 $t = 2000 \text{ s}$ 頃になると金属成分は全体が凝固し、コンクリートの凝固も終了する。右端の図は $t = 3000 \text{ s}$ 頃の分布を示しているが、 $t = 2000 \text{ s}$ 以降はコンクリートの侵食も溶融物の分布もほとんど変化しない。なお、 $t = 3000 \text{ s}$ 頃でも酸化物成分の上部、すなわちコンクリート主体の酸化物成分は液相のままであるが、これはこの部分の酸化物は固液相線温度がほぼコンクリートと同程度まで下がっているため凝固が開始していないためである。実際の実験では、解析では考慮できていない上部表面からの冷却が存在するので、上部の酸化物成分もいずれかのタイミングで凝固することが予想される。

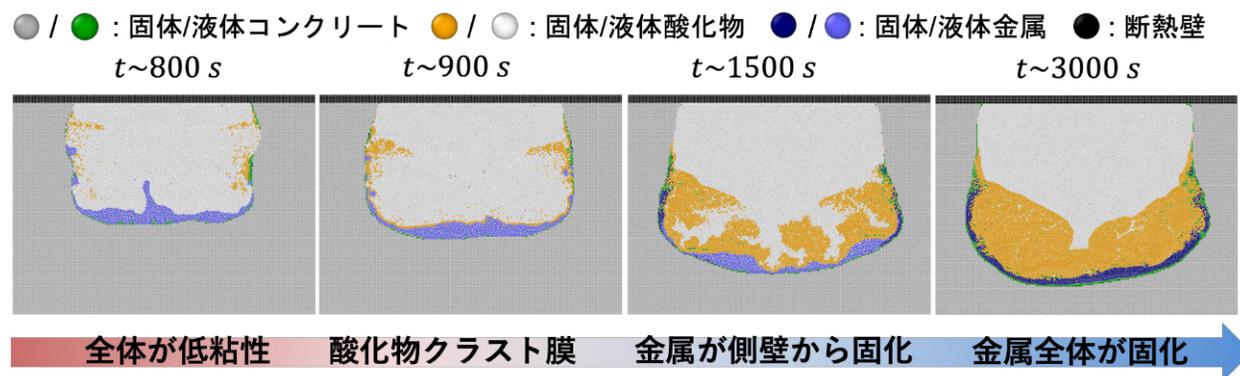


図 4-3 金属成分分布に関わる現象履歴の概要

図 4-4 はこの解析結果と実験結果の金属成分の最終分布を比較している。金属成分がコンクリート壁付近に沿って分布し凝固しているという観点で、解析結果は実験結果と定性的に一致していると言える。なお、解析結果は実験と比べてコンクリート側壁付近にも多くの金属成分は分布しているように見えるが、これは 2次元で解析をしているためであり、3次元解析を実施すると径方向に外側に存在する金属成分は少なくなると考えられる。本研究ではこのような理由から、金属成分の分布について定量的な議論をすることは難しいが、実験と解析の金属成分分布が定性的に類似していることから、金属成分がなぜ実験のようにコンクリート壁に沿い分布したのかのメカニズムを分析・考察することで、MCCIの基礎的な理解を深めることができる。

● / ● : 固体/液体コンクリート ● / ○ : 固体/液体酸化物 ● / ● : 固体/液体金属 ● : 断熱壁
 ■ コンクリート ■ 酸化物 ■ 金属

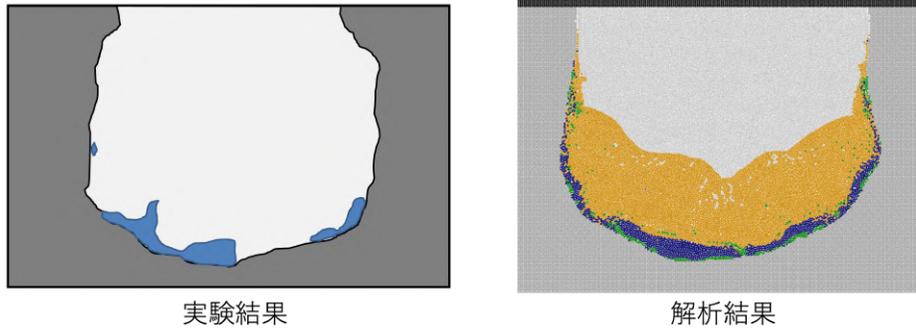


図 4-4 実験と解析の金属成分の最終分布の比較

4.2.3 コンクリート侵食

第 2.3.2 項の 3次元解析では、コンクリート侵食割合は（溶融したコンクリートの体積） / （溶融物の初期体積）、すなわち

$$\begin{aligned} \text{侵食割合}_{3d}(t) &\equiv \frac{\text{溶融したコンクリートの体積}(t)}{\text{溶融物の体積}(0)} \\ &= \frac{\text{溶融物の体積}(t) - \text{溶融物の体積}(0)}{\text{溶融物の体積}(0)} = \frac{\text{溶融物の体積}(t)}{\text{溶融物の体積}(0)} - 1 \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

で定義されたが、2次元解析で同じ方法、すなわち

$$\begin{aligned} \text{侵食割合}_{2d}(t) &\equiv \frac{\text{溶融したコンクリートの面積}(t)}{\text{溶融物の面積}(0)} \\ &= \frac{\text{溶融物の面積}(t) - \text{溶融物の面積}(0)}{\text{溶融物の面積}(0)} = \frac{\text{溶融物の面積}(t)}{\text{溶融物の面積}(0)} - 1 \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

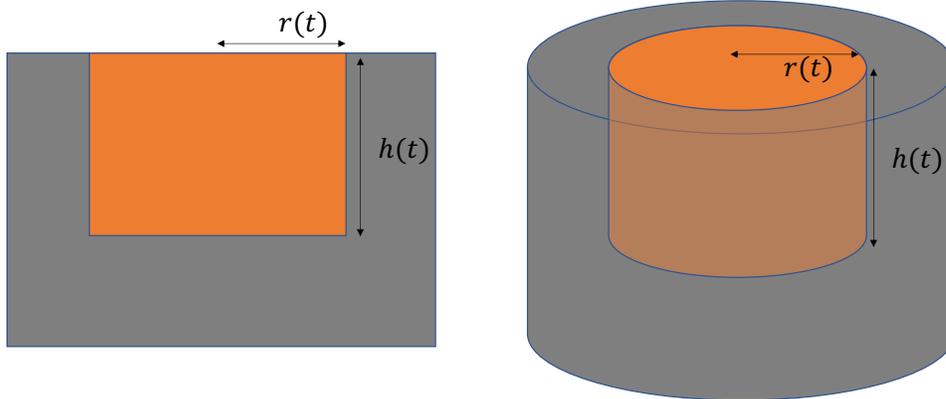
のように計算することはできない。なぜなら、図 4-5 が示すように、2次元解析の結果が意味する 3次元での侵食形状は概ね円柱であり、2次元解析が示すような長方形ではないためである。そこで、図 4-5 が示すように、半径 r で高さ h の円柱の体積と、横の長さの半分が r で高さが h の長方形の面積との比

$$\frac{\pi r^2 h}{2rh} = \frac{\pi r}{2} \quad (4.2.3)$$

を、式 (4.2.2) 中の「溶融物の面積」にかける必要がある。すなわち、径方向の平均的な侵食長さを $r(t)$ として

$$\text{侵食割合}_{2d}(t) \equiv \frac{\text{溶融物の面積}(t) \frac{\pi r(t)}{2}}{\text{溶融物の面積}(0) \frac{\pi r(0)}{2}} - 1 = \frac{\text{溶融物の面積}(t) r(t)}{\text{溶融物の面積}(0) r(0)} - 1 \quad (4.2.4)$$

が正しい侵食割合の定義である。



2次元解析による侵食形状 → 2次元解析の結果が意味する3次元の侵食形状

図 4-5 2次元解析で3次元解析の侵食割合を見積もる方法

式 (4.2.4) の定義により計算された侵食割合の時間進展を示したのが図 4-6 である。式 (4.2.4) 中の平均的な侵食長さ $r(t)$ は、可視化ソフトの結果から確認し入力された。解析の侵食割合の進展は、第 2.3.2 項で論じたように、実験で与えられた加熱条件や除熱条件が正確には測定されていないために数値解析にも反映することはできないということを勘案すれば、実験の侵食割合 [51] [45] とは概ね一致している。

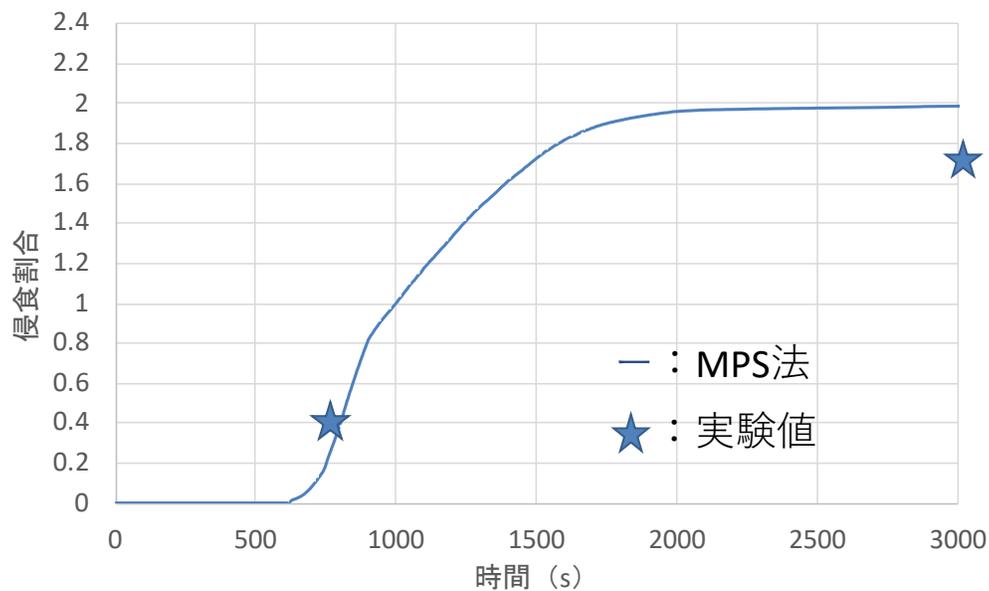


図 4-6 コンクリート侵食割合の進展

図 4-7 は解析におけるコンクリートの最終侵食形状と実験結果とを比較した図である。3次元解析同様、侵食形状は概ね実験結果と一致しているが、解析結果の方が局所的に径方向や軸方向の侵食が過大評価している部分がある。本来は表面からの除熱で散逸するはずの熱エネルギーが炉心酸化物主体の酸化物成分に蓄積されたまま、下方に分布していた熱伝導率の高い金属成分を通して容器下部を侵食したため、同図のような侵食パターンが形成されたと考えられる。実験同様に熔融

物表面からの冷却を考慮し、さらに、コンクリート分解ガスの気泡による攪拌で酸化物成分中の混合がより促進することも考慮することができれば、侵食形状をより実験と整合させることができると思われるが、侵食形状の厳密なフィッティングは本研究のスコープではないため、本研究では実施しなかった。

● / ● : 固体/液体コンクリート ● / ● : 固体/液体酸化物 ● / ● : 固体/液体金属 ● : 断熱壁

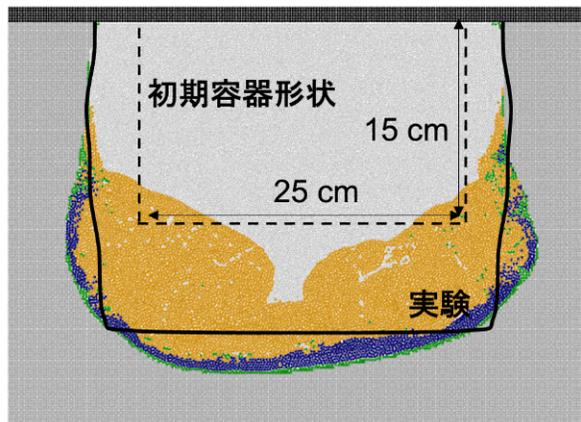


図 4-7 コンクリートの最終侵食形状

4.2.4 金属成分分布の影響因子の分析

次に、解析において金属成分がなぜコンクリート壁に沿って分布し凝固したのかを示すため、関連すると思われる物性値を変更し感度解析を実施した。

酸化物成分の固液相線温度の感度解析

図 4-8 は酸化物成分の固液相線温度をコンクリートと同じ 1350K/1650K に変更した感度解析の結果を示している。固液相線温度を小さくした感度解析ケースの結果では酸化物成分がクラストを形成せず、金属成分は酸化物成分の層の下に密度成層化したまま酸化物成分より先に固化している。この感度解析の結果から、金属成分のコンクリート壁に沿う分布には酸化物成分のクラストの先行的な形成が必須の現象であることが確認できた。

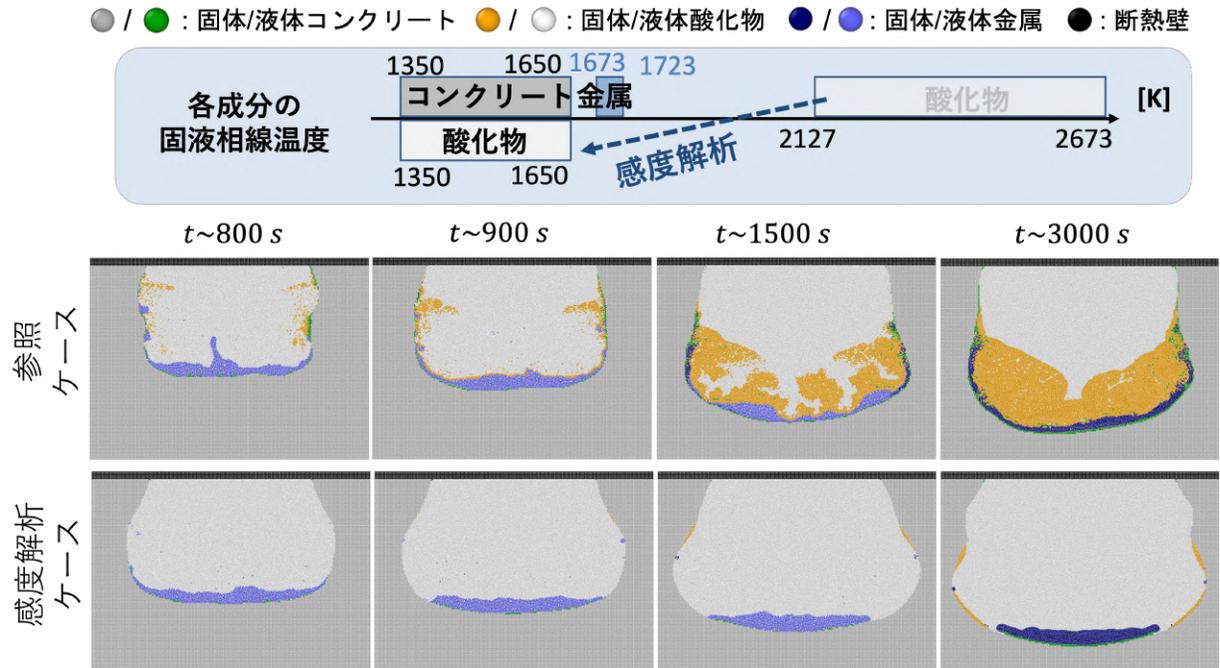


図 4-8 酸化物成分の固液相線温度の感度解析

酸化物成分の密度の感度解析

図 4-9 は酸化物成分の密度を金属成分よりも十分に小さくする感度解析を実施した。ここでは、酸化物成分の密度として、第 1.4 節にも述べた MOCKA 実験の酸化物成分 ($\text{Al}_2\text{O}_3\text{-CaO}$) の密度 (3680 kg/m^3) と同程度に設定した。感度解析ケースでは、金属成分は、参照ケースほどではないが、コンクリート側壁に沿って分布していることがわかり、この最終分布は図 1-10 の MOCKA1.7 の最終的な金属分布とも定性的に類似している。このような分布は、上部で先行的に凝固した金属成分が下方侵食から取り残されたことで形成されたことが確認できる。すなわち、密度が金属成分より十分に小さい場合、金属成分は液相のままではコンクリート壁に沿い上昇はしないことがわかった。

● / ● : 固体/液体コンクリート ● / ○ : 固体/液体酸化物 ● / ● : 固体/液体金属 ● : 断熱壁

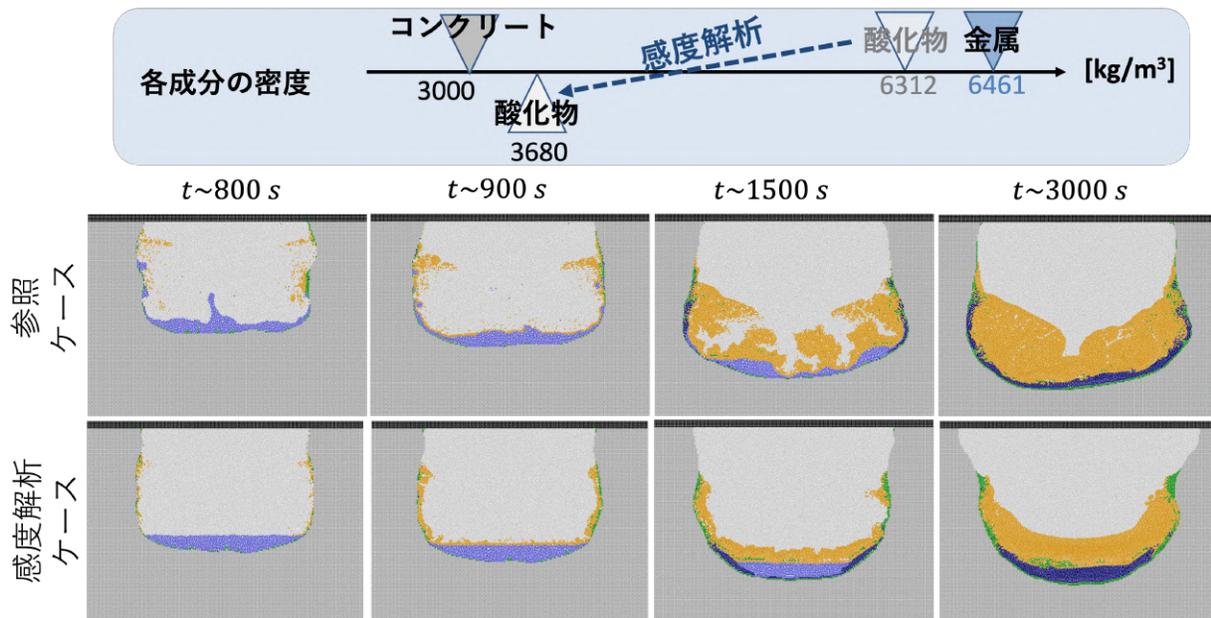


図 4-9 酸化物の密度の感度解析

溶融コンクリートの上昇の感度解析

図 4-10 は溶融コンクリートが溶融物中を上昇しないようにした場合の金属成分への影響を評価した感度解析の結果である。ここでは、溶け出した溶融コンクリートの密度を酸化物の密度と同じに設定することで、発生した溶融コンクリートが溶融物中を上昇しないようにした。感度解析ケースの金属成分はどのタイミングでも酸化物成分の下方で密度成層化しており、その分布を保ったまま凝固していることがわかる。この感度解析から、金属成分がコンクリート壁に沿って分布するためには、溶け出したコンクリートが上方に移行する必要があることがわかった。

● / ● : 固体/液体コンクリート ● / ○ : 固体/液体酸化物 ● / ● : 固体/液体金属 ● : 断熱壁

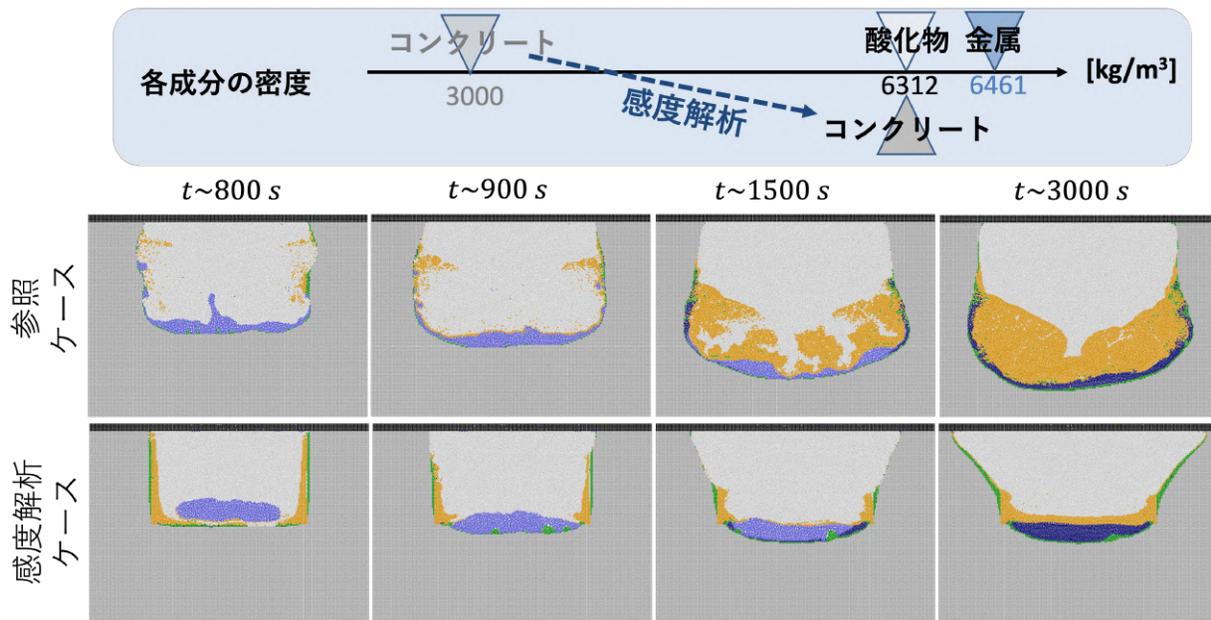


図 4-10 溶融コンクリートの上昇の感度解析

金属成分によるコンクリート壁の濡れ性の感度解析

図 4-11 は金属-酸化物の界面とコンクリート壁との接触角を、参照ケースの暫定的な 90° から変更した時の影響を示した感度解析の結果である（接触角の定義は図 3-20 を参照。同図で A 成分を酸化物、B 成分を金属成分に対応させる。）。接触角を 90° より小さくする、すなわち、酸化物成分より金属成分の方がコンクリート側壁を濡らしやすいと仮定すると、金属成分はコンクリート状を薄く広がりやすくなり、参照ケースよりも高くコンクリート側壁に沿って上昇する。一方、接触角を 90° より大きくする、すなわち、金属成分より酸化物成分の方がコンクリート側壁を濡らしやすいと仮定しても、金属成分はコンクリート側壁に沿って分布し凝固することが確かめられた。さらに、この場合、金属成分はコンクリート壁状で広がるよりも雫状に局在しようとするので、コンクリート容器底部で金属成分が左右に分裂して分布し、これにより伝熱パターンが変化し侵食形状も影響を受けている。これらの結果から、金属成分によるコンクリート壁の濡れ性は、最終的な金属成分の分布には影響を与えるが、それによりコンクリート側壁に沿う金属成分の分布の発生可否の支配因子ではないことが示唆された。

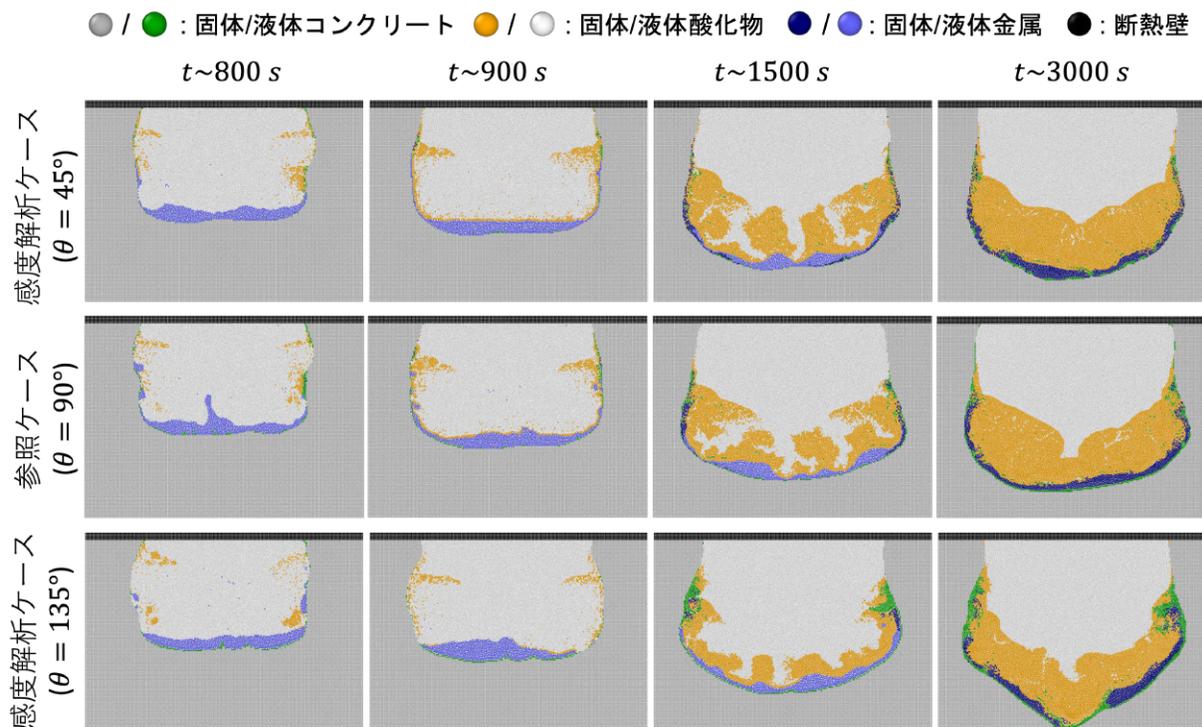


図 4-11 金属-酸化物界面のコンクリート壁との接触角の感度解析

4.2.5 金属が液相のままコンクリート側壁近傍を上昇するメカニズムの提案

第 4.2.2 項で述べたように、VF-U1 実験における金属成分は、まず、液相のままクラスト膜とコンクリート壁の間を上昇し、その後、コンクリート側壁付近から凝固した部分が下方侵食から取り残されることで、コンクリート側壁に沿うような分布が示された。本項では、金属が液相のままクラスト膜とコンクリート壁の間を上昇するメカニズムを考察する。前項（第 4.2.4 項）の分析から、金属成分が液相のまま上昇するための必要条件として、以下が明らかになった。

- 酸化物成分が金属成分より先に凝固を開始しクラスト膜を形成する必要がある。
- 酸化物成分の密度は金属成分の密度と同程度である必要がある。
- 溶融したコンクリートが上部へ移行する必要がある。

これらの必要条件を踏まえて本研究で提案するメカニズムを図 4-12 に示す。第 4.2.1 項の考察より、溶融コンクリート主体の酸化物成分と炉心酸化物主体の酸化物成分は、ある程度は混ざり合わず成層化していたと考えられるので、同図では単純化のため、溶融コンクリートは酸化物の上部で混ざり合わないよう描画している。同図の左図は、酸化物成分がクラスト膜に覆われる瞬間を示している。炉心酸化物主体の酸化物成分がクラスト膜に覆われた後も、コンクリートは引き続き金属成分やクラスト膜からの伝熱で溶融する。溶融したコンクリートは他の溶融物成分よりも低密度であるので、クラスト膜とコンクリート側壁の間を通過して体系上部に移行する。溶融コンクリートの上方への移行に伴い、炉心酸化物主体の酸化物成分と金属成分は共に下方に沈み込むが、その際、炉心酸化物主体の酸化物成分は比較的剛性を持ったクラスト膜により覆われている上に、クラスト膜として描画されていない液相酸化物領域も相当に高粘性であるので、径方向への拡大が妨げられる。

結局、クラスト膜に覆われた炉心酸化物主体の酸化物成分とコンクリート側壁との間に隙間を作らないように、静水圧を達成する高さまで金属成分が上昇する。

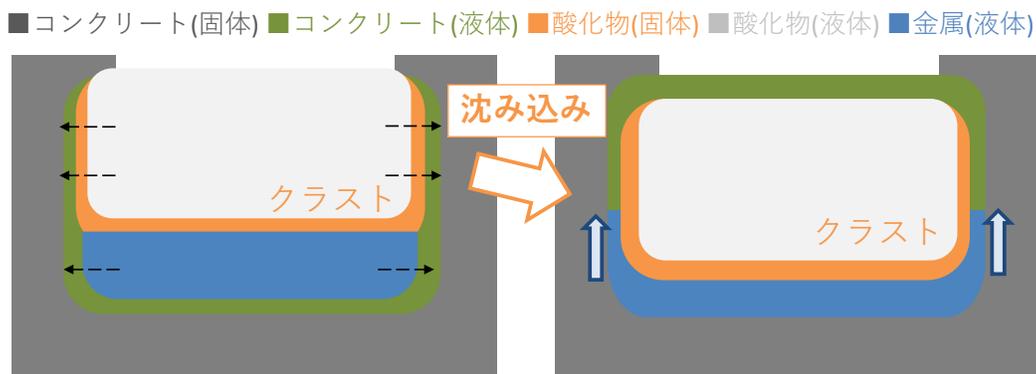


図 4-12 提案する金属成分の上昇メカニズム

ここで提案したメカニズムで金属成分が液相のまま上昇するためには酸化物成分の密度が溶融コンクリートの密度よりも金属成分の密度に近いことが重要であることを図 4-13 に示している。実際、もし COMET 実験や MOCKA 実験のように、初期の炉心酸化物として $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ ではなく $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-CaO}$ を用いると、酸化物の密度は溶融コンクリートの密度と同程度になるため、クラスト膜に覆われた炉心酸化物主体の酸化物が金属成分中に沈み込むことはなくなる。すなわち、VF-U1 実験や VBS 実験は、酸化物として $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ を用いていたために、その密度が溶融コンクリートよりも相当に重いため、クラスト膜に覆われた酸化物が金属成分中に沈み込んだと考えられる。

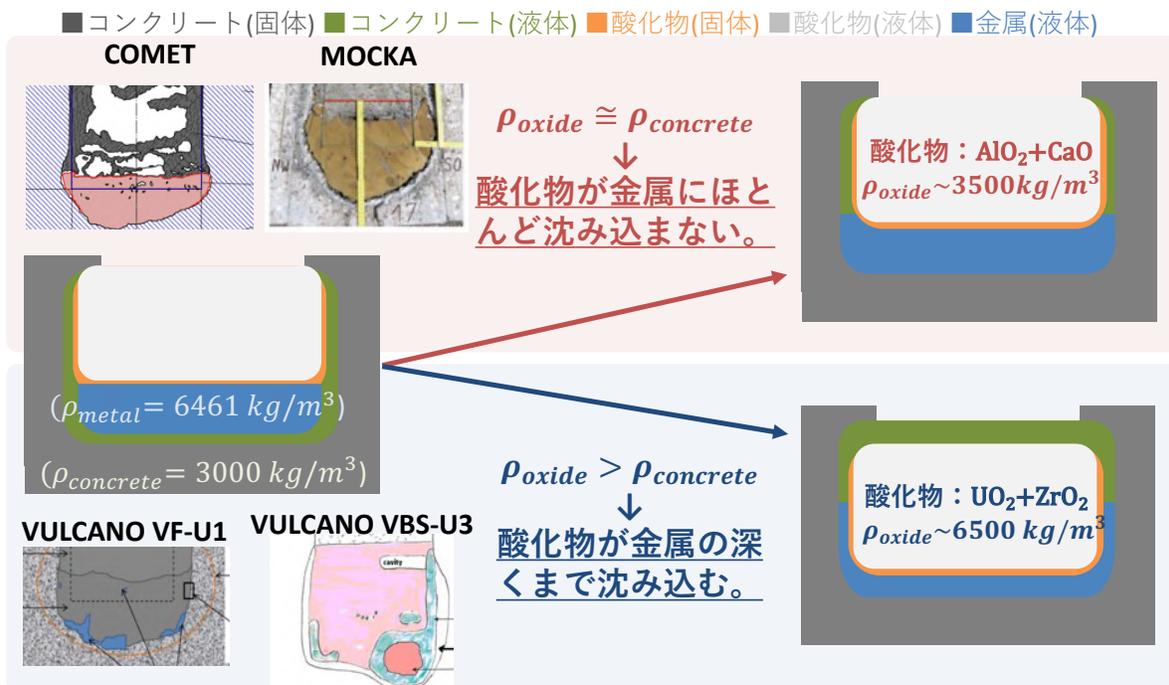


図 4-13 金属成分の上昇のための酸化物密度の条件

4.2.6 金属成分に関わる現象履歴の提案

本節の解析結果と考察、及び第 1.3.1 項で述べた従来の知見をまとめて、本研究で提案する金属成分に関わる現象履歴を図 4-14 のフェーズ毎に時系列で示す。

(1) 溶融物全体が高温で低粘性

(1-1) 本解析ではコンクリート分解ガスの気泡に伴う溶融物の対流を考慮できていないため、解析上ではこのフェーズでも金属成分は酸化物成分の下部で密度成層化しているが、実際の現象では、第 1.3.1 項で述べた定説の理解のように、気泡による対流が激しい間は金属成分と酸化物成分は乳濁していると考えられる。

(1-2) ガスの発生が穏やかになることと、コンクリートが酸化物成分に混ざり合うことで酸化物が低密度になることが同時に進行することで、溶融物全体が低粘性に保たれている間に金属成分と酸化物成分の間の乳濁が解消され概ね密度成層化すると考えられる。本研究の解析ではこのフェーズから概ね実験の状況を再現できていると考えられる。

(2) クラスト膜の形成

(2-1) 固液相線温度が高い炉心酸化物主体の酸化物成分の周りに先行的にクラスト膜が形成される。これにより、酸化物成分は径方向の拡大が妨げられる。なお、このフェーズでクラスト膜が発生するためには炉心酸化物主体の酸化物成分とコンクリート成分との混合が進行しすぎている必要がある。

(2-2) その後もコンクリートの侵食が進行するが、炉心酸化物主体の酸化物成分はクラスト膜により変形が妨げられるので、炉心酸化物主体の酸化物成分が金属成分中に沈み込むことで、クラスト膜とコンクリート側壁の間のギャップ中に金属成分が流入し上昇する。この際、金属成分が大きく上昇した理由には、酸化物成分が $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$ 主体であり、溶融コンクリートよりも十分に高密度であったことが指摘できる。

(3) 金属成分が上部から凝固

液相のままコンクリート壁付近を上昇した金属成分は、コンクリート主体で比較的低温の酸化物付近の上部から冷却され凝固する。しかし、上部の金属成分が凝固した後もコンクリートの下方侵食が継続するため、凝固した上部の金属成分が下方侵食から取り残されることで、軸方向に引き伸ばされたような分布がさらに強調された。

(4) コリウム全体の凝固と MCCI の終息

下方に存在する炉心酸化物主体の酸化物成分と金属成分とが共に凝固することで、溶融物中の成分分布は固定される。この時点では溶融物の温度はコンクリートの固液相線温度付近まで低下しているため、コンクリートの侵食も収まり、MCCI が終息する。

■コンクリート(固体) ■コンクリート(液体) ■酸化物(固体)
 ■酸化物(液体) ■金属(固体) ■金属(液体)

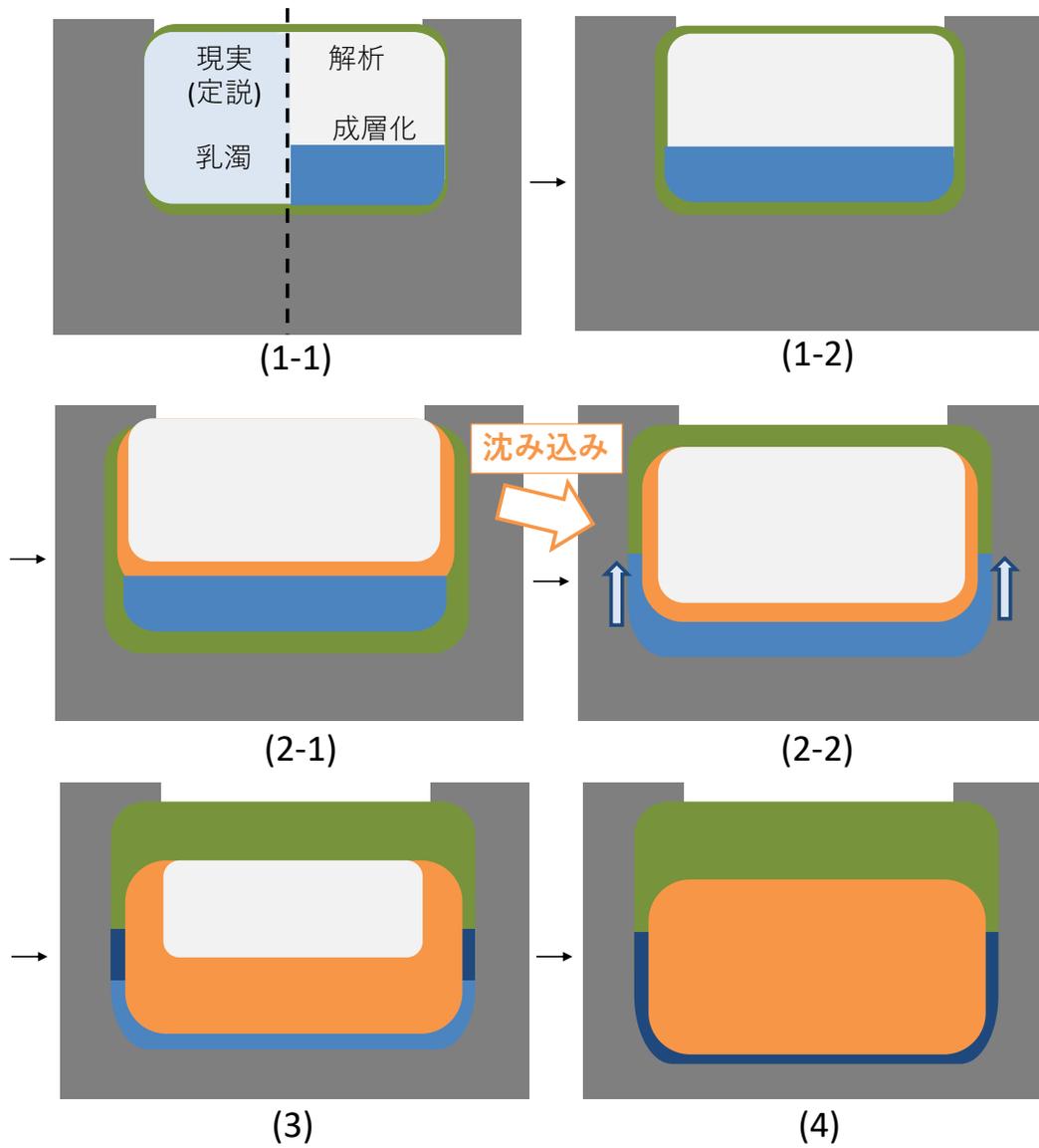


図 4-14 提案する金属成分に関わる現象履歴

5 結論と今後の展望・課題

5.1 結論

MCCI は炉心酸化物・金属、床コンクリート等の多成分が、それぞれ異なる温度域で熱分解・溶融・凝固するため、気・液・固の相変化とそれらの間の複雑な多成分多相界面が形成される伝熱流動現象である。従来の MCCI に関わる研究は、実験や数値解析能力の制約からそのような多成分多相界面の形成は考慮できず、限られた経験則を多用してガス発生やコンクリート侵食の挙動を評価することに留まっていた。本研究では、従来の MCCI 実験と異なり、模擬炉心金属 (SUS) と模擬酸化物燃料 ($\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$) の密度比が実機の事故に想定されるように小さかった VULCANO VF-UI 実験後に残ったデブリ中において金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布したのは、酸化物が半溶融/凝固状態に冷えた後に継続したコンクリート浸食、半溶融/凝固酸化物の沈降、溶融金属の流動によりもたらされたと考えられることを示した。その過程を通して、以下のように MCCI 実験後のデブリ成分分布から MCCI の理解を深められるという結論を得た。

第一に、MCCI 解析の実績があり、離散点が流れと共に移動する Lagrange 式記述であるため多成分多相界面の固液相変化を伴う解析に適している MPS 法を用いて、MCCI 実験後のデブリ成分分布を手掛かりに MCCI の理解を深めるために必要な解析の要件を明確にした。すなわち、溶融物が凝固する直前までの流動と複雑に形成される多成分の固液界面を正確に計算できる必要がある。そのためには、以下の条件を満たす界面張力モデルが適しているとの結論を得た：

- (1) 界面形状を明示的に求める必要がない
- (2) 壁面の濡れ性を考慮できる
- (3) モデル中のパラメーターを恣意的に調節する必要がない
- (4) 低密度液相中の高密度液滴の自重沈降等の解析に求められる基本的な数値計算能力を有する

第二に、上記の要件(1)及び(2)を満たす MPS 法のポテンシャルモデルに基づく界面張力モデルの改良により、上記 4 つの要件を全て満たす界面張力モデルを新たに考案し、解析により実証した。すなわち、従来のように全ての計算点 (粒子) 間に引力を働かせるのではなく、異成分粒子間のみ斥力を作用させ、新たな界面形成に伴う仕事量から界面張力を導出する Cohesion-Free Potential (CFP) 界面張力モデルとその濡れモデルを開発した。

第三に、新たに開発した CFP 界面張力モデルと、非圧縮性よりも凝固直前の流動計算精度を優先した粘性による速度拡散計算法、固相率と速度の閾値により粒子座標を固定する凝固モデル、混合に伴う溶融物の密度及び固液相線温度変化モデルを組み合わせた MPS 法による MCCI 解析手法を構築し、そのような手法を用いれば MCCI の履歴とその後に残留したデブリ中の成分分布の関係を論じることができることを明らかにした。すなわち、VULCANO VF-UI 実験の後に残留したデブリ中で金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って凝固分布していた理由を検討するには以下の 3 点を包括的に考慮した解析が必要であることを示した：

- 出力履歴：高加熱期間から低加熱期間に移行した後の溶融物中の各成分の流動と凝固を考慮する必要がある。
- 固液相線温度の関係：出力履歴に応じて酸化物成分が先行凝固を始めるが、酸化物成分は固液相線温度が高く、それらの幅も広いため、酸化物成分が半溶融/凝固状態となった以降も金属成分の流動とコンクリートの浸食は継続することを考慮する必要がある。
- 密度の関係：低密度の溶融コンクリートと高密度の酸化物成分の混合が限定的で、酸化物成分の密度が高く維持されれば、酸化物成分は半溶融/凝固状態となった以降も他の溶融物を押しのけるように下方に沈降することを考慮する必要がある。

これらを考慮した解析結果から、VULCANO VF-U1 実験後に残ったデブリ中において金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布したのは、以下のような履歴の結果である可能性を示した。すなわち、同実験で誘導加熱の出力が大きく低下した時点以降では、酸化物成分が凝固し始め、半溶融／凝固状態となった。このとき、金属成分が高い流動性を持って溶けた状態でコンクリートの浸食が継続したため、コンクリートの浸食に伴い酸化物成分が金属成分を押しよけるように下方に沈降し、コンクリート底部から側壁に沿って押しよけられた金属成分がそのままの分布でやがて冷えて凝固し残留した結果であると考えられることを示した。言い換えれば、同実験のデブリ成分の分布は、酸化物成分がほぼ凝固した後もコンクリートの溶融浸食と金属成分の流動が継続していた痕跡であると考えられることを示した。

以上のように、従来はコンクリート熱分解等に伴うガス発生履歴や、コンクリート侵食進展を示す熱電対温度履歴等から深められてきた MCCI の理解に対して、新たに MCCI 実験後に残留したデブリの成分分布を手掛かりに、溶融物が凝固する過程における MCCI の理解を深める手法を確立した。

5.2 今後の展望と課題

5.2.1 MCCI 研究の今後の展望

本研究により、従来の典型的な MCCI 実験や数値流体解析で想定されていた条件に比べてコリウムの崩壊熱と温度が大きく低下した後の MCCI の理解を深めることができた。具体的には、コリウムが半溶融／凝固状態のままコンクリートを侵食する場合には、その形跡が最終的なデブリ分布に反映されていると考えられることを示した。このような理解は例えば、原子炉停止後相当程度の時間が経過して崩壊熱が低下した後に生じる MCCI や、1F 事故のように燃料デブリの不十分な冷却が長期間継続する [6] 場合を想定した安全研究の発展を支える基盤研究として貢献することが期待される。これらの理解をさらに深めるには例えば、半溶融／凝固状態の炉心物質とコンクリートとの長期間の相互作用に着目する以下のような実験・解析研究が有用と考えられる。

- 【本研究の理解をさらに深める MCCI 実験】 従来実験（最大でも数時間の加熱履歴）よりも低出力で長時間（～数日間）の加熱履歴の MCCI 実験が有用と考えられる。その際、新たに実施が必要なデブリへの低出力加熱の長期的な維持や、温度勾配が緩やかなコンクリート侵食先端の検出には技術的な課題が伴う可能性がある。
- 【本研究の理解をさらに深める MCCI 解析】 加熱初期からデブリが完全に停止するまでの長時間（～数日間）の加熱履歴を考慮した解析が有用と考えられる。そのためには、本研究の MPS 法において実装したように、固-液及び液-液界面を正確かつ容易に実用的な解析コストで追跡する手法を用いる必要がある。

5.2.2 1F の燃料デブリ取り出しへの追加的知見

第 1.2 節に示したように、現在までに、1F の 1-3 号機の燃料デブリの取り出しに向けて、ミュオン透過測定や遠隔操作ロボットを用いた映像取得や試料サンプリングによる表面性状調査、事故進展の解析による推定等から、現在までに多くの知見が蓄積している。しかし、1F 各号機のペデスタル床上等の堆積物の内部にどのような物質がどのような性状で分布しているのかは未だに明らかになっていない。本研究により 1F の炉心やコンクリートの材料を模擬した VF-U1 実験の後に残ったデブリ中において金属成分がコンクリート底部から側壁に沿って分布したのは、溶融物酸化物成

分が半溶融／凝固状態になった後もコンクリートの溶融侵食と金属成分の流動性が継続していた結果もたらされたことを示した。このような理解に基づけば、酸化物燃料が半溶融状態で MCCI が限定的であったと推定されている 1F の 3 号機ペDESTAL では、酸化物燃料の流動性が限られた状態である程度コンクリート床の侵食が継続していたとすれば、VF-U1 実験と同様に、コンクリート底部から側壁に沿って金属デブリが分布している可能性がある。

5.2.3 コンクリート分解ガス気泡の影響の考慮

コンクリート分解ガス気泡の影響

本研究では、MCCI において発生するコンクリート分解ガス気泡の発生や上昇を模擬できていない。気泡の発生や上昇が溶融物の状態や溶融物とコンクリートの相互作用に及ぼす影響を考慮することは、二つの視点で重要な課題と考えられる。

一つ目は、本研究で得た新たな理解の妥当性向上の視点である。本研究では、MCCI 終息期に酸化物成分が半溶融／凝固状態になるまで冷えた後もコンクリート侵食は一定程度進み、その結果が VULCANO VF-U1 実験後のデブリ成分の分布に反映されたものと考えられることを示した。そのために、MCCI の履歴（加熱履歴、コンクリート侵食履歴、溶融物密度変化履歴等）が MCCI 終息期の溶融物凝固挙動に及ぼす影響を考慮した解析手法を開発し、解析を実施した。MCCI に伴う複雑な現象の全てを包括的に考慮した解析手法の構築は容易ではなく、全ての現象が MCCI 終息期の溶融物凝固挙動に直接影響するわけではない。しかし、実験中に撮影された動画から確認できるような多量の気泡生成は、本研究では簡易的なモデルで扱った溶融物間の混合や、本研究では明示的にモデル化していない溶融物の性状変化に何らかの影響を及ぼし、それらが MCCI 終息期の溶融物凝固挙動に何らかの影響を及ぼす可能性はある。そのような影響の考慮は今後の重要な課題と考えられる。

二つ目は、従来、重視されてきた過酷事故対策の一環として注水により MCCI を停止させることを考えたときの MCCI の理解の深化の視点である。本研究では上部から溶融物に注水した際に溶融物上面に形成されるクラストや、上部クラストの局所的な破断を伴う水の浸透（water ingress）等の影響は考慮できていない。過酷事故時に生じる MCCI の影響の評価精度の向上や、その影響緩和、防止策の検討には引き続き、これらの理解の深化が必要であり、多量の気泡生成がどのようにこれらに影響するのかを明らかにすることは今後の重要な課題と考えられる。

MPS 法でコンクリート分解ガス気泡の影響をするための課題

一般的に、MPS 法の解析でコンクリート分解ガスが多成分溶融物に与える影響を模擬するのは容易ではない。その理由は、溶融物中に多量の気泡が放出され多成分溶融物中を上昇することに伴う異成分界面の擾乱・乳濁や物質移行（混合や酸化・還元反応）を MPS 法により現実的な解析コストで模擬する手法が確立されていないためである。さらに、仮に多量の気泡が溶融物中を上昇することの模擬が可能になったとしても、微小スケールで発生する乱流やそれにより促進される物質移行を、実際の実験の空間・時間スケールの解析で直接的に考慮するためには、現実的に解析できる程度に解析負荷を低減することが課題となる。これら以外にも、気泡の発生過程の模擬も課題である。例えば、MPS 法で気泡が発生する過程を最も緻密に模擬する既存の方法として、気泡付近の分解能を局所的に向上（粒子径を小さく）し、気相を粒子ではなく空隙により表現する MPS-Meshless Advection using Flow directional Local grid (MPS-MAFL) 法 [112] が存在するが、同手法は比較的小スケールの気泡の発生と上昇のみに着目する解析への適用に留まっており、本研究のような

多成分多相熱流動解析へ適用するにはさらなる発展が必要と思われる。また、コンクリート壁面を構成する粒子とそれらに接する液体粒子の界面に多量の気相粒子を生成/流入する方法も考えられるが、コンクリート侵食により界面形状が時々刻々と変化する MCCI 解析では、そのような流入境界条件を設定することは容易ではない。

さらに、MPS 法では気体と液体のように密度が大きく異なる相の間の界面では数値不安定性が生じやすいため、一般に気液界面の解析には緻密な取り扱いが必要になる。その理由を以下に示す。着目粒子*i*が近傍粒子*j*から受ける圧力勾配の寄与は

$$w_{ij} \frac{P_j - P_i}{r_{ij}} \quad (5.2.1)$$

で与えられ、着目粒子が*j*で近傍粒子が*i*であるときはこの正負が逆になった式となる。つまり、粒子*j*から粒子*i*に作用する圧力相互作用の力と粒子*i*から粒子*j*に作用する圧力相互作用の力の絶対値は等しい。一方、式 (2.1.14) に示されるように、粒子に作用する加速度は、力を密度で割った値である。したがって、近接する粒子にかかる圧力相互作用による加速度の比は粒子の密度のみに反比例する。例えば、溶融物の典型的な密度は約 6000 kg/m³ で、一方でコンクリートから発生する水蒸気の常圧における密度は 0.6 kg/m³ 程度であるので、近接する溶融物粒子と気泡粒子の間には 10000 倍程度の加速度のジャンプが発生する。

$$|\mathbf{a}_{\text{melt}}| : |\mathbf{a}_{\text{gas}}| = \frac{1}{\rho_{\text{melt}}} : \frac{1}{\rho_{\text{gas}}} \sim 1 : 10000 \quad (5.2.2)$$

このような加速度のジャンプにより気泡粒子が溶融物粒子に対して大きな速度を持つことで図 5-2 のように気泡粒子が飛散するため、気液界面を伴う MPS 法解析は数値的に不安定になる。

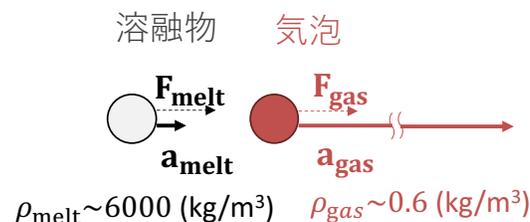


図 5-1 溶融物粒子と気泡粒子の間の加速度の大きなジャンプ

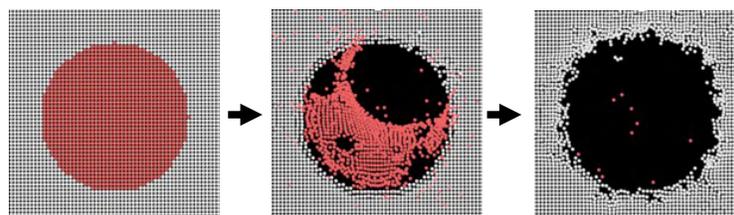


図 5-2 気泡粒子の飛散による数値低不安定性

このような気液界面解析の困難を回避するための従来のモデルとしては、気相と液相の圧力 Poisson 方程式を別々に解く Koshizuka の手法 [113] が代表的である。しかし、これらの手法は気泡の圧力や浮力をチューニングパラメーターとして与えなければならず、機構論的な解析には不向きである。また、近年開発された、界面付近で加速度を平滑化する Multiphase MPS-Continuous Acceleration (MMPS-CA) 法 [92] はこのようなチューニングが不要であるが、気相 1 成分と液相 1 成分の 2 相流を対象に圧力 Poisson 方程式を修正しているため、液相や気相が 2 成分以上で構成される多成分多相流では、3 つ以上の相や成分が相互作用する際に数値的に不安定になる可能性がある。

さらに、これらの従来の気泡モデルは気泡の生成・上昇・結合・分裂といった比較的単純な現象の解析には成功しているが、気泡の運動以外にも多くの現象が複雑に相互作用する工学的な問題への応用には課題が残っていた。

新たに考案した簡易気泡モデル

本研究のMCCI解析では、多量の気泡が溶融物中に放出され異成分界面の擾乱・乳濁や物質移行に与える影響を模擬する手法が不足していたため、気泡が溶融物に与える影響を包括的に考慮した解析は今後の課題とした。一方、筆者らは、将来的なそれらの影響の考慮の一助とするために気液界面解析の数値不安定性を簡易的に回避する手法：「簡易気泡モデル」を新たに考案している。本研究が今後より発展し気泡の影響の包括的な模擬を試みる際に、気液界面を安定的に解析するための一つの手法として提案するため、以降に同モデルの内容を示す。

同モデルの開発の背景として、本研究のMCCI解析では気泡の運動を詳細に解析することが目的なのではなく、コンクリートの熱分解に伴い発生する気泡が異成分溶融物間界面に及ぼす影響が考慮できれば十分である、という前提がある。従って、このような液-液界面への影響を考慮できるのであれば、気泡の運動は必ずしも精緻に模擬する必要はない。気泡の通過が液-液界面に与える影響とは、具体的には、図 5-3 のように下層の液相が通過気泡に随伴し液-液界面が擾乱されるような状況を指している。このような擾乱現象は Hassan らにより研究されており、両液相の密度や粘性、気液界面と液-液界面に作用する界面張力、そして気泡に作用する重力及び浮力により整理できることが示唆されている [114]。これらの作用の中で、気泡の密度が関連するのは、気泡に作用する重力だけである。一方、気泡に作用する浮力は、Archimedes の原理より排除する液相の密度に比例する。従って、気泡に作用する正味の力は鉛直上向に

$$(\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{gas}})V_{\text{gas}}g \quad (5.2.3)$$

で与えられる。ここで ρ_{liquid} と ρ_{gas} はそれぞれ液相と気相の密度で V_{gas} は気泡の体積である。ここで、溶融物とコンクリート分解ガス気泡を例にとれば、 ρ_{liquid} と ρ_{gas} はそれぞれ 6000 kg/m^3 、 0.6 kg/m^3 であるので、式 (5.2.3) は結局

$$(\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{gas}})V_{\text{gas}}g \cong \rho_{\text{liquid}}V_{\text{gas}}g \quad (5.2.4)$$

と、気泡密度が関係しない式にほぼ近似できる。



図 5-3 気泡の通過が液-液界面に与える影響

図 5-4 は式 (5.2.3) で表される気泡に作用する正味の力に対する気泡の密度の感度を示している ($\rho_{\text{liquid}} = 6000 \text{ kg/m}^3$ を仮定)。気泡の密度は実際には 0.6 kg/m^3 であるが、これを数値的に変更したとしても、 $100\text{-}1000 \text{ kg/m}^3$ 程度まではほとんど正味の力に対してほとんど感度を持たないことがわかる。一方、MPS 法では、2つの相の密度比が 10 倍程度までであれば、安定的に解析できること

が知られている [115, p. 41]。そこで本研究では、実際には 0.6 kg/m^3 程度の気泡の密度を 600 kg/m^3 ままで人為的に増大させることで、気泡の通過が液-液界面の擾乱に与える影響はほぼ変わらないまま安定的に気液界面を解析できる、「簡易気泡モデル」を考案した。簡易気泡モデルは気泡の粒子に与える密度を人為的に増大させるだけでよく、MPS 法のアルゴリズムを全く変更しないため実装は容易であり、ロバストな動作が期待できる。

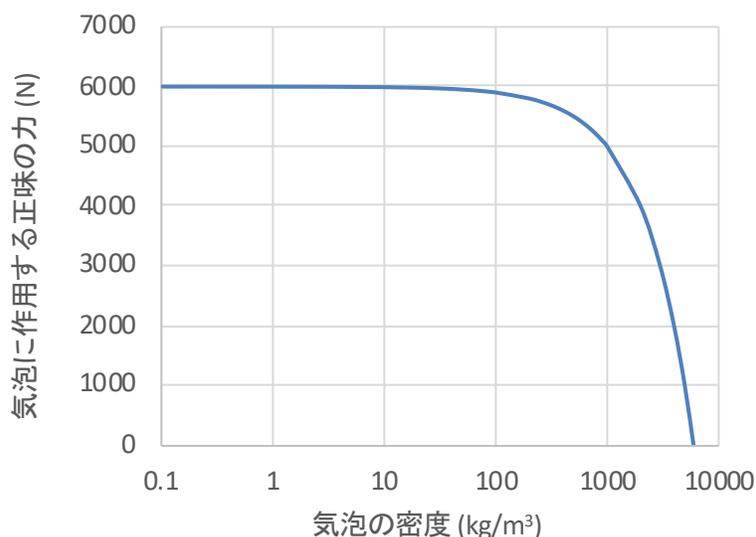


図 5-4 気泡に作用する浮力と重力の和に対する気泡の密度の感度

考案した簡易気泡モデルの妥当性を検証する。ここで確認すべき点は「気泡の密度を液相の 10 分の 1 程度まで人為的に増大させても、気泡の通過が液-液界面の擾乱に与える影響は実際の気泡密度の場合とほぼ変わらない」という流体力学上の仮説である。第 5.2.3 項で示したように一般的な MPS 法では実際の気泡密度の場合の解析ができないため、直接的な比較ができない。そこで、この仮説を検証するためには、MPS 法ではなく、実際の気泡密度で気液界面を直接的に解析することが容易な別の手法を用いる。そのよう手法としては格子法の VOF 法 [50]や Front-tracking [86]、Level-set 法 [87]等が代表的だが、本研究では、JAEA により開発された VOF 法ベースの CFD コード、JUPITER [116]を利用した（JUPITER の詳細なアルゴリズム付録第 6.6 節を参照。）。

図 5-5 は、気泡密度の液-液界面擾乱への影響を確認する JUPITER 解析の解析体系である。格子幅は全ての方向で 1 mm とした。下層の液相 1 と上層の液相 2 の物性としては VF-U1 実験で用いられた金属成分と酸化物成分をそれぞれ仮定し、密度と粘性は表 2-2 と同様に与えた。一方、気泡の密度は感度解析変数であり、実際の密度の 0.6 kg/m^3 、溶融物密度の約 10 分の 1 の 600 kg/m^3 、溶融物密度とほぼ同じの 6000 kg/m^3 という 3 ケースで実施した。粘性は、実際の気泡密度の解析ケースでは水蒸気の粘性から $1.5 \times 10^{-5} \text{ kg/s m}$ を使い、密度増大ケースでは、動粘性係数が保存するように粘性を調整した。液相 1、液相 2 と気泡の間の界面張力も、液相 1 と液相 2 として VF-U1 実験の金属成分と酸化物成分を仮定することで、[51]を参考に表 5-1 のように与えた。

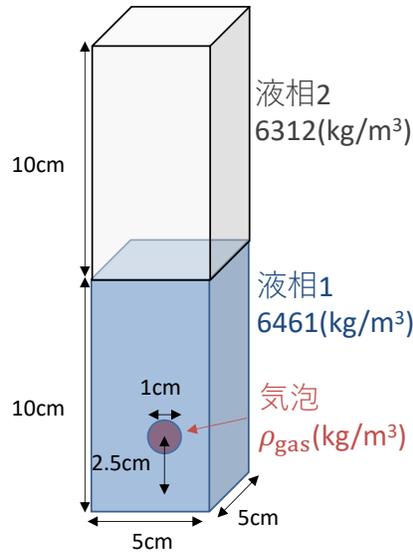


図 5-5 気泡密度が液-液界面の擾乱に与える影響感度の JUPITER による確認の解析体系

表 5-1 JUPITER 解析で適用する界面張力係数

	液相 1-液相 2	液相 1-気泡	液相 2-気泡
界面張力係数(N/m)	0.25	1.79	0.58

図 5-6 は 2 秒間の解析の結果のスナップショットを示す。 $\rho_{\text{gas}} = 0.6 \text{ kg/m}^3$ と $\rho_{\text{gas}} = 600 \text{ kg/m}^3$ のケースでは、 $t = 0.5 \text{ s}$ 程度で扁平化した気泡が液-液界面に到達・通過し、 $t = 0.8 \text{ s}$ 程度で気泡の後方を随伴していた液相 1 が気泡から離れている。このように、 $\rho_{\text{gas}} = 0.6 \text{ kg/m}^3$ と $\rho_{\text{gas}} = 600 \text{ kg/m}^3$ のケースでは気泡による液相 1 の随伴の時間進展が同期しており、さらに、随伴する液相 1 の規模も同程度であることがわかる。一方で、参考のために解析した $\rho_{\text{gas}} = 6000 \text{ kg/m}^3$ のケースでは、気泡の上昇スピードが小さく界面に到達するタイミングもずれており、随伴する液相 1 の規模も他の 2 ケースとは明らかに異なる。これらの 3 ケースの解析より、「気泡の密度を液相の 10 分の 1 程度まで人為的に増大させても、気泡の通過が液-液界面の擾乱に与える影響は実際の気泡密度の場合とほぼ変わらない」という流体力学上の仮説が確かめられた。

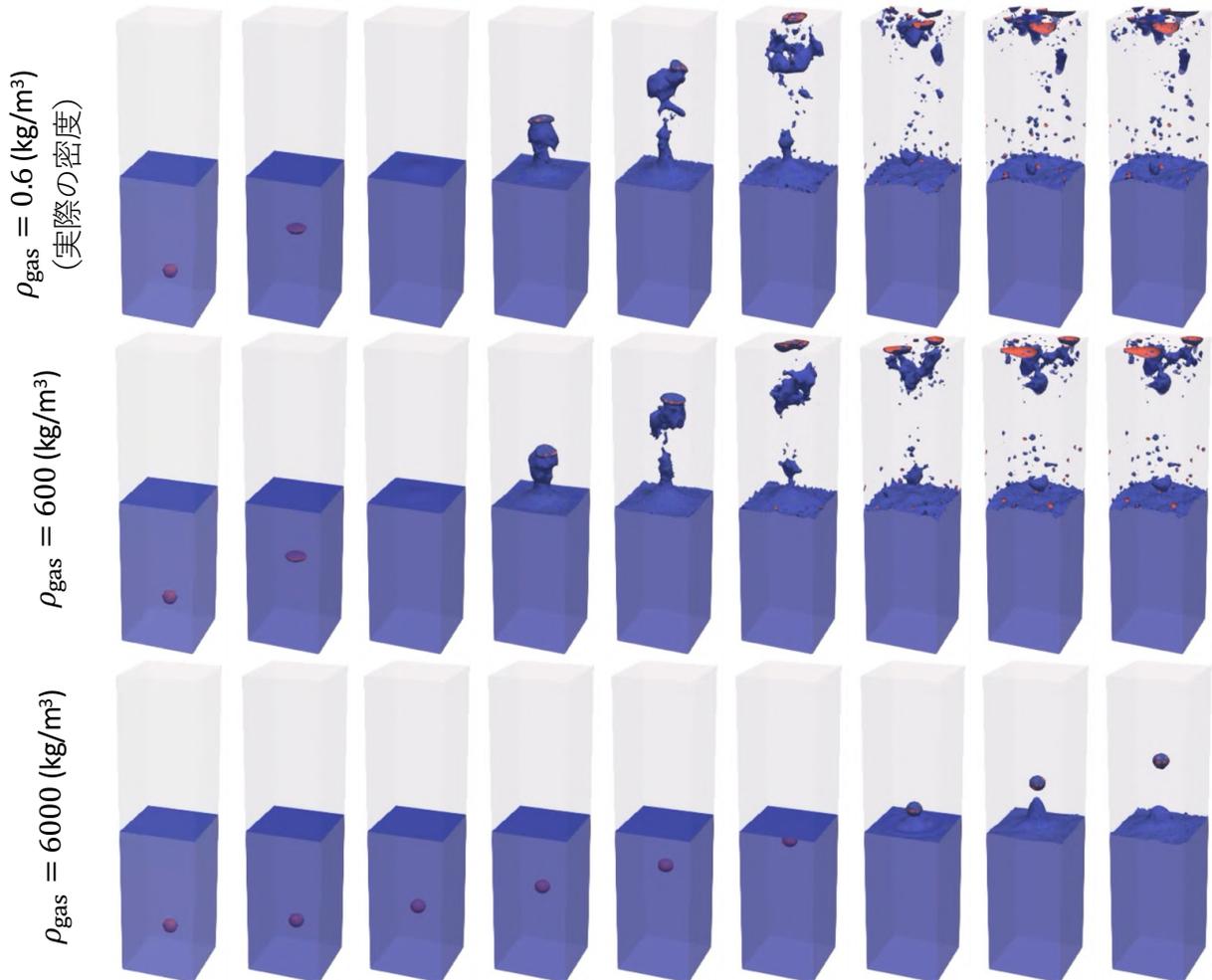


図 5-6 気泡密度が液-液界面の擾乱に与える影響感度の JUPITER による確認

6 付録

6.1 VBS 実験シリーズの概要

CEA の Journeau らは図 6-1 のような VULCANO 実験施設において、 UO_2 と ZrO_2 で構成される PWR 溶融炉心を模擬した溶融酸化物と溶融ステンレスを図 6-2 に寸法を示す珪酸質コンクリートあるいは石灰質コンクリートで製造された半円筒容器に流し込み誘導加熱で加熱することで、実機で想定されるコリウム物性を模擬した VULCANO VBS 実験（以後「VBS 実験」とする）を実施した [49] [117]。

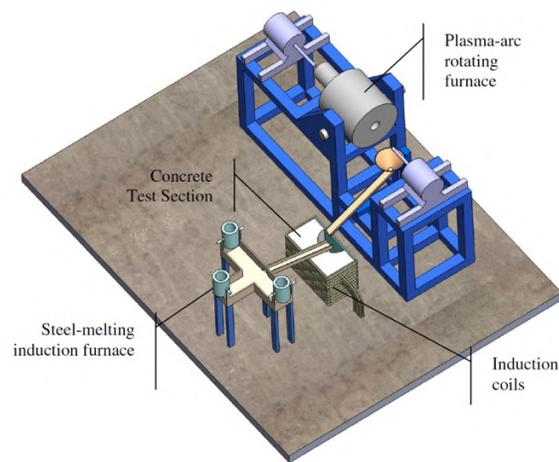


図 6-1 VBS 実験施設概略図

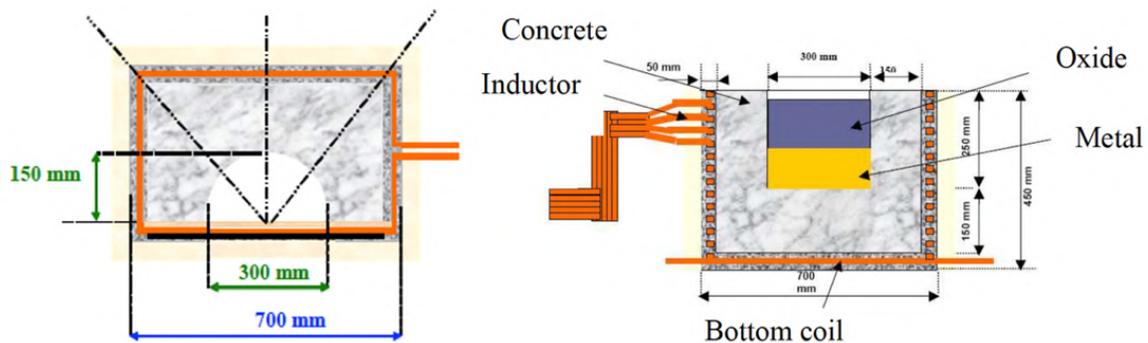


図 6-2 VBS 実験のコンクリート容器

コンクリートの種類やコリウム成分の質量や組成を変化させることで VBS-U1 実験から VBS-U4 実験までが実施され、表 6-1 には VBS 実験シリーズのそれぞれの実験条件を示している。VBS-U1 実験は石灰質コンクリートを用いているため、多くのガスが発生する MCCI を再現している。一方 VBS-U2 実験は誘導加熱に失敗したため、有意義な結果が得られなかった。VBS-U3 実験は VBS-U1 実験のコンクリートを石灰質コンクリートから珪酸質コンクリートに変更した実験で、最後の VBS-U4 実験は VBS-U3 実験の酸化物成分にコンクリートを予め混入させておくことで密度を低減した実験である [117]。以下では、特に VBS-U3 実験を紹介する。

表 6-1 VBS 実験シリーズの実験条件

Test	VBS-U1	VBS-U2	VBS-U3	VBS-U4
Concrete	Concrete G 67% CaCO ₃ 26% SiO ₂	Concrete F 25% CaCO ₃ 63% SiO ₂	Concrete F 25% CaCO ₃ 63% SiO ₂	Concrete F 25% CaCO ₃ 63% SiO ₂
Oxide load	86% (U, Zr)O ₂	86% (U, Zr)O ₂	86% (U, Zr)O ₂	45% (U, Zr)O ₂
Initial mass of oxides	35 kg	18 kg	36 kg	35 kg
Initial mass of 304L stainless steel	15 kg	17 kg	15 kg	24 kg
Heating duration	4h	Bad couplig	4h	2h 25

(Concrete G : 石灰質コンクリート、Concrete F : 珪酸質コンクリート)

実験中のコンクリート侵食の進展は、コンクリートに埋め込まれた熱電対によりリアルタイムで計測され、MCCI 終息後には耐火 (refractory) 壁を取り外すことで凝固したコリウムやコンクリートが目視観測や化学分析により調査された。図 6-3 は VBS-U3 実験の 2 時間 45 分経過時点でのコンクリート侵食と温度分布 (画質は原論文 [49] のまま) を示しており、図 6-4 には実験後のコリウムとコンクリートの様子 (赤破線は容器の初期形状) が示されている [49]。

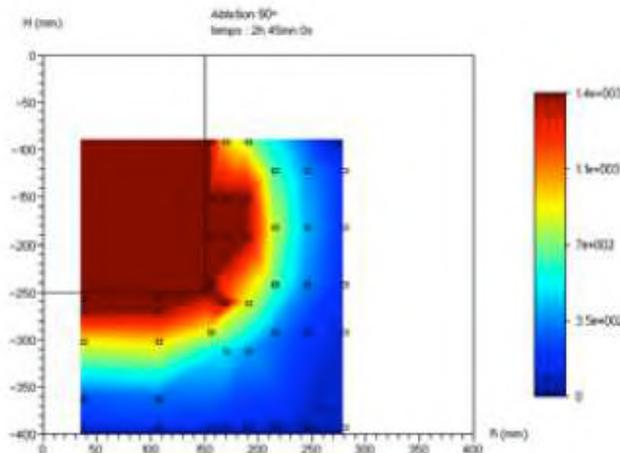


図 6-3 VBS-U3 実験の 2 時間 45 分経過時点でのコンクリート侵食と温度分布 [49]

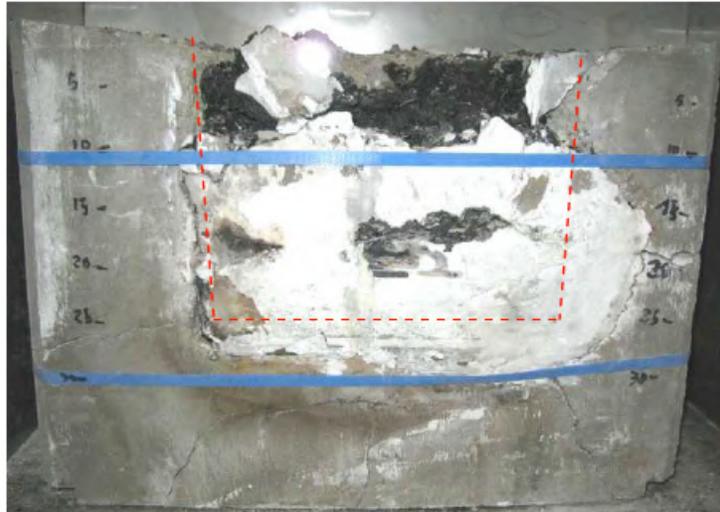


図 6-4 VBS-U3 実験後のコリウムとコンクリートの様子 [49]

実機過酷事故で想定されるコリウムを用いたこの VBS 実験でも、従来の 2 成分コリウム MCCI の理解と同様、金属成分がコンクリート分解ガス等により酸化されたり、金属成分の近くのコンクリートの侵食が促進されたりしていることが確認できた。しかし、実験者の Journeau ら自身が “unexpected” と表現 [49, p. 9068] しているように、実験後の凝固物中の金属成分と酸化物成分が単純に成層化するのではなく、図 6-5 のように金属成分がコンクリート側壁に沿って軸方向に分布していることが明らかになった（このことが、図 6-5 に示される左右対称で局所的なコンクリート侵食を説明している）。一方で、耐火壁に沿うような金属成分の分布は見られなかった。

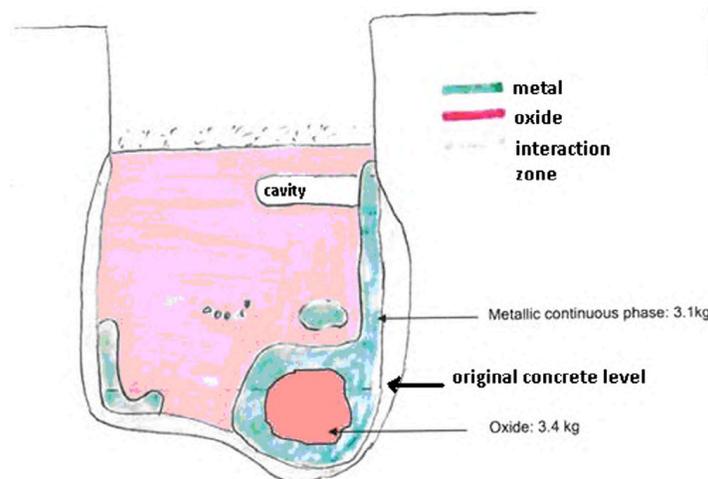


図 6-5 VBS-U3 実験後のコリウムの成分分布 [117]

6.2 数値流体解析の発展の歴史と粒子法

本節では、本研究で用いた MPS 法の開発と発展の背景を示すため、流体解析の歴史を図 6-6 と共に概説する [118]。1950 年代にコンピューターが誕生し 1960 年-1970 年代に社会に普及してくると、工業上重要な流体の挙動を、経済的・時間的コストが高い実験だけでなく数値的にも予想したいという潮流が生まれた。そのような流体解析の最初の例は、ポンプや配管といった工業機器に一組

の流体パラメーター（速度、圧力等）を与える巨視的な平均化モデル（Lumped Parameter Model）であり、RELAP [119]や MELCOR [33]がその例である。支配方程式を時間・空間で平均化することでシステムを構成する機器の巨視的なパラメーターを評価するが、精度は用いられる実験相関式の信頼性に依存する。次に、単一流路の流動様式に応じて異なる相関式を用いて管内気液二相流内のボイド率や速度分布を求める THINC [120]や FIDAS [121]といった微視的な平均化モデルが使用されるようになった。

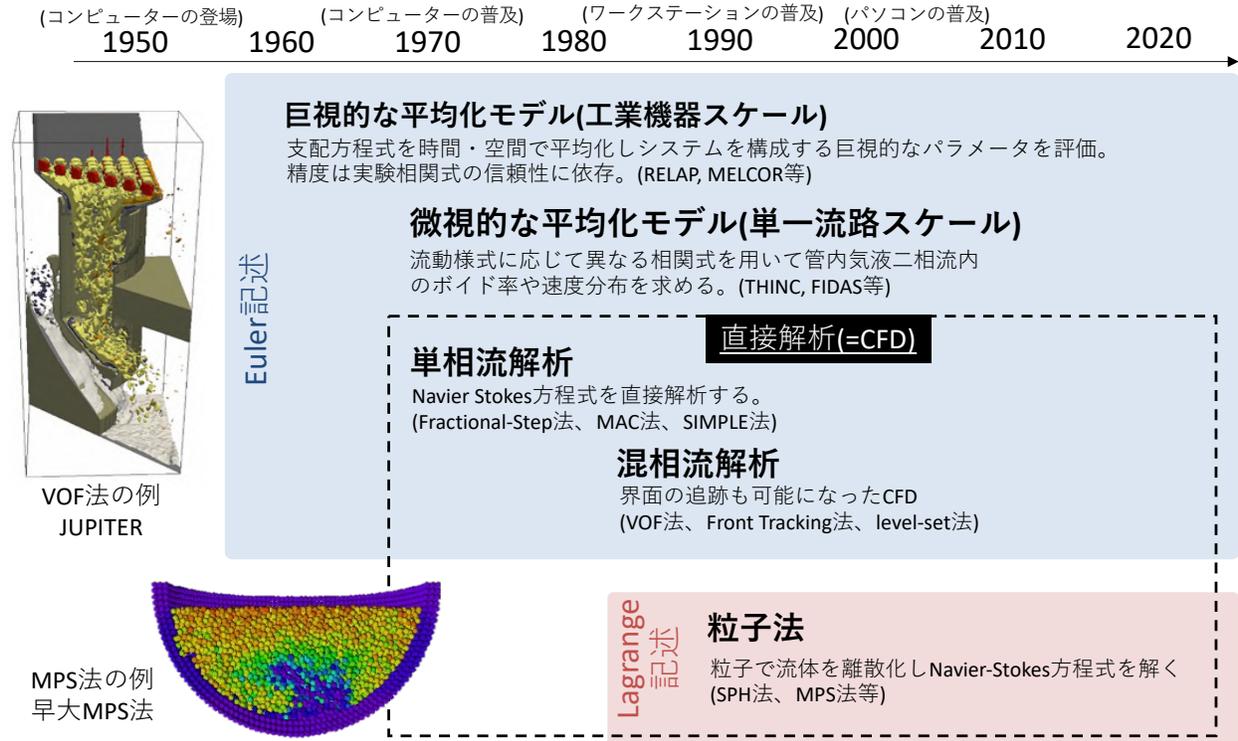


図 6-6 流体解析の歴史

1970 年頃から、工業応用のスケールとは程遠い限定的なスケールであるが、単相流の支配方程式である Navier-Stokes (N-S) 方程式を直接的に解析するアルゴリズムが発展してきた。Los Alamos 研究所の Marker and Cell (MAC) 法 [122]を皮切りに Fractional-Step 法 [123]や Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation (SIMPLE) 法 [124]、等が開発され、これらの解析アルゴリズムは以降の多くの CFD にも受け継がれている。1980 年ごろになると、自由表面や液-液界面（両者をまとめて「界面」と呼ぶ）を含む混相流解析を可能とする手法が開発され、そのうちの VOF 法 [50]や Front-tracking [86]、Level-set 法 [87]等は 2020 年代の現代でも広く利用されている。

さて、以上に述べた CFD は全て、空間に固定された計算点で N-S 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{g} \quad (6.2.1)$$

を離散化する Euler 式記述に基づいている。ここで、 \mathbf{u} は速度、 ρ は密度、 P は圧力、 μ は粘性、 \mathbf{g} は重力加速度を表す。N-S 方程式を

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} = \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{u}_a + \mathbf{u}_p + \mathbf{u}_v + \mathbf{u}_g) \quad (6.2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_a = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \quad (6.2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_p = -\frac{1}{\rho} \nabla P \quad (6.2.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_v = \frac{1}{\rho} \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (6.2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_g = \mathbf{g} \quad (6.2.6)$$

と項毎に分解すると、式 (6.2.3) は流体の移動に伴う運動量の輸送を解いていて、移流 (advection) 方程式と呼ばれる。式 (6.2.4) は圧力勾配による運動量の輸送を示しており、流体の非圧縮条件と組み合わせると Poisson 方程式を導く。さらに式 (6.2.5) は粘性による運動量の拡散を示す拡散方程式である。一方、伝熱の支配方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) T + \frac{k}{\rho c} \nabla^2 T + \frac{1}{\rho c} Q \quad (6.2.7)$$

も同様に温度 T の移流方程式と拡散方程式に分解できる。ここで、 k は熱伝導率、 c は比熱、 Q は熱発生密度である。流方程式、Poisson 方程式、拡散方程式は数学的にはそれぞれ双曲形、放物形、楕円形の微分方程式と分類でき、その数学的な構造が、数値解析上の扱いやすさと密接に関係している [36]。ほとんどの Euler 式記述の CFD では格子 (mesh) により微分方程式を離散化するが、放物形、楕円形の微分方程式の離散化では特段問題は生じない一方で、移流方程式を格子により離散化すると、後述するような数値的な困難を引き起こすことが知られている [36]。

速度 \mathbf{u} や温度 T に限定せず、一般の物理量 ϕ に対して 1 次元の移流方程式を図 6-7 に示すと

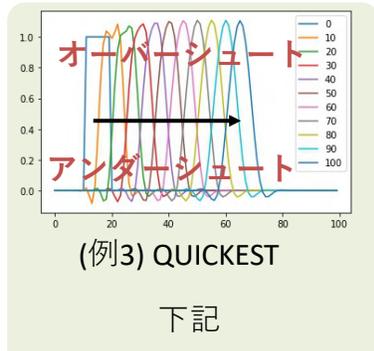
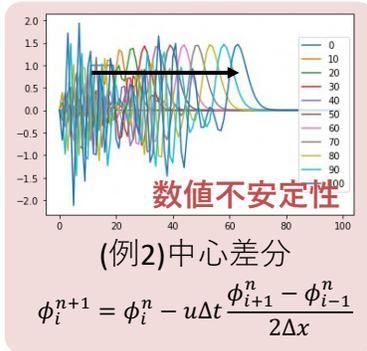
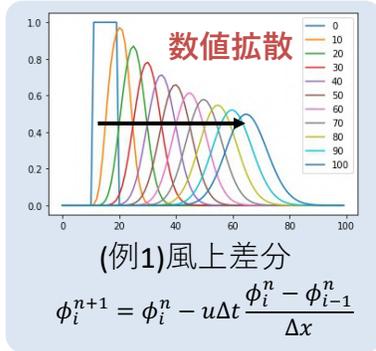
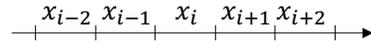
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (6.2.8)$$

と表されるが、この 1 次元方程式を空間差分するだけでも、風上差分、中心差分、ライス法 [125]、QUICK [126]、QUICKEST (改良 QUICK)、河村・桑原スキーム [127]、ENO [128]、WENO (改良版 ENO) [129]、CIP [130] 等多種が開発されており [36] [131]、そのような入念な開発が必要な理由こそが、図 6-7 に示されるような数値的な問題の発生である。図 6-7 の (例 1) 風上差分では、時刻 0 では矩形分布であった物理量 ϕ が時間進展に伴って拡散している (数値拡散)。一方、(例 2) のように中心差分を用いて空間微分項を離散化すると主に後方で不自然な振動が発生し、最悪の場合発散し計算が破綻する (数値不安定性)。これらを受けて開発されたより精巧な離散化手法 (例: QUICKEST) を用いてもなお、(例 3) のように少なからぬ数値拡散や、初期の上限値を上回る値が発生してしまうオーバーシュートや、その逆のアンダーシュートが発生してしまう。

移流方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (u > 0)$$

1次元格子を仮定



$$\phi_i^{n+1} = \begin{cases} \phi_i^n - \frac{u\Delta t}{6\Delta x} (2\phi_{i+1} + 3\phi_i - 6\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) + \frac{u^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) - \frac{u^3\Delta t^3}{6\Delta x^3} (\phi_{i+1} - 3\phi_i + 3\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) & u \geq 0 \\ \phi_i^n + \frac{u\Delta t}{6\Delta x} (2\phi_{i-1} + 3\phi_i - 6\phi_{i+1} + \phi_{i+2}) + \frac{u^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}) + \frac{u^3\Delta t^3}{6\Delta x^3} (\phi_{i-1} - 3\phi_i + 3\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) & u < 0 \end{cases}$$

図 6-7 格子法による移流方程式の離散化に伴う課題

単相流 CFD であっても N-S 方程式に含まれる速度 \mathbf{u} や温度 T の移流項は問題になるが、混相流 CFD ではその問題はさらに顕在化する。Euler 式記述の混相流 CFD の代表例である VOF 法 [50] では、異なる相 1 と 2 を区別するため空間で連続的に定義される関数 (Color function)

$$X_1(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} 1 & \text{(相 1)} \\ 0 & \text{(相 2)} \end{cases} \quad (6.2.9)$$

を各セル体積 θ で積分した VOF 値 (流体の支配体積割合に相当)

$$F = \frac{1}{\theta} \int_{\theta} X_1 d\mathbf{r} \quad (6.2.10)$$

が各セルに定義される。各セルで成立する支配方程式は、式 (6.2.1) のままであるが、ここに現れる密度と粘性は両相の VOF 値の重み付け平均で計算される。

$$\rho = F\rho_1 + (1 - F)\rho_2 \quad (6.2.11)$$

$$\mu = F\mu_1 + (1 - F)\mu_2 \quad (6.2.12)$$

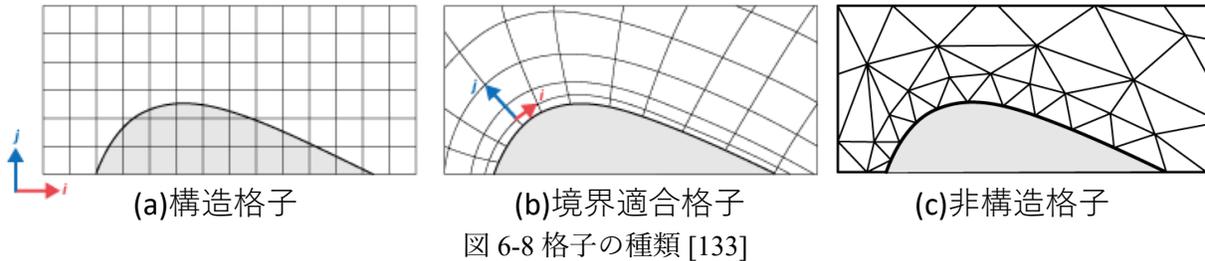
単相流 CFD と同様のアルゴリズム (Fractional-step [123]等) により N-S 方程式を解くことで得られる速度 \mathbf{u} を用いて、移流方程式

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla F \quad (6.2.13)$$

に従い VOF 値が空間を移流していくと仮定するのが VOF 法の要である。VOF 値が 1 のセルは相 1 に、VOF 値が 0 のセルは相 0 により満たされており、その中間の値をもつセルはそれらが界面のセルであると仮定することで、界面の時間発展を追跡することができる。しかし、界面を決定する VOF 値が (6.2.13) の移流方程式に支配されていることから、VOF 法では速度 \mathbf{u} や温度 T のみならず界面の曲面 (2 次元であれば曲線) が数値的に拡散しぼやけたり、数値不安定性が発生してしまう。

ここまでに Euler 式記述の CFD に共通する移流項の数値的な課題をまとめたが、Euler 式記述のほとんどの CFD が準拠する「格子」についても数値的な困難と克服の歴史がある。ある計算点が空間のどの領域を代表しているのかを示す格子は、図 6-8 (a) のような構造格子ばかりでなく、図 6-8 (b) のように境界に沿う境界適合格子 (Boundary Fitted Coordinate: BFC) や、有限体積法 [132]

に用いられる、格子を長方形や直方体に限定しない非構造格子等を用いた方が、境界条件を与えやすく、また、着目する領域にそうでない領域より多くの格子を配置できる [36]。しかし、構造格子以外の格子を用いる場合、その格子をどう生成するか、そして、その格子上で支配方程式をどう離散化するか、に煩雑さが移行してしまうとも言える。



構造格子以外の格子の生成には平滑化による方法 [134]、楕円形変微分方程式を用いる方法 [135]、デローニー三角分割 [136]等の自動格子生成法が発達しているが、流動方向、流速分布等を考慮してメッシュの配置や粗密を設定しなければならず、高精度な計算を行うためには豊富な知識と経験が必要となる。さらに、境界適合格子の計算点で支配方程式を離散化する場合、その支配方程式は一般的なデカルト座標での表示とは異なり、場合によっては微分幾何学等の複雑な数学に基づいた座標変換が必要になる。

Euler 式記述の CFD は 2020 年代の現代でも主流な数値解析手法であるが、移流方程式の離散化に伴う数値的な困難や格子生成、座標変換に伴う煩雑さは重要な課題であり続けている。これらの課題を解決するために考案され「粒子法」と総称される MPS 法 [35]や Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法 [58]は Lagrange 式記述に基づいており、Euler 式記述の CFD であれば不可避である移流項がそもそも存在しない。また、流体の流れに沿って運動する計算点（粒子）により離散化するため格子生成の煩雑さもない。さらに粒子法では支配方程式の各項を、粒子の相対的な位置関係に依存しない方法で離散化するため、支配方程式が複雑になる心配もない。

6.3 MPS 法の離散化モデルの導出

MPS 法において勾配モデルは

$$\langle \nabla \phi \rangle_i \equiv \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\phi_j - \phi_i}{r_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} w(r_{ij}) \right] \quad (6.3.1)$$

で与えられることを第 2.1.1 項で示した。この勾配モデルの直観的な導出は [36]や [137]に詳しいが、次元数 d をかける理由や初期 PND n^0 で割る理由の説明が直観的であるため、必ずしも明確に理解できない。そこでここでは、[54, p. 272]を参考に、2次元体系での勾配モデルを最小二乗法で導出する（3次元でも同様）。

ここで目的とするのは、着目粒子とその近傍粒子の間の相対位置 $\mathbf{r}_{ij} = (x_{ij}, y_{ij})^T$ や物理量 ϕ を用いて最も「合理的」な $\nabla \phi$ を評価することである。1 次までの Taylor 級数展開より、粒子 i と j の間の物理量の差分 ϕ_{ij} は

$$\phi_{ij} \equiv \phi_j - \phi_i \approx \phi_x x_{ij} + \phi_y y_{ij} \quad (6.3.2)$$

で与えられる。ここで ϕ_x と ϕ_y が評価したい ϕ の勾配

$$\phi_x \equiv \frac{\partial \phi}{\partial x}, \phi_y \equiv \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (6.3.3)$$

で、式 (6.3.2) の近似を最もよく成立させるような ϕ_x と ϕ_y の組み合わせが、与えられている離散値から評価できる最も「合理的な」 ϕ の勾配であると考えられる。この時、近似の指標として用いるのは重み関数 $w_{ij} \equiv w(r_{ij})$ により各粒子ペア間の残差 (residue) が重みづけされた以下を用いることとする。

$$I(\phi_x, \phi_y) \equiv \sum_{j \neq i} \frac{[\phi_{ij} - (\phi_x x_{ij} + \phi_y y_{ij})]^2 w_{ij}}{r_{ij}^2 n^0} \quad (6.3.4)$$

最小二乗法の理論により、求めたい ϕ_x と ϕ_y は

$$\begin{cases} \frac{\partial I(\phi_x, \phi_y)}{\partial \phi_x} = 0 \\ \frac{\partial I(\phi_x, \phi_y)}{\partial \phi_y} = 0 \end{cases} \quad (6.3.5)$$

の連立方程式の解で与えられる。微分を実施すれば、これは以下の行列方程式と同値である。

$$\begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} & \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} & \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix} \quad (6.3.6)$$

これは 2×2 行列なので簡単に逆行列が求まる。

$$\begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\det} \begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} & -\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ -\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} & \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix} \quad (6.3.7)$$

ここで

$$\det = \left(\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} \right) \left(\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} \right) - \left(\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \right)^2 \quad (6.3.8)$$

であり、これは一般に 0 ではない。さて、式 (6.3.7) を整理するため、図 6-9 のような正方格子上の粒子配置を仮定する。この時、x 方向と y 方向の対称性から明らかに、

$$\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} = \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} \quad (6.3.9)$$

であり、また、粒子 j のクロスターム $x_{ij} y_{ij}$ は x 軸ないし y 軸を挟んで逆側にそれと絶対値が同じで符号が反対の粒子が必ず存在するので、

$$\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} y_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} = 0 \quad (6.3.10)$$

である。これらを用いると式 (6.3.7) の行列は単位行列の係数倍となり

$$\begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2}} \begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix} \quad (6.3.11)$$

を得る。ここで式 (6.3.9) の事実より

$$n^0 = \sum_{j \neq i} w_{ij} = \sum_{j \neq i} w_{ij} \frac{r_{ij}^2}{r_{ij}^2} = \sum_{j \neq i} w_{ij} \frac{x_{ij}^2 + y_{ij}^2}{r_{ij}^2} = 2 \sum_{j \neq i} w_{ij} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^2} \quad (6.3.12)$$

であることを利用すれば、

$$\sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij}^2}{n^0 r_{ij}^2} = \frac{1}{2} \quad (6.3.13)$$

である。この導出過程より、式 (6.3.13) の右辺の分母 2 が次元数を表すことは明らかなので、2 を d で置き換え、

$$\begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{pmatrix} = d \begin{pmatrix} \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} x_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \\ \sum_{j \neq i} \frac{w_{ij} y_{ij} \phi_{ij}}{n^0 r_{ij}^2} \end{pmatrix} = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{\phi_{ij} \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} w_{ij} \quad (6.3.14)$$

という式 (2.1.10) と等価な式を得る。

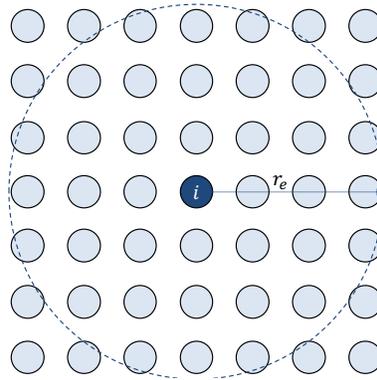


図 6-9 正方格子上的粒子配置

なお、粒子が正方格子に配置されていない一般の場合は、式 (2.1.10) の勾配モデルは式 (6.3.3) の近似を最もよく成立させるような勾配ではなくなる。

ところで、第 2.1.2 項で示される離散化モデルでは、2 次までの Taylor 級数展開に基づいた最適なフィッティングを与える微分係数を求め、粒子配置の異方性による異方性誤差を低減している。しかし、そもそも Taylor 級数展開によるフィッティング自体が近似であるので、粒子が等方に配置されていたとしてもなお Taylor 級数で高次の項を切り捨てた (truncation) ことによる誤差が生まれる。このように、離散化による誤差 (discretization error) は異方性誤差と切り捨て誤差により構成される (この説明は [54] に詳しい)。切り捨て誤差をさらに低減するためには、高次までの項を含めて (2.1.29) の Taylor 級数展開をすれば良く、際限なく高次の項を含めていけば原理的には誤差を限りなく小さくできる。このような方針に基づく MPS 法を Least Square MPS (LSMPS) 法 [138] と呼び、SCM を用いる MPS 法は 2 次精度の LSMPS 法という捉え方もできる。

6.4 VF-U1 実験の誘導加熱による酸化物成分と金属成分への入熱量

VF-U1 実験の誘導加熱は、高温時、酸化物成分に大部分が入熱したことを、種々の仮定に基づき簡易的に確認する。

誘導加熱の原理

誘導加熱にはヒステリシス損と渦電流損という 2 種類の加熱方法があるが、一般的な誘導加熱 (IH ヒーター等) でも MCCI 実験でも、後者の渦電流損の方法が用いられるので、ここでは渦電

流による誘導加熱を説明する [82]。図 6-10 のような半径 a (m)の円柱物体に 1m 当たり n 巻(1/m)のコイルを巻き、振幅が I (A)、周波数が f (Hz)の交流電流を流すことを考える。円柱物体内には、コイルに発生する磁場を打ち消すような方向に誘導電流が発生するが、誘導電流は必ずしも物体中に一様に流れるのではなく、以下で与えられる浸透深さ d (m)内に電流密度が集中し、内側にいくにしたがって指数関数的に減少する [82]。

$$d = 503 \sqrt{\frac{\rho}{\mu_r f}} \quad (6.4.1)$$

ここで μ_r は比透磁率、 ρ は抵抗率(Ωm)である。金属のような導体ではこの浸透深さが物体の直径に対して極めて小さくなることから、そのような電流の局在を「表皮効果」と呼ぶ。

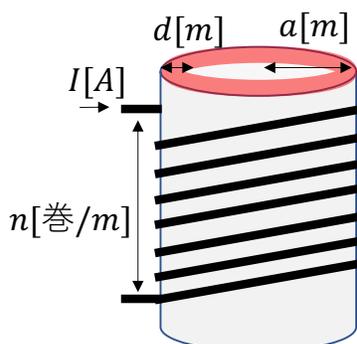


図 6-10 典型的な誘導加熱の体系

また、円柱上の物体 1 m あたりに発生する熱量 P (W/m)は以下で与えられることが知られる [82]。

$$P = \begin{cases} \frac{8\pi^5 a^4 f^2 \mu_r^2 n^2 I^2}{\rho} 10^{-14} \text{ [W/m]} & \left(\frac{2a}{d} \ll 14\right) \\ 4\pi^2 a n^2 I^2 \sqrt{\mu_r f \rho} 10^{-8} \text{ [W/m]} & \left(\frac{2a}{d} \gg 14\right) \end{cases} \quad (6.4.2)$$

ここで注意すべきは、表皮効果が発生していない場合 ($2a/d \ll 14$) と表皮効果が発生している場合 ($2a/d \gg 14$) で、発生熱量の式が異なることである。

VF-U1 実験の体系での入熱量の簡易評価

VF-U1 実験の加熱の条件を表 6-2 に示す。また計算を簡単にするため、VF-U1 実験中の酸化物成分と金属成分は、図 6-11 のようにともに円柱上に分布していたと仮定する。さらに、溶融物とコイルの間にはコンクリートがあるため、溶融物とコイルとは直接接してはいないが、酸化物と金属成分との間に入熱量の比を確認できれば十分であるため、コイルは溶融物の側面に存在し、図 6-10 と同様の体系になっていると仮定する。

表 6-2 VF-U1 実験の加熱条件

周波数(Hz)	電流(A)	巻数(1/m)
1.3×10^5	2000 *1	25 *2

*1 VF-U1 実験の記録がないので、VBS 実験 [49]の電流値で仮定。実際には、実験者が目標とする入熱量になるように実験中に制御している。 *2 [45]Figure2 のコイルの絵から目算

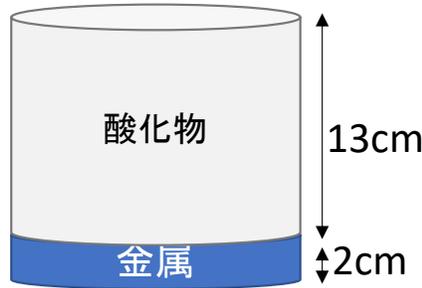


図 6-11 VF-U1 実験中の溶融物の構成の仮定

さらに、酸化物成分と金属成分は、それぞれ純粋な UO_2 と SUS304 であると仮定し、それらの代表的な温度での物性のオーダーを、それぞれ表 6-3 と表 6-4 にまとめている。

表 6-3 誘導加熱に関わる UO_2 の物性 [83]

	300K (常温)	1700K (SUS 融点付近)	2400K (UO_2 融点付近)
ρ : 抵抗率(Ωm)	$\sim 10^5 \times 10^{*1}$	$\sim 10^3 \times 10^{*1}$	~ 1
μ_r : 比透磁率	~ 1	~ 1	~ 1

*1 溶融するまでは酸化物は粉末であるので、空隙が存在することで電気抵抗が上昇することを簡易的に考慮するために暫定的に 10 倍している。

表 6-4 誘導加熱に関わる SUS304 の物性 [139]

	300K (常温)	1700K (SUS 融点付近)	2400K (UO_2 融点付近)
ρ : 抵抗率(Ωm)	$\sim 10^{-6}$	$\sim 10^{-6}$	$\sim 10^{-6}$
μ_r : 比透磁率	~ 10	~ 1	~ 1

これらの物性値を式 (6.4.1) に代入すると、酸化物 (UO_2) では表皮効果は発生せず、金属 (SUS304) では表皮効果が発生していることが確認できる。このことから酸化物領域で発生する発熱は式 (6.4.2) の上式で、金属領域で発生する発熱は式 (6.4.2) の下式で、概ね見積もることができる。その結果を表 6-5 に示す。この結果からも、このことから、模擬物質が常温であった初期は金属に入熱が集中するが、金属の付近に存在する酸化物粉末が金属からの熱伝導で加熱されると、酸化物へ入熱が集中するようになることが確認できた。このことは、VF-U1 実験の論文の記 [45]載 “Once the oxide is melt, because of the high frequency of heating (about 130 kHz) and the respective conductivities of the two liquids, most part of the induced power goes into the oxide.”にも一致する。

表 6-5 酸化物成分と金属成分への入熱量とそれらの比

	300K (常温)	1700K (SUS 融点付近)	2400K (UO_2 融点付近)
酸化物 (UO_2) への入熱量(W)	3.28E-02	3.28E+00	3.28E+04
金属 (SUS304) への入熱量(W)	2.81E+00	8.90E-01	8.90E-01

全入熱量に対する酸化物 (UO ₂) 入熱量の比(%)	1.2	78.7	100.0
---	-----	------	-------

ただし、実際には、酸化物成分には UO₂ 以外にも ZrO₂ や SiO₂ が、金属成分には SUS304 以外にも Zr が含まれているため、物性値は上記の通りではない。また、金属成分は酸化物成分の下部に円柱上に分布しているのではなく、本研究で着目しているように、よりコイルに近いコンクリート壁付近に分布している。デブリの成分分布は、本研究で示したように、各成分が経る熱的状态の履歴が重要であるので、それらに入熱する加熱密度のより詳細な評価、及び解析での考慮は、今後の課題である。

6.5 界面張力の基礎理論

本項では界面張力に関する前提知識を紹介する。なお、表面（液体と真空との界面）は界面の特殊なケースであるので、以降では界面張力に論点を絞る。

巨視的なスケールで界面張力は、等温環境で液体に外力を与えて界面の面積のみを微小面積 dA だけ増加させるときに必要な微小仕事 $dW^{\text{interface}}$ の係数 σ として定義される [140]。

$$dW^{\text{interface}} = -\sigma dA \quad (6.5.1)$$

ここで負号は、液体から外部へ向かう仕事を正としているために付されている。一方、熱力学第 1 法則より、液体に加えられる熱 δQ はその内部エネルギーの増分 dU と液体が外部へする仕事 dW の和で与えられる。

$$\delta Q = dU + dW \quad (6.5.2)$$

等圧過程する時の一般の仕事は

$$dW = dW^{\text{body}} + dW^{\text{interface}} = pdV - \sigma dA \quad (6.5.3)$$

で与えられるため、

$$\delta Q = dU + pdV - \sigma dA \quad (6.5.4)$$

を得る。さらに、等温環境から液体が吸収する熱はエントロピーの変化 dS を用いて

$$\delta Q = TdS \quad (6.5.5)$$

と表せることと、Gibbs の自由エネルギーの微小変化 dG は

$$dG \equiv dU + pdV - TdS \quad (6.5.6)$$

で定義される [141] ことから、

$$dG = \sigma dA \quad (6.5.7)$$

が示される。このことから、界面張力は液体が等圧的等圧的に微小面積だけ変形するときの Gibbs の自由エネルギーの増分

$$\sigma = \left(\frac{\partial G}{\partial A} \right)_{P,T} \quad (6.5.8)$$

としても表現できることがわかる。ここから転じて、界面張力 σ を「単位面積だけ界面を創るのに必要なエネルギー」ないし「単位面積の界面に蓄えられた界面エネルギー」と表現したりもするが、どの表現も熱力学的には等価である。

界面張力が Gibbs の自由エネルギーであることを示せたので、ここで界面張力に関する基本的な性質として、液体の界面内外の圧力差 (Laplace 圧力) の表式を導く。等温等圧のまま、図 6-12 のように液滴を仮想的に微小に膨張させると考えると、Gibbs の自由エネルギーの変化は

$$dG = dG_{in} + dG_{out} = (dU_{in} + P_{in}dV_{in} - TdS_{in}) + (dU_{out} + P_{out}dV_{out} - TdS_{out}) = \sigma dA \quad (6.5.9)$$

で与えられるが、界面内外の相をまとめて孤立系と見れば内部エネルギーの総和は不変である。

$$dU_{in} + dU_{out} = 0 \quad (6.5.10)$$

また、この孤立系が外界から断熱されて準静的に変化するとすればエントロピーの総和も保存される [141]。

$$dS_{in} + dS_{out} = 0 \quad (6.5.11)$$

当然

$$dV_{in} + dV_{out} = 0 \quad (6.5.12)$$

でもあるので、内部の体積膨張を dV で改めて表せば、(6.5.9) は

$$\Delta P \equiv P_{in} - P_{out} = \sigma \frac{dA}{dV} \quad (6.5.13)$$

を導く。体系が 2 次元で界面が半径 r の円形ならば、

$$\frac{dA}{dV} = \frac{dA/dr}{dV/dr} = \frac{2\pi}{2\pi r} = \frac{1}{r} \quad (6.5.14)$$

であり、またこの法則は全体として円を仮定しなくても、局所的な曲率 κ (= 曲率半径の逆数) に対しても成立するので、結局、よく知られる 2 次元の Laplace 圧力の表式を得る。

$$\Delta P = \sigma \kappa \quad (6.5.15)$$

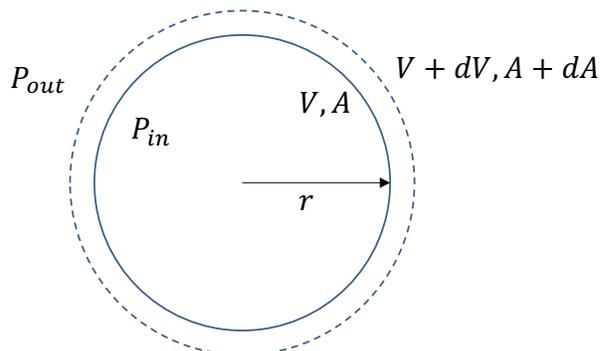


図 6-12 Laplace 圧力の導出

以上が巨視的な界面張力の定義とその性質である。ところで、この巨視的な理論では界面の面積を増加させるために必要な仕事として最初に界面張力を定義したのだが、そもそもなぜ界面積を増加させるのにはなぜ仕事が必要なのかを示す (以下では [142]を参考にした)。液体は、天文学

的な数の原子や分子により構成され、言い換えれば、液体は膨大な数の原子や分子で構成された多体系である。原子や分子の間には電磁気的なポテンシャルを介した相互作用が存在し、二つの原子・分子が遠ければ引力、近ければ斥力が作用する（e.g. van der Waals 力）。原子・分子間にこのような相互作用がある場合、外部からの別の力がなければ、原子・分子はお互いがお互いによるポテンシャルエネルギーを小さくしようと移動していき、多体系全体として最もポテンシャルエネルギーの総和が小さい形状に収斂していく。そのような形状が、界面積がより小さい状態であることは以下のようにわかる。内部の原子・分子には、最もポテンシャルエネルギーの低い（すなわち安定な）隣接位置にいる他の原子・分子が既に最大数存在するが、界面の原子・分子にはそのような安定位置にまだ他の原子・分子が入ってくるスペースがあるために、界面の原子・分子同士でそのスペースを埋め合わせていく方向に移動する方が安定である。その埋め合わせの結果、界面の一部の原子・分子は内部の原子・分子となっていく、最終的には界面に存在する原子・分子の数が最も少ない、すなわち界面の面積が最も小さい状態に落ち着く。このように、界面の面積が小さい方が多体系としてのポテンシャルエネルギーが小さく安定なので、その安定状態をずらそうと界面の面積を大きくするには、外から仕事を与える必要があるのである

6.6 JUPITER

JUPIER (JAEA Utility Program for Interdisciplinary Thermal-hydraulics Engineering and Research) は JAEA により開発された多成分多相詳細熱流動解析コードで、気相と任意の数の液体成分、及び固体が混在する固液気多成分多相流を機構論的に解析できる [116]。1 流体モデルに基づく VOF 法を採用しており、支配方程式中に現れる物性値の相や成分による平均化に用いる VOF 値を移流方程式 (6.2.13) により移流させることで多成分多相流体を直接解析している。この際、変数は等間隔直交格子にスタガード配置し、以下の表 6-6 に示す Fractional-step 法 [123] のアルゴリズムに基づいて支配方程式を解く。特に、界面張力は Brackbill らによる CSF モデル [77] を利用しており、その曲率評価のためには level-set 法 [87] を用いている。

表 6-6 JUPIER が基づく Fractional-step アルゴリズム

処理	空間差分法	時間差分
速度と温度の移流	5 次精度 HJ-WENO 法 [129]	TVD Runge-Kutta 法 [143]
重力と界面張力		
速度と温度の拡散	2 次精度中心差分	
圧力の Poisson 方程式		
VOF 値の移流		THINC/WLIC 法 [144]
VOF 値による物性の更新		
$t += dt$		

謝辞

本博士論文研究の謝辞を記すにあたって、何よりもまず山路哲史教授に感謝申し上げます。学部生時代からの6年間の間、研究に関する指導のみならず、進路相談、就職活動への協力、インターンシップや予算獲得の応募書類の添削まで、いただいたご尽力は計り知れません。私の知る限り最高品質の教育を、マンツーマンで受け続けることができたことは、私の一生の財産であり、誇りです。学位審査の最後の最後まで手のかかる学生であったことに全く頭が上がらない思いですが、研究者として修行を積んだ後は、僅かでも、山路先生に恩返しをすることができればと切に願っています。研究室の事務手続きでは大場さんに大変お世話になりました。特に、博士後期課程以降、獲得予算に係るほとんど全ての手続きに手取り足取りご教示いただき、非常に助かりました。Li Xinさんは、私が博士後期課程に進学したタイミングで研究員として2年間研究室にいらっしゃいました。MPS法やMCCIの右も左もわからない状態から、なんとか研究のスタートを切ることができたのは、Li Xinさんのご助力のおかげです。来年度からLi Xinさんと同じJAEAの研究員として働けることを、大変嬉しく思います。同様に、副査の範疇を超えて多くの知見を提供下さった古谷先生や鈴木先生、鷲尾先生、石川先生、コードを提供してくださりいつでも質問に丁寧に答えてくれたDuanさん、MPS法にテーマ変更した際に時間を惜しまずコードの仕様を教えてくれた高橋くんと川上くん、度々のメールにも懇意に回答くださったCEAのJourneauさんらやKITのFoitさんらにも、謝辞を伝えたいです。また、修士修了までの3年間を切磋琢磨した同期の勝田、鈴木、和田山とは、頻繁に連絡を取り合っています。研究活動に直接関連はしませんが、同じ原子力の業界で活躍している彼らの頑張りを直接的、間接的に聞くことは、研究の励みになりました。同期以外にも、研究室でたわいもない話をしてきた数々の先輩や後輩にも感謝を伝えたいです。研究室における生活は、彼ら・彼女らとのコミュニケーションがあったからこそ、楽しく、心地よいものでした。さらに、JAEAの吉田様、山下様をはじめとする旧熱流動グループの皆様には、D2の夏季実習以降から共同研究や研究相談、就職活動等で度々お世話になりました。来年度から同グループの皆様の下で働けることを誇りに思います。最後に、父、母、妹、そして、高校時代からともに過ごし昨夏入籍をした妻の佳世を含め、私の学生生活を支えていただいた全ての方に多大なる感謝を示し、本博士論文研究の謝辞とさせていただきます。誠にありがとうございました。

参考文献

- [1] B. R. Sehgal, Nuclear Safety in Light Water Reactors: Severe Accident Phenomenology, Academic Press., 2011.
- [2] 東京電力ホールディングス, “福島第一原子力発電所 1~3 号機の事故の経過の概要,” [オンライン]. Available: https://www.tepco.co.jp/nu/fukushima-np/outline/2_1-j.html. [アクセス日: 8 8 2022].
- [3] J. Rohde , G. Cenerino, “Ex-vessel melt behavior and its role in safety assessment of LWR,” 著: *Second OECD (NEA) CSNI Specialist Meeting on Molten Core Debris-Concrete Interactions*, 1992.
- [4] G. Randall, “SEVERE ACCIDENT PHENOMENA part 2: Ex-vessel,” Vienna, 2017.
- [5] OECD/NEA, “State-of-the-Art Report on Molten Corium Concrete Interaction and Ex-Vessel Molten Core Coolability,” 2017.
- [6] 早稲田大学, “Multi-Physics モデルリンク`による 福島 2・3 号機へ` テ`スタル燃料デ`ブリ 深さ方向の性状同定,” JAEA, 2021.
- [7] TEPCO, “福島第一原子力発電所事故発生後の詳細な進展メカニズムに関する未確認・未解明事項の調査・検討結果「第 5 回進捗報告」について,” 25 12 2017. [オンライン]. Available: https://www.tepco.co.jp/decommission/information/accident_unconfirmed/index-j.html. [アクセス日: 11 9 2022].
- [8] 東京電力ホールディングス, “東京電力ホールデ`ィンク`ス(株) 福島第一原子力発電所の廃止措置等に向けた 中長期ロード`マップ` (案),” 2019. [オンライン]. Available: https://www.tepco.co.jp/decommission/information/committee/roadmap/pdf/2019/t191227_04-j.pdf. [アクセス日: 8 2022].
- [9] 東京電力ホールディングス, “燃料デブリ取り出しの状況,” [オンライン]. Available: <https://www.tepco.co.jp/decommission/progress/retrieval/index-j.html>. [アクセス日: 8 8 2022].
- [10] 東京電力ホールディングス, “福島第一原子力発電所 燃料デ`ブリ等の取出し~保管について , ” 2 7 2020. [オ ン ラ イ ン]. Available: <https://www.tepco.co.jp/decommission/common/images/progress/retrieval/200702.pdf>. [アクセス日: 8 8 2022].
- [11] H. Yano, T. Kitagaki, H. Ikeuchi, R. Wakui, H. Higuchi, N. Kaji, K. Koizumi , T. Washiya, “Direction on characterization of fuel debris for defueling process in Fukushima daiichi nuclear power plant,” 著: *Proc. Int. Nucl. Fuel Cycle Conf. (GLOBAL2013)*, Salt Lake City, 2013.
- [12] J. K. Fink , M. C. Perti, “Thermophysical Properties of Uranium Oxide ANL/RE-97/2,” Argonne Natiola Laboratory Report, 1997.
- [13] I. Cohen , B. E. Schaner, “A metallographic and X-Ray study of the UO₂-ZrO₂ system,” *Journal of Nuclear Material*, 第 卷 9, pp. 18-52, 1986.
- [14] M. F. Roche, L. Leibowitz , J. K. Fink, “Solidus and Liquidus Temperatures of Core- Concrete Mixtures, NUREG/CR-6032,” NRC, 1993.
- [15] T. Sevón, “Molten Core-Concrete Interactions in Nuclear Accidents. Theory and Design of an Experimental Facility,” VTT, 2005.
- [16] V. Strizhov, V. Kanukova, T. Vinogradova, E. Askenov , V. Nikulshin, “An Assessment of the CORCON-MOD3 Code Part I: Thermal-Hydraulic Calculations, NUREG/IA-0129,,” NRC, 1996.

- [17] P. Hofmann, “Current knowledge on core degradation phenomena, a review,” *Journal of Nuclear Materials*, 第 卷 270, pp. 194-211, 1999.
- [18] G. A. Greene, S. Hodge, C. R. Hyman, M. L. Tobias, “The response of BWR Mark III Containments to Short-Term Station Blackout Severe Accident Sequences, NUREG/CR-5571,” NRC, 1991.
- [19] C. Journeau, P. Piluso, “Molten Core Concrete Interaction,” 著: *Comprehensive Nuclear Materials*, 第 卷 2, 2012.
- [20] 恭. 吉田, “乱流拡散と Lagrange 速度相関,” 第 卷 23, pp. 181-190, 2004.
- [21] M. T. Farmer, S. Lomperski, D. J. Kilsdonk, R. W. Aeschlimann, S. Basu, “Summary of Findings from the Melt Coolability and Concrete Interaction (MCCI) Program,” 著: *ICAPP '07*, Nice, 2007.
- [22] M. T. Farmer, S. Lomperski, D. J. Kilsdonk, R. W. Aeschlimann, “OECD MCCI Project 2-D Core Concrete Interaction (CCI) Tests: Final Report (OECD/MCCI-2005-TR05),” OECD, 2006.
- [23] C. Journeau, P. Piluso, J. F. Haquet, E. Boccaccio, V. Saldo, J. M. Bonnet, S. Malaval, L. Carénini, L. Brissonneau, “Two-dimensional interaction of oxidic corium with concretes: The VULCANO VB test series1,” *Annals of Nuclear Energy*, 第 卷 36, p. 1597–1613, 2009.
- [24] J. J. Foit, T. Cron, B. Fluhrer, A. Miassoedov, T. Wenz, “MOCKA Experiments on Concrete Erosion by a Metal and Oxide Melt,” 著: *5th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR)*, Cologne, 2012.
- [25] H. -J. Allelein, M. Bürger, “Considerations on ex-vessel corium behavior: Scenarios, MCCI and coolability,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 236, pp. 2220-2236, 2006.
- [26] B. Tourniaire, J. M. Bonnet, “Study of the mixing of immiscible liquids by sparging gas: results of the BALISE experiments,” 著: *10th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH 10)*, Seoul, 2003.
- [27] M. Epstein, D. J. Petrie, J. H. Linehan, G. A. Lambert, D. H. Cho, “Incipient stratification and mixing in aerated liquid-liquid or liquid-solid mixtures,” *Chemical Engineering Science*, 第 卷 36, pp. 84-86, 1981.
- [28] D. R. Bradley, D. R. Gardner, J. E. Brockmann, R. O. Griffiths, “CORCON-Mod3: An integrated computer model for analysis of molten core-concrete interactions, NUREG/CR-5843,” NRC, 1993.
- [29] M. Reimann, W. B. Murfin, “The WECHSL-code: A computer program for the interaction of a core melt with concrete,” Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1981.
- [30] B. Spindler, B. Tourniaire, J. M. Seiler, “Simulation of MCCI with the TOLBIAC-ICB code based on the phase segregation model,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 236, p. 2264–2270, 2006.
- [31] M. Nie, M. Fischer, G. Lohnert, “Advanced MCCI modeling based on stringent coupling of thermohydraulics and real solution of thermochemistry in COSACO,” 著: *ICONE10*, Arlington, 2002.
- [32] M. Cranga, R. Fabianelle, F. Jacq, M. Barrachin, F. Duval, “The MEDICIS code, a versatile tool for MCCI modeling,” 著: *ICAPP 05*, Seoul, 2005.
- [33] R. O. Gauntt, J. E. Cash, R. K. Cole, C. M. Erickson, L. L. Humphries, S. B. Rodriguez, M. F. Young, “MELCOR Computer Code Manuals, Sandia National Laboratories, NUREG/CR 6119, SAND2005-5713,” NRC, 2005.

- [34] B. Spindler, K. Atkhen, M. Cranga, J. Foit, M. Garcia, W. Schmidt, T. Sevon, C. Spengler, "Simulation of Molten Corium Concrete Interaction in a Stratified Configuration: the COMET-L2-L3 Benchmark," 著: *The 2nd European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2007)*, Karlsruhe, 2007.
- [35] S. Koshizuka, Y. Oka, "Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid," *NUCLEAR SCIENCE AND ENGINEERING*, 第 卷 123, pp. 421-434, 1996.
- [36] 誠. 越塚, 数值流体力学, 培風館, 1997.
- [37] X. Li, Y. Oka, "Numerical simulation of the SURC-2 and SURC-4 MCCI experiments by MPS method," *Annals of Nuclear Energy*, 第 卷 73, pp. 46-52, 2014.
- [38] X. Li, A. Yamaji, "A Numerical Study of Isotropic and Anisotropic Ablation in MCCI by MPS Method," *Progress of Nuclear Energy*, 第 卷 90, pp. 46-57, 2016.
- [39] X. Li, A. Yamaji, "Three-dimensional numerical study on the mechanism of anisotropic MCCI by improved MPS method," *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 314, pp. 207-216, 2017.
- [40] X. Li, I. Sato, A. Yamaji, G. Duan, "THREE-DIMENSIONAL NUMERICAL STUDY ON POOL STRATIFICATION BEHAVIOR IN MOLTEN CORIUM-CONCRETE INTERACTION (MCCI) WITH MPS METHOD," 著: *26th International Conference on Nuclear Engineering ICONE26*, London, 2018.
- [41] P. Chai, M. Kondo, N. Erkan, K. Okamoto, "Numerical simulation of 2D ablation profile in CCI-2 experiment by moving particle semi-implicit method," *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 301, pp. 15-23, 2016.
- [42] P. Chai, M. Kondo, N. Erkan, K. Okamoto, "Numerical simulation of MCCI based on MPS method with different types of concrete," *Annals of Nuclear Energy*, 第 卷 103, p. 227-237, 2017.
- [43] R. Chen, Q. Cai, P. Zhang, Y. Li, K. Guo, W. Tian, S. Qiu, G. H. Su, "Three-dimensional numerical simulation of the HECLA-4 transient MCCI experiment by improved MPS method," *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 347, p. 95-107, 2019.
- [44] Q. Cai, D. Zhu, R. Chen, J. Deng, Y. Li, C. Dong, W. Tian, S. Qiu, G. Su, "Three-dimensional numerical study on the effect of sidewall crust thermal resistance on transient MCCI by improved MPS method," *Annals of Nuclear Energy*, 第 卷 144, p. 107525, 2020.
- [45] V. Bouyer, C. Journeau, J. Haquet, P. Piluso, A. Nakayoshi, A. Ikeuchi, T. Washiya, T. Kitagaki, "LARGE SCALE VULCANO MOLTEN CORE CONCRETE INTERACTION TEST CONSIDERING FUKUSHIMA DAIICHI CONDITION," Prague, 2019.
- [46] T. Kitagaki, H. Ikeuchi, K. Yano, H. Ogino, J. F. Haquet, L. Brissonneau, B. Tormos, P. Piluso, T. Washiya, "Characterization of the VULCANO test products for fuel debris removal from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant," *Progress in Nuclear Science and Technology*, 第 卷 5, pp. 217-220, 2018.
- [47] 宏. 池内, "溶融燃料とコンクリートとの相互作用 (MCCI) による生成物の相および硬さ: 大型試験からの知見," JAEA, 2019.
- [48] C. Journeau, *Private Communication*, 9: 21, 2022.
- [49] C. Journeau, J. M. Bonnet, L. Ferry, J. F. Haquet, P. Piluso, "Interaction of Concretes with Oxide + Metal Corium: The VULCANO VBS Series," 著: *ICAPP '09*, Tokyo, 2009.
- [50] C. Hirt, B. Nichols, "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries," *Journal of Computational Physics*, 第 卷 39, pp. 201-225, 1981.

- [51] A. Boulin, J. Haquet, P. Piluso, S. Semenov, M. Antoni, T. Washiya, A. Nakayoshi, T. Kitagaki, "HYDRODYNAMIC NUMERICAL SIMULATIONS OF A PROTOTYPICAL OXIDE-METAL CORIUM MELT REPRESENTATIVE OF FUKUSHIMA 1- F1 SEVERE ACCIDENT CONDITIONS," 著: *2017 2nd International Conference on Advanced Robotics and Mechatronics (ICARM)*, Hefei and Tai'an, 2017.
- [52] A. A. Amsden, F. H. Harlow, "The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows, LA-4370," Los Alamos, 1970.
- [53] D. S. Kershaw, "The Incomplete Cholesky-Conjugate Gradient Method for the Iterative Solution of System of Linear Equations," *Journal of computational physics*, 第 卷 26, pp. 43-65, 1978.
- [54] G. Duan, A. Yamaji, S. Koshizuka, B. Chen, "The truncation and stabilization error in multiphase moving particle semi-implicit method based on corrective matrix: Which is dominant?," *Computers and Fluids*, 第 卷 190, p. 254-273, 2019.
- [55] Y. Suzuki, "Studies on improvement in particle method and multiphysics simulator using particle method [doctoral thesis in Japanese].," The University of Tokyo, Tokyo, 2008.
- [56] A. Khayyer, H. Goto, "Enhancement of stability and accuracy of the moving particle semi-implicit method," *J Comput Phys*, 第 卷 230, pp. 3093-3118, 2011.
- [57] G. Oger, S. Marrone, D. Le Touzé, M. de Leffe, "SPH accuracy improvement through the combination of a quasi-Lagrangian shifting transport velocity and consistent ALE formalisms," *Journal of Computational Physics*, 第 卷 313, p. 76-98, 2016.
- [58] L. Lucy, "A numerical approach to the testing of the fission hypothesis," *Astronomical Journal*, 第 卷 83, pp. 1013-1024, 1977.
- [59] R. Xu, P. Stansby, D. Laurence, "Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach," *Journal of Computational Physics*, 第 卷 228, p. 6703-6725, 2009.
- [60] G. Duan, S. Koshizuka, A. Yamaji, B. Chen, X. Li, T. Tamai, "An accurate and stable multiphase moving particle semi-implicit method based on a corrective matrix for all particle interaction models," *International Journal for Numerical Methods Engineering*, 第 卷 1, pp. 1-28, 2018.
- [61] G. Duan, T. Matsunaga, S. Koshizuka, A. Yamaguchi, M. Sakai, "New insights into error accumulation due to biased particle distribution in semi-implicit particle methods," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 第 卷 388, p. 114219, 2022.
- [62] G. Duan, M. Sakai, "An enhanced semi-implicit particle method for simulating the flow of droplets with free surfaces," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 第 卷 389, p. 114338, 2022.
- [63] A. Khayyer, H. Gotoh, Y. Shimizu, "Comparative study on accuracy and conservation properties of two particle regularization schemes and proposal of an optimized particle shifting scheme in ISPH context," *Journal of Computational Physics*, 第 卷 332, pp. 236-256, 2017.
- [64] M. Tanaka, T. Masunaga, "Stabilization and smoothing of pressure in MPS method," *Journal of Computational Physics*, 第 卷 229, pp. 4279-4290, 2010.
- [65] A. Shakibaeinia, Y. C. Jin, "MPS mesh-free particle method for multiphase flows," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 第 %1 卷 (全 %2 卷)229-232, pp. 13-26, 2012.

- [66] T. Kawahara , Y. Oka, “Ex-vessel molten core solidification behavior by moving particle semi-implicit method,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, 第 卷 49, 第 12, pp. 1156-1164, 2012.
- [67] G. Duan, A. Yamaji , S. Koshizuka, “A novel multiphase MPS algorithm for modeling crust formation by highly T viscous fluid for simulating corium spreading,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 343, p. 218–231, 2019.
- [68] D. G. , B. Chen, “Stability and accuracy analysis for viscous flow simulation by the moving particle semi-implicit method,” *FLUID DYNAMICS RESEARCH*, 第 卷 45, p. 035501, 2013.
- [69] M. Ramacciotti, C. Journeau, F. Sudreau , G. Cognet, “Viscosity models for corium melts,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 204, p. 377–389, 2001.
- [70] C. Journeau, E. Boccaccio, C. Brayer, G. Cognet, J. F. Haquet, C. Jégou, P. Piluso , J. Monerri, “Ex-vessel corium spreading: results from the VULCANO spreading tests,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 223, pp. 75-102, 2003.
- [71] Argonne National Laboratory, “Melt Spreading Code Assessment, Modifications, and Applications to the EPR Core Catcher Design,” 2009.
- [72] H. Suzuki, T. Matsumoto, T. Mitadera, M. Matsumoto, I. Sasaki , T. Zama, “Fundamental Experiment and Analysis for Melt Spreading on Concrete Floor,” 著: *2nd ASME-JSME international conference on nuclear engineering*, 1993.
- [73] E. R. Copus, R. E. Blose, J. E. Brockmann, R. B. Simpson , D. A. Lucero, “Core-Concrete Interactions Using Molten Urania With Zirconium on a Limestone Concrete Basemat, The SURC-1 Experiment, NUREG/CR.,” NRC, 1992.
- [74] University of Texas, “Mixture of liquids (miscibility),” 2013. [オンライン]. Available: <http://ch302.cm.utexas.edu/physEQ/index.php#solutions/miscibility.html>. [アクセス日: 17 8 2022].
- [75] Y. Zhu, Z. Qiu, J. Xiong , Y. Yang, “Verification and validation of MPS potential force interface tension model for stratification simulation,” *Annals of Nuclear Energy*, 第 卷 148, p. 107753, 2020.
- [76] M. Kondo, S. Koshizuka, K. Suzuki , M. Takimoto , “SURFACE TENSION MODEL USING INTER-PARTICLE FORCE IN PARTICLE METHOD,” 著: *5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference*, San Diego, 2007.
- [77] J. Brackbill, D. Kothe , C. Zemach, “A continuum method for modeling surface tension.,” *Journal of Computer Physics*, 第 卷 100, 第 2, pp. 335-354, 1992.
- [78] N. Shirakawa, H. Horie, Y. Yamamoto , S. Tsunoyama, “Analysis of the void distribution in a circular tube with the two-fluid particle interaction method,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, 第 卷 38, 第 6, pp. 392-402, 2001.
- [79] S. Koshizuka, K. Shibata, M. Kondo , T. Matsunaga, moving Particle Semi-implicit Method, Academic Press, 2018.
- [80] X. Chen, Z. Sun , G. Xi, “Improvement of Surface Tension Model and Numerical Investigation on Droplet Wetting Effect,” *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 第 卷 46, 第 7, pp. 115-121, 2012.
- [81] T. Fukuda, A. Yamaji, X. Li, J. Haquet , A. Boulin, “Analysis of the localized metallic phase solidification in VULCANO VF-U1 with MPS method,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 385, p. 111537, 2021.
- [82] 勘. 高橋, 哲. 渡辺, 成. 深町, 喜. 久保田, 高周波の工業への応用 誘導・誘電加熱・超音波, 東京電機大学出版局, 1977.

- [83] J. L. Bates, C. A. Hinman , T. Kawada, “Electrical Conductivity of Uranium Dioxide,” *Journal of The American Ceramic Society*, 第 卷 50, 第 12, pp. 652-656, 1967.
- [84] L. Brissonneau, H. Ikeuchi, P. Piluso, J. Gousseau, C. David, V. Testud, J. Roger, V. Bouyer, T. Kitagaki, A. Nakayoshi, S. Dubois , T. Washiya, “Material characterization of the VULCANO corium concrete interaction test with concrete representative of Fukushima Daiichi Nuclear Plants,” *Journal of Nuclear Materials*, 第 卷 528, p. 151860, 2020.
- [85] C. Spengler, H. J. Allelein, M. Cranga, F. Duval , J. P. Van Dorsselaere, “Assessment and development of molten corium concrete interaction models for the integral code ASTEC,” 著: *EUROSAFE Mtg*, Brussels, 2005.
- [86] S. O. Unverdi , G. Tryggvason, “A front tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows,” *Journal of Computer Physics* , 第 卷 100, pp. 25-37, 1992.
- [87] S. Banerjee , F. Beux, “Numerical Simulation of Three-Dimensional Two-Phase Flows by Means of a Level Set Method,” 著: *European Community on Computational Methods in Applied Sciences*, 1996.
- [88] K. Nomura, S. Koshizuka, Y. Oka , H. Obata, “Numerical Analysis of Droplet Breakup Behavior using Particle Method,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, 第 卷 38, 第 12, p. 1057–1064, 2001.
- [89] R. Q. Duan, S. Koshizuka , S. Oka, “Two-dimensional simulation of drop deformation and breakup at around the critical Weber number,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 225, pp. 37-48, 2003.
- [90] G. Duan, S. Koshizuka , B. Chen, “A contoured continuum surface force model for particle methods,” *Journal of Computational Physics*, 第 卷 298, p. 280–304, 2015.
- [91] A. Khayyer, H. Gotoh , N. Tsuruta, “A New Surface Tension Model for Particle Methods with Enhanced Splash Computation,” *Journal of Japan Society of Civil Engineering*, 第 卷 70, 第 2, pp. I_26-I_30, 2014.
- [92] G. Duan, B. Chen, S. Koshizuka , H. Xiang, “Stable multiphase moving particle semi-implicit method for incompressible interfacial flow,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 第 卷 318, pp. 636-666, 2017.
- [93] D. Harvie, M. Davidson , M. Rudman, “An analysis of parasitic current generation in volume of fluid simulations,” *Applied Mathematical Modelling*, 第 卷 30, 第 1056-1066, 2006.
- [94] 仁. 後藤, 粒子法:連続体・混相流・粒状体のための計算科学, 森北出版, 2018.
- [95] K. Inagaki, "Multi-Physics Particle Method for the Simulation of Severe Accidents in Nuclear Power Plants," *Transactions of the Atomic Energy Society of Japan*, vol. 14, no. 4, pp. 249-260, 2015.
- [96] J. Xiong, Y. Zhu, T. Zhang , X. Cheng, “Lagrangian simulation of three-dimensional macro-scale melting based on enthalpy method,” *Computers and Fluids*, 第 卷 190, pp. 168-177, 2019.
- [97] R. Chen, C. Dong, K. Guo, W. Tian, S. Qiu , G. H. Su, “Current achievements on bubble dynamics analysis using MPS method,” *Progress in Nuclear Energy*, 第 卷 118, p. 103057, 2020.
- [98] S. Adami, X. Y. Hu , N. A. Adams, “A new surface-tension formulation for multi-phase SPH using a reproducing divergence approximation,” *Journal of Computational Physics*, 第 卷 229, p. 5011–5021, 2010.
- [99] T. Fukuda, X. Li , A. Yamaji, “A New Potential Interface Tension Model for MPS Method Avoiding Unphysical Particle Cohesion,” *Progress in Nuclear Energy*, 2022.
- [100] H. Gotoh, H. Ikari, T. Memita , T. Sakai, “Lagrangian particle method for simulation of wave overtopping on a vertical seawall,” *Coastal Engineering Journal*, 第 卷 47, 第 2-3, pp. 157-181, 2005.

- [101] M. Kondo , J. Matsumoto, “Surface tension and wettability calculation using density gradient potential in a physically consistent particle method,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 第 卷 385, p. 114072, 2021.
- [102] J. Han , T. Grétar, “Secondary breakup of axisymmetric liquid drops. I. Acceleration by a constant body force,” *PHYSICS OF FLUIDS*, 第 卷 11, 第 12, pp. 3650-3667, 1999.
- [103] T. Fukuda, A. Yamaji , X. Li, “DEVELOPMENT OF A NEW WALL WETTING MODEL FOR COHESION-FREE POTENTIAL INTERFACE TENSION MODEL OF MPS METHOD,” 著: *The 12th Japan-Korea Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS12)*, Miyazaki, 2022.
- [104] G. Taylor, “The formation of emulsions in definable fields of flow,” *Proc. R. Soc. Lond. A* , 第 卷 146, p. 501–523, 1934.
- [105] M. Sakai, J. H. Song, N. Yoshida, S. Suzuki, Y. Kameshima , A. Nakajima, “Direct observation of internal fluidity in a water droplet during sliding on hydrophobic surfaces,” *Langmuir*, 第 卷 22, 第 11, pp. 4906-4909, 2006.
- [106] G. Li, Y. Oka, M. Furuya , M. Kondo, “Experiments and MPS analysis of stratification behavior of twoimmiscible fluids.,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 265, pp. 210-221, 2003.
- [107] P. Than, L. Preziosi, D. Josephl , M. Arney, “Measurement of interfacial tension between immiscible liquids with the spinning rod tensiometer,” *Journal of Colloid and Interface Science*, 第 卷 124, 第 2, pp. 552-559, 1988.
- [108] D. Van Krevelen , K. Te Nijenhuis, “Chapter 8 - interfacial energy properties,” 著: *Properties of Polymers*, Elsevier, 2009, p. 229–244..
- [109] X. Wang, C. Chen, K. Binder, U. Kuhn, U. Poschl, H. Su , Y. Cheng, “Molecular dynamics simulation of the surface.,” *Atmospheric Chemistry and Physics*, 第 卷 18, pp. 17077-17086, 2018.
- [110] C. H. Giles, “The Surface Properties of Dyes,” *Review of Progress in Coloration and Related Topics*, 第 卷 11, pp. 89-100, 1981.
- [111] J. Douglas, J. Gasiorek , J. Swaffield, *Fluid Mechanics*, Longman Scientific & Technical, 1985.
- [112] J. F. Haquet, *Private Communication*.
- [113] H. Y. Yoon, S. Koshizuka , Y. Oka, “Direct calculation of bubble growth, departure, and rise in nucleate pool boiling,” *International Journal of Multiphase Flow*, 第 卷 27, pp. 277-298, 2001.
- [114] S. Koshizuka, H. Ikeda , Y. Oka, “Numerical analysis of fragmentation mechanisms in vapor explosions,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 189, pp. 423-433, 1999.
- [115] E. I. Hassan, L. Benjamin, M. Gladys, L. S. Nathalie , M. Olivier, “Numerical simulation of the crossing of al liquid-liquid interface by a droplet,” *Physical Review Fluids*, 第 卷 5, 第 9, p. 0, 2020.
- [116] 誠. 越塚, 計算力学レクチャーシリーズ 5 粒子法, 東京: 丸善出版, 2005.
- [117] S. Yamashita, T. Ina, Y. Idomura , H. Yoshida, “A numerical simulation method for molten material behavior in nuclear reactors,” *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 322, p. 301–312, 2017.
- [118] J. J. Foit, M. Fischer, C. Journeau , G. Langrock, “Experiments on MCCI with oxide and steel,” *Annals of Nuclear Energy*, 第 卷 74, pp. 100-109, 2014.
- [119] 守. 秋山, 正. 有富, 新しい気液二相流数値解析 - 多次元流動解析 -, コロナ社, 2002.
- [120] The RELAP5 Development Team, “RELAP5/MOD3 Code Manual, NUREG/CR-5535,” NRC, 1995.

- [121] H. Chelemer, P. T. Chu, L. E. Hochreiter, "THINC-IV-An Improved Program for Thermal-Hydraulics Analysis of Rod Bundles Cores, WCAP-7956," 1973.
- [122] S. Sugawara, Y. Miyamoto, "FIDAS : Detailed Subchannel Analysis Code Based on the Three-Fluid and Three-Field Model," *Nuclear Engineering and Design*, 第 卷 129, pp. 146-161, 1990.
- [123] J. H. Welch, F. H. Harlow, J. P. Shannon, B. J. Daly, "THE MAC METHOD A Computing Technique for Solving Viscous, Incompressible, Transient Fluid-Flow Problems Involving Free Surfaces," LOS ALAMOS SCIENTIFIC LABORATORY of the University of California, 1965.
- [124] R. Preyret, T. D. Taylor, *Computational methods for fluid flow*, Springer-Verlag, 1982.
- [125] S. V. Patanker, D. B. Spalding, "A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three dimensional parabolic flows," *Int. J. Heat Mass Transfer*, 第 卷 15, 1982.
- [126] P. Lax, B. Wendroff, "Systems of conservation laws," *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 第 卷 13, pp. 217-237, 1960.
- [127] B. P. Leonard, "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 第 卷 19, pp. 59-98, 1979.
- [128] T. Kawamura, K. Kuwahara, "Computation of High Reynolds Number Flow Around a Circular Cylinder with Surface Roughness," *AIAA Paper*, 第 卷 84, 第 0340, 1984.
- [129] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, S. Chakravarthy, "Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory schemes III," *Journal of Computer Physics*, 第 卷 71, pp. 231-303, 1987.
- [130] G. Jian, C. W. Shu, "Efficient implementation of weighted eno schemes," *Journal of Computational Physics*, 第 卷 126, pp. 202-228, 1996.
- [131] H. Takewaki, T. Yabe, "The cubic-interpolated pseudo particle (CIP) method: application to nonlinear and multi-dimensional hyperbolic equations," *Journal of Computer Physics*, 第 卷 70, pp. 355-372, 1987.
- [132] "移流法," [オンライン]. Available: http://www.slis.tsukuba.ac.jp/~fujisawa.makoto.fu/cgi-bin/wiki/index.php?%B0%DC%CE%AE%CB%A1#notefoot_17. [アクセス日: 11 8 2022].
- [133] C. M. Rhie, W. L. Cow, "Numerical Study of the Turbulent Flow Past and Airfoil with Trailing Edge Separation," *AIAA Journal*, 第 卷 21, pp. 1525-1532, 1983.
- [134] HEXAGON, "もっと知りたい！熱流体解析の基礎 55 第 6 章 熱流体解析の手法：6.3.3 メッシュの種類," 24 4 2019. [オンライン]. Available: <https://www.cradle.co.jp/media/column/a227>. [アクセス日: 11 8 2020].
- [135] A. A. Amsden, C. W. Hirt, "A Simple Scheme for Generating General Curvilinear Grid," *Journal of Computer Physics*, 第 卷 11, pp. 348-359, 1973.
- [136] J. F. Thompson, F. C. Thames, C. W. Mastin, "TOMCAT - A Code for Numerical Generation of Boundary-Fitted Curvilinear Coordinate System on Fields Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies," *Journal of Computer Physics*, 第 卷 24, pp. 274-302, 1977.
- [137] B. Delaunay, "Sur la sphère vide," *Bulletin de l'Académie des Sciences de l'URSS, Classe des Sciences Mathématiques et Naturelles*, 第 卷 6, pp. 793-800, 1934.
- [138] 誠. 越塚, 和. 柴田, 浩. 室谷, 粒子法入門 流体シミュレーションの基礎から並列計算と可視化まで, 丸善出版, 2014.

- [139] T. Tamai , S. Koshizuka, “Least squares moving particle semi-implicit method: An arbitrary high order accurate meshfree Lagrangian approach for incompressible flow with free surfaces,” *Computational Particle Mechanics*, 第 卷 1, pp. 277-305, 2015.
- [140] ステンレス協会, “ステンレスの導電率、透磁率、熱膨張率などの物理的性質について,” [オンライン]. Available: <http://www.jssa.gr.jp/contents/faq-article/q6/>.
- [141] 保. 高田, “ぬれと表面張力,” *伝熱(Journal of HTSJ)*, 第 卷 43, 第 178, pp. 43-48, 2004.
- [142] 晴. 田崎, 新物理学シリーズ 32 熱力学 – 現代的な視点から –, 東京: 培風館, 2000.
- [143] 邦. 高橋, “表面張力と表面エネルギー,” *ぶれいず(BRAZE)*, 第 卷 38, 第 109, pp. 52-59, 2004.
- [144] S. Gottlieb , C. Shu, “Total variation diminishing Runge-Kutta schemes,” *Mathematics of Computation*, 第 卷 67, pp. 73-85, 1998q.
- [145] K. Yokoi, “Efficient implementation of THINC scheme: a simple and practical smoothed VOF algorithm,” *Journal of Computational Physics*, 第 卷 226, pp. 1985-2002, 2007.
- [146] 日本機械学会, JSME テキストシリーズ 伝熱工学, 丸善出版, 2005.
- [147] J. Kim, “A continuous surface tension force formulation for diffuse-interface models,” *Journal of Computational Physics* , 第 卷 204, pp. 784-804, 2005.

Acronyms

1F	-	福島第一原子力発電所
ANL	Argonne National Laboratory	-
BFC	Boundary Fitted Coordinate	境界適合格子
BWR	Boiling Water Reactor	沸騰水型原子炉
CEA	Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives	-
CFD	Computational Fluid Dynamics	数値流体力学
CFP	Cohesion-Free Potential	-
CSF	Continuous Surface Force	-
DCH	Direct Containment Heating	格納容器直接加熱
DEH	Direct Electrical Heating	電熱線によるコリウムの直接加熱
FCM	First-order Corrective Matrix	1次精度修正行列
IAEA	International Atomic Energy Agency	国際原子力機関
ICCG	Incomplete Cholesky Conjugate Gradient method	不完全コレスキー分解付き共役勾配法
IRSN	Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire	放射線防護・原子力安全研究所
JAEA	Japan Atomic Energy Agency	日本原子力研究開発機構
KIT	Karlsruhe Institute of Technology	-
LCS	Limestone/Common Sand concrete	石灰石・砂コンクリート
MAFL	Meshless Advection using Flow directional Local grid	-
MCCI	Molten Core-Concrete Interaction	溶融炉心・コンクリート相互作用
MPS	Moving Particle Semi-implicit	-
N-S	Navier-Stokes	-
NRC	Nuclear Regulation Committee	米国原子力規制委員会
OECD	Organization for Economic Co-operation and Development/Nuclear Energy Agency	経済協力開発機構/原子力機関
OPS	Optimized Particle Shifting	-
PCV	Primary Containment Vessel	原子炉格納容器
PND	Particle Number Density	粒子数密度
PS	Particle Shifting	-
PST	Particle Stabilizing Term	-
PWR	Pressurized Water Reactor	加圧水型原子炉
RPV	Reactor Pressure Vessel	原子炉圧力容器
SCM	Second-order Corrective Matrix	2次精度修正行列
SIL	siliceous concrete	珪酸質コンクリート
SNL	Sandia National Laboratory	-
VF-U1	<u>V</u> ULCANO <u>F</u> ukushima <u>U</u> ranium <u>1</u>	-
VTT	VTT Technical Research Centre of Finland	-

Nomenclature

A	任意のベクトル	
<i>a</i>	Zhu モデルのチューニング係数	-
<i>B</i>	液滴の短径	m
<i>c</i>	比熱	J/kg·K
C_{ij}	corrective matrix	-
C₁	corrective matrix の第 1 行ベクトル	-
<i>C</i>	Ramacciotti 相関式の係数またはポテンシャルモデルのポテンシャル係数	-
<i>Ca</i>	Capillary 数	-
<i>d</i>	次元数	-
<i>D</i>	混合拡散係数	m ² /s
<i>E</i>	ポテンシャル	J
<i>Eo</i>	Eötvös 数	-
f	体積力	N/m ³
g	重力加速度ベクトル	m/s ²
<i>G</i>	ポテンシャルモデルの幾何形状因子	m ³
<i>h</i>	対流熱伝達係数または比エンタルピー	W/m ² K または J/kg
<i>H</i>	液面の高さ	m
<i>k</i>	熱伝導率	J/m·K
<i>l₀</i>	粒子径	m
<i>L</i>	液滴の典型的な長さ、または液滴の長径	m
<i>M</i>	凝固モデルにおける粘性急昇係数	-
<i>nⁱ</i>	粒子数密度 (PND)	1/m ³
<i>n⁰</i>	初期粒子数密度 (初期 PND)	1/m ³
n	法線ベクトル	-
<i>P</i>	圧力	Pa
P	位置の一般化無次元ベクトル	-
ΔP	Laplace 圧力	Pa
\dot{Q}	総発熱量	W
<i>Q</i>	熱発生密度	J/m ³
<i>r_e</i>	影響半径	m
<i>r_{ij}</i>	粒子 <i>i</i> と <i>j</i> の間の距離	m
r_i[*]	仮の位置ベクトル	m
r_{ij}	相対位置ベクトル	m
<i>r_b</i>	ポテンシャルモデルの平衡点距離	m
<i>r_{ij}⁰</i>	格子幅 <i>l₀</i> の仮想的な正方 (立法) 格子状の粒子配置における粒子 <i>i</i> と <i>j</i> との粒子間の距離	m

S	面積	m^2
T	温度	K
t	時間	s
Δt	時間刻み幅	s
\mathbf{u}	速度ベクトル	m/s
\mathbf{u}_i^*	仮の速度ベクトル	m/s
v	速さ	m/s
w	重み関数	-
x_{ij}	相対位置ベクトル \mathbf{r}_{ij} の x 成分	m
y_{ij}	相対位置ベクトル \mathbf{r}_{ij} の y 成分	m
α	体積ボイド率または人工圧縮性	-
γ	圧力 Poisson 方程式の PND 項と速度発散項の間の組み合わせの比率または固相率	-
δ	デルタ関数	-
θ	接触角	°
κ	曲率	1/m
λ^0	Laplacian モデルの係数	m^2
μ	粘性	Pa·s
ρ	密度	kg/m^3
$\Delta\rho$	界面間密度差	kg/m^3
σ	界面張力係数	$N/m = J/m^2$
$\boldsymbol{\tau}$	応力テンソル	N/m^2
φ	熱流束	$W/m^2 \cdot s$
ϕ	任意のスカラー	
ϕ_x	任意スカラーの x 微分	

研究業績

(2022年11月現在)

種類別	題名、 発表・発行掲載誌名、 発表・発行年月、 連名者 (申請者含む)
論文	○ Takanari Fukuda , Xin Li and Akifumi Yamaji "A new potential interface tension model for MPS method avoiding unphysical particle cohesion", Progress in Nuclear Energy vol. 150, 104311, 2022
	○ Takanari Fukuda , Akifumi Yamaji, Xin Li, Jean-François Haquet and Anne Boulin, "Analysis of the localized metallic phase solidification in VULCANO VF-U1 with MPS method," Nuclear Engineering and Design, vol. 385, No. 111537, 2021
講演	○ Takanari Fukuda , Xin Li and Akifumi Yamaji, "Development of a New Wall Wetting Model for Cohesion-Free Potential Interface Tension Model of MPS Method", Proceeding in The 12th Japan-Korea Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS12), Miyazaki, Japan, October 30 - November 2, 2022
	福田貴齊 , 山路哲史, 武井遥来, 山下晋, 吉田啓之" MPS 法に基づいた MCCI における多成分多相伝熱流動解析手法の開発", 日本原子力学会 2022 年秋の大会, 2022/9/7-9, 茨城
	○ Takanari Fukuda , Akifumi Yamaji and Xin Li, "Development of an Interface Tension Model of MPS Method to Avoid Particle Clumping of Inner-Particles", 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM2022), 2022/7/31-2022/8/5, (オンライン)
	福田貴齊 , 山路哲史, Li Xin "Multi-Physics モデリングによる福島 2・3 号機ペデスタル燃料デブリ深さ方向の性状同定 (15) VULCANO VF-U1 実験の MPS 法による解析から考えられるデブリの局所性状", 日本原子力学会 2022 年春の年会, 2022/3/16-18 (オンライン)
	福田貴齊 , 山路哲史, Li Xin "VULCANO VF-U1 実験における金属相凝固分布メカニズムの MPS 法による解明", 原子力学会熱流動部会 若手研究者勉強会 ホスターセッション 2021/11/19 (オンライン)
	○ Takanari Fukuda , Akifumi Yamaji, Xin Li, Jean-François Haquet and Anne Boulin, "Development of MPS Method for Analyzing Convection and Solidification of Multi-Component Corium in Severe Accident of a Light Water Reactor", Proceedings of the VII International Conference on Particle-Based Methods (PARTICLES 2021), 2021/10/4-6 (オンライン)
	福田貴齊 , 山路哲史, Li Xin "VULCANO VF-U1 実験における金属溶融物相凝固挙動の MPS 法解析の改良", 日本原子力学会 2021 年秋の大会, 2021/9/10 (オンライン)
	福田貴齊 , 山路哲史, Li Xin "VULCANO VF-U1 実験における金属コリウム局所凝固挙動の MPS 法による解析", 日本原子力学会 2021 年春の年会, 2021/3/17-19 (オンライン)
	福田貴齊 , 山路哲史, Li Xin "VULCANO VF-U1 実験における金属コリウム局所凝固挙動の MPS 法による解析", 日本原子力学会学生ポスターセッション, 2021/3/17-18 (オンライン)
	福田貴齊 , 山路哲史, Li Xin "MCCI における模擬コリウム中の金属相局所凝固メカニズムの MPS 法による解明", 第 6 回次世代イニシアティブ廃炉技術カンファレンス (NDEC-6), 2021/3/3 (オンライン)
	福田貴齊 , 山路哲史, Li Xin "MCCI における金属コリウム凝固挙動の MPS 法による予備解析", 日本原子力学会 2020 年秋の大会, 2020/9/16-18 (オンライン)