

# 統合化学反応オープンソフト Cantera を用いた放射線分解水素放出解析ツールの試行

Attempt of tool for analyzing radiolytic hydrogen evolution with open-source chemical reaction suit Cantera

\*古川原 峻<sup>1</sup>, 小川 徹<sup>1</sup>, 井上 将男<sup>2</sup>, 永石 隆二<sup>2</sup>

<sup>1</sup>長岡技術科学大学大学院, <sup>2</sup>日本原子力研究開発機構

工学的な体系での放射線分解生成水素の放出を評価するために、統合化学反応解析ソフトウェア Cantera をベースとしたシミュレーション・プログラムを作成している。ここでは、攪拌状下での放射線分解水素の放出実験データの再現を試みた。

キーワード：水の放射線分解，水素，シミュレーション，Cantera

## 1. 緒言

水の放射線分解に伴う水素放出挙動について永石ら<sup>[1]</sup>は、純水の照射下での水素放出を攪拌速度の関数として測定した。この結果を再現するために、Cantera<sup>[2]</sup>を用いて自由界面と攪拌状態を考慮した放射線分解プログラムを構築し、実験データと比較・評価した。

## 2. Cantera による攪拌状態の水の放射線分解モデル

永石らの実験体系をモデル化 (Fig.1) し、Cantera の提供する無次元反応器ネットワークを用いて、反応器、Reservoir (定常状態供給器=環境)、拡散層、界面、プレナムのモジュールから成る体系を構築した。放射線分解による一次生成物は各 Reservoir から反応器に供給される。一方、分解した分の水が Reservoir に排出される。水素や酸素は拡散層から界面を介してプレナムに放出される。攪拌による物質移行を再現するために、複数の反応器-Reservoir 対を軸方向に配置し、それらの間を仮想的な質量流量制御器でつないだ。

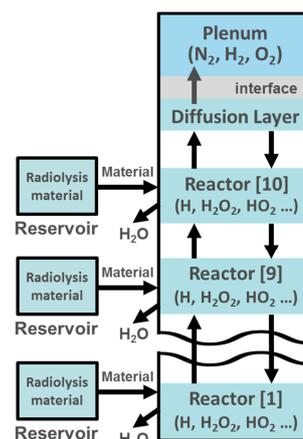


Fig.1 実験体系のモデル化

## 3. シミュレーション結果・考察

攪拌モデルを用いて行ったシミュレーション計算と実験結果の比較を Fig.2 に示す。#0 は攪拌しない状態である。

#1→#5 と攪拌速度が増す。攪拌速度の上昇に伴う水素放出量の増加を比較的良い定量性をもって再現することができた。

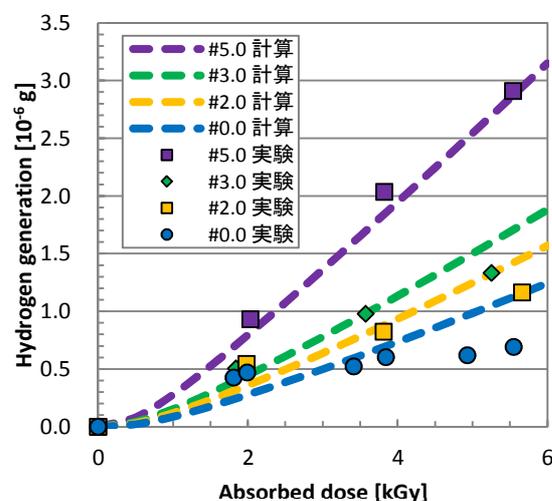


Fig.2 水素放出の計算値と実験値の比較

## 参考文献

- [1] 永石隆二・井上将男・日野竜太郎・小川徹 (2014), “原子力施設での水の放射線分解による水素発生に関する工学的検討”, 日本原子力学会「2014 秋の大会」E11
- [2] David G. Goodwin, Harry K. Moffat, and Raymond L. Speth. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. <http://www.cantera.org>, 2014. Version 2.1.1.

## 謝辞

本研究の一部は経済産業省資源エネルギー庁委託事業「発電用原子炉等安全対策高度化技術基盤整備事業 (水素安全対策高度化)」(平成 24~26 年度) の成果である。ここに謝意を表します。

\*Ryo Furukawahara<sup>1</sup>, Toru Ogawa<sup>1</sup>, Masao Inoue<sup>2</sup> and Ryuji Nagaishi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Graduate School of Nagaoka University of Technology, <sup>2</sup>Japan Atomic Energy Agency