

分
類

JNC TJ9440 2000-008

粒子法の化学反応を伴う流動様式への適用性評価解析

(核燃料サイクル開発機構契約業務報告書)

2000年3月

株式会社 東芝

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村村松4番地49

核燃料サイクル開発機構
技術展開部 技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:

Technical Cooperation Section,
Technical Management Division,
Japan Nuclear Cycle Development Institute
4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1184,
Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)
2000

粒子法の化学反応を伴う流動様式への適用性評価解析
(核燃料サイクル開発機構契約業務報告書)

白川典幸* 堀江英樹* 山本雄一** 松宮壽人***

要 旨

伝熱流動数値実験によって、化学反応を伴う伝熱流動が高速炉を構成する機器に及ぼす影響を評価するには、反応の発生箇所近傍だけでなく機器全体を解析対象とする必要がある。そのため、計算負荷の観点から微視的な解析手法を直接用いることができない。このため、使用する熱流動解析コードには、化学反応によって生じる多相・多成分の反応性流体の挙動をモデル化し、相関式として組み込まなければならない。

反応性流体の化学反応の量は反応する相間の界面面積に依存し、この面積は界面の形状によって大きく変化する。しかし、ナトリウム・水反応のように化学反応を伴う系については、これに関する実験的知見もないのが現状である。そこで本件では、微視的解析手法である粒子法を用いて、多相・多成分・反応性流体の挙動を機構論的に解析し、流動様式や界面面積に関する知見を得ることを最終的な目的とする。本年度は、粒子法を用いて水・ナトリウム反応を扱うための第一段階として、液体ジェットが他の液体プールに噴出する際の流体力学的挙動への粒子法の適用性を検討することとした。

このため、文献調査によりジェット流動様式のメカニズムを検討するとともに、ここでの目的に合致する、「ガソリンプールに水を噴出させる実験」を選び、解析した。また、蒸気発生器内部の伝熱管水リーク事故では管群内のジェット流を解析する。このような複雑体系への本手法の適用性を検討するため、蒸気発生器安全性総合試験(SWAT/Run19試験)を例として化学反応を含まない流体力学のみの予備解析を実施した。その結果、伝熱管群を含む複雑体系においても、高速ジェット流とプール流体との相互作用を考慮した流動挙動への適用性が確認できた。

さらに、今後扱うべき現象のモデリングについて検討し、相変化と化学反応経路を選定し定式化を行った。水の相変化は伝熱律速モデルに基づき、化学反応は水・水素転換率をパラメタとした一括反応モデルに基づいている。また、コード構成についても概念設計を行った。

本報告書は株式会社東芝が核燃料サイクル開発機構との契約により実施した業務成果に関するものである。

機構担当部課室：大洗工学センター システム技術開発部熱流体技術開発グループ

* 東芝原子力技術研究所 原子炉技術担当

** 東芝アドバンストシステム

*** 東芝磯子エンジニアリングセンター

March 2000

A feasibility study of the particle interaction method for the flow regimes
with the chemical reaction

(Report under the contract between JNC and Toshiba Corporation)

Noriyuki SHIRAKAWA* Hideki HORIE* Yuichi YAMAMOTO** Hisato MATSUMIYA**

Abstract

The numerical thermohydraulic analysis of a LMR component should involve its whole boundary in order to evaluate the effect of chemical reaction within it. Therefore, it becomes difficult mainly due to computing time to adopt microscopic approach for the chemical reaction directly. Thus, the thermohydraulic code is required to model the chemically reactive fluid dynamics with constitutive correlations.

The reaction rate depends on the binary contact areas between components such as continuous liquids, droplets, solid particles, and bubbles. The contact areas change sharply according to the interface state between components. Since no experiments to study the jet flow with sodium-water chemical reaction have been done, the goal of this study is to obtain the knowledge of flow regimes and contact areas by analyzing the fluid dynamics of multi-phase and reactive components mechanistically with the particle interaction method. For the first stage of the study, the applicability of this method to the analysis of a liquid jet into the other liquid pool was investigated.

Based on the literatures, we investigated the jet flow mechanisms and analyzed the experiment of a water jet into a gasoline pool. We also analyzed SWAT3/Run19 test, the jet flow in a rod bundle, to study the applicability of the method to a complicated boundary without a chemical reaction model. The calculated fluid dynamics was in good agreement with the experiment.

Furthermore, we studied and formulated the paths of phase change and chemical reaction, and conceptually designed the code adopting the heat-transfer-limited phase change model and the synthesized reaction model with a water-hydrogen conversion ratio.

This work was performed by Toshiba Corporation under contract with Japan Nuclear Cycle Development Institute.
JNC Liaison: Thermal-Hydraulics Research Group, System Engineering Technology Division, O-arai Engineering Center

* Core and Fuel Technology Group, Nuclear Engineering Laboratory, Toshiba Corporation

** Toshiba Advanced Systems Corporation

*** Isogo Engineering Center, Toshiba Corporation

粒子法の化学反応を伴う流動様式への適用性評価解析

2000年3月

目次

要 旨	(i)
Abstract	(ii)
目 次	(iii)
図表リスト	(iv)
 1. はじめに	1-1
 2. ジェット流動様式に関する調査	2-1
 3. 解析検討	3.1-1
3. 1 解析条件の検討	3.1-1
3. 2 ガソリンプールに水を吹き込む実験の解析	3.2-1
3. 3 境界面積評価方法	3.3-1
3. 4 SWAT3/Run19の予備解析	3.4-1
3. 5 考察	3.5-1
 4. 対象流体拡張のためのコード設計	4.1-1
4. 1 対象流体拡張のための定式化	4.1-1
4. 2 コード設計	4.2-1
 5. まとめと開発スケジュール案	5-1
 謝 辞	R-1
参考文献	R-1

List of tables

Table 3.1-1 Relation among CPU-time, number of particles, and calculation time.

List of figures

Fig. 2-1 Typical modes of jet breakup (Water jet into a gasoline pool).

Fig. 2-2 Sketch of a general jet flow configuration.

Fig. 2-3 Sketch of the near injector region of a pressure-atomized spray in the atomization breakup.

Fig. 2-4 Relation of jet breakup length curve with breakup regimes and mechanisms.

Fig. 2-5 Interaction between a jet and an ambient fluid.

Fig. 2-6 Stripping pattern and stripping mechanism.

Fig. 3.2-1 Calculational setup for "Water jet into a gasoline pool" and sectors to evaluate the binary contact area.

Fig. 3.2-2(1/2) Comparison of the calculation with the experiment of "Water jet into a gasoline pool".

Fig. 3.2-2(2/2) Comparison of the calculation with the experiment of "Water jet into a gasoline pool".

Fig. 3.2-3 Effect of the calculational region size of "Water jet into a gasoline pool" ($u=2.0 \text{ m/s}$).

Fig. 3.3-1 Evaluation of the binary contact area.

Fig. 3.3-2(1/2) Radial distribution of the volume fraction and the binary contact area (BCA) in "Water jet into a gasoline pool" ($u=2.0 \text{ m/s}, t=0.1 \text{ s}$).

Fig. 3.3-2(2/2) Radial distribution of the volume fraction and the binary contact area (BCA) in "Water jet into a gasoline pool" ($u=2.0 \text{ m/s}, t=0.2 \text{ s}$).

Fig. 3.4-1 Heat transfer tubes and TCs in SWAT3/Run19 test.

Fig. 3.4-2 History of the TCs involved in the calculation.

Fig. 3.4-3(1/2) History of the water distribution of SWAT3/Run19 Calculation.

Fig. 3.4-3(2/2) History of the water distribution of SWAT3/Run19 Calculation.

Fig. 3.5-1 Breakup model of the liquid core interacting with an ambient fluid.

Fig. 3.5-2 Breakup model in the particle interaction method.

Fig. 4.2-1 Flow chart of the code with phase change and chemical reaction models.

1. はじめに

伝熱流動数値実験によって、化学反応を伴う伝熱流動が高速炉を構成する機器に及ぼす影響を評価するには、反応の発生箇所近傍だけでなく機器全体を解析対象とする必要がある。そのため、計算負荷の観点から微視的な解析手法を直接用いることができない。このため、使用する熱流動解析コードには、化学反応によって生じる多相・多成分の反応性流体の挙動をモデル化し、相関式として組み込まなければならない。

反応性流体の化学反応の量は反応する相間の界面面積に依存し、この面積は界面の形状によって大きく変化する。界面の形状は、管内の2相流については質量流量とボイド率によって決まる流動様式として整理されているが、ナトリウム-水反応のように化学反応を伴う系については、これに関する実験的知見もないのが現状である。そこで本件では、微視的解析手法である粒子法を用いて、多相・多成分・反応性流体の挙動を機構論的に解析し、流動様式や界面面積に関する知見を得ることを最終的な目的とする。

本件では、粒子法を用いて水・ナトリウム反応を扱うための第一段階として、液体ジェットが他の液体プールに噴出する際の流体力学的挙動への粒子法の適用性を検討することを目的とした。ここで採用した手法は、越塚らが開発した粒子法[1-1,1-2]をベースとして、これを2流体に拡張するとともに、それに伴い必要と考えられたいいくつかのモデル開発と計算アルゴリズムの工夫を行った手法[1-3～1-7]である。基本的手法については、[1-3,1-4,1-5,1-6]を参照されたい。

このため、2. で文献調査によりジェット流動様式のメカニズムを検討するとともに、3. でここでの目的に合致する、「ガソリンプールに水を噴出させる実験」を選び、解析した。また、蒸気発生器内部の伝熱管水リーキ事故では管群内のジェット流を解析することになるため、このような複雑体系への本手法の適用性を検討するため、蒸気発生器安全性総合試験(SWAT/Run19試験)[1-8,1-9]を例として化学反応を含まない流体力学のみの予備解析を実施した。

4. では、相変化、化学反応を粒子法で扱う手法について述べた。相変化の粒子法における扱いについては、これまで東芝で開発してきたものである。

最後に、5. でまとめと今後のスケジュール提案について述べる。

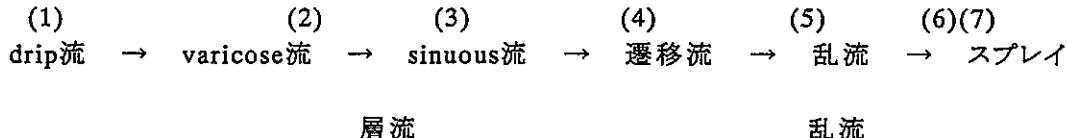
2. ジェット流動様式に関する調査

本章では、ジェット流について簡単に述べるとともに、異なる流体間の相互作用と、流動様式に関する文献調査について述べる。また、2流体粒子法によるジェット流動様式と比較可能な実験に関する調査についても述べる。

(1) ジェットについて

ジェットの形態は多様であり、Fig. 2-1[2-2]に示すようにその速度(あるいは、We数等)の違いによって、さまざまな状況を示す。

ノズル入口における速度を次第に増加していくと以下のようにジェットの様子が変化する。



一般的にジェット流は、軸方向に沿う2つの部分に分けて考えることができる(Fig. 2-2)。第1の領域はノズル近傍の展開領域と呼ばれる部分であり、噴流の中心線に向かって外部からの乱れが次第に浸透していく、くさび型の領域である。このくさび型の部分はポテンシャルコアと呼ばれ、その両側を混合領域と呼ばれる部分で囲まれている。第2の領域は完全発達領域と呼ばれる部分であり、外部の乱れが噴流の軸にまで到達し、その結果ポテンシャルコアはなくなっている。

Fig. 2-3に、気相中へ液体ジェットが侵入し、微粒化していく様子を示す。微粒化のブレイクアップ領域は、化学反応を含む場合には反応領域となるため非常に重要である。Dense Spray内には2つの多相流領域が存在する(Fig. 2-3においてLiquid CoreとDispersed Flowの部分)。

Fig. 2-4にジェットのブレイクアップ長さとジェットの速度の関係を示す。ジェット速度が低速な場合(図中、AB)、軸対称で表面張力が支配的なvaricose breakup領域に相当し、速度の増加とともにブレイクアップ長さは増加する。varicoseタイプからさらに速度を増加させると、周囲の流体の相対的な流れによって生じる横方向の不安定によって、sinuousタイプのブレイクアップ領域に入る(図中、点B)。ジェットの乱流やノズルの形状は、この曲線の最初の最大値の形成やこの領域でのブレイクアップに対して重要な要素となる。さらに高速な領域(図中、CD)においては、横向きあるいは螺旋状タイプの不安定によるバルクなジェットブレイクアップと、ジェットの表面から剥ぎ取られた(stripped)液滴の結合が生じる。この領域では速度の増加とともに、ブレイクアップ長さは増加する。さらに高速なジェット(図中、点D以降)になると、ジェットはノズルの出口直後でスプレイが生成され、微粒化され、ブレイクアップ長さは短くなる。

ブレイクアップ曲線全体は、本質的に、せん断流れの下でのcoarseブレイクアップとstrippingブレイクアップが、単独あるいは結合した過程によって説明される。Coarseブレイクアップは表面張力や周囲の流体との相対的な流れによって引き起こされるvaricoseタイプあるいは横方向擾乱によるものである。また、気体中への液体ジェットの侵入の場合において、気液の混合速度やスプレイ内の構造は、ノズル出口における流れの発達の程度、乱流の程度および密度差等に強く依存する。

ジェットの挙動を考える上で重要な要素には、liquid coreからのブレイクアップ、liquid core近傍のスプレイの挙動、ジェットから離れた部分での液滴のブレイクアップ等があり、解析を行う上でこれらの評価精度が現象解明の鍵になると考えられる(Fig. 2-5)。

(2) 文献調査

ナトリウム-水系のような化学反応を伴う流動は、相間の界面積が非常に重要な要素となる。本研究に際し、関連する研究についての文献調査を行ったが、ジェットの径(D)とそのコアの長さ(L)の関係(L/D)についての相関式は多くの文献で扱われているものの、界面積を直接評価するような実験相関式等について言及しているものはみあたらなかった。しかしながら、ブレイクアップによる液滴径を測定した研究はみられ、解析モデルを検討する際の参考と成り得ると思われる。

また、文献の多くが実験研究である中で、解析的な研究を行っているものもいくつかみられた。これらは本解析を実施する上で参考になるものと思われる。

以下に、今回文献調査を行った中で、本解析にとって有益と思われるいくつかの文献について簡単にその内容をまとめた。

1) McCarthy, M. J. and Molloy, N. A., (1974).[2-1]

本文献は、従来のさまざまな液体ジェットの安定性とノズル形状の効果の研究がまとめられており、ジェットに関する過去の研究の流れを知る上で有用である。以下にその内容について簡単に示す。

Rayleighは分裂前のジェットの連続部の長さとして次式を求めた。

$$\frac{Z}{d} = 103 \left(\ln \frac{a}{\delta_0} \right) V \left(\frac{\rho d}{\sigma} \right)^{0.5}$$

$$= 103 \left(\ln \frac{a}{\delta_0} \right) V (We)^{0.5} \quad (2-1)$$

(2-1)式は表面張力と慣性力のみに支配された液体ジェットの分裂長さを予測するものである。ここで、Zはジェット長さ、aはジェットの半径、 δ_0 は初期の擾乱の大きさ、ρはジェットの密度、dはノズルの半径、σは表面張力、Vはジェットの軸方向速度である。

Weberは、真空中の粘性ジェットの安定性の研究を行い、その中でジェットは擾乱のある平均流を持っていると仮定し、ジェット長さを表す次式を得た。

$$\frac{Z}{d} = \ln \frac{a}{\delta_0} \left\{ (We)^{0.5} + \frac{3We}{Re} \right\} \quad (2-2)$$

(2.2)式の第2項はジェット分裂における粘性の効果を示している。

真空中の非粘性ジェットの分裂は、ノズル出口での無限小と仮定される軸対称な表面擾乱の指數関数的な成長によって生じる。いったん擾乱がジェット半径のスケールに達するとジェットは分裂する。この分裂のタイプはRayleighによってvaricoseと名付けられた。

実験におけるジェットの安定性のデータを表す最初の安定性曲線(ジェット速度に対するZのプロット)は、Savartによって構築された。この際、Savartの実験範囲において、ZはVとともに線形に増加する。同様の実験でSmithとMossは最大値、すなわち速度の臨界値をもつ(速度の増加に対してジェット長さが急激に減少)安定性曲線を構築した。

TylerとWatkinは粘性の効果を組み込み、実験相関式を次式のように発展させた((2-3)式)。

$$\frac{Z}{d} = V \left(\frac{\rho d}{\sigma} \right)^{0.5} \left\{ 1 + \frac{1}{4095} \left(\frac{\sqrt{\pi \rho d}}{\mu} \right)^{15} \right\} \xi \log \frac{a}{\delta_0}$$

$$= \xi \log \frac{a}{\delta_0} \left[(We)^{0.5} + \frac{(We)^{0.5}}{4095(Oh)^{1.5}} \right] \quad (2-3)$$

ここで、 ξ はBessel関数の比であり、式中定数としている。

さらに、GrantとMiddlemanによって実験相関式が提唱された((2-4)式)。これは直接的に粘性ジェットのWeberの理論に基づいている。

$$\frac{Z}{d} = 19.5 \left[(We)^{0.5} + \frac{3We}{Re} \right]^{0.85} \quad (2-4)$$

ジェット安定性へのジェット速度分布の影響について次のように述べられている。

ノズル壁の制約が除かれる(すなわちノズル出口)と、速度分布の緩和がジェット内部の縦方向での運動量移行によるメカニズムによって生じる。その結果、一般的な不安定性を引き起こす力(例えば、表面張力)によって生じるジェット流の相対運動とともに、速度分布の緩和に関連した内部の運動が存在する。

十分に発達した管内流で、流体の運動エネルギーは平均速度の2倍になる。物理量 ε は(2-5)式のようになり、 ε の大きさによって流れが区別される。

$$\varepsilon = \frac{\int_0^A \{V_z(r)\}^3 dA}{V^3 A} \quad (2-5)$$

ここで、 $V_z(r)$ は局所的な流体速度であり、 V は断面積 A にわたる平均速度である。

- (a) プラグ流に対して、 $\varepsilon=1$
- (b) 十分に発達した乱流に対して、 $\varepsilon=1.1-1.2$
- (c) 十分に発達した層流、 $\varepsilon=2.0$

この考え方を液体ジェット流に対して適用すると、層流ジェットは $\varepsilon=2.0$ である。雰囲気流体中を通過するうちに、放物状の速度分布が平坦化してくると、ジェット内でのエネルギー再分配が起こり、この再分配から生じる力はジェットの分裂に重要な役割を果たす。

このように放物線状の速度分布を持つジェットは最も不安定であるが、プラグ流のジェットは最も安定である。実際に、放物状の速度分布を持つ高速の層流ジェットに関連したエネルギー再分配はかなり激しく、ジェットのバーストが生じる。これは”bursting breakup”と名づけられている。

乱流ジェットの安定性について次のように述べられている。

安定性曲線中の極小値を超えると、実験データはジェット速度の増加に対して分裂の時間が減少することを示すが、ジェットの分裂長さは再び速度とともに増加する。

GrantとMiddlemanは、長い滑らかな管から流出する乱流ジェットの分裂データに対して次の実験相関式を作成した。

$$\frac{Z}{d} = 8.51(We)^{0.32} \quad (2-6)$$

Baronによる次の相関式はMiesseのデータとかなり一致する((2-7)式)。

$$\frac{Z}{d} = 17(We)^{0.5} \left(Re \times 10^{-4} \right)^{-0.625} \quad (2-7)$$

・液体ジェットの微粒化

液体ジェットの微粒化に関して、「第二微粒化」、すなわち小さい液滴へのジェットの分裂が生じる過程は非常に興味深い現象である。

第一、第二微粒化は現在区別されている。第一微粒化は内力(乱流、慣性力、速度分布緩和から生じる力、表面張力)の作用のみを含む分裂過程である。第二微粒化は第一微粒化で存在していた力に加えて空力的な力の作用を含んでいる。第一の微粒化から生じる液滴を細かい液滴へ分散させるのと同様に、空力的な力はジェットの表面に直接的に作用する。

その結果、微粒化の過程はジェットの初期安定性に強く依存していることが分かる。すなわち、大きな臨界速度を持つジェットは、小さい臨界速度のものよりはるかに第二微粒化が生じる傾向が小さい。従って、ジェットの ϵ の値が重要であるということが予測できる。

おそらくジェットを分類する最も一般的な基準はOhnesorgeによるものである。Ohnesorgeは慣性力、重力、表面張力、粘性力の相対的な重要性を決定した。ジェットの分裂様式はReynolds数に対するOhnesorge数のグラフ上で3つの領域に分割できるという解析結果になった

- (a)ジェットは大きな均一の液滴に分裂(Rayleighタイプの分裂)
- (b)ジェットは波状に分裂し、幅広いサイズの液滴の分布を持つ
- (c)第二の微粒化の発生

・結論

著者らはジェットの安定性理論のレビューから次のような結論を出している。

1. 軸対称擾乱の成長による層流ジェットの分裂は、今までかなり研究されており、よく理解されている。最近の非線形解析の出現によって、不安定形状の詳細さえ(少なくとも定性的に)記述されており、全ての現象の定量的な理解が近い将来に可能であろう。
2. 表面張力を超えた領域での液体ジェットの分裂パターンはほとんど理解されていない。流れが複雑であるため、これらのケースに対する数学的な解析はできそうにない。乱流ジェットの安定性の実験的研究によって、ある特定の状況においては有効であると証明された相関式が提案されている。これらの相関式に一般性が欠如している原因は、安定性に関するジェットの速度分布の効果が考慮されていないことである。
3. 特別なノズル(長くてまっすぐで滑らかなノズル以外)からのジェットに対して、有効な相関式は現在、存在しない。相関式は、実験的にも理論的にもジェット長さの関数としてジェット形状パラメータの評価を提供するものである。

2) Tanasawa, Y. and Toyoda, S., (1955)

本文献は、液体微粒化の基本メカニズムの究明を目的とした実験研究である。

実験では円柱ノズルから流出する液体の微粒化モードを観察し、ジェット長さの遷移現象、流れる液体の特徴や微粒化された液滴の直径を示している。その際、微粒化のモードに影響すると思われる状況を変化させて実験を行っている(ノズル直径 D 、流出速度 v 、液体の物性(密度 ρ 、表面張力 σ 、粘性係数 μ)、周囲流体の圧力 p_a 、周囲流体の物性等)。

本文献では、ジェット数と呼ばれる無次元数が、微粒化のモードを規定するとしている。また、ジェット数をレイノルズ数とStability数と呼ばれる粘性に関する修正因子に関連付けると、微粒化する液体のモードや形状がはっきりと示されることを述べている。

この論文は著者らが1936年以来行ってきた研究の成果である。

この文献もまた、円管から流出するジェットの状況に応じて分類し、それについて解説している。

・液滴の落下から遷移流への遷移

液体の供給量を増加させ、液滴落下の流れから層流へと遷移していく条件を評価している。一般化された形状での条件を評価するために、Weber数をより一般化した形式へと拡張することを提案している。流出速度が臨界値を超えると、流れは層流になる。その一方で、臨界値以下ならば、流れ

は停止し、drippingが開始する。著者らは臨界速度の実験値をWe数から次式のように表現している。

$$v_k = \frac{0.99}{D_1} \left(\frac{\sigma}{\gamma} \right)^{3/4} \sqrt{g} + \frac{0.45}{\sqrt{D_1}} \left(\frac{\sigma}{\gamma} \right)^{2/4} \sqrt{g} - \frac{0.57}{\sqrt[4]{D_1}} \left(\frac{\sigma}{\gamma} \right)^{3/8} \sqrt{g} \quad (2-8)$$

・層流の特徴

層流における液体ジェットの連続部長さを l とすると、その測定したジェット長さは内径 D_1 や初期流出速度 v とともに増加することを示している。さまざまな液体に対するジェット長さ l を測定し、次の実験式を導出している。

$$\frac{l}{D_1} = 22.4 \left\{ \left(v - v_k \right) \sqrt{\frac{\gamma D_1}{\sigma g}} \right\}^{0.8} \left\{ 1 + \frac{1}{250} \frac{\sqrt{\sigma \gamma D_1}}{\mu \sqrt{g}} \right\} \quad (2-9)$$

・層流から乱流ジェットへの遷移

層流のジェット長さは流出速度とともに増加するが、それは v が臨界速度 v_c に等しくなったとき最大値に達する。それを超えると、ジェットは不安定になり、ジェット長さが短くなる。流出速度がさらに増加すると、ジェットの次の安定な形状が現れる。この一連の現象を実験で示した。

・スプレイ

ジェットの流出速度が比較的大きくなると、混合された表面のcrestが大きな空気抵抗を受け、その結果、filmやligamentが形成され、多数の液滴が生成される。一般に高速の乱流ではスプレイが形成される。このことは非粘性液体では正しいが、粘性液体では適当でない。

Tanasawaらは軽油と粘性の大きい重油のジェット長さを測定し、これから粘性液体は非粘性液体より、遷移の開始点がより低いレイノルズ数にあり、遷移の幅もより広いことを示している。

つまり、粘性液体では、動粘性係数が非常に大きいと、高速の場合でさえレイノルズ数が低くとどまり、その結果、空気抵抗が非粘性液体の乱流の場合より大きいと、層流の場合にもスプレイが形成されることを示している。

液体中に微粒化された液滴径 \bar{d} を測定し、次式の実験式を示している。

$$\bar{d} = 47 \frac{D_1}{v} \left(\frac{\sigma}{\gamma_a} \right)^{0.25} \sqrt{g} \left\{ 1 + 3.31 \frac{\mu \sqrt{g}}{\sqrt{\sigma \gamma D_1}} \right\} \quad (2-10)$$

・周囲の物質の効果

周囲の物質の効果を知るために、高圧空気タンク中に液体を注入したときの、ジェットの形状を高速度撮影によってとらえた。その結果を系統化するために、次式で示すジェット数という新しい無次元数を用いた。

$$Je = \frac{\gamma D_1 v^2}{\sigma g} \left(\frac{\gamma_a}{\gamma} \right)^{0.55} = \frac{\gamma_a D_1 v^2}{\sigma g} \left(\frac{\gamma}{\gamma_a} \right)^{0.45} \quad (2-11)$$

実験より、同じジェット数の流れに対しては微粒化のモードがその分裂部において、ほとんど同じであることを示した。

微粒化の様子をジェット数で整理した結果を以下に示す。

(1) $Je < 0.1$ に対して、dripping

(2) $Je = 0.1 \sim 10$ 、縦方向の振動による液滴への分裂

(3) $Je=10 \sim 500$ 、空気摩擦の付加的な効果を伴う径方向の振動による液滴への分裂

(4) $Je>500$ 、膜形成による多数の液滴への分裂

ジェット数は分裂の度合いの指標であり、微粒化のモードを示すものである。

3) Faeth, G. M., Hsiang, L. P. and Wu, P. K., (1995).[2-3]

これまで多くの非燃焼および燃焼スプレイの研究がなされてきたが、それらはインジェクター出口から離れたスプレイの希釈された領域に重点をおいたものであった。結果として、現在、希釈されたスプレイの多くの特徴はよく理解されている。従って、現在では、インジェクターの形状やスプレイ周囲の状況が、希釈されたスプレイ領域に侵入してくる流れの性質に対していかに影響しているかを決めるために、インジェクター近傍の扱いにくい密度の濃いスプレイ領域に关心が向けられている。

この論文の目的はこれらの研究をレビューし、さらに研究が必要となる分野を定義することである。密度の濃いスプレイの構造、二次ブレイクアップおよび一次ブレイクアップの3つについて詳細に記述されている。

論文中、次のようなグラフが示されており、実験解析を行う上で有効であると思われる。

圧力をパラメータとしたときのジェット体積率の軸方向分布および径方向分布、Weber数、Ohnesorge数をパラメータとしたときの液滴のブレイクアップ様式や変形様式および分裂時間、一次および二次ブレイクアップ後のSMD(Sauter Mean Diameter)の相関式、円形ジェットの一次ブレイクアップ様式等々。

4) Bürger, M., Cho, S.H., Berg, E.V. and Schatz, A. (1995).[2-4]

本文献は、軽水炉でのシビアアクシデントに焦点を当て、水中でのメルトジェットのブレイクアップのメカニズムについてモデルを立てるとともに、解析コード(IKEJET)を作成し、各種実験結果と比較検討した研究である。

本文献では、当研究において開発したコードIKEJETのジェットのブレイクアップモデル(IKEモデル)について述べるとともに、その解析コードによって計算した結果とFARO等の実験を比較している。

ここでは、例としてBürgerらの行った、実験(IKEJET)解析について述べる。

Bürgerらは、ジェットのブレイクアップの1次元解析を行った。用いた基礎式は次のとおりである。

質量保存式

$$\frac{\partial}{\partial t} (A_M \rho_M) + \frac{\partial}{\partial z} (A_M \rho_M w_M) = - \dot{M} \quad (2-12)$$

運動量保存式

$$\frac{\partial}{\partial t} (A_M \rho_M w_M) + \frac{\partial}{\partial z} (A_M \rho_M w_M^2) = g (\rho_M - \rho_a) A_M - c_{DM} \pi R_M \rho_a (w_M - w_a)^2 - w_M \dot{M} \quad (2-13)$$

ここで、 $A_M = \pi R_{M0}^2$

また、 A は流れの断面積、 ρ は密度、 w は速度、 \dot{M} は単位長さおよび時間当たりにジェットから剥ぎ取られるメルトの質量、 R は半径、 c_D は抵抗係数を表す。添字 a は周囲の流体、 M はメルトジェットを表し、ブレイクアップモデルより評価している。

IKEモデルは、実験結果との比較に基づき、径方向の剥ぎ取り(stripping)過程に焦点を当てており、ジェットダイナミクス、せん断流不安定によるジェット表面の波の成長、ジェットの剥ぎ取りによって構成されている。ここでは、ジェットの剥ぎ取りモデルについて述べることにする。

Bürgerらは次のように、せん断流によって生じる不安定性によるジェット表面の波の、ジェットからの剥ぎ取りをモデル化した。Fig. 2-6に示すように境界面の波の振幅を評価し、ある一定値(ここでは波長の1/2)以上の大きさに達したならば、その部分を占める環状のメルトを周囲流体側へ渡すモデルを用いている。図中、 η_B は液滴が剥ぎ取られる基準となる振幅、 η_{ab} は液滴が剥ぎ取られる瞬間の振幅、 S は液滴が剥ぎ取られる部分のジェットの擾乱波の幅。

このモデルは、不安定性モデルにおいてジェットと周囲流体を径方向へ無限拡張すると仮定しているため、ジェットの直径に対して十分小さな波長を持つジェット表面波の場合のみ適用可能である。しかしながら、一般的には不安定性の発生はジェットコアの粗い分裂の原因となる大きな波長を生じる。このことは、剥ぎ取りによって十分に薄くなった後の、ジェットコアの微粒化領域においても当てはまる。その結果、不安定性発生の上記の制限にも拘わらず、計算された局所的な波長がジェットの直径に達したならば、残りのジェットコアが分裂すると仮定する。

以上の文献調査によって得られた知見は、通常の計算コードによる解析に対してはもちろん、粒子法による解析においても有効に活用できると考えられる。

粒子法を化学反応を伴うジェット流に適用するに当たり、解析評価上、重要な要素になるとを考えられる物理現象には相変化、化学反応があるが、これらをいかに適切にモデル化できるかが解析結果を左右する。中でも、これら相変化等の現象に大きく影響する要素がジェット流の流動様式のモデル化である。

上に挙げた1), 2), 3)の文献からは、従来のジェット流研究の流れを知ることができ、ジェットについて解明されている点、未知な点を把握することができる。また、文献4)にはジェット流の解析的な研究が記述されており、粒子法におけるジェットのエントレイン等のモデル化の参考となる。さらに、3)の文献には、多数の実験結果が記載されており、ジェット流動様式モデルの検証に利用できると考えられる。

粒子法においてジェット流動様式に対するモデリングが必要となるのは、3.で述べるように、物理的に妥当な液滴サイズを用いることが主として計算時間の制約から困難なことによっている。

これらの文献調査から得られた知見に基づく、流動様式のモデル化については3.5章で述べることとする。

2-8

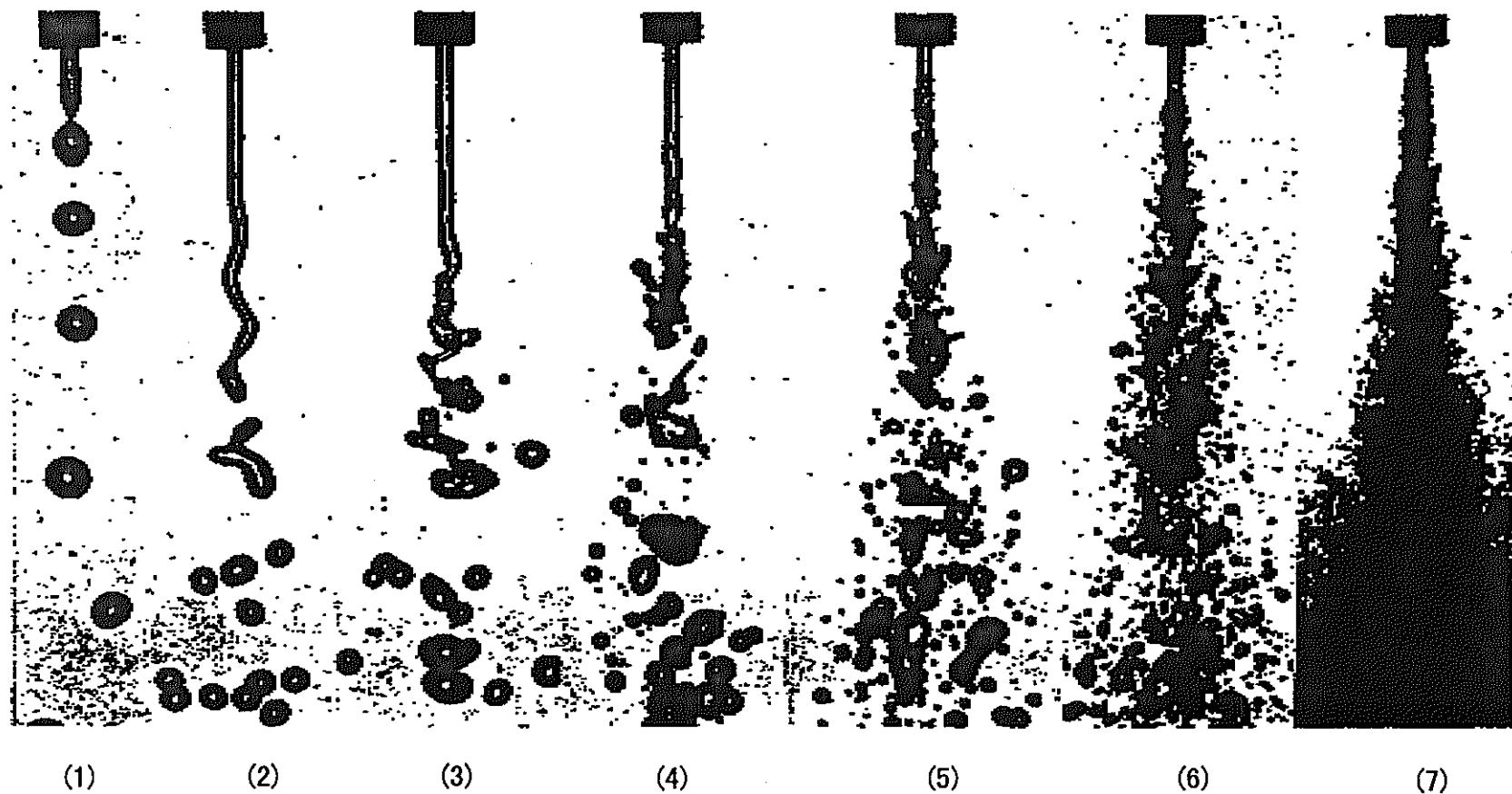


Fig. 2-1 Typical modes of jet breakup (Water jet into a gasoline pool).

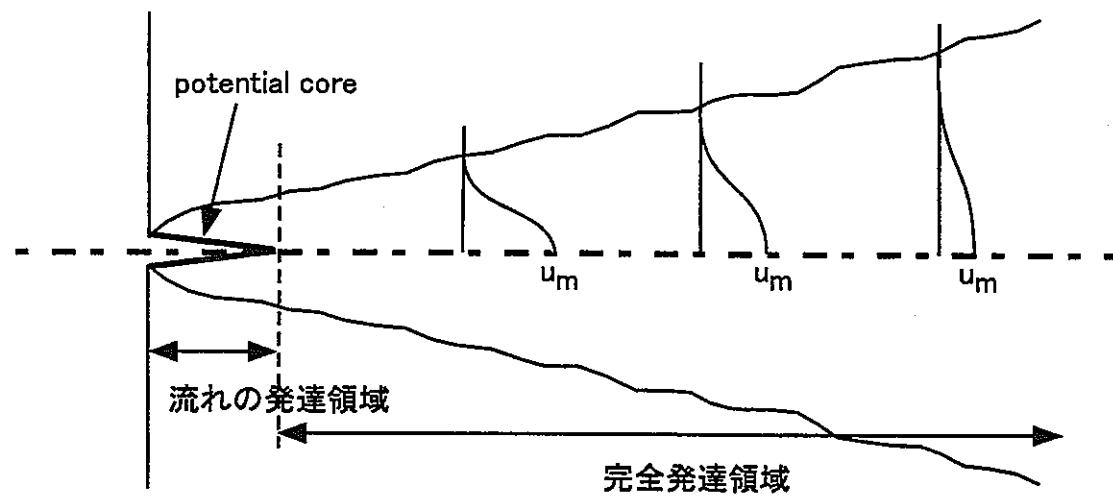


Fig. 2-2 Sketch of a general jet flow configuration.

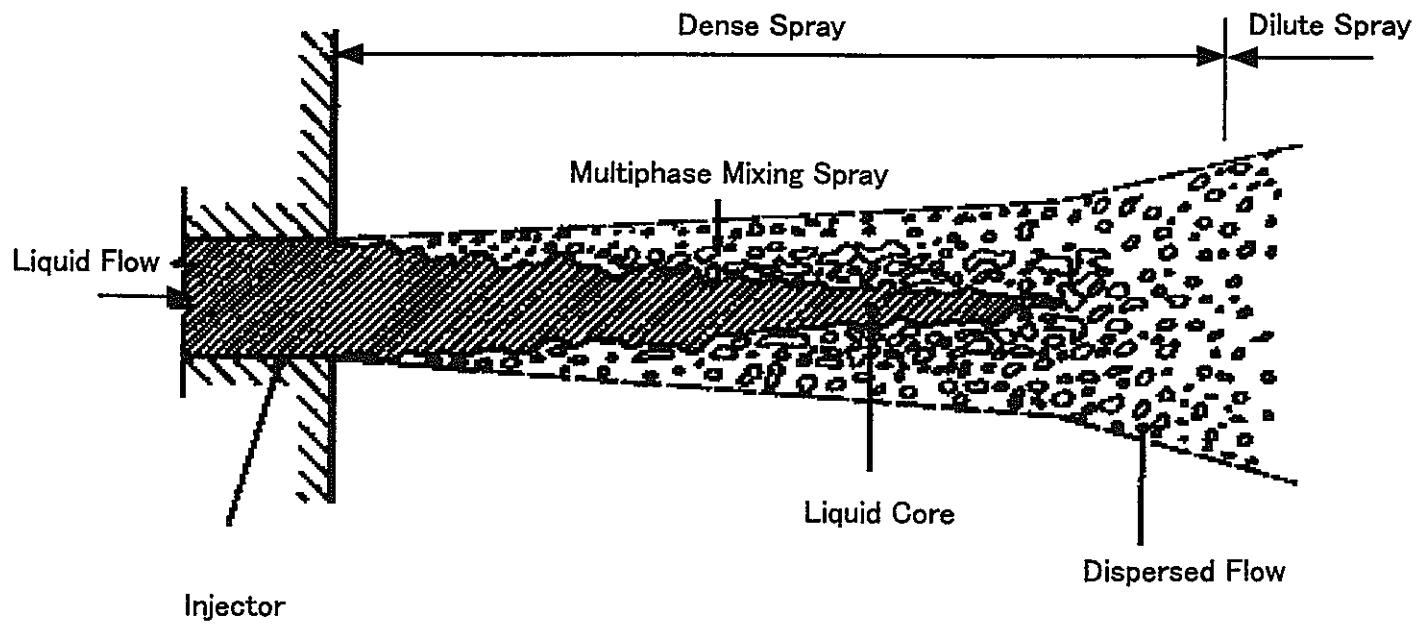


Fig. 2-3 Sketch of the near injector region of a pressure-atomized spray in the atomization breakup.

Breakup regimes

laminar

transition

turbulent second wind

atomization

Breakup mechanisms

varicose type

sinuous type

mixing of coarse breakup mechanisms and stripping

wave stripping

2-10

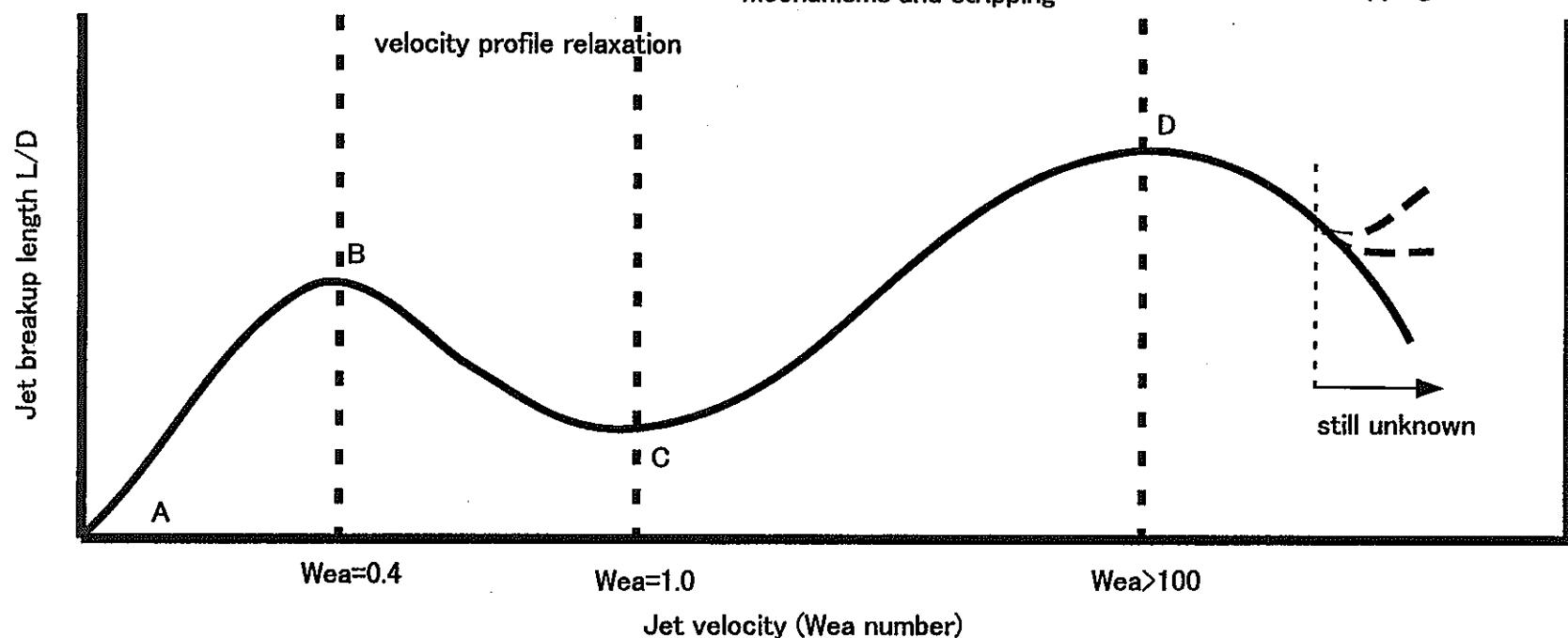


Fig. 2-4 Relation of jet breakup length curve with breakup regimes and mechanisms.

2-11

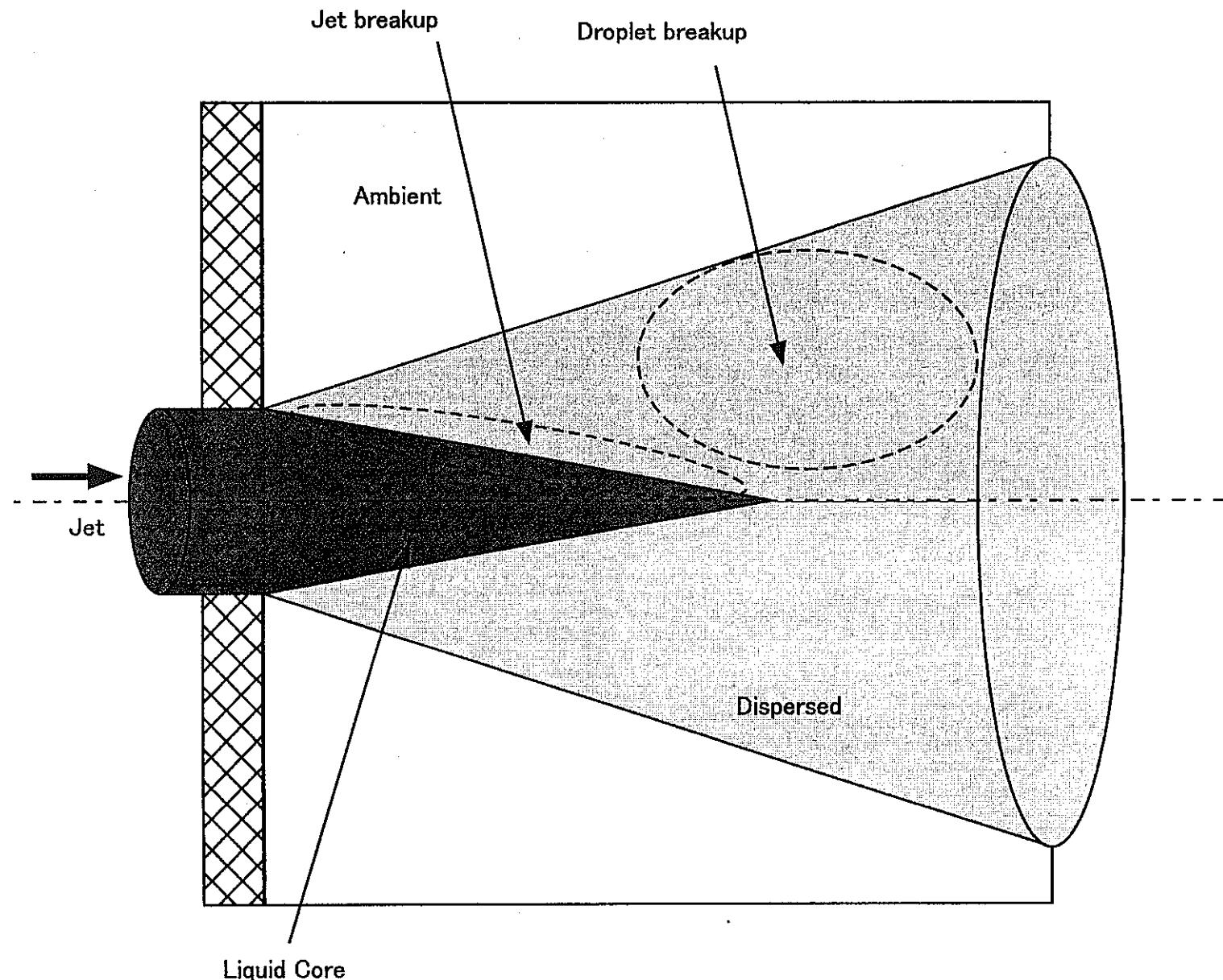


Fig. 2-5 Interaction between a jet and an ambient fluid.

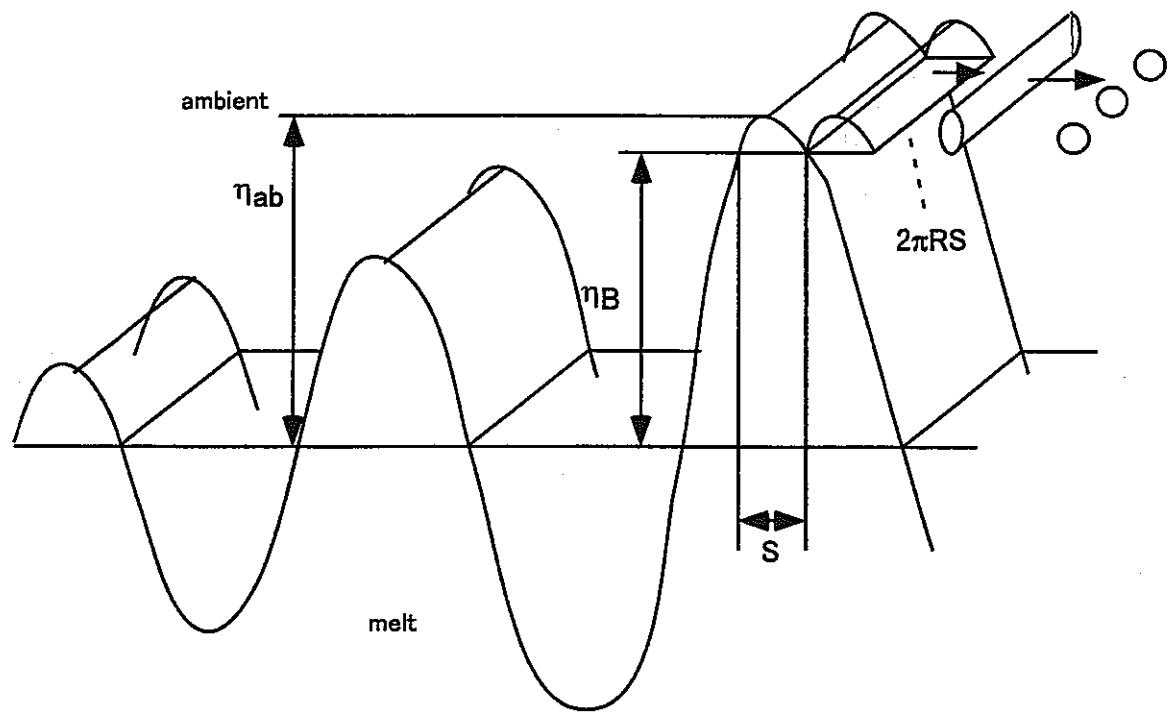
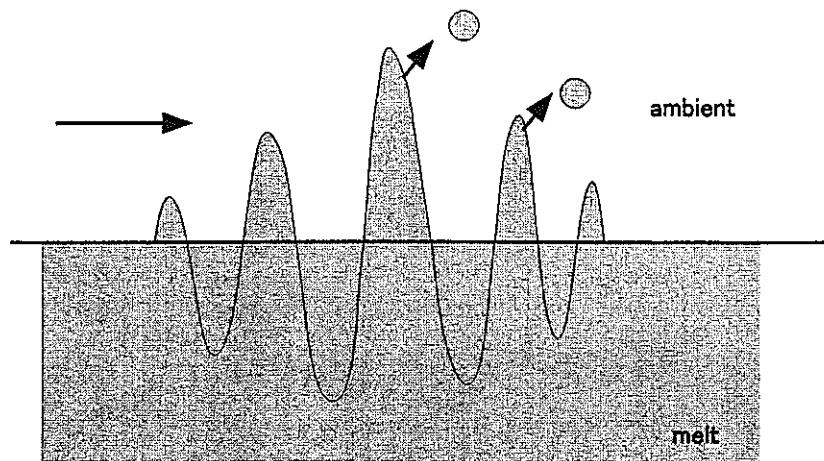


Fig. 2-6 Stripping pattern and stripping mechanism.

3. 解析検討

3. 1 解析条件の検討

本年度は、化学反応は考慮しないで、水とナトリウム相当の2つの液体系において、若干密度の大きい水をジェットとしてもう一方の液体のプールに吹き込む計算を試みる。

このような現象では、2. でも述べたように（化学反応を含まない場合でも）液滴サイズが空間的・時間的にどのように分布しているかは、実験でも明確になっているわけではない。しかし、SIMMER-III-SWコードによるSWAT3/Run19のパラメタサーベイの経験[3-1]から、化学反応を含む場合の液滴あるいは生成される固体粒子の半径は0.1mm～2mm程度であろうと考えられる。

ここで採用した粒子法をベースとする手法では、主として計算時間の制約から、並列計算を行わない場合、扱える粒子数は数万が限度である。また、扱う粒子数が多いと圧力方程式を解いた後の位置の更新により粒子数密度を初期密度とするための収束計算が悪くなることも原因の一つである。並列計算はこれまでにも試みたが、機種依存性（分散メモリ）もあって実用になるほどスケーラビリティが向上しなかった[3-2]。

例えばSWAT3/Run19試験[1-8,1-9]の解析を試みようとする場合、適用性の検討という目的に適う最小限の体系の大きさ、すなわち水リーク孔近傍の伝熱管を含む領域に限っても、現象が本質的に3次元であることから奥行きのサイズをかなり小さくとっても、1mm間隔の初期粒子配置は困難であった。このため現状では、物理的に必要であると考えられる粒子サイズを用いることができず、2.5mmの初期粒子配置間隔を採用している。

計算対象領域を小さくせざるを得ないことから、境界条件の設定には注意が必要である。

今年度のスコープでは、プール液体とジェット液体は両者とも非圧縮性として扱うため、計算体系内の粒子数を保存させるように境界条件を設定するのが適切であると判断し、これを実現するための条件を工夫した。

例えば、3. 1で述べるガソリンプールに水ジェットを吹き込む実験の解析では、水ジェットの計算領域への浸入にしたがって上部からガソリン粒子を全粒子数（ガソリン+水）を保存するように取り去っている。また、計算領域の下端に達した水粒子は計算から除外している。SWAT3/Run19試験の解析では、初期に設定した体系の外部に移動する液体粒子は同様に全粒子数を保存するように計算から除外するという境界条件を設定した。

ここで粒子数と計算時間の関係について述べておく。

Table 3.1-1にCPU-time、粒子数、および計算が進んだ（物理）時間を、3. 2以下に述べる、ガソリンプールに水を吹き込む実験とSWAT3/Run19試験の解析について示す。SWAT3/Run19では粒子配置間隔を2ケース検討している。ここに示した3ケースとも、あるEWSで3daysのCPU-timeを要しているが、計算が進んだ物理時間は大きく異っている。ケース(1)、(2)では粒子数はほぼ同一であるのに物理時間が異なるのは、ケース(2)の流速が大きいためCourant条件によりタイムステップが小さくなつたためである。ケース(3)はケース(2)の半分の粒子配置間隔であるが、3次元解析であることから粒子数は大きく増え、同じCPU-timeで1 msしか計算が進まない。粒子法では、一般的に言って、自分と相互作用する粒子を登録するための容量と、粒子数が元数となる圧力方程式マトリックスがメモリ容量の大部分を占める。計算時間も粒子登録が大きい部分を占める。上記の並列化も粒子登録を主な対象としたものである。また、少し広い領域に渡って粒子登録を行い、タイムステップ毎には粒子登録を行わない方が計算時間は比較的大きく減少すること、また計算領域をサブリージョンに分割し粒子登録の際のサーチ回数を低減することが有効であること、等がこれまで分かっている[3-2]。本件の計算ではこうした工夫を用いている。

Table 3.1-1 Relation among CPU-time, number of particles, and calculation time.

Case	No. of particles	Memory size (MB)	Calculated time (s)	No. of cycles	CPU-time (day)
(1) Jet into gasoline pool	24,500	111	0.2	4200	3
(2) SWAT3/Run19 $\Delta x=2.5\text{mm}$	25,000	113	0.03	4000	3
(3) SWAT3/Run19 $\Delta x=1.25\text{mm}$	81,136	265	0.001	700	3

3. 2 ガソリンプールに水を吹き込む実験の解析

2. でも述べたように、同程度の密度を有するジェット挙動の研究は少なく、ここで取り上げたガソリンプールに水を吹き込む実験[2-2]は貴重である。

ここでは、[2-2]に述べられているひとつの実験シリーズをとりあげ、水ジェット流速が、
0.18 m/s, 0.37 m/s, 0.72 m/s, 1.0 m/s, 1.4 m/s, 2.0 m/s, 3.0 m/s,
の7ケースを計算した。

計算体系をFig. 3.2-1に示す。同図(a)は計算領域とサイズを示す。このサイズは実験の容器サイズよりも少し小さい。初期粒子配置間隔は1mmとした。用いた粒子数は水、ガソリン合わせて16,500、容器構造粒子数は8,000である。

同図(b)は、3. 3で検討するジェットの分布や境界面積を評価するための計算領域の空間分割を示す。水平断面では半径差が1 mmの同心円に、鉛直方向には2 mm間隔で分割した。

計算手法としては、これまでの経験から、静止液体中に異なる液体が流入する場合、圧力補正に応じた速度の更新方法を[1-3,1-4,1-5,1-6]若干修正している。

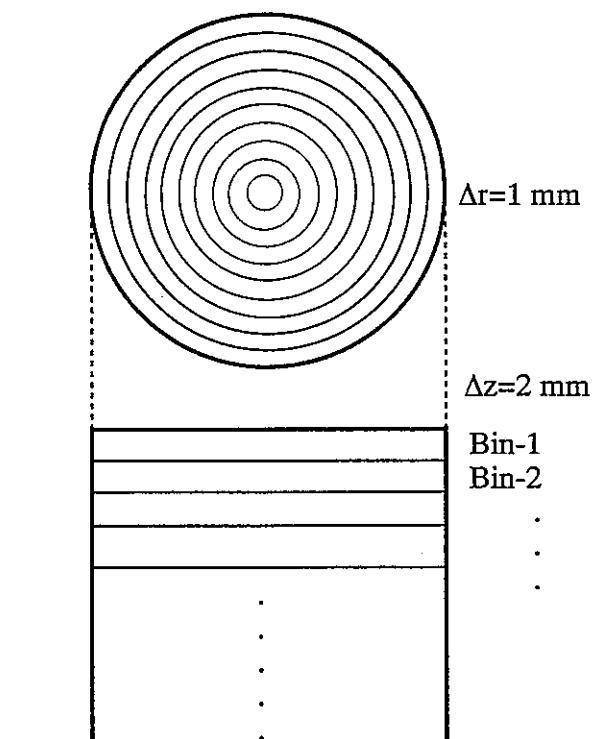
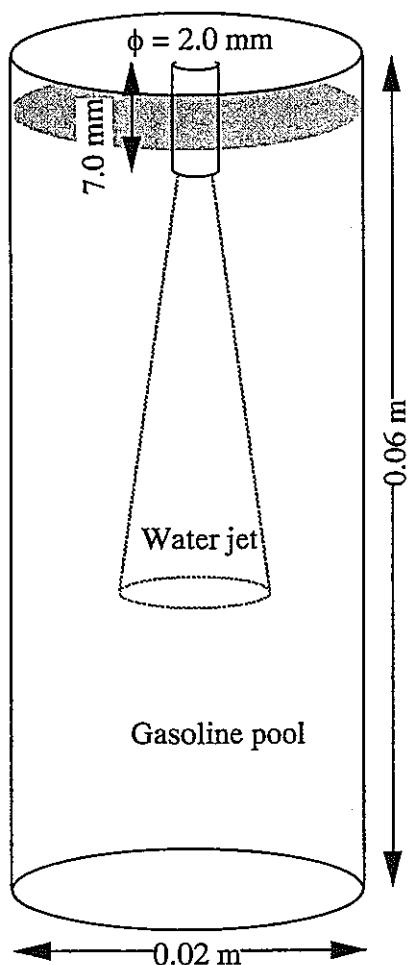
これまでの方法においては、explicitステージ終了時点での粒子数密度の初期粒子数密度からのずれの補正を、圧力ポアソン方程式から圧力を求めた後、すべての相互作用範囲にある粒子間で同時にしている。しかし、本解析における水ジェットのように非常に運動量が大きい流体が静止した流体（ガソリン）中に噴射されるような場合、ジェット界面近傍での大きな粒子数密度のずれをこの方法で補正すると、水とガソリン間の（圧力勾配項による）運動量の交換が過大に評価され、運動エネルギーの（ジェット軸と垂直な方向への）拡散が非常に大きくなってしまう。その結果、ジェットの広がりが実験よりもかなり大きくなってしまうとともに、ジェット先端の進入速度が極端に遅くなるという数値計算上の問題が生じる。

上記のような過大な運動量の交換を避けるため、implicitループでの圧力補正を以下のように修正する。すわなち、各タイムステップにおいて、implicitループの最初の数回は水粒子の速度と位置はexplicit終了時点の値に固定し、ガソリン粒子に対してのみ速度、位置の補正を行う。その後は、従来手法と同様にすべての粒子に対して同時に補正を行う。これにより、ジェットの軸に垂直な方向への運動エネルギーの拡散が抑制され、ジェットの軸方向の運動量の急激な減少を避けることができる。

ガソリンのみ補正を行う回数については問題に応じてある程度の任意性があり、計算結果と実験との比較により決定することになる。実際の計算ではimplicitループは20回程度であるが、ガソリンのみを補正する回数を5回～15回程度の範囲で変えて、この問題では結果に大きな違いはなかった。また、この方法によりジェットの広がりに関する実験結果の再現性は非常によくなる。

Fig. 3.2-2に実験写真と計算結果の可視化による流動状況の比較を示す。計算結果は、ガソリン粒子を除いて水粒子だけを3次元で見たものである。7ケースの流速全てに亘ってジェットの拡がりを模擬できていることが分かる。例として、ジェット流速が3.0 m/sの場合にもジェットの拡がり角は、実験とよい一致を示している。

Fig. 3.2-3は、計算領域を鉛直方向に2倍の長さとして、その効果を見たものである。同図より、本件で採用した境界条件によれば計算領域の大きさの効果はそれほど大きくないと判断できる。



(b) Sectors to evaluate the binary contact area (BCA)

Calculational conditions

$\Delta x = 0.001 \text{ m}$

Number of particles:

Liquid :16500

Structure: 8000

Density:

Water : $1000 \text{ kg} / \text{m}^3$

Gasoline: $787 \text{ kg} / \text{m}^3$

(a) Calculational setup

Fig. 3.2-1 Calculational setup for "Water jet into a gasoline pool" and sectors to evaluate the binary contact area.

3.2-3

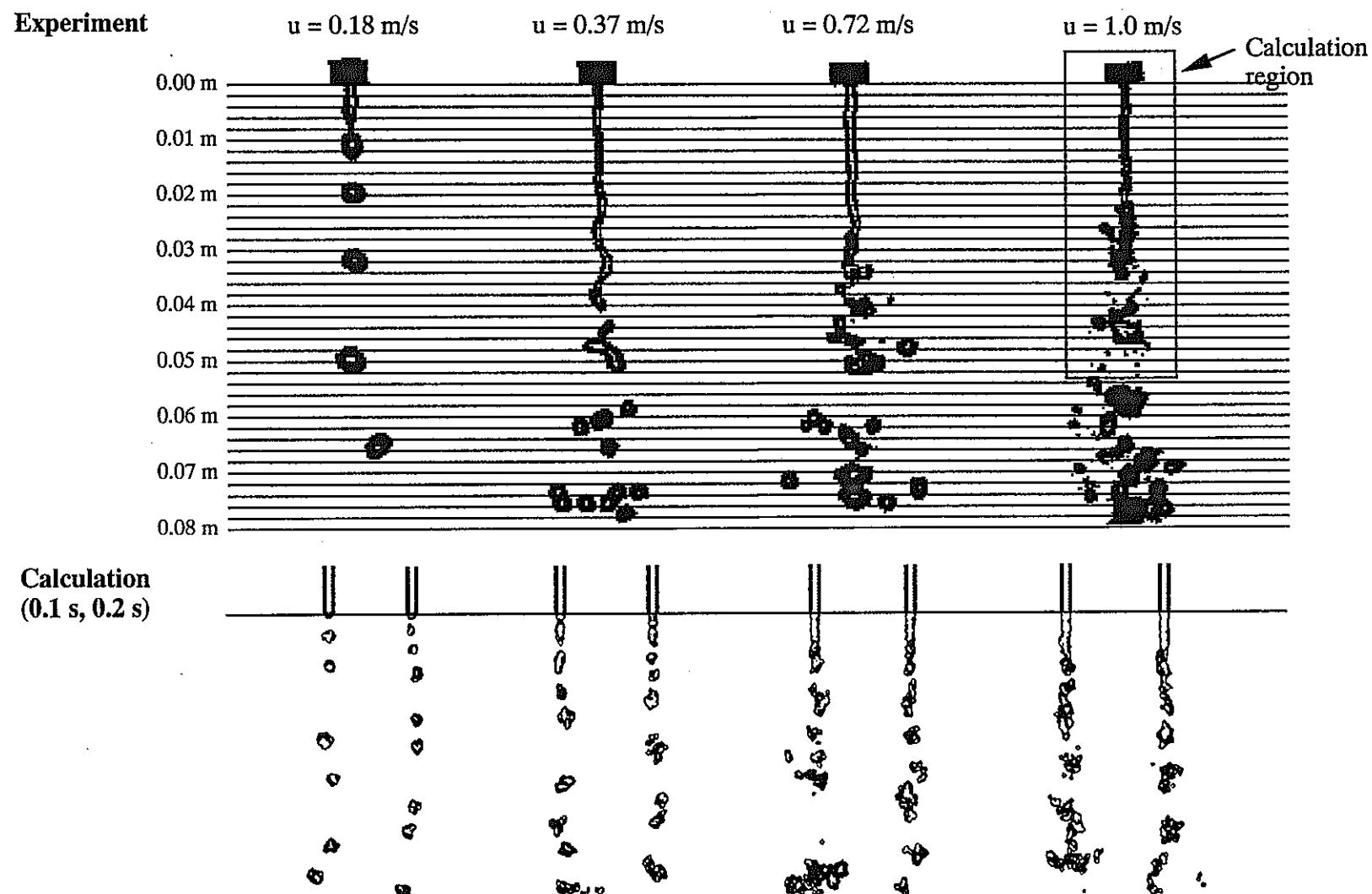


Fig. 3.2-2 (1/2) Comparison of the calculation with the experiment of "Water jet into a gasoline pool".

3.2.4

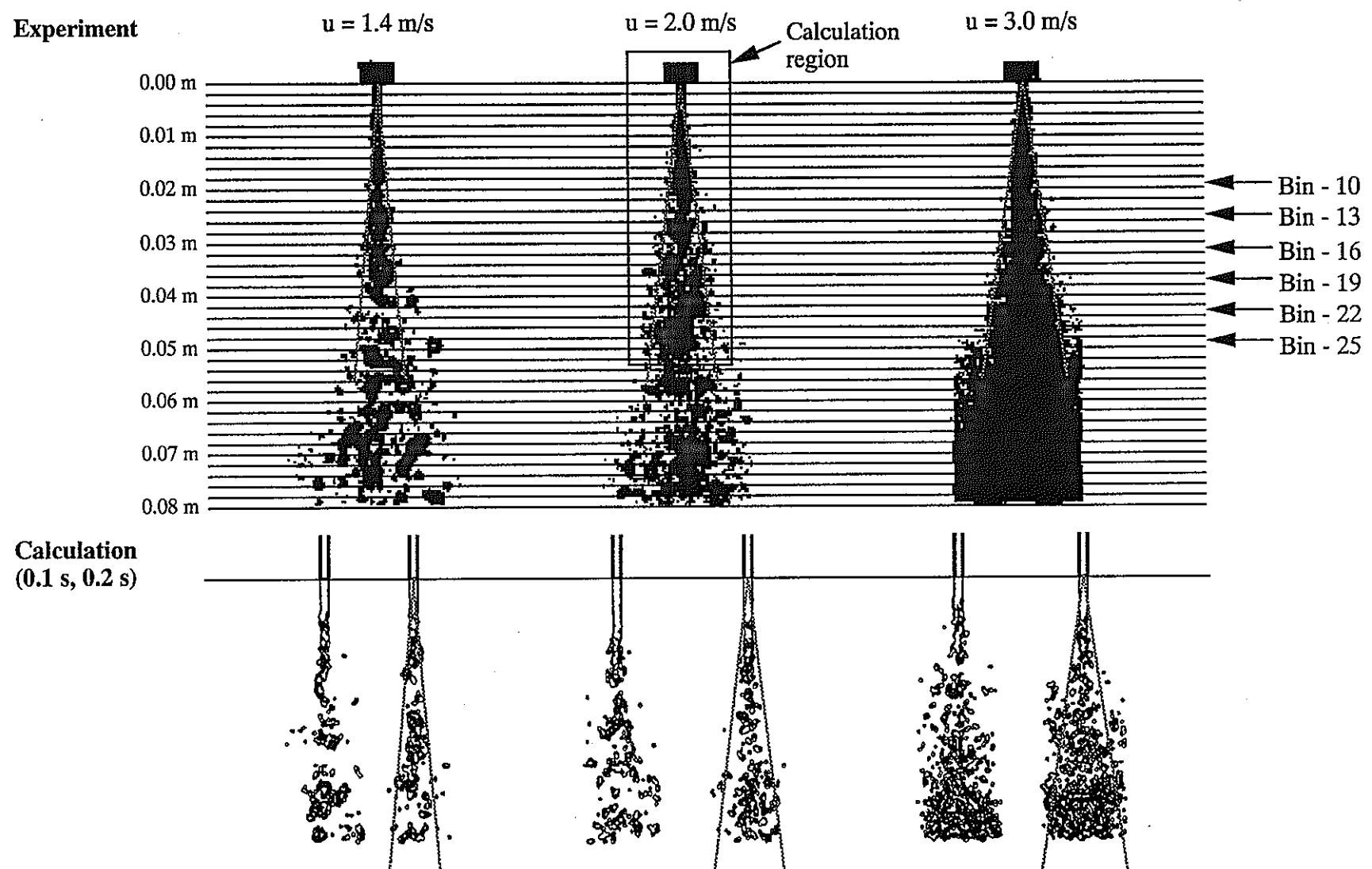


Fig. 3.2-2 (2/2) Comparison of the calculation with the experiment of "Water jet into a gasoline pool".

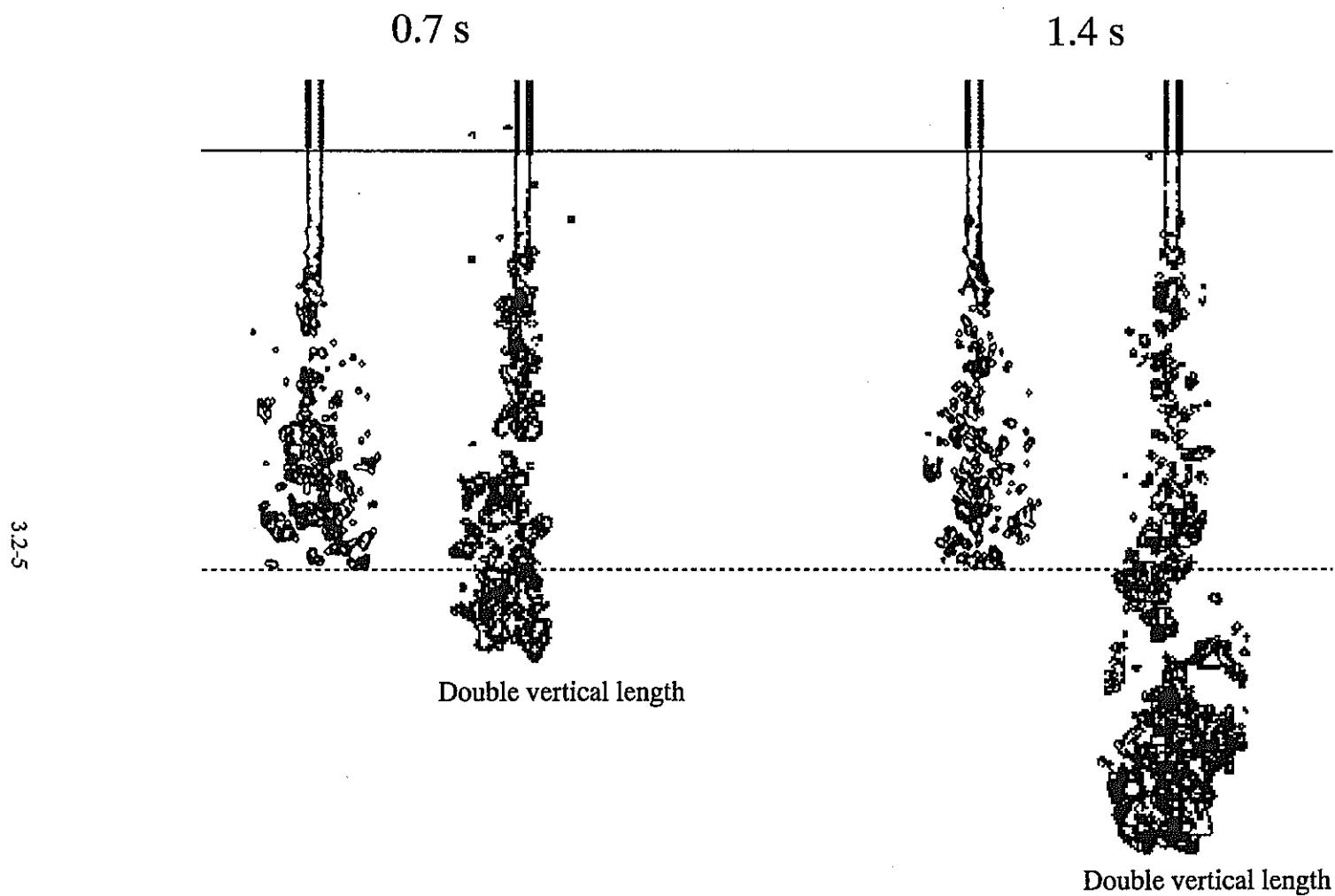


Fig. 3.2.3 Effect of the calculational region size of "Water jet into a gasoline pool" ($u=2.0 \text{ m/s}$).

3. 3 境界面積評価方法

境界面積 (Binary Contact Area: BCA) は、従来の多流体気液 2 相流解析コード等では、例えば気泡と液体、気泡と気泡、液滴と気泡、液滴と液滴、液体連続相と液滴、等の間で、熱的相互作用および運動量交換のための境界面積として評価される。

本手法では、構成物質は全て粒子イメージで与えられるため、Fig. 3.3-1に示すように評価する。

同図(a)に示すように、2つの粒子 i, j 間には、それらの中間点に次式で評価されるBCAが存在するとする：

$$BCA(\overline{r}_{ij}) = \frac{A^0}{n^0} w(|\overline{r}_j - \overline{r}_i|), \quad (3.3-1)$$

$$\overline{r}_{ij} = \frac{1}{2} (|\overline{r}_j + \overline{r}_i|). \quad (3.3-2)$$

ここで、 A^0 は面積の次元を持った係数であり、値は以下のように決める。Fig. 3.3-1 (b)に示すように、周りをすべて他の種類の流体粒子に囲まれている粒子を考えると、BCAの和は、

$$BCA = \frac{A^0}{n^0} \sum_{j \neq i} [w(|\overline{r}_j - \overline{r}_i|)] = A^0 \quad (3.3-3)$$

となる（自分のまわりの粒子が初期配置にあるときそれらのカーネルの和が初期粒子数密度と定義されている）。この値が、ある半径 (Δ) の球の表面積に等しいとすると A^0 は、

$$A^0 = 4 \pi \Delta^2 \quad (3.3-4)$$

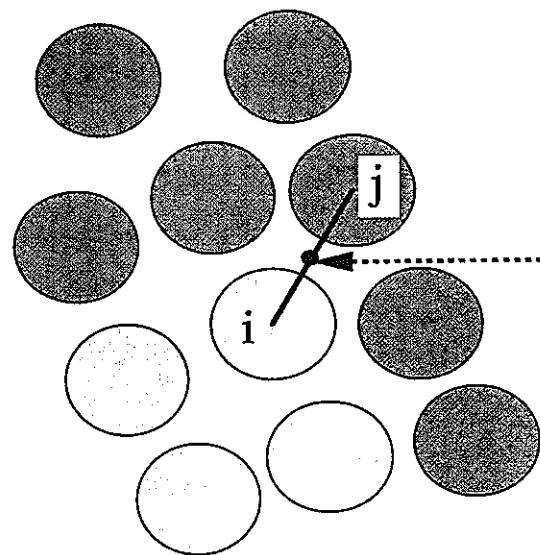
となる。

式(3.3-1)で定義したBCAへの初期粒子間隔の影響を検討する。まず、簡単のために2流体の界面が平面である場合を考える。この場合、粒子間隔を $1/n$ にするとBCAの計算において考慮すべき粒子ペア数は n^2 倍となる（通常行われているように、カーネル径が初期粒子間隔に比例する場合カーネル関数の和も n^2 倍となる）。一方、係数 A^0 を式(3.3-4)のように初期粒子間隔の2乗に比例する形式で与えておくと、 A^0 は $1/n^2$ に比例するので、結果としてBCAは n には依存しない量となる。一般にもっと複雑な界面形状の場合でも初期粒子間隔を非常に小さくしていくと、注目している現象のスケールと比較して界面が局所的な平面の集合とみなせるようになり、ここでの結論を適用できる。すなわち、初期粒子間隔を非常に小さくとる極限（曲面を平面で近似できるような極限）では、BCAは一定の値に収束することになる。

以下では、 Δ を初期粒子配置間隔としてBCAを評価した

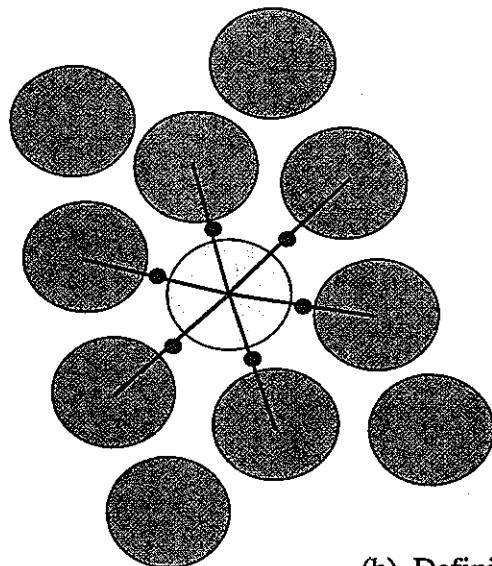
本手法により流速2.0 m/sのケースを対象として時刻0.1 s, 0.2 sにおいてBCAと体積率を評価した結果を、Fig. 3.3-2(1/2)、およびFig. 3.3-2(2/2)に各々示す。各図とも評価セクターで平均された値として、いくつかの鉛直方向bin毎に径方向分布を示している。

体積率分布の結果は妥当に思われるが、比較できる実験結果はない。とくに、BCAについては、上記のように(3.3-4)式の Δ に依存するので、粒子に働く剪断力から実験式により液滴サイズを評価し、ここで得られたBCAを補正することも考えられる。また、いずれにせよ実験解析によるチューニングが必要になると考えられる。これについては3. 5で検討する。



$$\begin{aligned}BCA(\bar{\mathbf{r}}_{ij}) &= \frac{A^0}{n^0} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \\ \bar{\mathbf{r}}_{ij} &= \frac{1}{2}(|\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_i|)\end{aligned}$$

(a) BCA between two particles.



$$\begin{aligned}BCA &= \frac{A^0}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \right] = A^0 \\ A^0 &= 4 \pi \Delta^2 \quad \Delta: \text{e.g. } \Delta x\end{aligned}$$

(b) Definition of the BCA constant.

Fig. 3.3-1 Evaluation of the binary contact area.

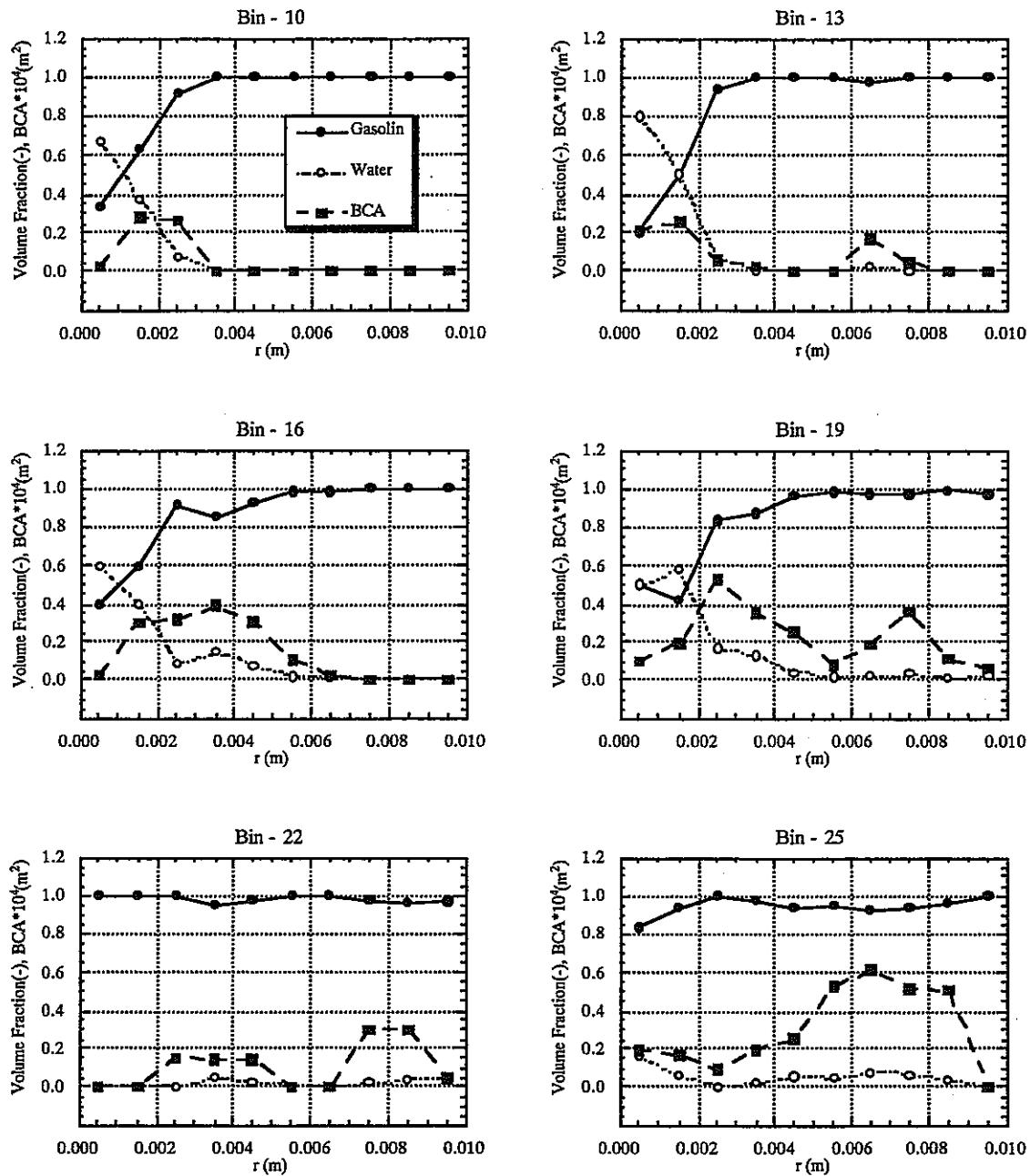


Fig. 3.3-2 (1/2) Radial distribution of the volume fraction and the binary contact area (BCA) in "Water jet into a gasoline pool" ($u = 2.0 \text{ m/s}$, $t = 0.1 \text{ s}$).

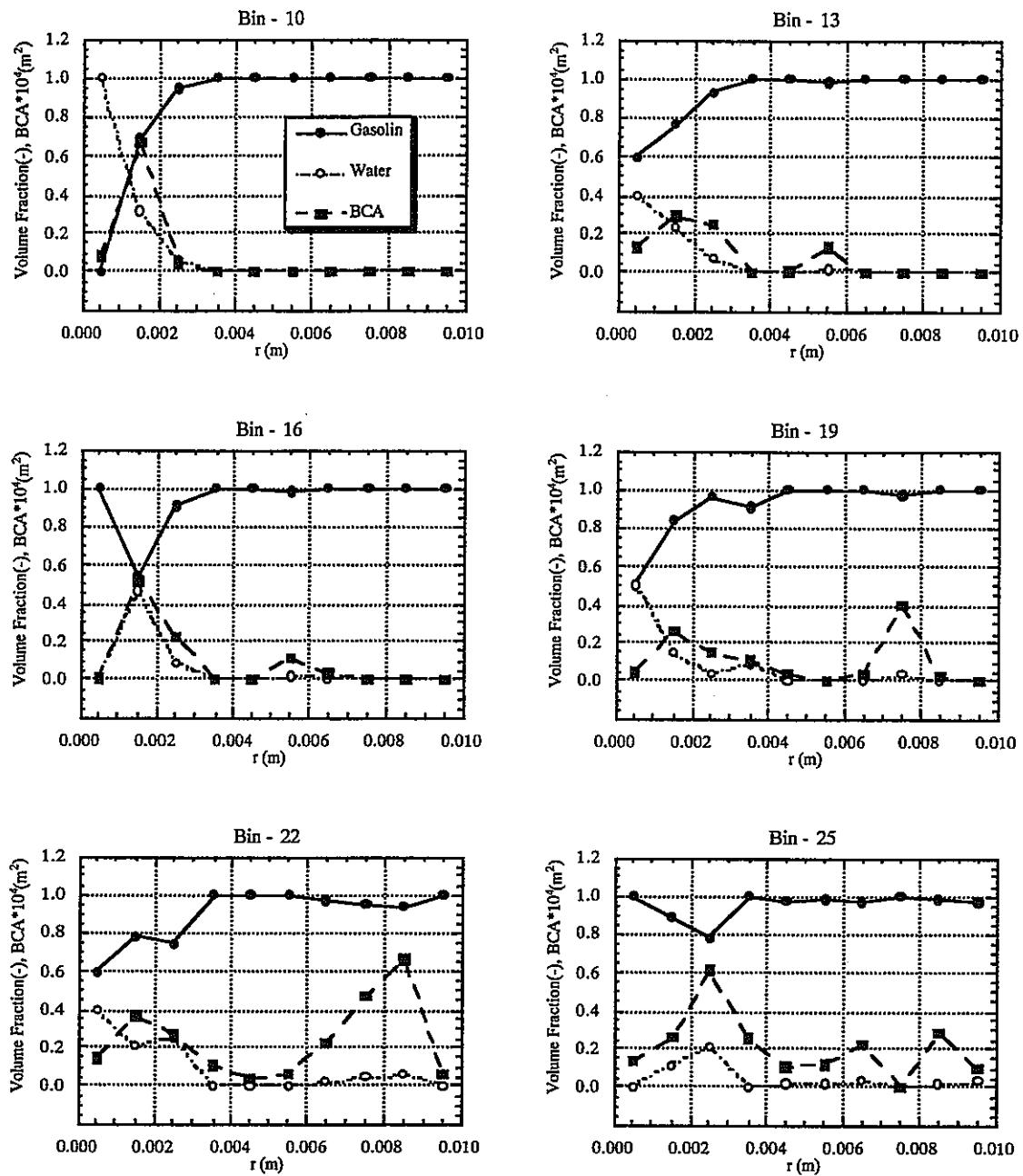


Fig. 3.3-2 (2/2) Radial distribution of the volume fraction and the binary contact area (BCA) in "Water jet into a gasoline pool" ($u = 2.0$ m/s, $t = 0.2$ s).

3. 4 SWAT3/Run19の予備解析

SWAT3/Run19の予備解析の目的は、化学反応モデルは入れない状態で、水／ナトリウムの液液2流体モデルが実機の複雑な体系に適用できる可能性を検討することにある。したがって、伝熱管を含む計算領域における流動状況を観ることになる。

解析体系と解析条件については、3. 1で述べた。

Fig. 3.3-1に、SWAT3/Run19試験の全ての伝熱管と主要熱電対の位置を示す。同図においてハッキングした小領域を計算対象とし、#79, #80, #71, #72, #63, #64の伝熱管を模擬した。

この解析体系に対して、粒子数(x,y,z) = (40,10,66)の粒子を設定した。ただし、伝熱管部分があるので、実際には次のようにある。

初期粒子配置サイズ : $dx=0.0025\text{ m}$

液体粒子数 = 20,000

壁粒子数 = 5,000

解析体系サイズ : (x,y,z) = (0.1,0.025,0.165) m

水ジェットは#79伝熱管の 1 cm^2 の孔から 1.85 kg/s でリークする。噴出角度はx軸から反時計回りに 66 deg である。単純計算から水ジェット速度を 24 m/s とした。

実験結果としては熱電対温度と一部の位置での圧力が計測されている。水リーク孔のある伝熱管の圧力は10秒以上の時間に渡ってほぼ 15 MPa に保たれている。

熱電対による温度は 0.02 s 毎に計測されている。Fig. 3.4-2に熱電対 T1190, T1186, T1181, T1179 の計測値を示す。同図において、 0.02 s のデータは最初のデータである。

Fig. 3.4-3に本解析体系における水粒子の挙動を示す。同図は、ナトリウム粒子を除いて水粒子のみを可視化したものである。実験におけるナトリウム・水反応は、水粒子が到達した部分で生じていると考えられる。すなわち、水粒子が到達した位置の熱電対の温度が上昇する。

例えばT1181に向けて射出した水は、 0.005 s ではT1181の位置には到達していない。

0.011 s では比較的大きな部分がT1181に到達し、#72伝熱管の下部に一部が回り込みT1186に到達している。 0.015 s では#63伝熱管の下部に一部が回り込みT1179に到達している。このとき#80にはTCがないため判断できないが、少なくともその下の#88伝熱管上部のT1190には水は到達していない。

0.027 s まで至っても水の分布は、熱電対に及ぼす影響として見ると温度計測値をよく説明していると言える。

これにより、本実験のような伝熱管群を含む複雑体系においても、高速ジェット流とプール流体との相互作用を考慮した流動挙動への適用性が確認できた。

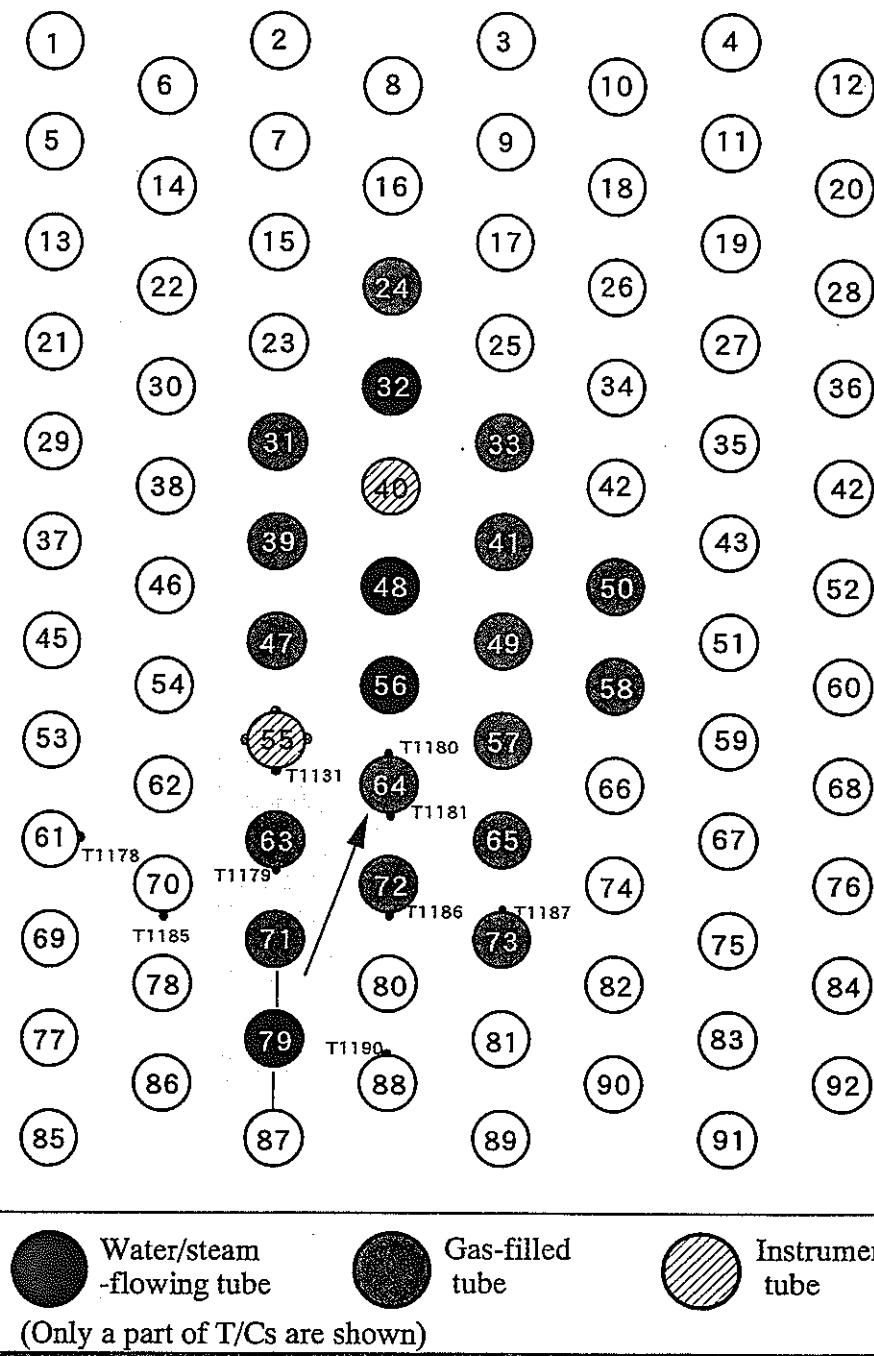


Fig. 3.4-1 Heat transfer tubes and TCs in SWAT3/Run19 test.

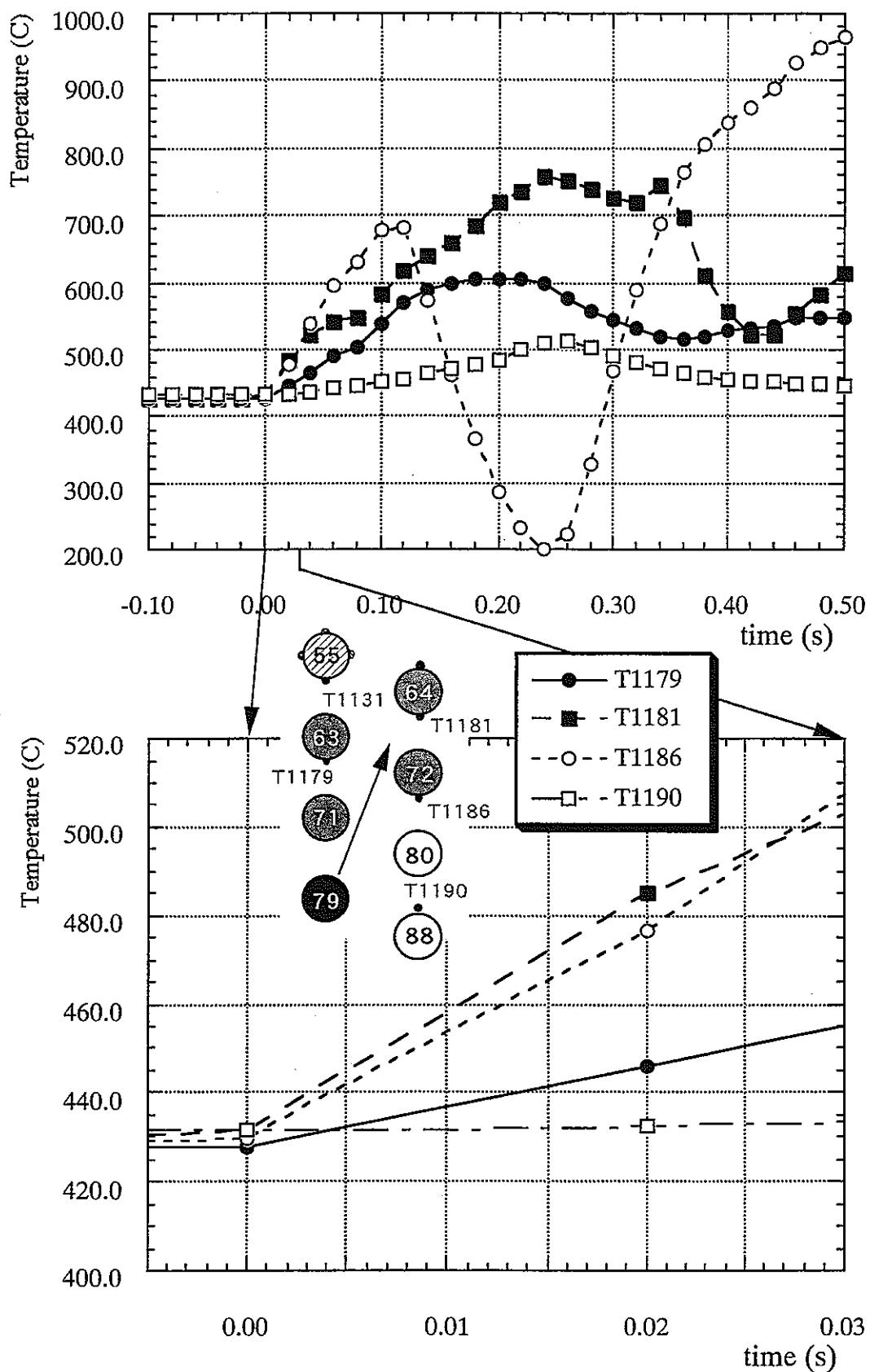


Fig. 3.4-2 History of the TCs involved in the calculation.

3.44

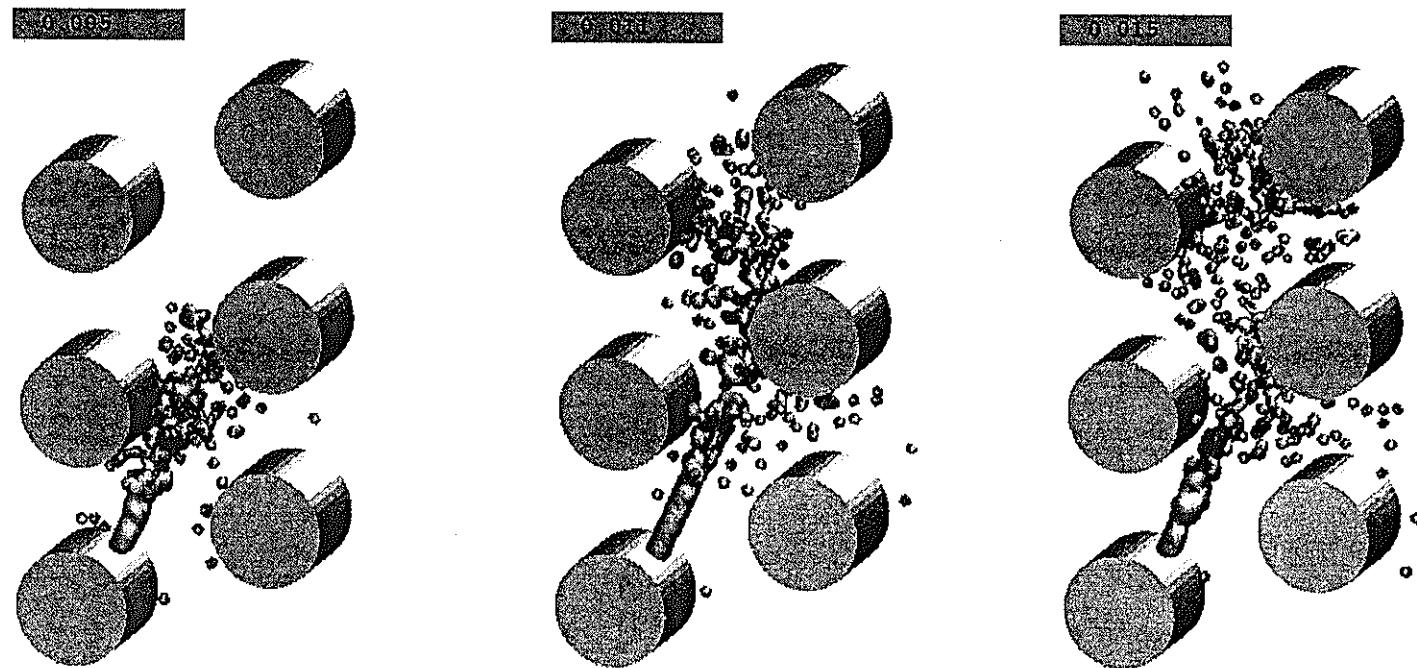


Fig. 3.4-3 (1/2) History of the water distribution of SWAT3/Run19 calculation.

3.4.5

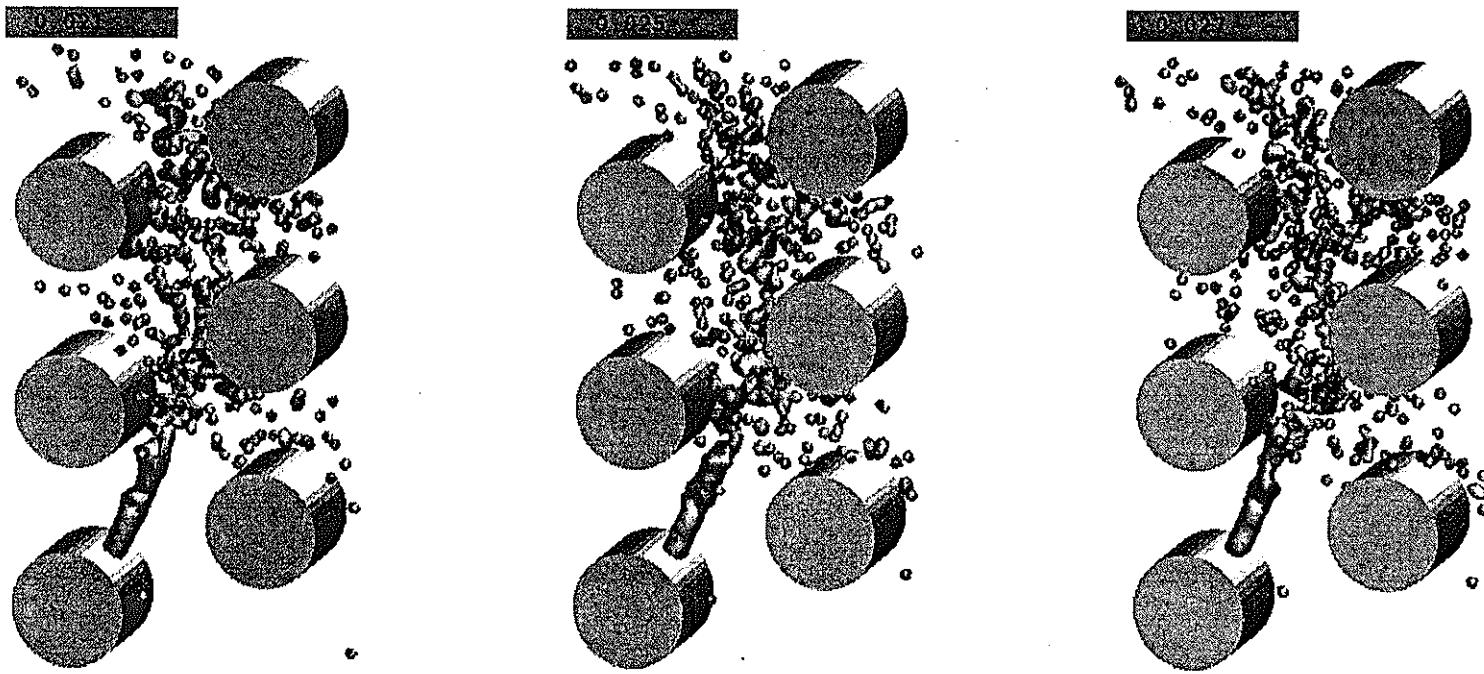


Fig. 3.4-3 (2/2) History of the water distribution of SWAT3/Run19 calculation.

3.5 考察

本節では粒子法における界面および界面積のモデル化について述べる。

既存の流動計算コードでは、相間界面積は、実験相関式や境界面積の保存方程式を用いて求められているが、これはあくまでも一般的な垂直あるいは水平管内二相流(混相流)に対して適用されるものであり、本研究で扱うノズルから流出するジェットのような現象に対しては必ずしも適切ではない。

2. 章で述べたように従来の文献において、ジェットと周囲の霧囲気流体間の接触面積を評価するような実験相関式は挙げられていない。

ここでは、既存の流動解析コードにおけるジェット流動様式に対するモデルを述べるとともに、粒子法におけるジェット流動様式の扱いを検討し、ひとつのモデルを提案する。

1) 既存の流動解析コード

TRAC コードでは、流動様式によって定まる実験相関式から界面積を表現している。また、SIMMER-III コードでは、界面積の保存方程式を解くことにより、より精度の高い評価を行っている。

ジェットを評価する場合、ジェットのコア部と周囲流体間の界面の定義、その界面から周囲流体へジェットがブレイクアップする状況、および混合相をいかに表現するかが重要になる。従来手法においてジェット流動様式を考慮することを考えると、界面が定義されれば、環状流あるいは環状分散流の流動様式における界面積の評価法を、ジェットと周囲霧囲気流体間の境界面積の取り扱い方に拡張することにより可能であると考えられる。

例として、SIMMER-III コードについて検討したモデルを以下に述べる。

現状の SIMMER-III の流動様式モデルでのチャンネル流の流動様式線図は、ボイド率と気液間の相対速度に対応した液膜からの液滴のエントレインメント率をパラメータとしている。この考え方をジェットと周囲の流体が構成する流動様式に適用することにより、新たにジェットと周囲の流体の流動様式を表現する補助的な流動様式線図を作成することが考えられる。

2) 粒子法

粒子法は本来、特別な実験相関式を必要としない手法であり、特に流動様式線図等を持たなくとも流動様式等を適切に表現できるものと考えられる。しかしながら、実際には計算時間の制約から粒子径をある程度大きくとらざるを得ないため、粒子径より小さな液滴を扱うことができない(粒子径が最小液滴径に相当する)。このため、解析の解像度が低下し、流れの状況を適切に評価できなくなる可能性がある。本研究のようなジェットの分裂現象を扱う際には、液滴の分裂等のモデルを併用することが解析手法のひとつとして考えられる。

ジェットを評価する上で最も重要であり、まずモデル化すべきであると思われる要素は、Fig. 2-3 における、liquid core と周囲流体間の相互作用によるブレイクアップである。ジェット現象では、液体表面近傍で液滴を形成するブレイクアップは、スプレイ生成の重要な過程のひとつであり、微粒化過程の開始、液体コア部の範囲の制御および分散流領域の初期範囲の情報を与える。しかしながら、このブレイクアップ現象は、密度の濃いスプレイ中のブレイクアップ、二次的な液滴のブレイクアップ等を観察しないと理解困難であるため、詳細なブレイクアップの相関式等が提案されていないのが現状である。

このブレイクアップは乱流の程度や密度差に依存するが、現在の粒子法では乱流の効果は考慮されていない(粒子径を小さくとれば考慮されると思われるが)ため、この効果をなんらかのモデルで表現する必要がある。次に、ひとつの案として検討したモデルについて述べる。

Fig. 3.5-1 にモデル概念を示す。ジェット成分である粒子 A の速度の主流方向速度 u とそれに垂直な方向の速度 v (擾乱成分)の比がある程度大きくなった場合、

$$\frac{v}{u} > C$$

最近傍の周囲の流体成分である粒子 B と位置および運動量を交換することを考えるものである。

また、液体コア部からブレイクアップした液滴が、流体力学的な効果によってさらに小さな液滴へと分裂する過程は、上述したように粒子径の制限により模擬することができないため、一例として任意位置の粒子速度等の流体力学的条件から分裂液滴径を実験式により評価するモデルが考えられる。Fig. 3.5-2 に示すように、計算粒子径より小さな液滴を扱う場合、液滴を計算粒子の中で次々と分裂させるモデルを考える。このとき、分裂液滴は計算対象粒子の中に詰ったまま他の分裂液滴と共に移動するものとし、界面積は計算された半径から評価されるものとする。

流体力学的不安定性による液滴の分裂の評価モデルの例[3-3]を示す。

液滴は次式に示す臨界ウェーバー数を超えると分裂する。

$$We_{cr} = We_{cr}|_{v=0} \left\{ 1 + f(N_{vd}) \right\} \quad (3.5-1)$$

ここで、 $We_{cr}|_{v=0}$ は液滴の粘性効果が無いときの臨界ウェーバー数の値である。また、 N_{vd} は次式に基づく無次元数である。

$$N_{vd} = \frac{v_d^2}{\rho_d d_{max} \sigma} \quad (3.5-2)$$

ここで、 ρ_d 、 d_{max} 、 σ 、 v_d はそれぞれ、液滴の密度、分裂液滴の最大直径、液滴の表面張力、液滴の動粘性係数。

$f(N_{vd})$ は実験から、次式が提案されている。

$$We_{cr} = We_{cr}|_{v=0} + 14N_{vd} \quad (3.5-3)$$

これより、分裂液滴の最大半径 r_{max}^{eq} は次式のように評価される。

$$r_{max}^{eq} = \frac{|\sigma_c - \sigma_d|}{4\rho_c (u_c - u_d)^2} We_{cr}|_{v=0} + \sqrt{\left(\frac{|\sigma_c - \sigma_d|}{4\rho_c (u_c - u_d)^2} We_{cr}|_{v=0} \right)^2 + \frac{7}{2} \frac{\mu_d^2}{\rho_c \rho_d (u_c - u_d)^2}} \quad (3.5-4)$$

ここで、 u_c 、 u_d 、 μ_d 、 ρ_c 、 σ_c 、 σ_d はそれぞれ周囲流体の速度、液滴の速度、液滴の粘性係数、周囲流体の密度、周囲流体の表面張力、液滴の表面張力。

また、 $We_{cr}|_{v=0}$ はおよそ 13 である。

密度差によるブレイクアップモデルについては今後の検討課題とする。

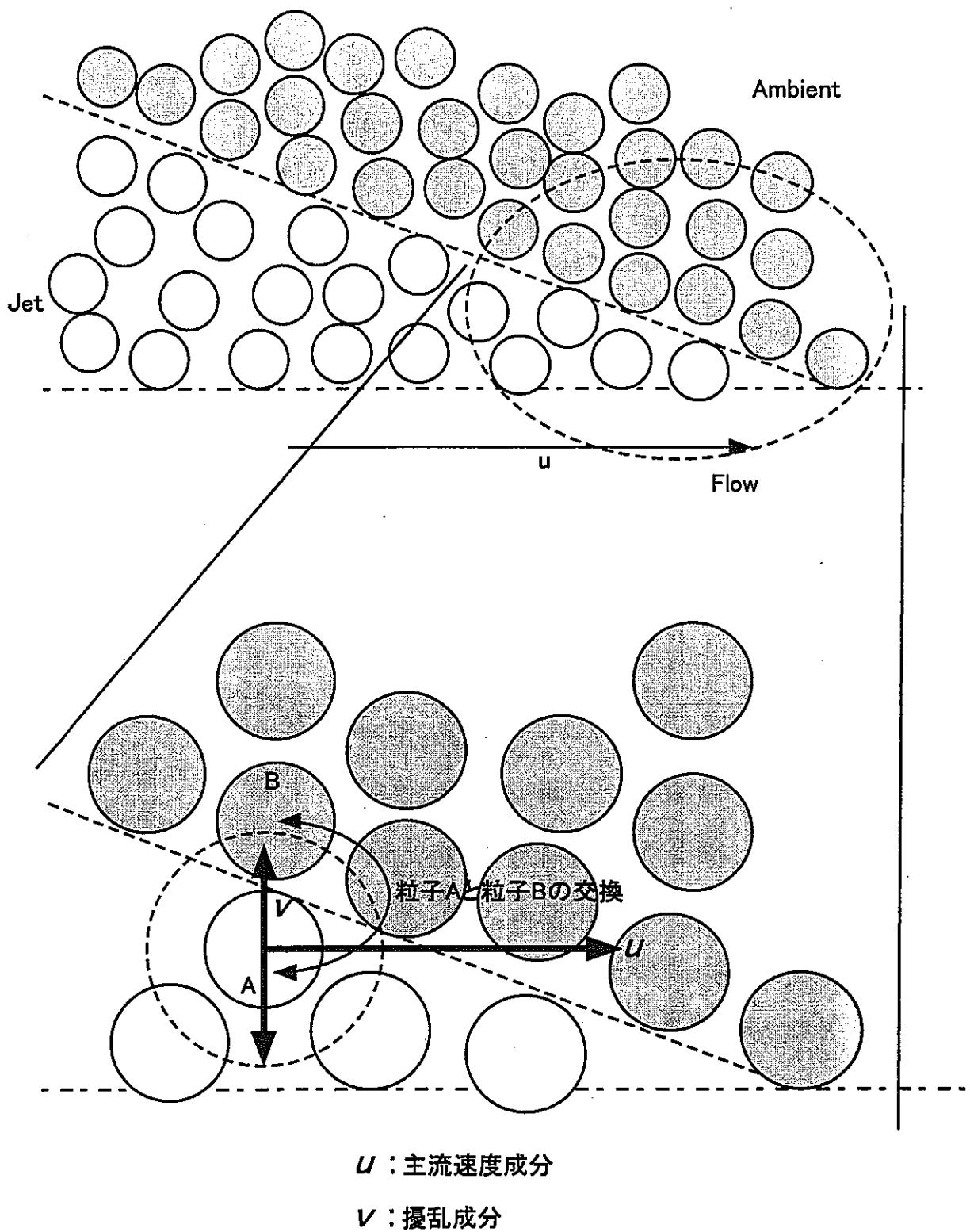


Fig. 3.5-1 Breakup model of the liquid core interacting with an ambient fluid.

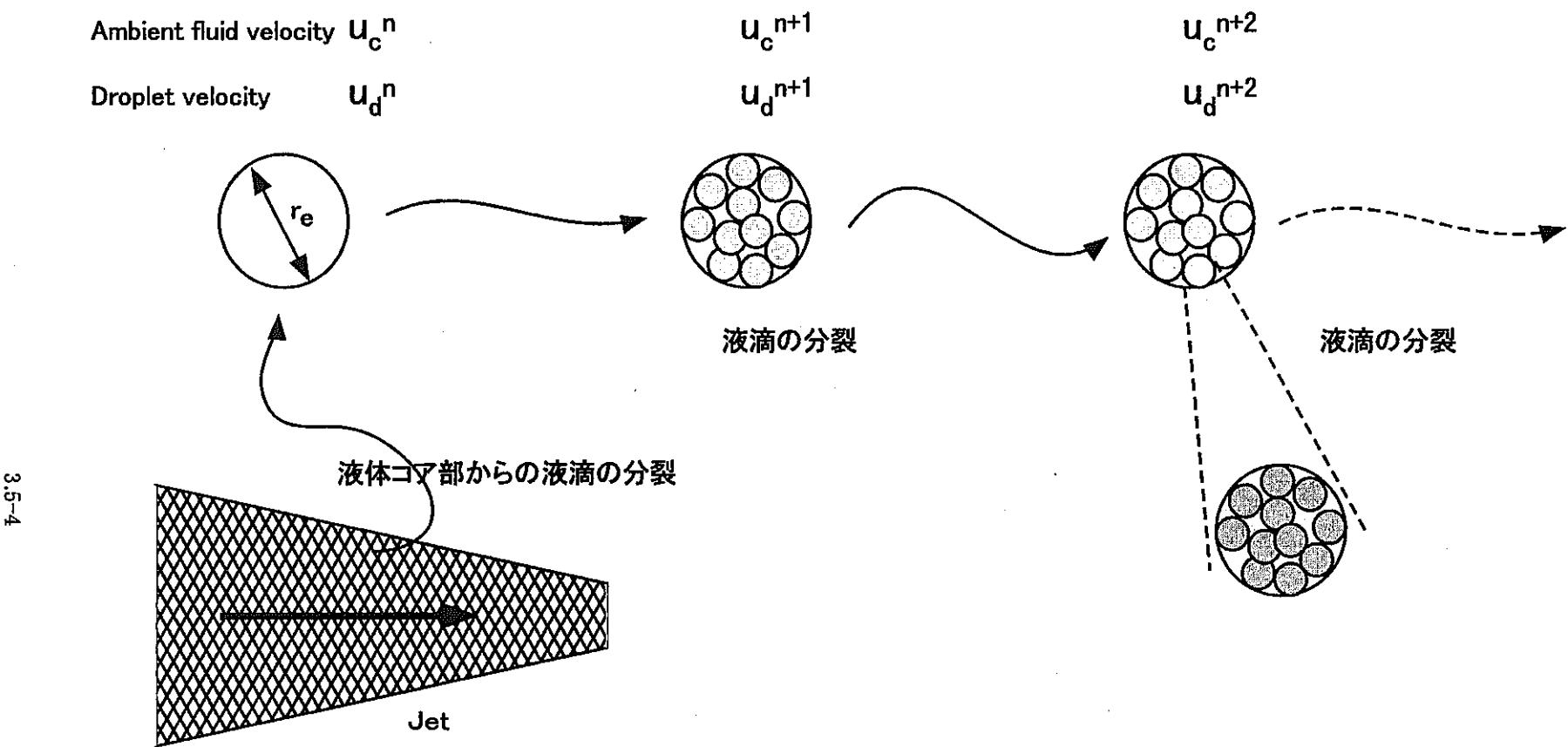


Fig. 3.5-2 Breakup model in the particle interaction method.

4. 対象流体拡張のためのコード設計

本コードの最終目標は、高速炉蒸気発生器水リーク事故における伝熱管の温度を評価することである。ナトリウムー水反応を含むこの現象は非常に複雑な物理過程であり、粒子法でこれをモデリングする場合、現象の本質をとらえるとともに、大きな効果ではないと考えられる部分は捨てることが必要になる。また、実機に比較して非常に小さな計算領域を設定しても、ひとつの粒子サイズは実現象に比べてかなり大きなものにならざるを得ない。このため、どのような近似（モデルの簡略化）を行うかが重要となる。

4. 1 対象流体拡張のための定式化

4. 1. 1 化学反応モデル

(1) 化学反応モデルの基本仮定

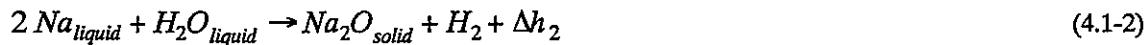
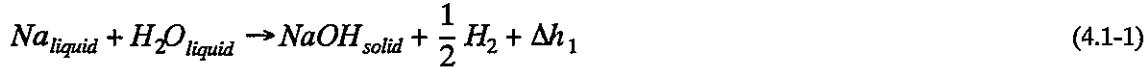
ナトリウムー水反応のような不均一系反応では、反応界面が存在するため反応現象は界面近傍に限られる。その反応速度は界面における流動拡散／混合時間または表面反応時間で決定され、反応速度は一般に均一系よりも小さい。また、反応により相変化を伴うのでエントロピーが大きく増大し、逆反応が生じる割合は非常に小さい。さらに、公開されたナトリウムー水反応によるウェステージ基礎試験結果によれば、ナトリウムー水反応領域は厚さ1 mm程度と狭いことが分かっている。

したがって、

一反応は全て界面近傍で生じ、反応速度は有限である。すなわち、反応速度を考慮する、

一反応は非可逆的であるとする、

という仮定を置く。また、次の2つの化学反応を考慮する。



(2) モデルの基本構想

ここでは、水、ナトリウム、水蒸気、およびナトリウムー水の化学反応生成物を扱うためのモデリングについて述べる。

これまでのSIMMER-III-SWによる、SWAT1/P06、SWAT3/Run19解析をとおして得られた知見[3-2]から、物理現象は以下のようであると考えられる。

水の連続相（あるいはフラッシングによる気液混合状態）と、ナトリウムの連続相の界面で化学反応を生じ、界面に気体層と化学反応生成物が生じる。界面に生じた、Na₂O（固体粒子）、NaOH（おそらく液体）、H₂、および水とナトリウムの蒸気と液滴が、界面近傍の水とナトリウムの連続相と混合し熱的相互作用を行う結果、主として水が蒸発し気体の圧力が上昇することにより気体領域が拡大していく。

3. 3で説明したSWAT3/Run19試験では、初期には温度が水温程度まで減少する熱電対もあることから、初期フラッシングによりリーク孔近傍の圧力が上昇すると水が液体状態で噴出していると考えられる。しかし、このような状態はリーク孔近傍に限られ、少し離れた伝熱管ではナトリウムー水反応より主として高温気体との接触により熱電対温度が上昇すると考えられる。

こうした物理的描像を模擬するためには、以下の熱伝達経路が必要であると考えられる。ただし、SIMMER-III-SWによる解析ではジェット流動様式を模擬するためにSIMMER-IIIの流動様式を修正することが重要な要素であったが、粒子法ではジェット流動様式が自動的に模擬できること、および全ての物質は粒子イメージで表現されることを考慮した。

ここで、この現象に現れる成分の記号を次のように決めておく。

L1 : Water
 L2 : Sodium
 P1 : Na₂O
 P2 : NaOH
 g1 : Steam
 g2 : Sodiumvapor
 g3 : H₂

以下に示す熱伝達経路と化学反応経路の記号で、

VC : Vaporization/Condensation

CR : Chemical reaction

を示す。ただし、伝熱管の温度評価にとっては高温気体に包まれる状態が重要であるからcondensationは考慮しない。

主要な熱伝達経路は以下のようであると考えられる。

- (1) VC_L1g1;L2 : 水が高温ナトリウム接触して蒸発する
- (2) VC_L1g1;P1 : 水が高温Na₂O粒子と接触して蒸発する
- (3) VC_L1g1;P2 : 水が高温NaOH液滴と接触して蒸発する
- (4) VC_L2g2;P1 : ナトリウムが高温Na₂O粒子と接触して蒸発する
- (5) VC_L2g2;P2 : ナトリウムが高温NaOH液滴と接触して蒸発する

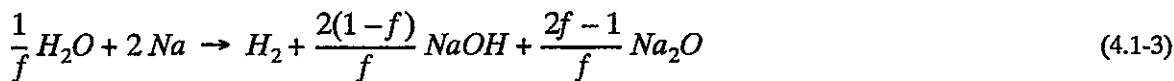
(注) 高温蒸気と水が接触することによる水の蒸発は扱わない。これは凝縮現象であると考えられるからであり、凝縮は上記の理由により考慮しないからである。

(4.1-1)、(4.1-2)式を用いれば化学反応経路は以下のようになる。

- (6) CR_L1L2 : 水（液滴）とナトリウム液滴が接触してNa₂O粒子、NaOH液滴、水素を生成する
- (7) CR_L1g2 : 水（液滴）とナトリウム蒸気が接触してNa₂O粒子、NaOH液滴、水素を生成する
- (8) CR_L2g1 : ナトリウム液滴と水蒸気が接触してNa₂O粒子、NaOH液滴、水素を生成する
- (9) CR_g1g2 : 水蒸気とナトリウム蒸気が接触してNa₂O粒子、NaOH液滴、水素を生成する

(3) 化学反応モデルの計算アルゴリズム

粒子法では、例えば水粒子（液滴）の相互作用範囲に、これと化学反応をする粒子（ナトリウム液滴、ナトリウム蒸気）が存在する場合、(4.1-1)、(4.1-2)式の2つの化学反応式にしたがって化学反応を行うことになる。これら2つの式の生じる割合を水素／水のモル転換比をパラメータとして考慮するため、次式のような水とナトリウムの合成反応式を考える。水素／水のモル転換比をf（入力ノミナル値：0.75）とすると次式が得られる。



化学反応にともなう生成熱はNaOHを生じる水酸化反応でQ_NaOH=189 kJ/mol、Na₂Oを生じる酸化反応でQ_Na₂O=176 kJ/molであるから、(4.1-3)式より生成される熱量は、

$$Q (kJ/mol) = \frac{2(1-f)}{f} Q_{NaOH} + \frac{2f-1}{f} Q_{Na_2O} \quad (4.1-4)$$

とする。水素生成の反応速度は次式で評価する。

$$m_{H_2} = w_{H_2} K a^l C_{Na} C_{H_2O} = w_{H_2} K a^l \left(\frac{\rho}{w}\right)_{Na} \left(\frac{\rho}{w}\right)_{H_2O} \quad (4.1-5)$$

ここで、

w	: 分子量
K	: 水素生成反応速度定数（入力パラメータ）
a ^I	: 単位体積あたり接触面積
C	: 化学種のモル濃度
ρ	: 密度

計算アルゴリズムとしては、すべての相互作用範囲内にあるH₂O粒子とナトリウム粒子対について水素生成量を計算する。実際の計算では設定できる粒子サイズは物理的に妥当と考えられるサイズよりも大きくなるを得ないため、実験相関式を考慮した粒子間相互作用面積を用いる。ここでは、H₂O粒子*i*、ナトリウム粒子*j*の間の相互作用面積を最も簡単な形式である、

$$(a^I)_{ij} = \frac{a^0}{n^0} w(|r_j - r_i|) \quad (4.1-6)$$

とした場合について示す。 a^0 は単位体積あたりの境界面積である。粒子*i*、*j*の反応による水素発生速度は、

$$(m_{H_2})_{ij} = \frac{w_{H_2} K a^0}{n^0} w(|r_j - r_i|) \left(\left(\frac{\rho}{w} \right)_{Na} \right)_j \left(\left(\frac{\rho}{w} \right)_{H_2O} \right)_i \quad (4.1-7)$$

となる。求まった水素発生量と(4.1-3)式を考慮することによりNaON、Na₂Oの発生量を評価することができる。

水素発生速度から発生水素粒子の個数 *N* は、

$$(N_{H_2})_{ij} = \frac{(m_{H_2})_{ij} \cdot \Delta t}{\bar{\rho}_{H_2, CR}^*} \quad (4.1-8)$$

で与えられるとする。ここで、分母の * が付いた質量密度は反応に関与しているH₂O粒子とNa粒子に関して平均をとった圧力・温度における水素の密度を用いる。NaON、Na₂Oについても同様に扱う。

(4.1-8)式で与えられる個数が 1 に満たない場合は、発生量をH₂O粒子とナトリウム粒子に分配しそれぞれの粒子がそれを蓄積していく。互いに相互作用範囲にあるH₂O粒子とナトリウム粒子の蓄積量の和が粒子 1 個分になった時点で界面上に水素粒子、NaOH粒子、Na₂O粒子を発生させ、H₂O粒子とナトリウム粒子からその分の質量を引く。質量がある一定の値以下になったH₂O粒子やナトリウム粒子は削除する。

ナトリウム・水反応によって生じる物質のエネルギー状態の評価については、化学反応生成物の温度を評価する方法を採用する。化学反応による生成物質の熱力学的状態は、反応前と反応後のエンタルピーが生成熱も含めて保存されるように決定する。(4.1-3)式を化学反応生成熱を無視してエンタルピーの保存式に書き直せば、

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{H_2O, CR}^* \Delta h_{H_2O}^n + \hat{\rho}_{Na, CR}^* \Delta h_{Na}^n \\ = \hat{\rho}_{H_2, CR}^* \Delta h_{H_2}^{n+1} + \hat{\rho}_{NaOH, CR}^* \Delta h_{NaOH}^{n+1} + \hat{\rho}_{Na_2O, CR}^* \Delta h_{Na_2O}^{n+1} \end{aligned} \quad (4.1-9)$$

となる。ここで、 $\hat{\rho}$ は巨視的密度を表す。添字CRはそのタイムステップでの化学反応に関与する巨視的密度という意味である。粒子法では微視的密度と区別する必要はないが、ここでの定式化は巨視的密度で表現する。比エンタルピーの前に△がつけられているのは、ある任意の基準点に対する相対比エンタルピーを意味する。化学変化によって新たな物質が生じる場合は、新たに生じた物質のエネルギー状態を定めるために、各物質で共通のエンタルピーの基準を定義する必要がある。この基準の取り方は任

意であるが、化学反応の標準生成熱が定義されている標準温度298Kで1気圧とするのが自然である。ある物質Mの相対比エンタルピーは、基準点の比エンタルピーを $h_{M,0}$ とすると、

$$\Delta h_M = h_M - h_{M,0} \quad (4.1-10)$$

となる。ここで、さらに新たに生成した物質の温度は生成反応熱を分配する前の状態では等しいと仮定する。すなわち、反応後の温度を T_{CR}^{n+1} とすると、

$$\begin{aligned} & \hat{\rho}_{H_2O, CR}^n \Delta h_{H_2O}(T_{H_2O}^n) + \hat{\rho}_{Na, CR}^n \Delta h_{Na}(T_{Na}^n) \\ &= \hat{\rho}_{H_2, CR}^* \Delta h_{H_2}(T_{CR}^{n+1}) + \hat{\rho}_{NaOH, CR}^* \Delta h_{NaOH}(T_{CR}^{n+1}) + \hat{\rho}_{Na_2O, CR}^* \Delta h_{Na_2O}(T_{CR}^{n+1}) \end{aligned} \quad (4.1-11)$$

となる。この非線形方程式を解いて T_{CR}^{n+1} を求め、次式で与えられる化学反応による生成熱を各反応生成物に分配して反応後の各生成物質の温度を求める。

$$Q_{CR} = n_{H_2, CR} \left(\frac{2(1-f)}{f} \Delta h_{NaOH} + \frac{2f-1}{f} \Delta h_{Na_2O} \right) \quad (4.1-12)$$

ここで、

$n_{H_2, CR}$: 化学反応で生成した水素のモル数、

Δh_{NaOH} : NaOH生成反応の標準生成熱、

Δh_{Na_2O} : Na₂O生成反応の標準生成熱。

生成熱が反応生成物のみに与えられると仮定し、反応生成物の熱容量に応じて Q_{CR} を分配するのであれば、結局は分配後も各成分の温度が等しくなる。すなわち、この場合は、(4.1-11)式の右辺に生成反応熱を含めた

$$\begin{aligned} & \hat{\rho}_{H_2O, CR}^n \Delta h_{H_2O}(T_{H_2O}^n) + \hat{\rho}_{Na, CR}^n \Delta h_{Na}(T_{Na}^n) + Q_{CR}^n \\ &= \hat{\rho}_{H_2, CR}^* \Delta h_{H_2}(T_{CR}^{n+1}) + \hat{\rho}_{NaOH, CR}^* \Delta h_{NaOH}(T_{CR}^{n+1}) + \hat{\rho}_{Na_2O, CR}^* \Delta h_{Na_2O}(T_{CR}^{n+1}) \end{aligned} \quad (4.1-13)$$

を解いた T_{CR}^{n+1} がそのまま反応後の各生成物質の温度ということになる。ここでは、計算時間を考慮して(4.1-13)式を用いる。

化学反応に関する成分全てに共通な温度(273K:入力)における比内部エネルギーを $h_{M,0}$ とし、次式により各成分のエネルギーを更新する。

$$e^{n+1} = h_{M,0}^0 + \Delta h(T_{CR}^{n+1}) \quad (4.1-14)$$

NaOH, Na₂Oについては比エンタルピーがほぼ比内部エネルギーに等しいと仮定して、状態方程式(EOS)を設定する必要がある。

(4) 蒸発／凝縮モデルの計算アルゴリズム

蒸発／凝縮モデルとして相境界のエネルギーバランスで記述される非平衡過程モデルを採用する。

Γ は蒸発/凝縮(Vaporization/Condensation;)過程における単位体積当たりの質量移行率を表す。記号[]は

境界を表し、添字(g,l)は気相から液相への移行を、(g,l)=(l,g)であることを示す。H, Lは相変化の対象となる物質に接触している高温および低温物質を表わす。

●気液界面において水が蒸発して水蒸気に、あるいは水蒸気が凝縮して水になる経路。

気相／液相の相変化による質量保存式：

$$\frac{\partial \hat{\rho}_g}{\partial t} = \Gamma_{l,g} - \Gamma_{g,l} \quad (4.1-15)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}_l}{\partial t} = \Gamma_{g,l} - \Gamma_{l,g} \quad (4.1-16)$$

気相／液相の相変化によるエネルギー保存式：

相変化する成分からは、そのバルクエンタルピが除かれ、相変化先の成分には界面エンタルピが移行すると考える。

$$\frac{\partial \hat{\rho}_g e_g}{\partial t} = -\Gamma_{g,l} i_g + \Gamma_{l,g} [i]_{Vapor} + [a]_{g:l} h_{g,l} ([T] - T_g) \quad (4.1-17)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}_l e_l}{\partial t} = -\Gamma_{l,g} i_l + \Gamma_{g,l} [i]_{Liquid} + [a]_{g:l} h_{l,g} ([T] - T_l) \quad (4.1-18)$$

ここで、

Γ	: 単位体積当たりの質量移行率
$[i]_{Vapor}$: 蒸気の境界エンタルピ（境界温度で定義される蒸気のエンタルピ）
$[i]_{Liquid}$: 液体の境界エンタルピ（境界温度で定義される液体のエンタルピ）
$[a]_{g:l}$: 気相と液相の界面面積
h	: 熱伝達率
$[T]$: 気相と液相の界面温度

質量移行率 Γ は単位体積当たりのエネルギー移行率、

$$[q]_{g,l} = [a]_{g:l} \left[h_{g,l} ([T] - T_g) + h_{l,g} ([T] - T_l) \right], \quad (4.1-19)$$

により、

$$\text{if } [q]_{g,l} > 0, \text{ then } \Gamma_{g,l} = \frac{[q]_{g,l}}{i_g - [i]_{Liquid}}, \quad (4.1-20)$$

$$\text{if } [q]_{g,l} < 0, \text{ then } \Gamma_{l,g} = -\frac{[q]_{g,l}}{[i]_{Vapor} - i_l}, \quad (4.1-21)$$

で与えられる。ここで、(4.1-20)式、(4.1-21)式の分母が各々、（実効的）凝縮潜熱、蒸発潜熱に相当す

る。また、 $[q]_{g,l} = 0$ の場合、境界温度は次式となる。

$$[T]_{g:l} = -\frac{h_{g,l} T_g + h_{l,g} T_l}{h_{g,l} + h_{l,g}} \quad (4.1-22)$$

●高温物質と接触して水が蒸発する経路。
気相／液相の相変化による質量保存式：

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_g}{\partial t} = \Gamma_{l,g} \quad (4.1-23)$$

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_l}{\partial t} = -\Gamma_{l,g} \quad (4.1-24)$$

気相／液相の相変化によるエネルギー保存式：

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_g e_g}{\partial t} = \Gamma_{l,g} [i]_{Vapor} \quad (4.1-25)$$

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_l e_l}{\partial t} = -\Gamma_{l,g} i_l + [a]_{H:l} h_{l,H} ([T] - T_l) \quad (4.1-26)$$

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_H e_H}{\partial t} = [a]_{H:l} h_{H,l} ([T] - T_H) \quad (4.1-27)$$

ここで、

Γ : 単位体積当たりの質量移行率

$[i]_{Vapor}$: 蒸気の境界エンタルピ（境界温度で定義される蒸気のエンタルピ）

$[i]_{liquid}$: 液体の境界エンタルピ（境界温度で定義される液体のエンタルピ）

$[a]_{H:l}$: 高温物質と低温液相の境界面積

h : 热伝達率

$[T]$: 高温物質と低温液相の界面温度

質量移行率 Γ は単位体積当たりのエネルギー移行率、

$$[q]_{g,l} = [a]_{H:l} \left[h_{H,l} ([T] - T_H) + h_{l,H} ([T] - T_l) \right], \quad (4.1-28)$$

により、

$$\text{if } [q]_{g,l} < 0, \text{then } \Gamma_{l,g} = -\frac{[q]_{g,l}}{[i]_{Vapor} - i_l}, \quad (4.1-29)$$

で与えられる。ここで、(4.1-29)式の分母が（実効的）蒸発潜熱に相当する。また、 $[q]_{g,l} = 0$ の場合、境界温度は次式となる。

$$[T]_{H:l} = \frac{h_{H,l} T_H + h_{l,H} T_l}{h_{H,l} + h_{l,H}} \quad (4.1-30)$$

●低温物質と接触して水蒸気が凝縮する経路。

気相／液相の相変化による質量保存式：

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_g}{\partial t} = -\Gamma_{g,l} \quad (4.1-31)$$

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_l}{\partial t} = \Gamma_{g,l} \quad (4.1-32)$$

気相／液相の相変化によるエネルギー保存式：

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_g e_g}{\partial t} = -\Gamma_{g,l} i_g + [a]_{g:L} h_{g,L} ([T] - T_g) \quad (4.1-33)$$

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_l e_l}{\partial t} = \Gamma_{g,l} [i]_{liquid} \quad (4.1-34)$$

$$\frac{\partial \widehat{\rho}_L e_L}{\partial t} = [a]_{g:L} h_{L,g} ([T] - T_L) \quad (4.1-35)$$

ここで、

Γ	：単位体積当たりの質量移行率
$[i]_{Vapor}$	：蒸気の境界エンタルピ（境界温度で定義される蒸気のエンタルピ）
$[i]_{liquid}$	：液体の境界エンタルピ（境界温度で定義される液体のエンタルピ）
$[a]_{g:L}$	：低温物質と高温気相の境界面積
h	：熱伝達率
$[T]$	：低温物質と高温気相の界面温度

質量移行率 Γ は単位体積当たりのエネルギー移行率、

$$[q]_{g,l} = [a]_{g:L} \left[h_{g,L} ([T] - T_g) + h_{L,g} ([T] - T_L) \right], \quad (4.1-36)$$

により、

$$if [q]_{g,l} > 0, then \quad \Gamma_{g,l} = \frac{[q]_{g,l}}{i_g - [i]_{liquid}}, \quad (4.1-37)$$

で与えられる。ここで、(4.1-37)式の分母が（実効的）凝縮潜熱に相当する。また、 $[q]_{g,l} = 0$ の場合、境界温度は次式となる。

$$[T]_{g:L} = \frac{h_{g,L} T_g + h_{L,g} T_L}{h_{g,L} + h_{L,g}} \quad (4.1-38)$$

粒子法においては、相変化の対象となる粒子とその相互作用範囲にある粒子との間で熱流束を計算する。こでは、水粒子が高温物質と接触して蒸発する場合を例とし、粒子 i, j 間の相互作用面積を最も簡単な形式である、

$$([a]_{H,l})_{ij} = \frac{a^0}{n^0} w(|r_j - r_i|) \quad (4.1-39)$$

とした場合について示す。水粒子 i に対する(4.1-28)式は、

$$\begin{aligned} & ([q]_{g,l})_i \\ &= \sum_{j=Na, NaOH, Na2O} ([a]_{H,l})_{ij} \left[h_{H,l} \left(([T])_{ij} - (T_H)_j \right) + h_{l,H} \left(([T])_{ij} - (T_l)_i \right) \right] \\ &= \sum_{j=Na, NaOH, Na2O} \frac{a^0}{n^0} w(|r_j - r_i|) \left[h_{H,l} \left(([T])_{ij} - (T_H)_j \right) + h_{l,H} \left(([T])_{ij} - (T_l)_i \right) \right] \end{aligned} \quad (4.1-40)$$

と表わせる。この熱移行率を(4.1-29)式に用いて得られる質量移行率を用いて発生気体粒子の個数 N を次式で決める。すなわち、

$$N_{lg,i} = \frac{\Gamma_{lg,i} \cdot \Delta t}{\rho_g} \quad (4.1-41)$$

ここで、分母の気体密度は気体発生点近某の粒子の平均圧力における飽和蒸気の密度である。

発生粒子数が 1 に満たない場合は、移行熱量（質量移行量に相当）を気体粒子 1 個を発生できる量になるまで液体粒子が蓄積していく。1 個の気体粒子を発生できる量になら界面上に気体粒子を 1 個発生させ、その分の質量を液体粒子から引く。凝縮過程の場合も同様であるが、質量移行量を気体粒子が蓄積していく、気体粒子 1 個に相当する量となったところで気体粒子 1 個を削除し液体粒子にその分の質量を加える。

同種粒子間の熱伝導に関しては、熱伝導方程式、

$$\frac{D e}{D t} = \frac{k}{\rho} \nabla^2 T \quad (4.1-42)$$

に従うものとし、カーネル関数で離散化した形式、

$$\begin{aligned} e_i^{n+1} &= e_i^n + \frac{k}{\rho} \nabla^2 T \Delta t \\ &= e_i^n + \frac{k}{\rho} \frac{2d}{n^0 \lambda_{j=i}} \sum \left[(T_j^n - T_i^n) w(|r_j - r_i|) \right] \Delta t \end{aligned} \quad (4.1-43)$$

を用いて計算する。 k は熱伝導率である。

4. 1. 2 流体力学モデル

ナトリウム-水の化学反応を扱うためには、既存の液-液2流体、気-液2流体の定式化を、気液複数流体（複数速度場）に拡張する必要がある。各流体は以下の物質を扱うものとする。

液体 $\xi = 1$: 水

液体 $\xi = 2$: ナトリウム

液体 $\xi = 3$: Na_2O

液体 $\xi = 4$: NaOH

気体 $\xi = 5$: 水蒸気

気体 $\xi = 6$: ナトリウム蒸気

気体 $\xi = 7$: H_2

基礎式および計算アルゴリズムを以下に示す。上付添字 $n+1$ は新しい時刻の量、 $*$ は陽的計算の結果、 $^{\sim}$ は陰的計算での補正量を表わしている。添字がない量は前タイムステップ (n) の結果である。

(1) 拡散項、重力項、表面張力項による粒子速度、位置の仮の更新

$$\begin{aligned} u_{\xi,i}^* &= u_{\xi,i} + \left[\nu_{\xi} \nabla_{\xi,i}^2 u + F_{\xi,i}^{(g)} + F_{\xi,i}^{(st)} \right] \Delta t \\ &= u_{\xi,i} + \left[\nu_{\xi} \frac{2d}{n^0 \lambda} \sum_{j \neq i}^{N_{\xi=1 \sim 7}} [u_j - u_{\xi,i}] w(|r_j - r_{\xi,i}|) + F_{\xi,i}^{(g)} + F_{\xi,i}^{(st)} \right] \Delta t \end{aligned} \quad (4.1-44)$$

$$r_{\xi,i}^* = r_{\xi,i} + u_{\xi,i}^* \Delta t, \quad (4.1-45)$$

$F_{\xi,i}^{(g)}$ は重力、 $F_{\xi,i}^{(st)}$ は表面張力である。表面張力は液体に対してのみ考慮する。

(2) 圧力、密度の陰的計算

圧力ボアソン方程式の計算

$$\langle \nabla^2 P^{n+1} \rangle_{\xi,j} = -\frac{\rho_{\xi,i}^{n+1}}{\Delta t^2} \frac{n_{\xi,j}^* - n^0}{n^0} \quad (4.1-46)$$

ただし、密度の初期値は、

$$\rho_{\xi,i}^{n+1} = \rho_{\xi,i}^* = \rho_{\xi} (p_{\xi,b} e_{\xi,i}^{n+1}) \quad (4.1-47)$$

である。

ここで、気体と液体の圧力方程式は別々に解く。気体圧力を求める時には、液体粒子を構造粒子と同様に取り扱う。液体圧力を解くときには液体界面粒子を自由界面粒子として扱い、その粒子の圧力は気体圧力計算で得られている値とする。

速度、位置の補正量を求める

$$u_{\xi,i}' = -\frac{\Delta t d}{n^0 \rho_{\xi}} \sum_{j \neq i}^{N_{\xi=1 \sim 7}} \frac{P_j - P_{\xi,i}}{|r_j^* - r_{\xi,i}|^2} (r_j^* - r_{\xi,i}^*) w(|r_j^* - r_{\xi,i}^*|) \quad (4.1-48)$$

$$r_{\xi,i}' = u_{\xi,i}' \Delta t \quad (4.1-49)$$

新しい時刻の圧力を用いて状態方程式から密度を求める

$$\rho_{\xi,i}^{n+1} = \rho_{\xi}^*(p_{\xi,i}^{n+1}, e_{\xi,i}^{n+1}) \quad (4.1-50)$$

速度、位置の補正

$$u_{\xi,i}^* = u_{\xi,i}^* + u'_{\xi,i} \quad (4.1-51)$$

$$r_{\xi,i}^* = r_{\xi,i}^* + r'_{\xi,i} \quad (4.1-52)$$

(3) 収束判定。未収束であれば(2)に戻る。

(4) 収束したら速度、位置、温度を更新して次のタイムステップに進む、

$$u_{\xi,i}^{n+1} = u_{\xi,i}^* \quad (4.1-53)$$

$$r_{\xi,i}^{n+1} = r_{\xi,i}^* \quad (4.1-54)$$

$$T_{\xi,i}^{n+1} = T_{\xi}^*(p_{\xi,i}^{n+1}, e_{\xi,i}^{n+1}) \quad (4.1-55)$$

$$t \leftarrow t + \Delta t \quad (4.1-56)$$

(3) 実験結果との比較方法

伝熱管に溶接された熱電対は、伝熱管の材質を有するひとつ（あるいは複数）の構造粒子とみなし、粒子法による計算タイムステップが短い（～<1.e-4 s）ことから、熱電対の時定数とされている10 ms程度の時間平均をとって比較する。

4. 2 コード設計

4. 1 では、蒸発／凝縮、および化学反応の基本モデルについて述べたが、これらを粒子法のアルゴリズムに採り入れ安定に計算するためには今後多くの問題が生じる可能性がある。

蒸発／凝縮モデルを粒子法に採り入れることについては、これまでの経験から可能であると思われるが、そこでも急激な蒸発現象に対してはタイムステップが小さくなりすぎる等の問題とともに、粒子の発生方法に関する工夫が必要であった。

化学反応は、さらに現象を厳しくするため、計算時間の制約が大きな問題となるであろう。

ここでは、これまで述べた、蒸発／凝縮モデル、および化学反応モデルを取り入れた粒子法の計算アルゴリズムの概念をFig. 4.2-1に示しておくが、開発の過程で変更する可能性もある。

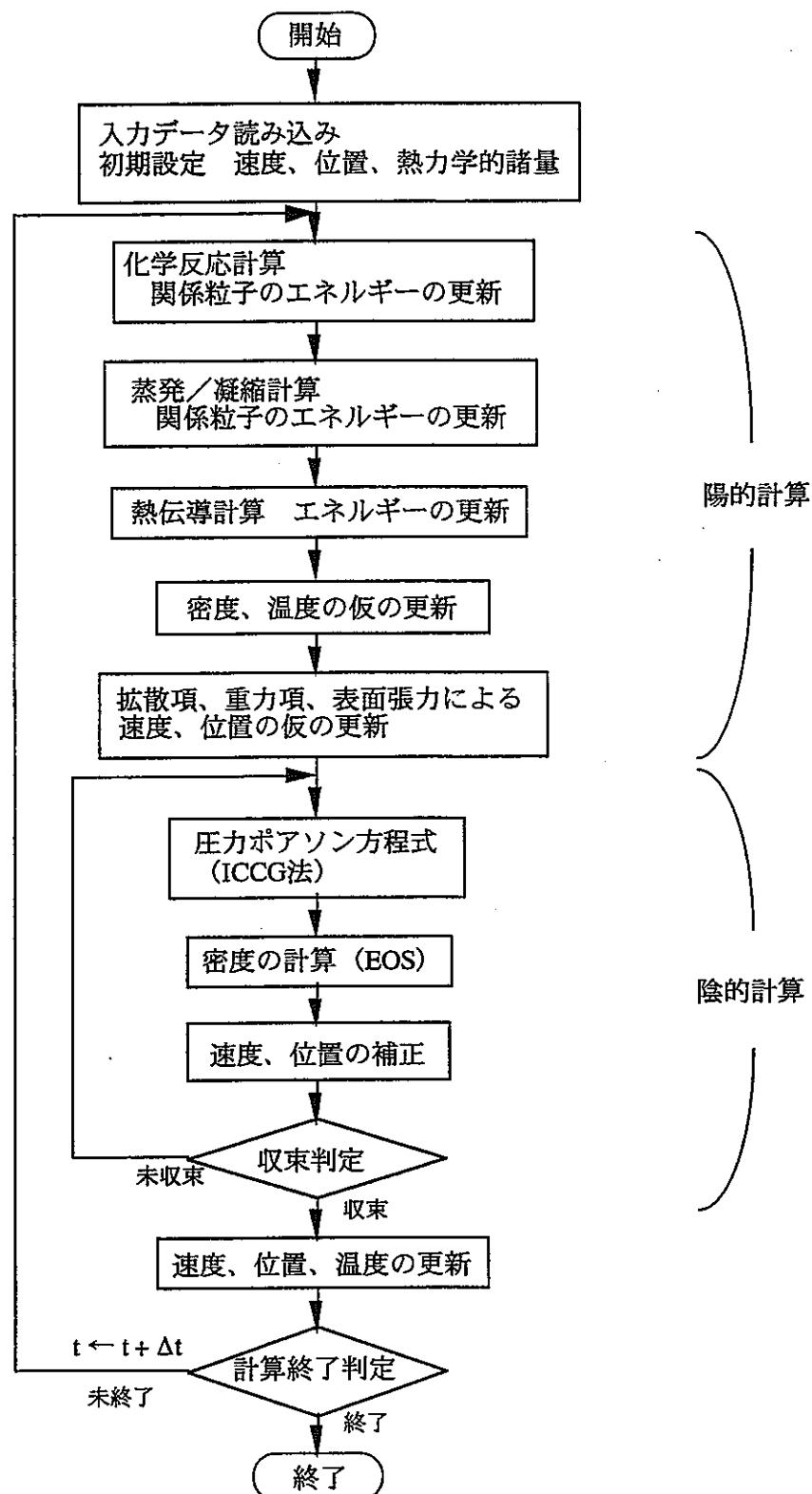


Fig. 4.2-1 Flow chart of the code with phase change and chemical reaction models.

5. まとめと開発スケジュール案

本件では、粒子法を用いて水・ナトリウム反応を扱うための第一段階として、液体ジェットが他の液体プールに噴出する際の流体力学的挙動への粒子法の適用性を検討することを目的とした。

このため、文献調査によりジェット流動様式のメカニズムを検討するとともに、ここでの目的に合致する、「ガソリンプールに水を噴出させる実験」を選び、解析した。これにより、2流体粒子法に基づく本手法がジェット流動様式を適切に扱うことができることを確認した。

しかし、計算時間の制約等から、実現象で想定される小さい粒子径を用いることが困難であるため、2つの液体の界面で生じる微粒化については、実験相関式と組み合わせた手法が必要であろうということも指摘した。

本件の最終目標である蒸気発生器内部の伝熱管水リーク事故では管群内のジェット流を解析することになるため、このような複雑体系への本手法の適用性を検討するため、SWAT3/Run19試験を例として化学反応を含まない流体力学のみの予備解析を実施した。その結果、管群内における水の分布の時間変化は、計測された熱電対の応答から推定できる水ジェットの拡がり状況をよく説明していることが確認できた。これにより、本実験のような伝熱管群を含む複雑体系においても、高速ジェット流とプール流体との相互作用を考慮した流動挙動への適用性が確認できた。

さらに、今後扱うべき現象のモデリングについて検討し、相変化と化学反応経路を選定し定式化を行った。水の相変化は伝熱律速モデルに基づき、化学反応は水・水素転換率をパラメタとした一括反応モデルに基づいている。また、コード構成についても概念設計を行った。

開発スケジュールは、扱う現象が非常に複雑な熱伝達、化学反応経路を含むこと、かつ厳しい熱力学的条件におかれることから、種々の困難が予想されること、また、計算時間についても現時点では見積もりが難しいこと、等の制約を考慮して、以下のように提案する。

開発スケジュール

- H 1 2 年度：実験式を適切に導入した境界面積評価手法に基づく3流体テストコード開発
 - ・3流体（ナトリウム（固体粒子を含む）、水、気体）モデルを開発する
 - ・H 1 1 年度検討に基づき、実験式を適切に導入した境界面積評価手法を開発する
 - ・H 1 1 年度検討に基づき、蒸発モデルを開発する
- H 1 3 年度：H 1 2 年度検討に基づき、化学反応モデルを含む統合テストコード開発
 - ・化学反応モデルを開発する
 - ・境界面積評価手法、3流体モデル、蒸発モデル、および化学反応モデルの統合テストコード開発
 - ・伝熱管を含まない体系における統合テストコードの機能検証
 - ・境界面積を他コードに合理的に渡すための検討（他コードの仕様が存在していることが前提）
- H 1 4 年度：H 1 3 年度検討に基づき、伝熱管モデルを含む統合テストコード開発
 - ・伝熱管モデルの開発
 - ・境界面積評価手法、3流体モデル、蒸発モデル、化学反応モデル、および伝熱管モデルの統合テストコード開発
 - ・統合テストコードによるSWAT3/Run19試験の解析（試験体系の部分領域を解析する）
- H 1 5 年度：実機解析評価（SGの部分領域を解析する）

謝辞

本業務を遂行するにあたり、サイクル機構大洗工学センターシステム技術開発部 山口 彰殿、岡野 靖殿、および飯田将雄殿には研究の進め方、現象の解釈等にわたりコメントを頂きました。
また、ナトリウム・安全工学試験部 浜田広次殿にはSWAT3/Run19試験のデータを提示頂きました。
ここに深く感謝致します。

参考文献

- [1-1] Koshizuka, S., Tamako, H., and Oka, Y., "A Particle Method for Incompressible Viscous Flow with Fluid Fragmentation," *Comput. Fluid Dynamics J.*, VOL.4, 29, (1995).
- [1-2] Koshizuka, S., and Oka, Y., "Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid," *Nucl. Sci. and Eng.*, VOL.123, July (1996).
- [1-3] 白川,堀江,山本,"粒子法による気液2相流動様式の研究," 粒子法研究会(弥生研究会),1999年3月
- [1-4] 白川,堀江,山本,"粒子法による流動様式評価手法の研究," 日本原子力学会,春の年会,1999年3月
- [1-5] Shirakawa, N., Horie, H., and Yamamoto, Y., "A Study on the Evaluation Method of Flow Regimes with the Particle Interaction Method," ICONE-7278, 7th Int. Conf. on Nucl. Eng., Tokyo, Japan, April 19-23, (1999),
- [1-6] 白川,堀江,山本,"気液2流体粒子法による流動様式実験解析," 日本原子力学会,秋の大会,1999年9月
- [1-7] 白川,堀江,山本,"気液2流体粒子法による流動様式実験解析2," 日本原子力学会,春の年会,2000年4月
- [1-8] 田辺,渡辺,"蒸気発生器安全性総合試験装置(SWAT-3)による破損伝播試験(V)," PNC TN9410 86-104, 1986年9月
- [1-9] 浜田広次,"蒸気発生器伝熱管の高温ラプチャ型破損評価手法の整備と適用," PNC TN9410 98-029, 1998年6月
- [2-4] Burger, M., Cho, S. H., Berg, E. v. and Schatz, A., "Breakup of Melt Jets as Pre-condition for Premixing: Modeling and Experimental Verification," *Nuclear Engineering and Design*, 155, 215, (1995).
- [2-3] Faeth, G. M., Hsiang, L. P. and Wu, P. K., "Structure and Breakup Properties of Sprays," *Int. J. Multiphase Flow*, vol.21, 99 (1995).
- [2-1] McCarthy, M. J. and Molloy, N. A., "Review of Stability of liquid jets and the Influence of Nozzle Design," *The Chemical Engineering Journal*, 7, 1-20, (1974).
- [2-2] Tanasawa, Y. and Toyoda, S., "On the Atomization of Liquid jet Issuing from a Cylindrical Nozzle," *The Technology report of Tohoku University*, vol.19, 135 (1955).
- [3-1] 白川,堀江,松宮,井上,"ナトリウム・水反応拳動解析コードSIMMER-SWの整備(2)," JNC TJ9440 99-009,1999年3月
- [3-2] 白川,"粒子法による気液2相流動様式の研究," 弥生研究会「粒子法研究会(第3回)」,1999年3月
- [3-3] Kocamustafaogullari, G., Chen, I.Y. and Ishii, M., "Unified Theory for Predicting Maximum Fluid Particle Size for Drops and Bubbles," *NUREG/CR-4028*, 1984.