JNC TY9400 2000-013

多成分多相流の熱流動現象の数値シミュレーションに関する研究

― 相変化を伴う多成分多相流のモデル化手法の開発 ―

（先行基礎工学研究に関する平成11年度共同研究報告書）

２０００年４月

技術情報室
No.
2000. 8. 18

核燃料サイクル開発機構
九州大学大学院工学研究院

本資料は、先行基礎工学分野に関する研究として、九州大学と核燃料サイクル開発機構との共同研究の成果として作成されたものです。
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,
Technology 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），
九州大学（Kyushu University）
2000

Ⓢ

JNC TY9400 2000-013
2000年4月

多成分多相流の熱流動現象の数値シミュレーションに関する研究
－相変化を伴う多成分多相流のモデル化手法の開発－
(先行基礎工学研究に関する平成11年度共同研究報告書)

守田 幸路*, 藤本 登*, 福田 研二*
飛田 吉春**, 山野 秀将***, 鈴木 徹***, 近藤 悟***

要 旨

炉心損傷事故の安全解析コードにおける多成分多相流の熱流動現象の数値シミュレーション技術の高度化を図ることは、安全評価の信頼度を向上する上で重要な課題の一つである。核燃料サイクル機構と九州大学によって実施される共同研究では、損傷炉心における熱流動現象を解析・評価する上で重要な界面挙動である多成分蒸気の蒸発／凝縮および相間の界面積変化に着目し、これらのミクロな挙動を記述するための機構論的モデルの提案・開発を行う。本年度は、非凝縮性ガスの蒸発／凝縮挙動に及ぼす影響を扱うための拡散律速モデルの開発を進め、2成分系での基本的な妥当性を検証した。さらに、流動変化に伴う気泡や液滴の界面積変化の挙動に関するソース項モデルについて検討し、安全解析コードのモデル化手法について改良の指針を得た。

本研究は、先行基礎工学分野に関する研究協力として、九州大学と核燃料サイクル開発機構との共同研究として実施したものである。

* 九州大学大学院工学研究院 附属環境システム科学研究センター.
** 大洗工学センター，システム技術開発部，リスク評価技術開発グループ
*** 大洗工学センター，要素技術開発部，高速炉安全工学グループ

JNC TY9400 2000-013
April, 2000

A study on a numerical simulation for thermal-hydraulic phenomena of multi-phase, multi-component flows

—Modeling for multi-phase, multi-component flows with phase change—

Koji MORITA*, Noboru FUJIMOTO*, Kenji FUKUDA*

Yoshiharu TOBITA**, Hidemasa YAMANO***, Tohru SUZUKI***, Satoru KONDO***

Abstract

It is one of important problems for more reliable safety evaluation to improve numerical simulation techniques for thermal-hydraulic phenomena of multi-phase, multi-component flows in a safety analysis code of core disruptive accidents. In collaboration with Japan Nuclear Cycle Development Institute and Kyushu University, mechanistic models are proposed and developed for vaporization/condensation processes of multi-component vapor and interface-area change in evaluating thermal-hydraulic phenomena in disrupted core. In this fiscal year, a diffusion-limited model was developed and validated for basic binary-component problem in order to examine effects of no-condensable gas on vaporization/condensation behavior. Source term models describing interface area behaviors of bubbles and droplets were also investigated.

Work performed under contracts between Japan Nuclear Cycle Development Institute and Kyushu University.

* Institute of Environmental Systems, Kyushu University

** Nuclear System Safety Research Group, System Engineering Technology Division, O-arai Engineering Center, JNC

*** Fast Reactor Safety Engineering Group, Advanced Technology Division, O-arai, JNC

目　次

要旨 i
Abstract ii
目次 iii
表目次 v
図目次 v

1．緒言 1
1．1　研究の目的と概要 1
1．2　研究の内容 1

2．拡散律速型相変化モデルに関する検討 3
2．1　伝熱律速型相変化モデルの基礎式 4
2．2　拡散律速型相変化モデル 6
2．2．1　基礎方程式 6
2．2．2　物質伝達係数 7
2．2．3　構成方程式 10
2．3　単成分蒸発／凝縮への適用 12
2．3．1　構成方程式 12
2．3．2　基本解法 14
2．3．3　SIMMER-III コードへの導入 16
2．4　基本モデルの検証 17

3．境界面積対流モデルに関する検討 25
3．1　概要 25
3．2　境界面積対流モデルの基礎式 26
3．2．1　境界面積の対流式 26
3．2．2　ソース／シンク項の定式化 26
3．3　境界面積対流式のソース項 29
3．3．1　既存モデルの概要 29
3．3．2　ソース項の分類 30
3．4　ソース／シンク項のモデル化手法のレビュー 33
3．4．1　乱流による合体モデル 33
3．4．2　乱流による分裂モデル 37
3．4．3　加速による気泡分裂モデル 41
3．5　まとめ 44

4．結言 45
記号表.....46
参考文献.....49
Appendix　Historian Correction sets 52

表 目 次

表 4-1　ソース項に関する既存モデル 32

図 目 次

図 2-1　伝熱律速型相変化モデルの概念図 20
図 2-2　金属球の温度上昇の時間変化 21
図 2-3　蒸気／液膜界面温度の時間変化 21
図 2-4　凝縮面積に対する修正係数の時間変化 22
図 2-5　液膜側熱流束の時間変化 22
図 2-6　凝縮による質量移行率の時間変化 23
図 2-7　金属球表面上での空気の質量分率の時間変化 23
図 2-8　金属球の温度上昇への Sherwood 数の影響 24
図 2-9　蒸気側の熱伝達係数に対する補正係数の時間変化 24

1.　緒言

本報告書は、平成11年度より三カ年計画で実施する先行基礎工学研究「多成分多相流の熱流動現象の数値シミュレーションに関する研究　ー相変化を伴う多成分多相流のモデル化手法の開発ー」のうち、平成11年度にサイクル機構と九州大学で実施した成果の一部をまとめたものである。

1．1 研究の目的と概要

原子炉の炉心崩壊事故時に炉心内で生ずる多相・多成分の流動・伝熱・相変化の複合現象に対する数値計算手法の高度化を図ることは、原子炉の安全評価の信頼度を向上する上で重要な課題の一つである。本研究では、炉心崩壊事故時の損傷炉心における熱流動現象を解析・評価する上で重要な界面挙動である多成分蒸気の蒸発／凝縮および相間の界面積変化に着目し、これらのミクロな挙動を記述するための機構論的モデルの提案・開発を行う。これにより、炉心損傷事故の安全解析コードにおける多成分多相流の熱流動現象の数値シミュレーション技術の高度化を図り、安全評価の信頼度向上に資する。

本研究では、相変化を伴う多成分多相流における相間および物質間の界面挙動を記述する要素物理モデルの高度化を図ることで、多相・多成分の流動・伝熱・相変化の複合現象を精度良く模擬できる数値計算手法を構築する。このため損傷炉心の熱流動現象を解析・評価する上で重要な界面挙動である

1）拡散律速挙動を伴う多成分蒸気の蒸発／凝縮

2）相変化／流動変化に伴う相間の界面積変化

に着目し、これらのミクロな挙動を記述するための機構論的モデルの提案・開発を行う。また、高度化されたモデルを複合現象の解析に適用することで、その妥当性を検証するとともに、安全評価における改善効果を評価する。

本年度は、3カ年の共同研究の初年度として高度化すべき支配的機構の摘出を行うとともに、上記の界面現象のうち、1）については2成分系でのモデル化と素現象の検証解析、2）については界面積変化を記述する各種相間式の評価と高度化のためのモデル構築に着手する。

1．2 研究の内容

本研究では、以下の項目について実施する。

1）高度化すべき支配的機構の抽出

高速炉の炉心損傷事故評価の観点から、損傷炉心の熱流動現象の支配的な挙動に着

目して、数値シミュレーションのための物理モデルの高度化が必要かつ有効なメカニズムを抽出・整理する。

2）多成分蒸気の拡散挙動を考慮した多成分蒸発／凝縮モデルの開発

多成分蒸気に含まれる非凝縮性ガスの蒸発／凝縮に及ぼす影響をモデル化するため、気体分子の拡散挙動を考慮した熱および質量移行モデルの一般化モデルを作成する。本年度は2成分系（凝縮性蒸気および非凝縮性ガス）を対象とした物理モデルの開発および実験解析等を通じた検証を実施するとともに、多成分系へのモデル拡張を図る。

3）相変化／流動変化に伴う相間の界面積変化の解析モデルの開発

相変化や流動変化に伴う気泡や液滴の界面積変化は、相間の界面積濃度の対流方程式におけるソース項によってモデル化される。ここでは、過去の実験データ、各種相関式等を広くサーベイすることにより、流動変化／相変化に伴う気泡や液滴の界面積変化の挙動を現象に応じて適切に記述できるようソース項の体系的モデル化を図る。本年度は特に流動変化に伴うソース項に着目してモデル改良に着手する。

4）複合現象解析による総合検証および安全解析コードへの反映

2）および3）で高度化された物理モデルを複合現象の解析に適用し、総合的なモデル検証よって安全評価における改善効果を評価するともに、その成果を高速炉の安全解析コードSIMMER-IIIへ反映する。これについては、平成12年度より着手する。

本研究の成果は、原子炉の安全評価の信頼度向上に直接的に寄与するばかりでなく、多くの複雑な多成分多相流現象が現れる機器の設計・開発や自然・工学現象の理解等に大きく寄与することが期待され、学術的にも意義の高い研究である。しかしながら、本研究では、損傷炉心の多相熱流動に係わる支配的現象を記述する要素物理モデルを新しい技術を用いて高度化していることから、その基本的な妥当性を確認するため既存の検証データベースが不十分である。さらに、高度化されたモデルを多相・多成分の流動・伝熱・相変化の複合現象の解析に適用し、原子炉の安全評価における改善効果を評価するためには、その汎用性と一般性を検証するための新たな基礎的な実験データの取得が必要不可欠である。従って、ここでは、本研究で提案・開発される要素物理モデルの妥当性を確認するための新たな検証実験も合わせて実施する予定である。

2. 拡散律速型相変化モデルに関する検討

蒸発／凝縮挙動は、相変化を生ずる界面での温度勾配に依存した熱収支に支配されるが、非凝縮性ガスを含む多成分系では蒸気成分の拡散挙動が重要となる。炉心物質（燃料、スティール、ナトリウム、FP ガス）の蒸発／凝縮挙動は、それぞれが異なる物性値（例えば、前者３つの沸点は、それぞれ約 3800K, 3100K, 1150K）を有している。従って、固相／気相／液相間の各接触界面では、各成分の熱力学的状態に応じて複数の相変化が同時に生じうる。接触境界面での熱収支を基本とする伝熱律速型のモデルは、気液二相流を対象とした二流体モデル等にも用いられている。しかしながら、多成分多相流に対する評価手法の高度化を図る上では、多成分相変化を扱う多流体モデルに適用可能な評価手法を確立することが重要である。

伝熱律速型の概念に基づいて定式化されている SIMMER-III の蒸発／凝縮モデルの妥当性については、これまで、いくつかの検証解析によって確認されているが、一方で、蒸気に非凝縮性ガスが混在する場合の凝縮過程が適切に模擬できないことも指摘されている[1]。これは、非凝縮性ガスが混在する場合の熱伝達が、蒸気側の拡散抵抗の存在によって純蒸気の場合に比較して著しく低下する現象が適切にモデル化されていないことに起因する。この基本現象は、高速炉の事故解析では、特に、炉心膨張過程における機械的エネルギーの緩和メカニズムである CDA 蒸気泡の凝縮効果を適切に評価する上で重要な現象であることから、SIMMER-III コードにおいても、そのモデル化を実現することが開発課題の一つであった。

本検討では、原子炉の安全解析で扱う多成分系での蒸発／凝縮現象を適切に記述するため、SIMMER-III コードに拡散律速型の相変化モデルを導入することを目的とし、必要な物理モデル開発と検証研究を実施する。

２．１ 伝熱律速型相変化モデルの基礎式

SIMMER-III コードでは、流体成分間および流体ー構造材間の接触境界面で生じる相変化過程は、物質内部の熱的状態が、一般には、相変化条件に達していないことから「非平衡過程」と呼ばれ、エネルギー成分間の接触境界におけるエネルギー収支に基づく伝熱律速の相変化過程としてモデル化される。図2-1に伝熱律速型相変化モデルの概念を示した。境界面での単位体積当たりのエネルギー移行率を

$$q_{A,B} = a_{A,B} h_{A,B} (T^I_{A,B} - T_A) \qquad \text{成分 A 側} \tag{2-1}$$

$$q_{B,A} = a_{A,B} h_{B,A} (T^I_{A,B} - T_B) \qquad \text{成分 B 側} \tag{2-2}$$

で定義すると、境界面での正味のエネルギー移行率は次式で表される。

$$q^I_{A,B} = q_{A,B} + q_{B,A} \tag{2-3}$$

ここで、$q^I_{A,B} = 0$であれば、成分 A、B 間では相変化が生じず、顕熱が交換されることになる。$q^I_{A,B} > 0$、すなわち、境界面でエネルギー損失がある場合、液体の固化あるいは蒸気の凝縮が生ずる。この場合、単位体積当たりの質量移行率は、次式から決定される。

$$\Gamma^I_{A,B} = \frac{q^I_{A,B}}{i_A - i^I_B} \qquad \text{相変化によって成分 B が生ずる場合} \tag{2-4}$$

$$\Gamma^I_{A,C} = \frac{q^I_{A,B}}{i_A - i^I_C} \qquad \text{相変化によって成分 C が生ずる場合} \tag{2-5}$$

一方で、$q^I_{A,B} < 0$、すなわち、境界面でエネルギー増加がある場合、固体の溶融あるいは液体の蒸発が生ずる。この場合、単位体積当たりの質量移行率は、次式から決定される。

$$\Gamma^I_{B,A} = -\frac{q^I_{A,B}}{i^I_A - i_B} \qquad \text{相変化によって成分 A が生ずる場合} \tag{2-6}$$

$$\Gamma^I_{B,D} = -\frac{q^I_{A,B}}{i^I_D - i_B} \qquad \text{相変化によって成分 D が生ずる場合} \tag{2-7}$$

上記の４つの式では、境界面のエンタルピーとバルクのエンタルピーの差を実効的な潜熱として定義している。相変化が生ずる場合、境界面温度は、融点や飽和温度等の相変化温度として定義される。質量移行が生じない場合、境界面でのエネルギー移行はゼロとなり、従って、境界面温度は

$$T^I_{A,B} = \frac{h_{A,B} T_A + h_{B,A} T_B}{h_{A,B} + h_{B,A}} \tag{2-8}$$

とならなければならない。

以上の伝熱律速型相変化の概念を単成分の気液2相系での相変化を例にして、エネルギー保存の観点から考えてみる。まず、相変化が生じている成分からはそのバルクのエンタルピーが移行し、一方、境界面のエンタルピーが、相変化先の相に移行すると仮定する。この場合、相変化に伴う蒸気および液体の質量およびエネルギー保存式は、以下のように表される。

$$\frac{\partial \bar{\rho}_g}{\partial t} = \Gamma_{l,g} - \Gamma_{g,l} \tag{2-9}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t} = \Gamma_{g,l} - \Gamma_{l,g} \tag{2-10}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_g i_g}{\partial t} = \Gamma_{l,g} i_{Vap} - \Gamma_{g,l} i_g + a h_{g,l}(T_i - T_g) + \alpha_g \frac{\partial p}{\partial t} \tag{2-11}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_l i_l}{\partial t} = \Gamma_{g,l} i_{Con} - \Gamma_{l,g} i_l + a h_{l,g}(T_i - T_l) + \alpha_l \frac{\partial p}{\partial t} \tag{2-12}$$

エンタルピーの定義 $i = e + pv$ を用いると、(2-11)、(2-12)式から内部エネルギーの保存式を得る。

$$\frac{\partial \bar{\rho}_g e_g}{\partial t} = \Gamma_{g,l} i_{Vap} - \Gamma_{l,g} i_g + a h_{g,l}(T_i - T_g) - p \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} \tag{2-13}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_l e_l}{\partial t} = \Gamma_{l,g} i_{Con} - \Gamma_{l,g} i_l + a h_{l,g}(T_i - T_l) + p \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} \tag{2-14}$$

系全体でのエネルギー保存を満足するためには、(2-13)、(2-14)式の右辺の和はゼロでなければならない。従って、質量移行率は、次式で定義されることになる。

$$\Gamma_{g,l} = \frac{q_{gl}}{i_g - i_{Con}} \qquad q_{gl} > 0 \tag{2-15}$$

$$\Gamma_{l,g} = -\frac{q_{gl}}{i_{Vap} - i_l} \qquad q_{gl} < 0 \tag{2-16}$$

ここで、境界面でのエネルギー移行率 q_{gl} は次式で定義される。

$$q_{gl} = a[h_{g,l}(T_i - T_g) + h_{l,g}(T_i - T_l)] \tag{2-17}$$

(2-15)、(2-16)式は、それぞれ凝縮、蒸発による質量移行率を定義し、それらの分母は、凝縮、蒸発に対する実効的な潜熱を表している。

2．2 拡散律速型相変化モデル

2．2．1 基礎方程式

ここでは、SIMMER-II コード用に検討された拡散律速型相変化モデル[2]をもとに、多成分系での拡散律速型相変化を記述するための基礎方程式について検討する。

N 個の多成分蒸気における成分 k の一次元拡散方程式は、拡散方向を y とすると、フィックの拡散法則により

$$n_k = -\rho_g D_{kg} \frac{d\omega_k}{dy} + \omega_k \sum_{j=1}^{N} n_j \tag{2-18}$$

で表される[3]。ここで、n_k：成分 k の y 方向の質量流束（$= \rho_k v_k$）、ρ_g：混合ガス密度（$= \sum_{j=1}^{N} \rho_j$）、D_{kg}：混合ガス内を拡散する成分 k の拡散係数、ω_k：成分 k の質量分率（$= \rho_k / \rho_g$）、v_k：成分 k の y 方向の移動速度　である。また、質量平均速度

$$v = \frac{\sum_{j=1}^{N} \rho_j v_j}{\sum_{j=1}^{N} \rho_j} \tag{2-19}$$

を用いると

$$\rho_g v = \sum_{j=1}^{N} n_j \tag{2-20}$$

の関係がある。(2-18)式を相変化の生ずる相 A, B の接触界面 $y = i$ に適用すると、成分 k の界面における質量流束は

$$n_k = -\rho_g D_{kg} \left. \frac{d\omega_k}{dy} \right|_{y=i} + \omega_{k,i} \sum_{j=1}^{N} n_j \tag{2-21}$$

で与えられる。また、成分 k の単位体積当たりの蒸発／凝縮率Γ_kは、蒸発$\Gamma_k < 0$ を、凝縮$\Gamma_k > 0$ とすると

$$\Gamma_k = -a_i n_k = a_i \rho_g D_{kg} \left. \frac{d\omega_k}{dy} \right|_{y=i} + \omega_{k,i} \sum_{j=1}^{N} \Gamma_j \tag{2-22}$$

と表される。ここで、a_i：単位体積当たりの接触界面積　である。

一方、単位体積当たりの面積 a を通過する熱伝導、拡散、対流に伴う全エネルギー移行率 q は

$$q = a\left[-\kappa\frac{dT}{dy} - \sum_{j=1}^{N}\rho_g D_{jg}\frac{d\omega_j}{dy}i_j + \rho_g v i\right] \tag{2-23}$$

で表される。ここで、i_j：成分jの比エンタルピー、κ：熱伝達係数

$$\rho_g v i = \rho_g v\sum_{j=1}^{N}\omega_j i_j \tag{2-24}$$

である。(2-18)、(2-23)および(2-24)式から、境界面でのエネルギー移行率は

$$q_i = a_i\left[-\kappa\left.\frac{dT}{dy}\right|_{y=i} + \sum_{j=1}^{N}n_j i_j\right] \tag{2-25}$$

で表される。さて、界面でのエネルギー収支はゼロとなることから

$$-\kappa_g\left.\frac{dT_g}{dy}\right|_{y=i} + \sum_{\lambda=1}^{N}n_j i_{j,g} = -\kappa_o\left.\frac{dT_o}{dy}\right|_{y=i} + \sum_{j=1}^{N}n_j i_{j,o} \tag{2-26}$$

が成立する。ここで添字g, oはそれぞれ蒸気、凝縮側を表す。熱伝達項は、蒸気、凝縮側の熱伝達係数をそれぞれh_g、h_oとすると

$$\kappa_g\left.\frac{dT_g}{dy}\right|_{y=i} = -h_g(T_i - T_g) \tag{2-27}$$

$$\kappa_o\left.\frac{dT_o}{dy}\right|_{y=i} = h_o(T_i - T_o) \tag{2-28}$$

で与えられるから、結局、界面でのエネルギー式は

$$\sum_{j=1}^{N}\Gamma_j i_{lg,j} = -\sum_{j=1}^{N}a_i n_j i_{lg,j} = a_i\left[h_g(T_i - T_g) + h_o(T_i - T_o)\right] \tag{2-29}$$

となる。ここで、$i_{lg,j}$：成分jの蒸発潜熱（$= i_{j,g} - i_{j,o}$）　である。

2．2．2　物質伝達係数

熱伝達の場合の熱伝達係数の定義式(2-27)と同様にして、界面と流体の間で物質伝達がある場合には、物質伝達係数kは次式によって定義される。

$$\rho_g D_{kg}\left.\frac{d\omega_k}{dy}\right|_{y=i} = -k_k(\omega_{k,i} - \omega_{k,\infty}) \tag{2-30}$$

ここで、添字∞はバルクでの値を表す。流れの場が物質伝達の影響を受けないような、すなわち界面における物質伝達量が小さい場合

$$\mathrm{Pr}\left(\equiv\frac{\nu}{\alpha}\right)=\mathrm{Sc}\left(\equiv\frac{\nu}{D}\right) \tag{2-31}$$

すなわち

$$\mathrm{Le}\left(\equiv\frac{\mathrm{Sc}}{\mathrm{Pr}}\right)=\frac{\alpha}{D}=1 \tag{2-32}$$

が成立し、濃度分布と温度分布が一致する、いわゆる熱伝達と物質伝達のアナロジーが成立する。この場合、熱伝達と物質伝達に対して同一の無次元整理式を用いることにより、強制対流に対して

$$\mathrm{Nu}\equiv\frac{h\ell}{\kappa}=f(\mathrm{Re},\mathrm{Pr}) \tag{2-33}$$

$$\mathrm{Sh}\equiv\frac{k\ell}{\rho D}=f(\mathrm{Re},\mathrm{Sc}) \tag{2-34}$$

が得られる。ここで$\mathrm{Re}=\rho V\ell/\mu$である。自然対流物質伝達の場合にも熱伝達とのアナロジーが成立すると仮定する。自然対流熱伝達の無次元整理式は、一般に

$$\mathrm{Nu}=f(\mathrm{Gr},\mathrm{Pr}) \tag{2-35}$$

$$\mathrm{Gr}=\frac{g\rho^2\beta\Delta T\ell^3}{\mu^2} \tag{2-36}$$

によって表される。ここで、熱伝達に対する膨張係数は$\beta=-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)_{p,x_k}$で定義される（理想気体の場合、$T^{-1}$）。この場合の対流駆動力は、温度差に基づく密度差によって生じる浮力であるが、物質伝達の場合には、濃度差に基づく密度差によって生じる浮力によって対流が起こる。従って、Gr の$\beta\Delta T$の項を$\varsigma\Delta x_k$に置き換えることにより、物質伝達に対する Grashof 数を

$$\mathrm{Gr}_D=\frac{g\rho^2\varsigma\Delta x_k\ell^3}{\mu^2} \tag{2-37}$$

で定義すれば、物質伝達は(2-35)式を用いて次のように表される。

$$\mathrm{Sh}=f(\mathrm{Gr}_D,\mathrm{Sc}) \tag{2-38}$$

ここで、物質伝達に対する膨張係数は、$\varsigma=-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial x_k}\right)_{p,T}$で定義される（理想気体の場合、$-1$）。しかしながら、物質伝達量が大きいと界面において界面に垂直な方向の速度成分vが存在するために、流れの場は物質伝達の影響を受けることになる。この場

合、界面における質量流束は(2-22)式で与えられ、対流速度 v による物質輸送が無視できない場合の物質伝達係数 k^*を新たに

$$n_k = k_k^*(\omega_{k,i} - \omega_{k,\infty}) \tag{2-39}$$

で定義する。同様に、界面におけるエネルギー移行率は(2-25)式で与えられ、熱伝達係数についても h^*を

$$q_i = a_i h^*(T_i - T_\infty) \tag{2-40}$$

で定義する。この時、物質伝達係数および熱伝達係数に対する補正係数を

$$\theta_{mk} = \frac{k_k^*}{k_k} = \frac{\phi_{mk}}{R_{mk}} \tag{2-41}$$

$$\theta_h = \frac{h^*}{h} = \frac{\phi_h}{R_h} \tag{2-42}$$

で表すと、

$$\theta = \frac{\phi}{\exp(\phi) - 1} = \frac{\ln(R+1)}{R} \tag{2-43}$$

の関係がある[3]。ここで

$$\phi_{mk} = \frac{\sum_{j=1}^{N} n_j}{k_k} \tag{2-44}$$

$$\phi_h = \frac{\sum_{j=1}^{N} n_j c_{p,j}}{h} \tag{2-45}$$

$$R_{mk} = \frac{\sum_{j=1}^{N} n_j}{k_k^*} = \frac{\omega_{k,i} - \omega_{k,\infty}}{\frac{n_k}{\sum_{j=1}^{N} n_j} - \omega_{k,i}} \tag{2-46}$$

$$R_h = \frac{\sum_{j=1}^{N} n_j c_{p,j}}{k_k^*} = \frac{\sum_{j=1}^{N} n_j c_{p,j}(T_i - T_\infty)}{q} \tag{2-47}$$

である。

二成分系での拡散係数は、分子間ポテンシャルが Lennard-Jones 型で記述できると

仮定したChapman-Enskogの理論によって計算される[4]。この時、理想気体を仮定すると、低圧系での成分i、jの拡散係数D_{ij}は、次式の簡易式で表される。

$$D_{ij} = 2.66\times10^{-2}\frac{T_G^{3/2}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{W_{M(Gi)}}+\frac{1}{W_{M(Gj)}}\right)}}{(p_{Gi}+p_{Gj})\sigma_{ij}^{2}\Omega_D} \tag{2-48}$$

ここで、σ_{ij}：拡散に対するLennard-Jones衝突直径 [Å]、Ω_D：拡散に対する衝突積分　である。Ω_Dに対する経験式は蒸気温度の関数として表され、Neufeld et al. [5]によって次式が提案されている。

$$\Omega_D = [A(T^*)^{-B}] + C[\exp(-DT^*)] + E[\exp(-FT^*)] + G[\exp(-HT^*)] \tag{2-49}$$

ここで、$T^* = k_B T_G/\varepsilon_{ij}$、$A = 1.06036$、$B = 0.15610$、$C = 0.19300$、$D = 0.47635$、$E = 1.03587$、$F = 1{,}52996$、$G = 1.76474$、$H = 3.89411$である。$\varepsilon_{ij}$および$\sigma_{ij}$の値は、成分$i$、$j$のLennard-Jonesパラメータの平均値を用いることで経験的に次式で得られる。

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{M(Gi)} + \sigma_{M(Gj)}) \tag{2-50}$$

$$\varepsilon_{ij} = (\varepsilon_{M(Gi)}\varepsilon_{M(Gj)})^{1/2} \tag{2-51}$$

多成分蒸気系での拡散係数は、i成分気体が均一な混合系媒体中を拡散すると仮定して求めた次の実効拡散係数D_{im} [6]を簡単化のために用いる。

$$D_{im} = (1-x_i)\left(\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{x_j}{D_{ij}}\right)^{-1} \tag{2-52}$$

2．2．3　構成方程式

以上より、N成分系での拡散律速による蒸発／凝縮に伴う熱および質量移行を記述する構成方程式は

$$n_k = k_k^*(\omega_{k,i} - \omega_{k,\infty}) + \omega_{k,i}\sum_{j=1}^{N} n_j \tag{2-53}$$

$$\sum_{j=1}^{N} n_j i_{lg,j} = -\left[h_g^*(T_i - T_g) + h_o^*(T_i - T_o)\right] \tag{2-54}$$

あるいは、単位体積当たりの質量移行率Γ_k (= $-a_i n_k$)を用いると

$$\Gamma_k = -a_i k_k^*(\omega_{k,i} - \omega_{k,\infty}) + \omega_{k,i}\sum_{j=1}^{N}\Gamma_j \tag{2-55}$$

$$\sum_{j=1}^{N}\Gamma_j i_{g,j} = a_i\left[h_g^*(T_i - T_g) + h_o^*(T_i - T_o)\right] \tag{2-56}$$

で与えられる。ここで

$$k_k^* = \frac{\phi_{mk}}{\exp(\phi_{mk}) - 1} k_k \tag{2-57}$$

$$h^* = \frac{\phi_h}{\exp(\phi_h) - 1} h \tag{2-58}$$

$$\phi_{mk} = \frac{\sum_{j=1}^{N} n_j}{k_k} \tag{2-59}$$

$$\phi_h = \frac{\sum_{j=1}^{N} n_j c_{p,j}}{h} \tag{2-60}$$

である。また、熱伝達係数および物質伝達係数は

$$h = \frac{\kappa}{\ell}\mathrm{Nu} \tag{2-61}$$

$$k = \frac{\rho D}{\ell}\mathrm{Sh} \tag{2-62}$$

で与えられる。

2．3 単成分蒸発／凝縮への適用

2．3．1 構成方程式

N 個の多成分蒸気のうち、成分 k のみが相変化する場合、解くべき保存方程式は(2-53)、(2-54)式より

$$n_k = k_k^*(\omega_{k,i} - \omega_{k,\infty}) + \omega_{k,i} n_k \tag{2-63}$$

$$n_k = -\frac{h_g^*(T_i - T_g) + h_o^*(T_i - T_o)}{i_{lg,k}} \tag{2-64}$$

で表される。ここで

$$k_k^* = \frac{\phi_{mk}}{\exp(\phi_{mk}) - 1} k_k \tag{2-65}$$

$$h^* = \frac{\phi_h}{\exp(\phi_h) - 1} h \tag{2-66}$$

$$\phi_{mk} = \frac{n_k}{k_k} \tag{2-67}$$

$$\phi_h = \frac{n_k c_{p,k}}{h} \tag{2-68}$$

で与えられる。さらに、物質伝達係数を

$$k_k^* = \frac{\ln(R_{mk} + 1)}{R_{mk}} k_k \tag{2-69}$$

$$R_{mk} = \frac{\omega_{k,i} - \omega_{k,\infty}}{1 - \omega_{k,i}} \tag{2-70}$$

の関係を用いて表し、(2-69)式を(2-63)式に代入して整理すると

$$n_k = k_k \ln\left(\frac{1 - \omega_{k,\infty}}{1 - \omega_{k,i}}\right) = k_k \ln\left(\frac{\omega_{ng,\infty}}{\omega_{ng,i}}\right) \tag{2-71}$$

を得る。ここでω_{ng}は、相変化しない蒸気成分の全質量分率で

$$\omega_{ng} = 1 - \omega_k = \sum_{j=1}^{N-1} \omega_{ng,j} \tag{2-72}$$

である。(2-63)、(2-64)式は、それぞれ拡散律速、伝熱律速による成分 k の質量移行率を表し、これらを同時に満たすn_kが求める解である。

さて、(2-63)式左辺を拡散律速による物質移行率$n_{k,D}$、(2-64)式左辺を伝熱律速による物質移行率$n_{k,C}$とおくと、満たされるべき方程式は

$$f(T_i) = n_{k,C} - n_{k,D} = 0 \tag{2-73}$$

となる。ここで$\omega_{ng} = 0$の場合、$T_i = T_s$（成分kの分圧p_kに対応した飽和温度）とおける。上式を$T_i = T_s$で1次の項までテーラー展開すると

$$f(T_i) = f(T_i) + \left.\frac{df}{dT_i}\right|_{T_s}(T_i - T_s) \tag{2-74}$$

で表され、h^*およびi_{lg}がT_iによらず一定とすると

$$\frac{df}{dT_i} = -\frac{h_g^* + h_o^*}{i_{lg,k}} - \frac{dn_{k,D}}{dT_i} \tag{2-75}$$

で与えられる。$f(T_i) = 0$、$f(T_s) = n_{k,C}(T_s)$（すなわち、$n_{k,D}(T_s) = 0$）の条件を(2-73)式に代入し、T_iについて整理すると

$$T_i = \frac{\dfrac{1}{i_{lg,k}}(h_g^* T_\infty + h_o^* T_o) + \dfrac{1}{\phi}T_s}{\dfrac{1}{i_{lg,k}}(h_g^* + h_o^*) + \dfrac{1}{\phi}} \tag{2-76}$$

を得る。ここで

$$\frac{1}{\phi} = \left.\frac{dn_{k,D}}{dT_i}\right|_{T_s} \tag{2-77}$$

である。すなわち、(2-76)式は$\phi > 0$であればT_iがT_g、T_oおよびT_sの重み平均となることを示している。(2-76)式を(2-64)式に代入すると

$$n_k = -\left(1 + \phi\frac{h_g^* + h_o^*}{i_{lg,k}}\right)^{-1}\frac{\left[h_g^*(T_s - T_g) + h_o^*(T_s - T_o)\right]}{i_{lg,k}} \tag{2-78}$$

を得る。(2-78)式は、(2-64)式において$T_i = T_s$とし$\left(1 + \phi\dfrac{h_g^* + h_o^*}{i_{lg,k}}\right)^{-1}$を乗じたものに他ならない。一方、(2-76)式を(2-13)および(2-14)式に代入し、整理すると

$$\frac{\partial\bar{\rho}_g e_g}{\partial t} = \Gamma_{l,g} i_{Vap} - \Gamma_{g,l} i_g + Rah_{g,l}^*(T_s - T_g) + (1-R)ah_{g,l}^*\left(\frac{h_{g,l}^* T_g + h_{l,g}^* T_l}{h_{g,l}^* + h_{l,g}^*} - T_g\right) - p\frac{\partial\alpha_g}{\partial t} \tag{2-79}$$

$$\frac{\partial\bar{\rho}_l e_l}{\partial t} = \Gamma_{g,l} i_{Con} - \Gamma_{l,g} i_l + Rah_{l,g}^*(T_s - T_l) + (1-R)ah_{l,g}^*\left(\frac{h_{g,l}^* T_g + h_{l,g}^* T_l}{h_{g,l}^* + h_{l,g}^*} - T_l\right) - p\frac{\partial\alpha_l}{\partial t} \tag{2-80}$$

を得る。ここで質量移行率$\Gamma_{g,l}$、$\Gamma_{l,g}$は、それぞれ(2-15)、(2-16)式で与えられるが、境界面でのエネルギー移行率q_{gl}は、(2-17)式の代わりに次式で定義される。

$$q_{gl} = Ra[h^*_{g,l}(T_s - T_g) + h^*_{l,g}(T_s - T_l)] \tag{2-81}$$

ここで

$$R = \left(1 + \phi \frac{h^*_{g,l} + h^*_{l,g}}{i_{lg,k}}\right)^{-1} \tag{2-82}$$

である。従って、成分kの蒸発／凝縮における非凝縮性ガスの影響は、$T_i = T_s$とし計算される質量移行率に対して、境界面積に対する修正係数を乗ずることで取り扱えることになる。

2．3．2　基本解法

(2-73)式はT_iの非線形方程式であるため、これを満たすT_iを得るためには反復計算が必要となる。Newton-Raphson 法を用いると、一回の反復計算でのT_iの増分値をΔT_iとし、

$$\Delta T_i = -f^n(T_i)\left(\left.\frac{df}{dT_i}\right|^n\right)^{-1} \tag{2-83}$$

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \Delta T_i \tag{2-84}$$

$$f(T_i)^{n+1} = f(T_i^{n+1}) \tag{2-85}$$

$$\left.\frac{df}{dT_i}\right|^{n+1} = \left.\frac{df}{dT_i}\right|_{T_i^{n+1}} \tag{2-86}$$

の関係から、(2-83)　(2-86)式を$f(T_i)^{n+1} \cong 0$が満たされるまで反復計算することでT_iを得ることができる。ここで、上付き添字nは反復回数を表す。さらに、T_iの収束解を用いて

$$\phi = \frac{T_s - T_i}{\frac{1}{i_{lg,k}}\left[h^*_g(T_\infty - T_i) + h^*_o(T_o - T_i)\right]} \tag{2-87}$$

の関係から境界面積に対する修正係数(2-82)式を計算する。

(2-73)式においてh^*がT_iに依存するとすると、その微係数は

$$\frac{df}{dT_i} = \frac{dn_{k,C}}{dT_i} - \frac{dn_{k,D}}{dT_i} \tag{2-88}$$

ここで

$$\frac{dn_{k,C}}{dT_i} = -\frac{h_g^* + h_o^*}{i_{lg,k}} - \frac{T_i}{i_{lg,k}}\left(\frac{dh_g^*}{dT_i} + \frac{dh_o^*}{dT_i}\right) \tag{2-89}$$

$$\frac{dn_{k,D}}{dT_i} = -\frac{k_k}{\omega_{ng,i}}\frac{d\omega_{ng,i}}{dT_i} \tag{2-90}$$

で与えられる。(2-89)式における熱伝達係数の微係数は、(2-66)、(2-68)式の関係から

$$\frac{dh^*}{dT_i} = \frac{dh^*}{d\phi_h}\frac{d\phi_h}{dT_i} \tag{2-91}$$

$$\frac{dh^*}{d\phi_h} = \frac{[\exp(\phi_h)-1](1-\phi_h)-\phi_h}{[\exp(\phi_h)-1]^2}h \tag{2-92}$$

$$\frac{d\phi_h}{dT_i} = \frac{c_{p,k}}{h}\frac{dn_{k,D}}{dT_i} \tag{2-93}$$

で表される。一方、理想気体を仮定し、境界面が熱的平衡状態にあるとすると、境界面での非凝縮性ガスのモル分率 $x_{ng,i}$ は

$$x_{ng,i} = 1 - x_{k,i} = 1 - \frac{p_{s,k}(T_i)}{p_g} \tag{2-94}$$

とおける。ここで、$p_{s,k}(T_i)$：界面温度 T_i に対応した成分 k の飽和圧力、p_g：混合蒸気の全圧（$= p_k + \sum_{j=1}^{N-1} p_{ng,j}$）である。さらに、

$$\omega_{ng} = \frac{x_{ng}W_{ng}}{x_k W_k + x_{ng}W_{ng}} \tag{2-95}$$

の関係を用いると、(2-90)式における非凝縮性ガスの質量分率の微係数は、

$$\frac{d\omega_{ng,i}}{dT_i} = \frac{d\omega_{ng,i}}{dx_{ng,i}}\frac{dx_{ng,i}}{dT_i} \tag{2-96}$$

$$\frac{d\omega_{ng,i}}{dx_{ng,i}} = \frac{W_k W_{ng}}{(x_{k,i}W_k + x_{ng,i}W_{ng})^2} \tag{2-97}$$

$$\frac{dx_{ng,i}}{dT_i} = -\frac{1}{p_g}\left.\frac{dp_{s,k}}{dT}\right|_{T_i} \tag{2-98}$$

で与えられる。但し、(2-95)、(2-97)式において、相変化しない蒸気成分の分子量 W_{ng} は

$$W_{ng} = \frac{\sum_{j=1}^{N-1} p_{ng,j} W_{ng,j}}{\sum_{j=1}^{N-1} p_{ng,j}} \tag{2-99}$$

で与えられる。

2．3．3　SIMMER-III コードへの導入

上に述べた構成方程式ならびに数値解法について、SIMMER-III コード（ver. 2F）への導入を図った。Appendix に Historian Correction set を示す。これにより、SIMMER-III コードにおいても、任意の接触界面において N 個の多成分蒸気のうち成分 k のみが蒸発／凝縮する場合については、本モデルに基づく数値計算が可能となった。但し、(2-66)式による熱伝達係数の補正は考慮されていない。本モデルを有効にするには、以下のユーザー入力を用いる。

XCNTL/HMTOPT(1)（デフォルト値 0）

= 0：拡散律速型モデルを用いない（蒸発／凝縮は、伝熱律速型モデルによって計算される）。

= n (>0)：拡散律速型モデルを用いる。n は、境界面温度を求める際の最大反復回数である（推奨値 10）。

導入したモデルは、2 成分以上が同時に相変化する場合については適用範囲外となる。この場合、導入モデルでは、ある成分の相変化に対して他の成分は全て非凝縮性ガスとして扱われるため、個々の相変化成分に対する非凝縮性ガスの効果が過大評価されることになる。しかしながら、SIMMER-III コードが取り扱う多成分蒸発／凝縮現象では、多くの場合、主となる相変化成分に対して他の相変化成分の寄与は小さく、このモデルによる取扱いでも相変化しない成分の影響はある程度模擬できるものと思われる。このような問題を汎用的に取り扱うためのモデルは２．２節に示したとおりであるが、SIMMER-III コードへの組み込みについては、現状の蒸発／凝縮計算との整合のとれた数値解法を新たに開発する必要がある。

2．4 基本モデルの検証

2．3節で述べた基本モデルについては、SIMMER-II コード用に検討された拡散律速型相変化モデル[2]の検証実験[7]を解析することでその妥当性を確認する。この実験では、温度 408 K、圧力 1.1 bar の乾き蒸気中に、直径 2.5 cm、初期温度 303 K の銅製の金属球を置き、金属球表面上への蒸気の凝縮に伴う金属球温度の変化が計測された。実験パラメータは、蒸気中の空気の体積率であり、0 vol. % air, 1.8 vol. % air, 10 vol. % air の結果が示されている。金属球表面温度を T_w、金属球表面の液膜と蒸気の境界面温度を T_i とし、

1）バルク蒸気は一定状態を維持している。

2）金属球のバルク温度と表面温度の差は、無視できるほど小さい。

3）液膜内の温度分布は液膜の厚さ方向に線形とみなせる。

4）金属球の径に比べて、液膜の厚さは無視できるほど薄い。

を仮定すると、金属球の温度変化は、

$$\frac{\partial T_w}{\partial t} = \frac{h_{lg}}{mc_p} A_w (T_i - T_w) \tag{2-100}$$

で表される。ここで、A_w：金属球の表面積、m：金属球の質量、c_p：金属球の比熱　である。液膜側の熱伝達係数 h_{lg} は、球における膜状凝縮に関する理論式として次式で表される[8]。

$$\mathrm{Nu}_l = \frac{h_{lg} d}{\kappa_l} = 0.785 \left[\frac{g\rho_l(\rho_l - \rho_g) i_{lg}^* d^3}{\mu_l \kappa_l (T_i - T_w)} \right]^{-1/4} \tag{2-101}$$

ここで、i_{lg}^* は液膜内での対流による顕熱輸送の影響を考慮した潜熱であり

$$i_{lg}^* = i_{lg} + 0.68 c_{p,l}(T_i - T_w) \tag{2-102}$$

で与えられる。(2-101)式中の熱物性値は、$T_w + 0.3(T_i - T_w)$ で求めた。さらに、(2-76)式から T_i を得るには、蒸気側の熱伝達係数 h_{gl} が必要となるが、これには、球からの自然対流熱伝達に関する経験式[9]

$$\mathrm{Nu}_g = \frac{h_{lg} d}{\kappa_g} = 2 + 0.43(\mathrm{Gr}_g \mathrm{Pr}_g)^{1/4} \tag{2-103}$$

を用いた。ここで、

$$\mathrm{Gr}_g = \frac{g\rho_g^2 \beta (T_s - T_i) d^3}{\mu_g^2} \tag{2-104}$$

$$\mathrm{Pr}_g = \frac{\rho_g \kappa_g}{\mu_g} \tag{2-105}$$

である。(2-103)式中の熱物性値は、膜温度$0.5(T_g + T_i)$で求めた。蒸気の凝縮に関するSherwood 数は、２．２節で述べたように、物質伝達と熱伝達の間のアナロジーが成立すると仮定し、物質伝達と熱伝達に関して同一の関数型を用いることにより求める。

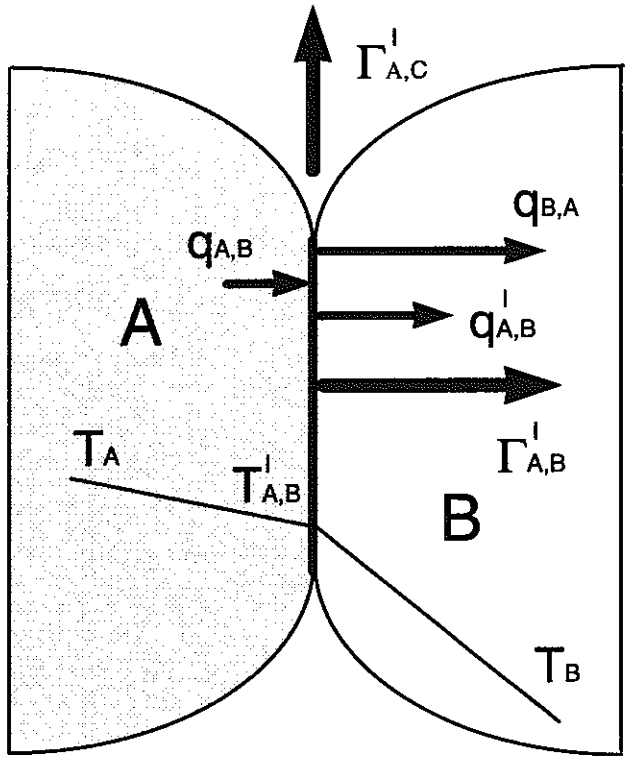
以上により、２．３節で述べた基本解法を用いて境界面温度T_iを求め、(2-100)式をexplicit に解くことにより、蒸気の凝縮に伴う金属球温度の上昇を計算した。図 2-2は、金属球の温度上昇の時間変化を実験と解析で比較したもので、蒸気中の空気の体積割合（0 vol. % air, 1.8 vol. % air, 10 vol. % air）をパラメータとしている。ここでは、0 vol. % air の解析では、1 ppm vol. % air として拡散律速モデルを用いて計算した。10 vol. % air のケースでは、金属球の温度上昇が過大評価されるものの、何れのケースにおいてもモデルの予測値と実験の一致は比較的良く、非凝縮性ガスが混在する場合の凝縮過程への影響がうまく模擬されている。

図 2-3 に(2-76)式で計算される蒸気／液膜界面温度の時間変化、図 2-4 に(2-82)式で計算される凝縮面積に対する修正係数の時間変化、図 2-5 に液膜側の熱流束の時間変化、図 2-6 に凝縮による質量移行率の時間へ変化を示す。これらの図から、凝縮過程における不凝縮性ガスの存在が、その混合割合に比してかなり大きく影響することが確認できる。このことは、図 2-7 に示した金属球表面上の空気の質量分率の時間変化からも分かる。凝縮開始直後は、金属球と蒸気との大きな温度差のため急激な凝縮が生じ、結果として、金属球表面上の空気の割合は、蒸気中のそれに比べて非常に大きくなっている。また、温度差の緩和とともに凝縮速度が遅くなり、金属球表面上の空気の割合は蒸気中のそれに近づいて行く。

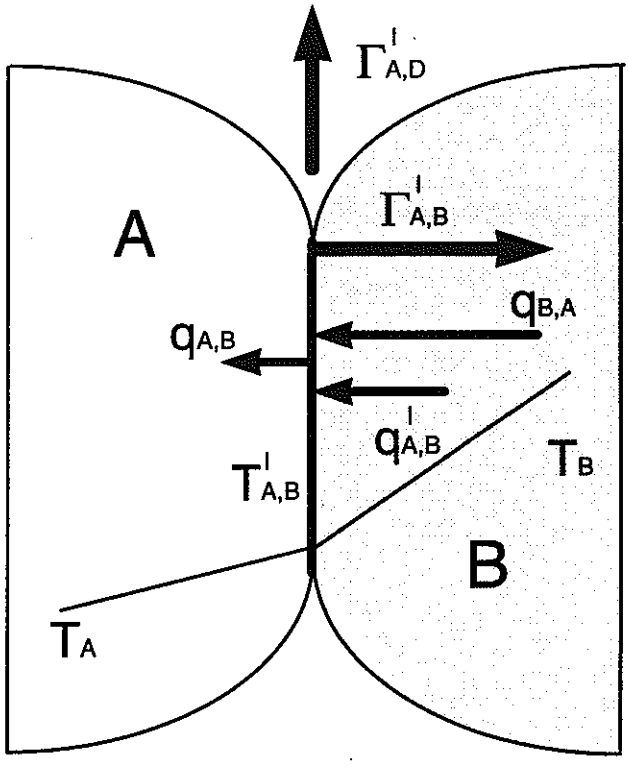
２．２節で述べたように、自然対流物質伝達の場合に熱伝達とのアナロジーが成立すると仮定すると、物質伝達を規定する Sherwood 数は、(2-34)式で与えられる。ここでは、Le = 1 と Sh = Nu の条件での金属球の温度上昇の違いを図 2-8 に比較した。図に示すように、Sherwood 数の違いによる金属球の温度上昇への影響は無視できず、比較的大きい。自然対流の場合、温度場と速度場および濃度場と速度場が連成しているから、一般には、両者が共存する場合は、物質伝達を熱伝達とのアナロジーから求めることはできない。

界面での物質伝達によって流れの場が影響を受ける場合の熱伝達係数に対する補正係数は、(2-66)式で定義される。本問題では、液体側の熱伝達係数に対する補正は数%以下と小さいが、蒸気側では物質伝達によって大きく影響を受けている。図 2-9 に蒸気側の熱伝達係数に対する補正係数の時間変化を示した。図に示すように、非凝

縮性ガスの混在量が小さく、また、凝縮率が大きい程、補正係数は小さくなっている。しかしながら、ここでは、蒸気側から界面への熱移行量は、液体側のそれに比べてかなり小さいため、金属球の温度上昇への影響は無視できる結果となった。



(a)　$q^{I}_{A,B} > 0$ の場合の境界面での質量移行：成分 A の凝縮あるいは固化



(b)　$q^{I}_{A,B} < 0$ の場合の境界面での質量移行：成分 A の蒸発あるいは溶融

図 2-1　伝熱律速型相変化モデルの概念図

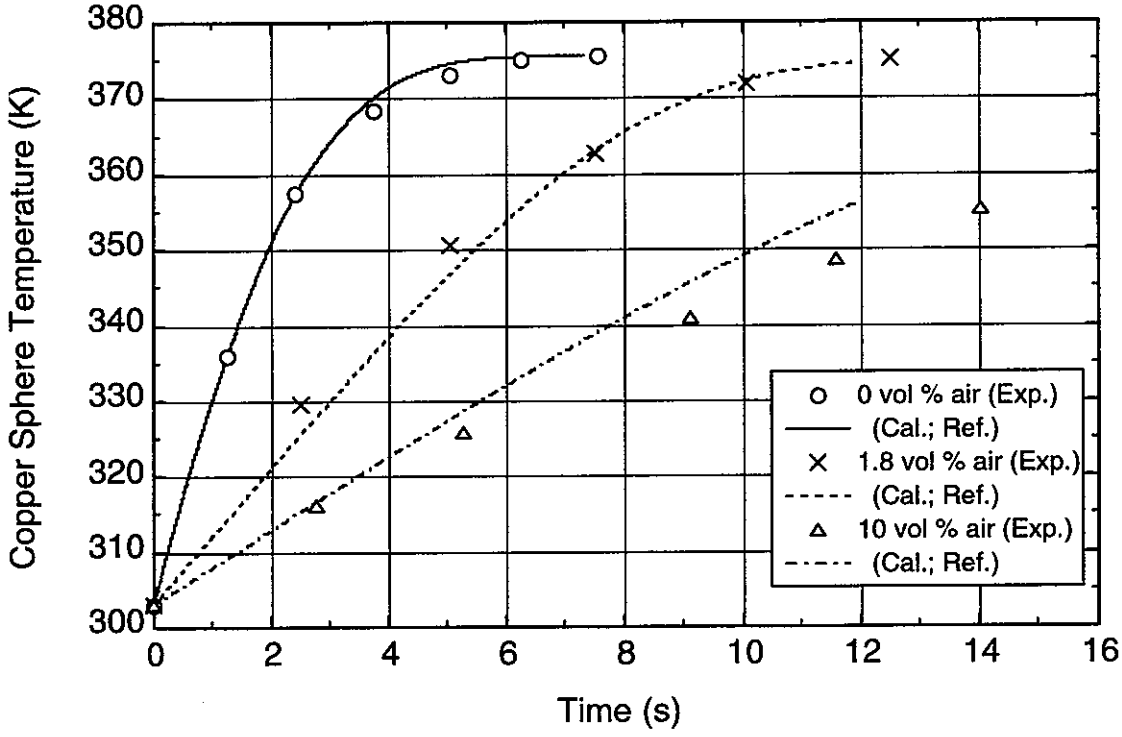


図 2-2　金属球の温度上昇の時間変化

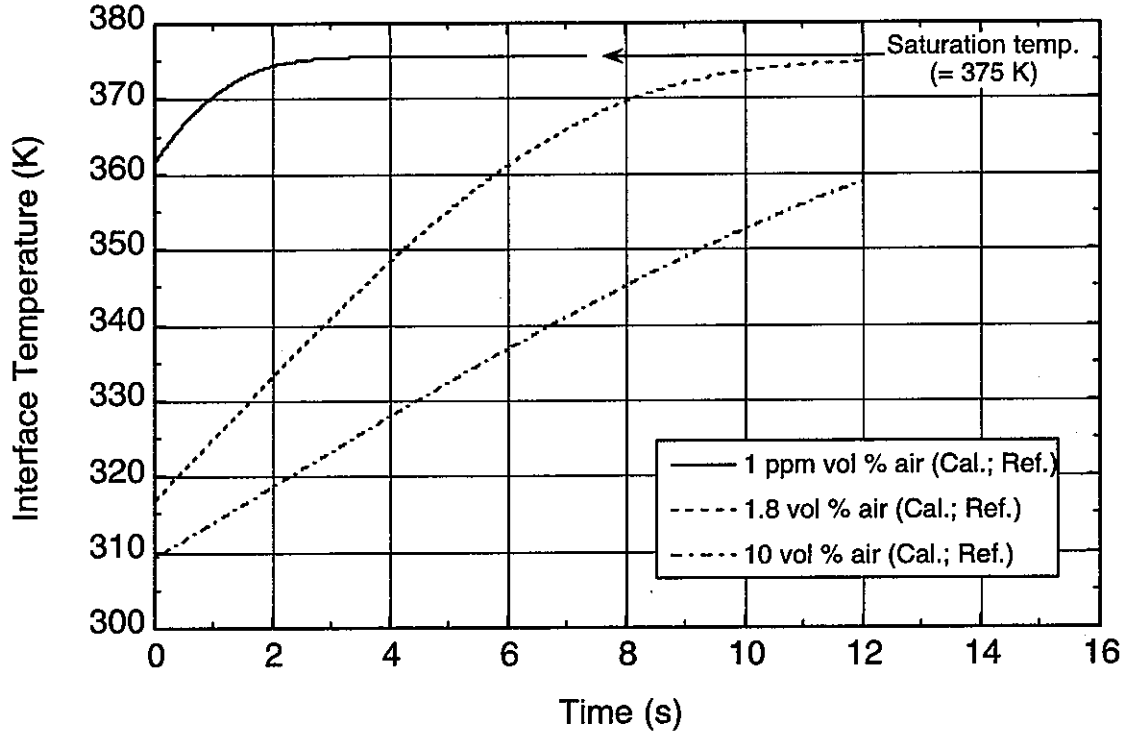


図 2-3　蒸気／液膜界面温度の時間変化

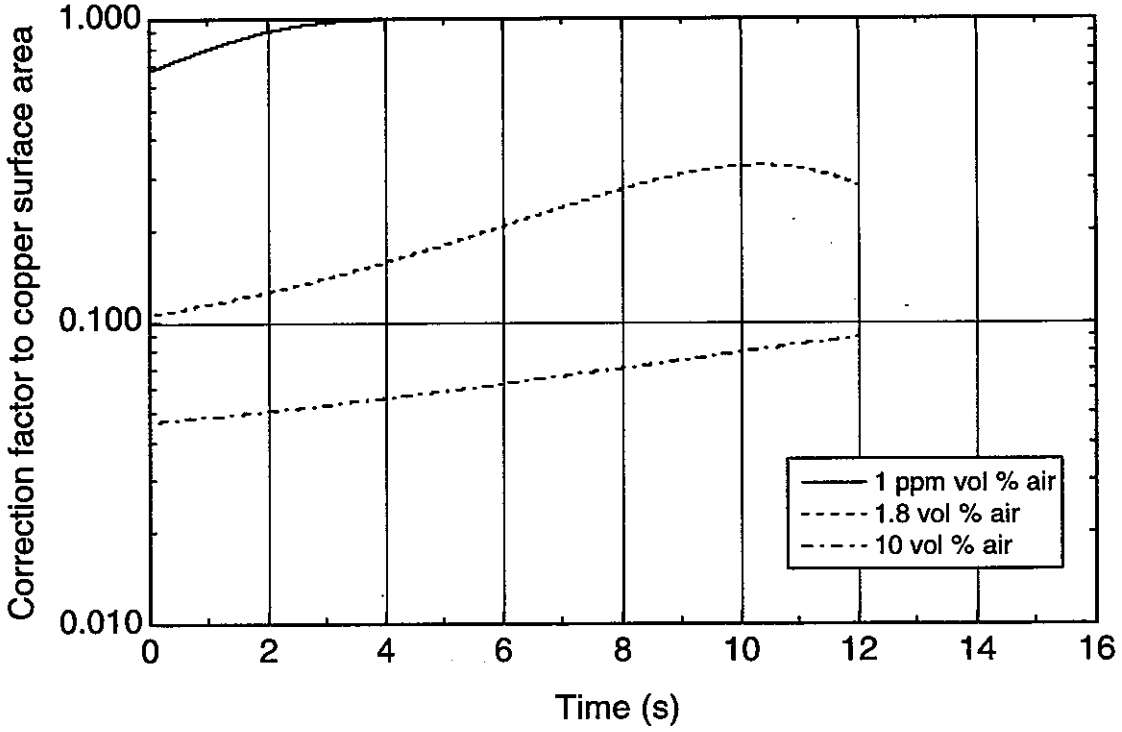


図 2-4　凝縮面積に対する修正係数の時間変化

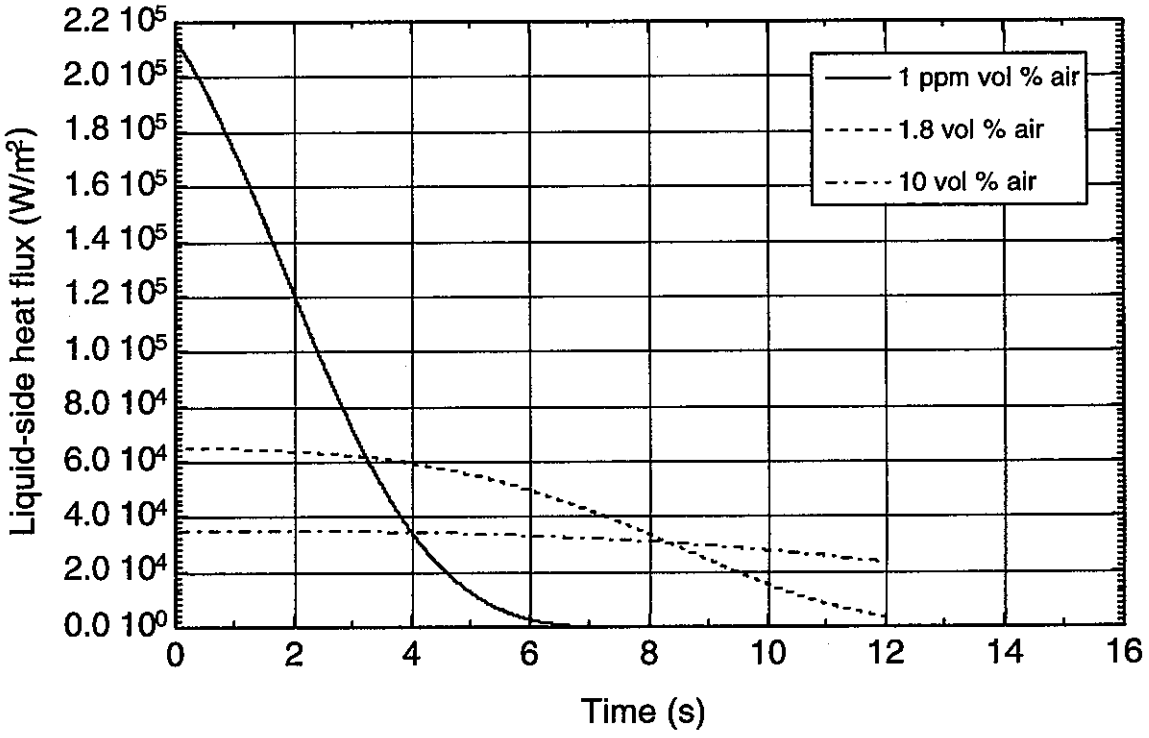


図 2-5　液膜側熱流束の時間変化

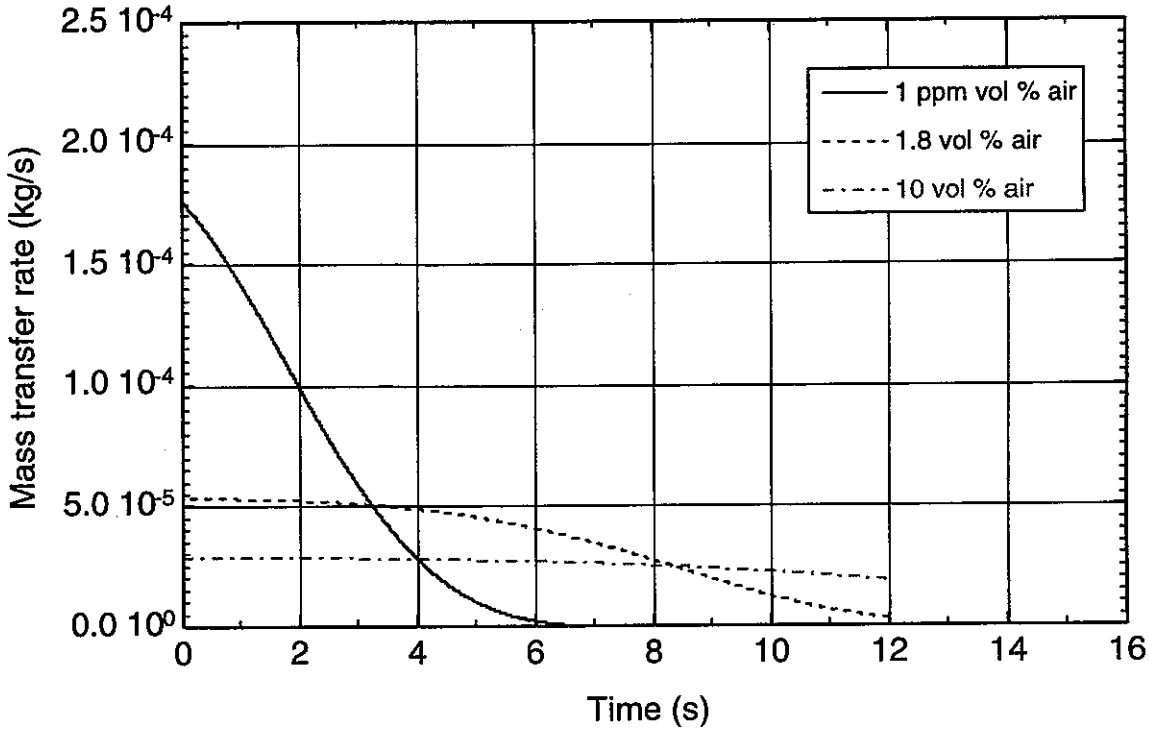


図 2-6　凝縮による質量移行率の時間変化

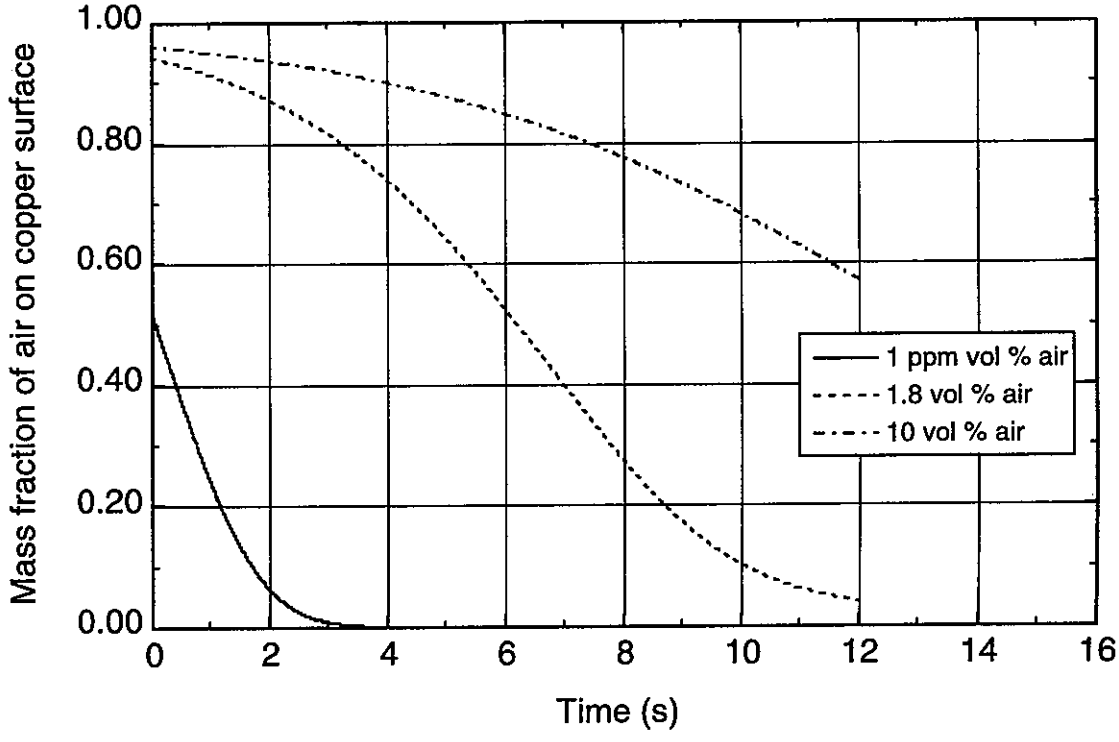


図 2-7　金属球表面上での空気の質量分率の時間変化

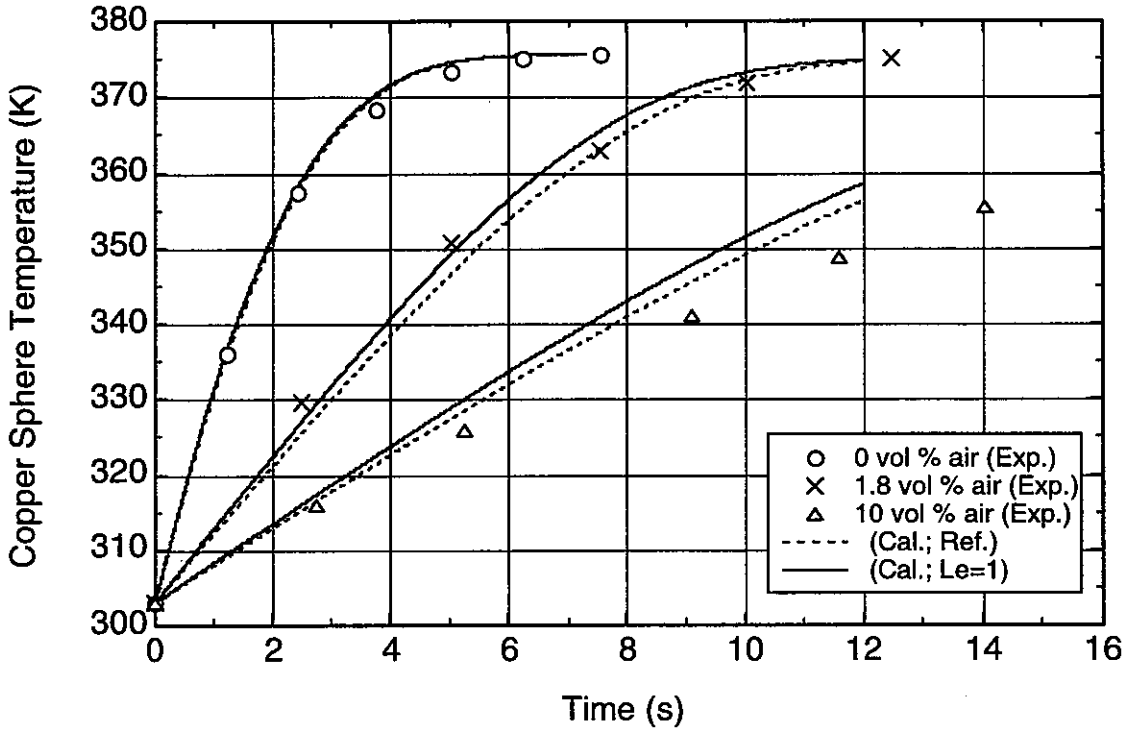


図 2-8　金属球の温度上昇への Sherwood 数の影響

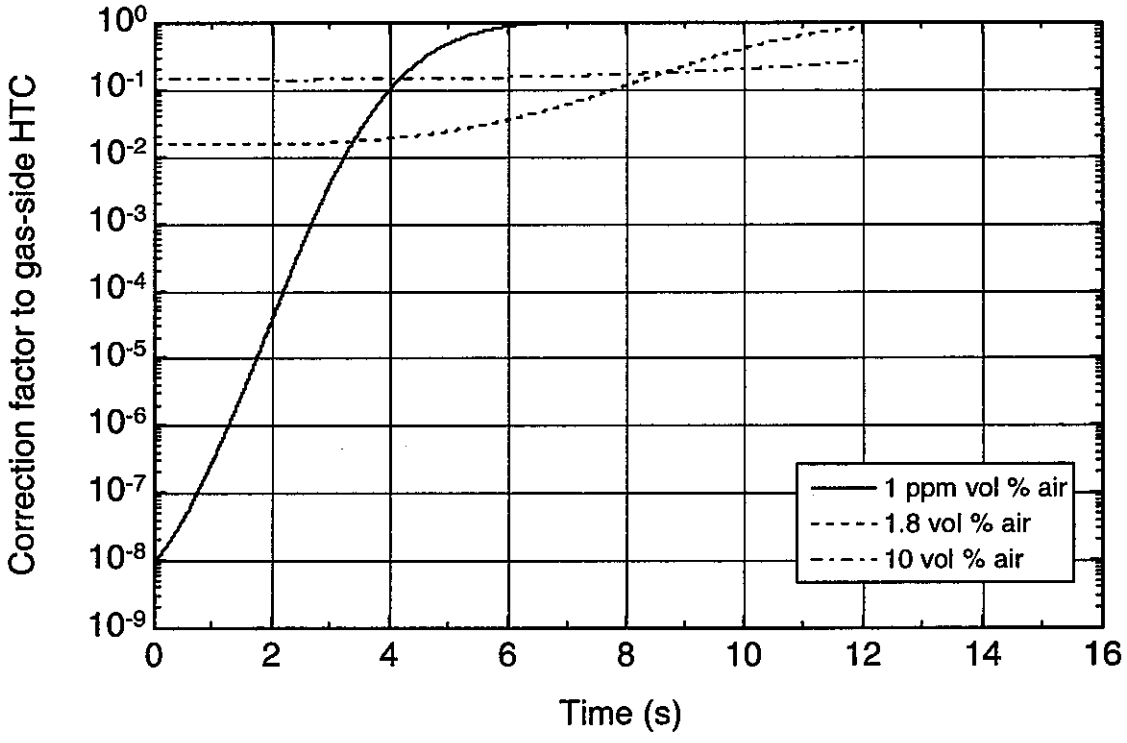


図 2-9　蒸気側の熱伝達係数に対する補正係数の時間変化

3.　境界面積対流モデルに関する検討

3．1 概要

多成分多相流での相間の界面積の変化挙動は、流動様式の変化や相変化によって複雑に変化するため、現象に応じた気泡／液滴の密度、形状等の過渡挙動に関するモデル化が必要となる。相間の界面積濃度の変化履歴を扱う境界面積対流モデルは、多成分多相流における境界面積の対流を追跡して流動の履歴の影響を考慮することで、気泡や液滴の変化挙動を現象に応じて適切に記述できることから、近年、多流体モデルの構成式として用いることが試みられている。しかしながら、相変化（沸騰、FCI 等）や流動変化による相間の界面積濃度の変化挙動は、気泡／液滴の分裂・合体が複雑に絡み合っており、それらの素過程の現象を正しく反映したモデル化が境界面積対流モデルの真価を十分に発揮させる上で重要である。

境界面積対流モデルにおいて、気泡／液滴の分裂・合体による界面積濃度の変化は、素過程を記述するソース項として扱われる。原子炉のシビアアクシデントを対象とする安全解析では、炉心物質の相変化を伴う多成分多相流を対象とすることから、以下のようなソース項があると考えられる。

1）分裂：フラッシング、流体力学的不安定性、乱流効果

2）生成：沸騰核形成、蒸発／凝縮

3）合体

これらは、炉心溶融プールの沸騰挙動、燃料—冷却材相互作用等の現象を扱う上で鍵となるモデルの一つであるとともに、流動様式に応じた界面積濃度の変化を与えることになる。

本検討では、相変化や流動変化による界面積濃度の変化挙動に関する各種相関式、実験データ等を整理・検討し、原子炉の安全解析で扱う現象に応じて適切に記述できるよう、多流体モデルによる多成分多相流解析のための体系的モデル化を図る。なお、本年度は、流動変化に関連したソース項のモデル化を進める。

3．2 境界面積対流モデルの基礎式

3．2．1 境界面積の対流式

分散相数密度の輸送方程式は、次式で表される[10]。

$$\frac{\partial n_M}{\partial t}+\nabla\cdot(v_M^p n_M)=\sum_j s_{M,j} \tag{3-1}$$

ここで、n_M：全ての大きさの分散相 M の粒子数密度、v_M^p：粒子数で重み平均した分散相 M の局所速度、$s_{M,j}$：単位体積当たりの分散相 M の粒子数のソース／シンク項である。分散相 M の体積率α_M、界面積濃度（単位体積当たりの境界面積）A_Mおよびn_Mに関する関係式

$$n_M=\psi\left(\frac{A_M^3}{\alpha_M^2}\right) \tag{3-2}$$

を用いると、境界面積に関して次式を得る。

$$\frac{\partial A_M}{\partial t}+\nabla\cdot(v_M^i A_M)=\frac{1}{3\psi}\left(\frac{\alpha_M}{A_M}\right)^2\sum_j s_{M,j}+\left(\frac{2A_M}{3\alpha_M}\right)\left[\frac{\partial\alpha_M}{\partial t}+\nabla\cdot(v_M^i\alpha_M)\right] \tag{3-3}$$

ここで、v_M^i：界面積濃度で重み平均した分散相 M の境界面速度、ψ：分散相の形に依存した係数（球形の場合$\psi=1/36\pi$）である。上式右辺の第２項は、膨張／圧縮等による分散相体積の変化の寄与を表している。(3-3)式は、単位体積当たりの分散相 M の界面積濃度のソース／シンク項$S_{M,j}$を用いると

$$\frac{\partial A_M}{\partial t}+\nabla\cdot(v_M^i A_M)=\sum_j S_{M,j}+\left(\frac{2A_M}{3\alpha_M}\right)\left[\frac{\partial\alpha_M}{\partial t}+\nabla\cdot(v_M^i\alpha_M)\right] \tag{3-4}$$

と表される。ここでは、(3-3)あるいは(3-4)式を境界面積の対流式と呼ぶ。

3．2．2 ソース／シンク項の定式化

相変化が無い場合、単位体積当たりの境界面積の時間変化の増分として寄与するソース項は粒子の機械的な分裂（breakup, fragmentation）によるものとなる。分散相 M の Sauter 平均直径D_M

$$D_M\equiv\frac{6\alpha_M}{A_M} \tag{3-5}$$

の関係を用いると、分散相 M の分裂による時間平均の生成率は

$$s_{M,br} \approx \frac{n_{M,\infty} - n_M}{\Delta\tau_{M,br}} = n_M \frac{(D_M/D_{M,\infty})^3 - 1}{\Delta\tau_{M,br}} \tag{3-6}$$

あるいは

$$S_{M,br} \approx \frac{A_{M,\infty} - A_M}{\Delta\tau_{M,br}} \tag{3-7}$$

で与えられる。ここで、$D_{M,\infty}$：分裂後の粒子の安定直径、$A_{M,\infty}$：分裂後の粒子の安定境界面積、$\Delta\tau_{M,br}$：分裂の時定数である。さらに、ある粒子の分裂頻度$f_{M,br}$を用いると

$$s_{M,br} = n_M f_{M,br} \tag{3-8}$$

あるいは

$$S_{M,br} = \frac{A_M}{3} f_{M,br} \tag{3-9}$$

と表される。ここで

$$f_{M,br} = \frac{(D_M/D_{M,\infty})^3 - 1}{\Delta\tau_{M,br}} \tag{3-10}$$

である。

相変化が無い場合、単位体積当たりの境界面積の時間変化の減分として寄与するシンク項は粒子の合体（coalescence, agglomeration）によるものとなる。単位時間、単位体積当たりの分散相Mの合体率は

$$s_{M,coal} = -\frac{n_M}{2} f_{M,coal} \tag{3-11}$$

あるいは

$$S_{M,coal} = -\frac{A_M}{6} f_{M,coal} \tag{3-12}$$

で与えられる。ここで、$f_{M,coal}$：粒子の合体頻度（coalescence frequency、あるいは合体率 coalescence rate）である。これらの式を合体の時定数$\Delta\tau_{M,coal}$間で積分することで、分散相Mの合体による時間平均の生成率は、

$$s_{M,caol} \approx -\frac{n_M[1 - \exp(-f_{M,coal}\Delta\tau_{M,coal}/2)]}{\Delta\tau_{M,coal}} \tag{3-13}$$

あるいは

$$S_{M,caol} \approx -\frac{A_M[1-\exp(-f_{M,coal}\Delta\tau_{M,coal}/6)]}{\Delta\tau_{M,coal}} \tag{3-14}$$

と表される。また、$f_{M,coal}$ は粒子の衝突頻度（collision frequency、あるいは衝突率 collision rate）$f_{M,coll}$ と合体確率（coalescence probability、あるいは合体効率 coalescence efficiency）$f^{p}_{M,coal}$ の積として定義される。

$$f_{M,coal} = f_{M,coll} f^{p}_{M,coal} \tag{3-15}$$

3．3 境界面積対流式のソース項

多成分多相流での流動様式の変化や相変化に応じた相間の界面積の変化挙動をモデル化する試みは、これまで気液二相流のブローダウン等の個別の現象を対象とした解析においていくつか見られる[11, 12]。また、軽水炉シビアアクシデント研究の分野では、ジェットあるいは液滴形状の融体が分裂、微粒化する挙動が蒸気爆発現象を解析する上で重要な機構であることから、これまで、実験的・理論的研究が進み、境界面積の変化挙動についても幾つかの物理モデルが提案されている。しかしながら、多成分多相流の伝熱流動現象に対して一般的なモデル化を提案した例は少ない。

ここでは、これまで各種の解析コードや実験解析で検討された境界面積対流式のソース項の分類と機構について整理するとともに、相変化を伴う多成分多相流を対象とする場合に必要となるソース項について摘出する。

3．3．1　既存モデルの概要

これまで各種の解析コードや実験解析で提案された境界面積対流式のソース項の詳細なモデル式については、次章で検討することにし、ここでは、ソース項に関する既存モデルの概要についてまとめる（表 4-1)。

（1）AFDM／SIMMER-III モデル

SIMMER-III コードの流体力学モデルのテストコードであった AFDM[13]では、流動様式の変化のみならず相変化に応じた相間の界面積の変化挙動のモデル化を試みている。AFDM コードでのソース項のモデル化手法は、SIMMER-III コードの基礎として用いられている。特に、SIMMER-III コードでは、これまで FCI 時の液滴のフラグメンテーション挙動に関する改良[14]、フラッシング流での壁面からの発泡核形成に関するモデル化[15]が試みられている。

（2）Kolev モデル

Kolev によって開発された 3 次元多流体コード IVA3[16]では、分散相の合体、分裂およびジェットの崩壊がソース項として扱われている。また、後に開発された IVA4 コード[17]では、フラッシング流を扱うための壁面から発泡核形成を扱うモデルも導入されている。これらのモデル化の詳細については、文献[18]を参照されたい。

（3）Städtke らのモデル

Städtke ら[19, 20]は、分散相の合体、分裂のソース項をモデル化し、これを二流体コードに組み込んで Edwards' pipe 問題および過渡気泡柱試験に適用し、その妥当性を検証した。しかしながら、前者への適用においては、気泡核の形成やフラッシング

による液滴分裂など、相変化に伴うソース項のモデル化が行われていない。

（4）Wu らのモデル

Wu ら[10]は、キャップ気泡あるいはスラグ気泡を含まない気泡流に対して、3つのソース項（乱流に駆動された不規則な衝突による合体、気泡の後流でのエントレインメントによる合体および乱流渦の衝突による分裂）のモデル化を行っている。これらを用いた二流体モデルを鉛直管内気泡流解析に適用し、径方向の境界面積濃度分布について実験結果との良い一致を得ることに成功している[21]。一方、キャップ気泡あるいはスラグ気泡を含む気泡流では、キャップ気泡からの小気泡の分断および大きなキャップ気泡表面での流れの不安定性による分裂のモデル化が合わせて必要であるとしている。

3．3．2　ソース項の分類

以上の各モデルにおいて、相変化を除いた流動変化に伴うソース項のメカニズムに着目すると以下のように分類できる。

（1）分散相（液滴、気泡）の分裂（breakup）

・加速によるフラグメンテーション（Acceleration-induced fragmentation）

分散相界面での流体力学的な不安定性（Rayleigh-Taylor および Kelvin-Helmholtz 不安定性）による分裂である。この場合、流体力学的な安定限界は、一般に、分散相に働くせん断力と表面張力の比、すなわちウェーバー数を用いて表される。

・乱流によるフラグメンテーション（Turbulence-induced fragmentation）

乱流場にある分散相の大きさが乱流渦の代表長さよりも大きくなると不安定になり崩壊する。この場合、結果としてその分散相の大きさの分布は、乱流渦の代表長さの分布と同等となる。また、崩壊の特性時間は、乱流変動の特性時間とほぼ等しくなる。

（2）分散相（液滴、気泡）の合体（coalescence）

・乱流による合体（Turbulence-induced coalescence）

分散相の大きさが乱流運動に追従できるほど十分に小さい場合、乱流の脈動によって分散相は衝突し、ある状況下では合体に至る。Kolev は、これを振動合体（oscillatory coalescence）と呼んでいる。

・局所的な速度差による合体（Coalescence due to local velocity differences）

分散相の大きさが異なる（に分布がある）場合、連続相との相対速度差にも分布が

生じ、分散相同士も相対速度を持って運動することで合体が生ずる。Kolev は、これをスペクトル合体（spectral coalescence）と呼んでいる。

・空間的な速度差による合体（Coalescence due to spatial velocity differences）

障害物や境界条件によって空間的に速度場が一様でない場合に生ずる合体である。例えば、淀み点での気泡合体はこれに相当する。Kolev はこれを非振動合体（non-oscillatory coalescence）と呼んでいる。Blahak & Städtke[19]も気泡の衝突率をモデル化する際に、二次元的な流動パターンにより生ずる気泡の上昇速度差の影響を考慮している（しかしながら、彼らの後の論文[20]では、この効果については言及されていない）。また、Wu らは、このメカニズムによる合体は、流れのパラメーターやボイド率の分布によって非直接的に生ずることから、先の５つのメカニズムによるソース項のモデル化によって記述されるべきだとしている。

・気泡の後流エントレインメントによる合体（Wake-entrainment induced bubble coalescence）

Wu らは、先行する大きな気泡の後流領域に小さい気泡が入り込んだ場合、この小さい気泡が加速されることによって先行気泡と衝突し、合体する挙動をモデル化している。

表 4-1　ソース項に関する既存モデル

機構	AFDM／SIMMER-III モデル (Wilhelm, 1990 [13])		Kolev モデル (Kolev, 1991 [16]; 1993 [18]; 1995 [17])		Städtke らのモデル (Blahak and Städtke, 1996 [19]; Städtke et al., 1997 [20])		Wu らのモデル (Wu and Ishii, 1997 [21]; Wu et al., 1998 [10])	
分裂	気泡 液滴	Breakup by dynamic forces	気泡 液滴	Acceleration-induced fragmentation	液滴	Breakup due to Kelvin-Helmholts and Reyleigh-Taylor instabilities	気泡	
	気泡 液滴 *	Buoyancy-driven turbulence breakup		Turbulence-induced fragmentation	気泡	Turbulence-induced fragmentation		Bubble breakup due to turbulent impact
合体	気泡 液滴	Coalescence due to random collision	気泡 液滴	Oscillatory coalescence：Turbulence-induced coagulation	気泡 液滴	Turbulence-induced coalescence	気泡	Random collision induced bubble coalescence
				Spectral coalescence：Local velocity differences				
				Non-oscillatory coalescence：Spectral velocity differences	気泡	Two-dimensional effects on collision rate		
								Wake-entrainment induced bubble coalescence
相変化	気泡	Bubble nucleation in pool flow	気泡					
		Heterogeneous nucleation at walls **		Heterogeneous nucleation at walls				
	液滴	Flashing of droplets						
備考	* 気泡流のみ ** Morita (1998) [15]						キャップあるいはスラグ気泡を含まない気泡流のソース項	

3．4 ソース／シンク項のモデル化手法のレビュー

3．4．1 乱流による合体モデル

（1）AFDM モデル

AFDM コード[13]では SIMMER-II コード[2]で採用された簡易な相互作用モデルを用いている。このモデルでは、速度V'で不規則な運動をする粒子が単位時間に衝突する頻度を、一つの粒子が単位時間にスウィープする体積$\pi r_d^2 V'$および粒子の数密度$\alpha_d/(4\pi r_d^3/3)$の積として

$$f_{coll} = \frac{3}{4}\frac{\alpha_d V'}{r_d} = \frac{1}{4}\left(\frac{6\alpha_d}{D_d}\right)V' \tag{3-16}$$

で与えている。ここで、D_d（$= 2r_d$）：分散相の直径、α_d：分散相の体積率である。また、(3-12)式の関係を用いて整理すると

$$S_{coal} = -A_d^2 \frac{1}{24} f_{coal}^p V' = -A_d^2 \Gamma_{coal} \tag{3-17}$$

を得る。ここで、$\Gamma_{coal} = f_{coal}^p V'/24$である。さらに、$V'$が連続相と分散相の速度差$\Delta V_{cd}$ $(=|V_c - V_d|)$に比例し、分散相の増加と共に合体も増加すると仮定し、Γ_{coal}を次のようにモデル化している。

$$\Gamma_{coal} = C_1 \Delta V_{cd} \exp(C_2 \alpha_d) \tag{3-18}$$

ここで、C_1, C_2：経験定数である。

（2）Kolev モデル

分子運動論とのアナロジーに基づいたモデルでは、相対速度V^{rel}で運動する粒子が単位時間に衝突する頻度は、衝突断面積πD_d^2と単位時間当たりにスウィープする円柱長さV^{rel}の積として与えられる。

$$f_{coll} = n_d \pi D_d^2 V^{rel} = \left(\frac{6\alpha_d}{D_d}\right)V^{rel} \tag{3-19}$$

さらに、分散相の相対速度が Maxwell 分布であると仮定すると

$$f_{coll} = \frac{1}{\sqrt{2}} n_d \pi D_d^2 V^{rel} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{6\alpha_d}{D_d}\right)V^{rel} \tag{3-20}$$

で表される。IVA コード[16, 17]では、(3-20)式に衝突時の分散相の変形と弾性の効果を含めた衝突頻度

$$f_{coll} = \frac{1}{\sqrt{2}} n_d \pi D_d^2 V^{rel} \frac{2}{\sqrt{3\alpha_d}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{6\alpha_d}{D_d} \right) V^{rel} \frac{2}{\sqrt{3\alpha_d}} = 2\sqrt{6} \frac{\alpha_d^{1/2}}{D_d} V^{rel} \tag{3-21}$$

を用いている[22]。この衝突頻度の$\alpha_d{}^m$の依存性については実験的に確認されており、気－液系での液滴：～$\alpha_d{}^{0.6}$、液－液系での液滴：～$\alpha_d{}^{0.45}$、気泡：～$\alpha_d{}^{0.6}$としている。IVA3 コード[16]では非振動合体が考慮されておりて、粒子の衝突当たりの合体確率を$f_{coal}^p \approx 0.0001$（液滴）、$f_{coal}^p \approx 0.0064$（気泡）の経験定数で与えている。この場合、相対速度V^{rel}は次式で計算されている。

$$V^{rel} \approx \left[\left(\Delta r \frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 + \left(\Delta \theta \frac{\partial v}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\Delta z \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] \tag{3-22}$$

一方、IVA4 コード[17]では、流路断面で分散相が非一様に分布する影響を$f_{coal}^p \approx 1$で近似し、液体の過熱が無い場合に$f_{coal}^p \approx 0.0032$としている。ここで、相対速度$V^{rel}$は、平均速度差と乱流変動速度$\Delta V_{cd}^t$の重ね合わせとして次式で計算されている。

$$V^{rel} = |V_d - V_c| + \Delta V_{cd}^t \tag{3-23}$$

ここで

$$\Delta V_{cd}^t \approx 0.3 |V_d - V_c| \quad \text{for} \quad \alpha_d < 0.3 \tag{3-24}$$

$$\Delta V_{cd}^t \approx 0.7 |V_d - V_c| \quad \text{for} \quad \alpha_d > 0.3 \tag{3-25}$$

である。

乱流振動によって粒子が衝突する場合の粒子の衝突当たりの合体確率は、乱流場における粒子の接触時間と合体を関係付けることで Meusel[23]および Coulaloglou & Tavlaride[24]によってモデル化されている。

【Meusel モデル】

$$f_{d,coal}^p = 0 \qquad \frac{\Delta\tau_{coll}}{\Delta\tau_{coal}} < 1 \tag{3-26}$$

$$f_{d,coal}^p = const \cdot \left(\frac{\Delta\tau_{coll}}{\Delta\tau_{coal}} \right)^{1/3} \qquad \frac{\Delta\tau_{coll}}{\Delta\tau_{coal}} \geq 1 \tag{3-27}$$

（経験定数 *const* は気泡流実験から 0.032 とした）

【Coulaloglou & Tavlarides モデル】

$$f_{d,coal}^p \approx \exp\left(-\frac{\Delta\tau_{coll}}{\Delta\tau_{coal}} \right) \tag{3-28}$$

ここで、$\Delta\tau_{coll}$：衝突一回当たりの時間、$\Delta\tau_{coal}$：合体に必要な時間である。

これらのモデルでは、二つの特性時間$\Delta\tau_{coll}$および$\Delta\tau_{coal}$を定める必要がある。連続相中で振動する球形の液滴あるいは気泡の第n次モードの自然周波数は、

$$(2\pi f_n)^2 = b\frac{\sigma_d}{r_d^3}\left(\frac{n(n+1)(n-1)(n+2)}{(n+1)\rho_d + n\rho_c}\right) \qquad n = 2, 3, \ldots, n \tag{3-29}$$

で与えられる[25]。この式で液滴に対しては、実験的に第1次モード（$n=2$）の振動のみが観察される。係数bは、小さな振幅の振動に対しては1に近づく。また、$\Delta\tau_{coal}$は第1次モードの自然周波数と

$$\Delta\tau_{coal} \approx \frac{1}{f_2} \tag{3-30}$$

の関係がある。これらより、液滴の合体に必要な時間

$$\Delta\tau_{coal} \approx 0.45\left(\frac{D_d^3(3\rho_d + 2\rho_c)}{\sigma}\right)^{1/2} \tag{3-31}$$

を得る。

Thomas[26]は、分散相が気泡の場合、慣性力と粘性が大きな液滴と異なり、$\Delta\tau_{coal}$は衝突する2つの気泡間の液体を押し出すのに必要な時間を

$$\Delta\tau_{coal} \approx \frac{3\pi\eta_c r^4}{2F\delta^2} \tag{3-32}$$

で与えた（film thinning model）。ここで、r：合体時の2つの気泡の共有面の半径、δ：気泡間の径方向膜厚さ（≈ 10^{-7} m）、η_c：連続相の粘性係数、F：共有面上の気泡内部から働く力で

$$F = \frac{4\pi r^2\sigma}{D_b} \approx \tau D_b^2 = \rho_c (V^{rel})^2 D_b^2 \tag{3-33}$$

で与えられる。以上より、気泡の合体に必要な時間

$$\Delta\tau_{coal} = \frac{3}{32\pi}\eta_c\rho_c (V^{rel})^2 D_b^2\left(\frac{D_b}{\sigma\delta}\right)^2 \tag{3-34}$$

を得る。さらに、乱流場における粒子の接触時間は

$$\Delta\tau_{coll} \approx \frac{D_d}{V^{rel}} \tag{3-35}$$

で与えられている。以上の結果を用いて、Kolev[18]は、(3-31)および(3-35)式から乱流場にある液滴に対して

$$\frac{\Delta\tau_{coll}}{\Delta\tau_{coal}} \approx 2.21\left(\frac{\sigma}{D_d(3\rho_d+2\rho_c)}\right)^{1/2}(V^{rel})^{-1} \tag{3-36}$$

(3-34)および(3-35)式から乱流場にある気泡に対して

$$\frac{\Delta\tau_{coll}}{\Delta\tau_{coal}} = \frac{32\pi}{3}\left[\frac{(\sigma\delta)^2}{\eta_c\rho_c(D_bV^{rel})^3}\right] \tag{3-37}$$

を導出している。

（3）Städtke らのモデル

Städtke ら[20]は、気体中の分子衝突理論のアナロジーを用いて、乱流場における粒子の衝突頻度を次式で与えた。

$$f_{coll} = 6\sqrt{2}\frac{v_{turb}\alpha_d}{D_d}\frac{1}{(1-2\alpha_d)} \tag{3-38}$$

ここで、v_{turb}：乱流変動速度　である。本式は、Prince & Blanch[27]によるものと同様であるが、$(1-2\alpha_d)^{-1}$によって気泡の有限体積を考慮している点が異なる。

ここでも、乱流振動によって気泡が衝突する場合の気泡の衝突当たりの合体確率は、「film thinning model」を用いて求められている。Prince & Blanch は、$\Delta\tau_{coal}$を２つの気泡間の液膜を初期厚さδ_{init}（10^{-4} m）から破断厚さδ_{crit}（10^{-8} m）まで排出するのに必要な時間とし、合体する気泡間にある液膜の半径が気泡径に等しいと仮定して

$$\Delta\tau_{coal} = \sqrt{\frac{r_b^3\rho_C}{16\sigma}}\ln\frac{\delta_{init}}{\delta_{crit}} \tag{3-39}$$

を得た。また、乱流場における粒子の接触時間は、Levich[28]によって

$$\Delta\tau_{coll} \approx \frac{r_b^{2/3}}{\varepsilon_c^{1/3}} \tag{3-40}$$

で与えられる。ここで、ε_c：単位質量当たりの連続相のエネルギー消散率である。以上から、Städtke らは、乱流場にある気泡に対して、(3-39)および(3-40)式から得られる

$$\frac{\Delta\tau_{coll}}{\Delta\tau_{coal}} \approx -1.30\times\sqrt[6]{\frac{D_b^5\rho_c^3\varepsilon_c^2}{\sigma^3}} \tag{3-41}$$

を Coulaloglou & Tavlaride のモデル(3-28)式に適用し、気泡の衝突当たりの合体確率を計算している。

（4）Wu らのモデル

Wu ら[10]は、平均の気泡変動速度vで接近する二つの気泡の衝突率の関係を次式で与えた。

$$f_{coll} \propto n_b D_b^2 v \left[\frac{1}{\alpha_{\max}^{1/3}(\alpha_{\max}^{1/3} - \alpha_b^{1/3})} \right] \tag{3-42}$$

ここで、$\alpha_{\max}$は気泡の最大充填率（~ 0.8：スラグ流から環状流への遷移点）である。また、vは、距離D_d間の液体の変動速度差の RMS 値に比例するとし、次式で与えた。

$$v \approx (\varepsilon_c D_d)^{1/3} \tag{3-43}$$

一方、(3-42)式は、分子運動論とのアナロジーに基づいた(3-19)式に相似しているが、[ ]の項によって気泡の平均自由行程が平均の気泡径と同等となった場合の効果が考慮されている。さらに、Wu らは、気泡間の平均距離が非常に大きい場合には衝突が生じないことを考慮して、(3-42)式を次式のように修正した。

$$f_{coll} \sim n_b D_b^2 v \left[\frac{1}{\alpha_{\max}^{1/3}(\alpha_{\max}^{1/3} - \alpha_b^{1/3})} \right] \times \left[1 - \exp\left(-C \frac{\alpha_{\max}^{1/3} \alpha_b^{1/3}}{\alpha_{\max}^{1/3} - \alpha_b^{1/3}} \right) \right] \tag{3-44}$$

ここで、C：モデル定数である。

一方、粒子の衝突当たりの合体確率については、Kolev モデルや Städtke らのモデルで用いられたような「film thinning model」では、鉛直管内気泡流の実験結果をうまく再現できなかったとして、合体確率を一定として扱っている。その結果、Wu らは、不規則な衝突による単位時間、単位体積当たりの気泡の合体率を

$$S_{\mathrm{coal}} = -\frac{1}{3\pi} C_{RC} v A_b^2 \left[\frac{1}{\alpha_{\max}^{1/3}(\alpha_{\max}^{1/3} - \alpha_b^{1/3})} \right] \times \left[1 - \exp\left(-C \frac{\alpha_{\max}^{1/3} \alpha_b^{1/3}}{\alpha_{\max}^{1/3} - \alpha_b^{1/3}} \right) \right] \tag{3-45}$$

で与えた。ここで、C_{RC}：モデル定数である。Wu らは、鉛直管内気泡流の実験解析から、$C_{RC} = 0.0565$、$C = 3$ とした。

3．4．2　乱流による分裂モデル

（1）AFDM モデル

液滴分散流における連続相の乱流エネルギーは、気泡流のそれと比べて小さいために、AFDM コード[3]では、乱流による分散相の分裂を気泡および気泡流中の液滴に対して考慮している。さて、乱流の特性周波数は

$$f = \frac{\sqrt{\overline{v^2}}}{\ell_{ec}} \tag{3-46}$$

で表される。ここで$\overline{v^2}$：距離 D_d 間の速度差の自乗平均値で、乱流変動速度の RMS

値V'との間には次の関係がある[25]。

$$\overline{v^2} \approx 2(\varepsilon_c D_d)^{2/3} \approx 2V'^2\left(\frac{D_d}{L}\right)^{2/3} \tag{3-47}$$

ここで、L：流れの積分スケールである。Sevik & Park は、(3-46)式が(3-29)式で表される球形の液滴あるいは気泡の第 n 次モードの自然周波数で与えられるとした。この時、最小臨界ウェーバー数（$n=2$）に対応する安定限界は

$$\frac{24}{\pi^2\left(3\frac{\rho_d}{\rho_c}+2\right)} = \frac{\rho_c V'^2}{\sigma}\left(\frac{D_d^5}{L^2}\right)^{1/3} \tag{3-48}$$

から得られる。この式で、$\rho_d/\rho_c \ll 1$および$L=2r_d$として得られる気泡分裂の臨界ウェーバー数は

$$We_{crt} = \frac{\rho_c V'^2 D_b}{\sigma} \cong 1.22 \tag{3-49}$$

となる。一方、Sevik & Park によって実験的に得られた臨界ウェーバー数

$$We'_{crt} = \frac{\rho_c \overline{v^2} D_b}{\sigma} \cong 2.6 \tag{3-50}$$

が$\overline{v^2} \approx 2V'^2$の関係を用いると(3-49)式の値とほぼ等しくなることから、Wilhelm は、(3-48)式で$L=D_d$として臨界ウェーバー数を求めることが妥当であるとした。結果として、分裂後の安定直径は

$$D_{d,\infty} = \frac{24}{\pi^2}\frac{1}{3\frac{\rho_d}{\rho_c}+2}\frac{\sigma}{\rho_c V'^2} \tag{3-51}$$

で与えられる。また本モデルでは、分裂の特性時間定数$\Delta\tau_{br}$は、第１次モードの自然周波数から

$$\Delta\tau_{br} \approx \frac{1}{f_2} = 0.0325 r_b^{3/2}\left(\frac{3\rho_b+2\rho_c}{\sigma}\right)^{1/2} \tag{3-52}$$

与えているが、AFDM コードでは、右辺の定数を$C_{TT}\times 10^{-3}$とおいている。ここでC_{TT}は入力定数である。

さて、AFDM コードは、いわゆる乱流モデルを持たないため、V'を気泡の浮力による乱流と関係付けてモデル化した定式[29]を採用している。

$$\frac{V'}{(r_b g)^{1/2}} = \left\{ \alpha_b (1-\alpha_b) \left| 1 - \frac{\rho_b}{\rho_c} \right| \right\}^{1/2} \tag{3-53}$$

このため、AFDM コードでは、気泡流中の分散相に対して考慮した乱流による分裂を「浮力に駆動された乱流にによる分裂」(Bouyancy-driven turbulence breakup) と呼んでいる。

（2）Kolev モデル

乱流せん断力／表面張力で定義される臨界ウェーバー数は

$$We'_{crt} = \frac{\tau \pi D_{d,\infty}^2}{\sigma \pi D_{d,\infty}} = \frac{\rho_c \overline{v^2} D_{d,\infty}}{\sigma} \approx const \tag{3-54}$$

で表される。ここで、$\overline{v^2}$：乱流変動速度差の自乗平均値、$\tau = \rho_c \overline{v^2}$：乱流せん断応力である。乱流が局所的に等方であり、粒子の大きさが慣性小領域にあると仮定すると、Kolmogoroff の等方性乱流の仮説を用いて$\overline{v^2}$は次式で表される。

$$\overline{v^2} = \left(\frac{1}{c_1} \right)^{2/3} (\ell_{ec} \varepsilon_c)^{2/3} \tag{3-55}$$

ここで、$(1/c_1)^{2/3} = 2$ あるいは $c_1 = 0.3536$ である。粒子の最大径$D_{d,\infty}$が乱流渦の代表長さℓ_{ec}に等しいと仮定すると

$$We'_{crt} = D_{d,\infty}^{5/3} \left(\frac{\varepsilon_c}{c_1} \right)^{2/3} \frac{\rho_c}{\sigma} \tag{3-56}$$

を得る。We'_{crt}には実験的および理論的な考察から次の値が推奨されている。

$We'_{crt} \approx 1.17$（気相乱流における液滴・実験値）(Hinze [30])

$We'_{crt} \approx 2.43$（液相乱流における気泡／理論値：実験値は(3-50)式）(Sevik & Park [25])

以上より、Kolev [18]は、分裂後の粒子径を乱流消散率の関数として

$$D_{d\infty} \approx \left(\frac{c_1}{\varepsilon_c} \right)^{2/5} \left(\frac{We'_{crt} \sigma}{\rho_c} \right)^{3/5} \tag{3-57}$$

で与えた。また、分裂の特性時間定数$\Delta\tau_{br}$は、単一の乱流渦の振動周期$\Delta\tau'$と同等であるとし

$$\Delta\tau_{br} \approx \Delta\tau' \approx \frac{\ell_{ec}}{\sqrt{\overline{v^2}}} \approx \frac{D_{d,\infty}}{\sqrt{\overline{v^2}}} \approx \left(\frac{c_1 D_{d,\infty}^2}{\varepsilon_c} \right)^{1/3} \tag{3-58}$$

で与えた。

（3）Städtke らのモデル

Städtke ら[20]は、気泡が乱流渦と衝突するとき、乱流渦大きさがの気泡と同等の場合に気泡分裂が生じるとした Prince & Blanch[27]のモデルを採用している。乱流による気泡の分裂率は、気泡当たりの乱流渦との衝突率$f_{coll,br}$と衝突当たりの分裂効率f_{br}^{p}の積を用いて次式で表される。

$$f_{br} = \sum f_{coll,br} f_{br}^{p} \tag{3-59}$$

ここで、Σは分裂に寄与する乱流渦の大きさについての和である。

$f_{coll,br}$は、気体分子運動論のアナロジーから次式で与えられる。

$$f_{coll,br} = n_e A_{be} \sqrt{v_b^2 + v_e^2} \tag{3-60}$$

ここで、n_e：単位体積当たりの乱流渦数（直径D_e）、v_b：気泡の変動速度（$= 1.4\sqrt[3]{\varepsilon_c D_b}$）、$v_e$：乱流渦の変動速度（$= 1.4\sqrt[3]{\varepsilon_c D_e}$）、$A_{be}$：衝突断面積（$= \frac{\pi}{4}(D_b + D_e)^2$）である。また、気泡の大きさに比べて小さい乱流渦は気泡を分裂させるのに十分なエネルギーを持たないことから、分裂に与する乱流渦の大きさを$0.2D_b \sim D_b$の範囲とした。

渦のエネルギーがその速度の自乗に比例すると仮定すると、Coulaloglou & Tavlarides [24]による乱流による気泡の合体効率へのアナロジーから、分裂を引き起こすのに十分なエネルギーを持つ渦の割合f_{br}^{p}は、次式で与えられる。

$$f_{br}^{p} = \exp\left(-\frac{v_{crt}^2}{v_e^2}\right) \tag{3-61}$$

ここで、臨界気液相対速度v_{crt}は、衝突する渦の運動エネルギーと気泡の表面張力との比に分裂が依存することから、Prince & Blanch による臨界ウェーバー数

$$We'_{crt} = \frac{\rho_c D_b v_{crt}^2}{\sigma} = 2.3 \tag{3-62}$$

を用いて得ることができる。

（4）Wu らのモデル

Wu ら[10]は、気泡に働く連続相の乱流渦の慣性力と表面張力のバランスから、乱流渦と気泡の衝突による気泡裂率の関係を次式で与えた。

$$f_{br} \propto \frac{v}{D_b}\left(1 - \frac{We'_{crt}}{We'}\right)^{1/2} \tag{3-63}$$

ここで

$$We' = \frac{\rho_c v^2 D_b}{\sigma} > We'_{crt} \tag{3-64}$$

であり、臨界ウェーバー数は鉛直管内気泡流の実験解析からWe'_{crt} = 2.0 とした(Prince & Blanch [27]は、We'_{crt} = 2.3 としている)。さらに、(3-61)式と同様に、気泡を分裂させるのに十分大きなエネルギーを持つ渦と衝突する確率を

$$f_{br}^{p} \propto \exp\left(1 - \frac{v_{crt}^2}{v^2}\right) \tag{3-65}$$

で近似し[24]、(3-63)式にこれを考慮することで乱流による気泡の分裂率を

$$S_{br} = \frac{1}{18} C_{TI} v \left(\frac{A_b^2}{\alpha_b}\right)\left(1 - \frac{We'_{crt}}{We'}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{We'_{crt}}{We'}\right) \tag{3-66}$$

で与えた。ここで、C_{TI}：モデル定数である。彼らは、鉛直管内気泡流の実験解析から、$C_{TI} = 0.18$ とした。

3．4．3　加速による気泡分裂モデル

（1）AFDM モデル

AFDM モデル[13]では、流体力学的に安定な気泡径に対して、気相中の液滴に対する経験式[31]

$$We_{d,\infty} = \frac{\rho_c (V_c - V_d)^2 D_{d,\infty}}{\sigma} = We_{crt} + 14 N_\mu \tag{3-67}$$

を用いている。ここで、N_μは粘性数（viscous number）と呼ばれる無次元数で

$$N_\mu = \frac{\mu_d^2}{\rho_d D_{d,\infty} \sigma} \tag{3-68}$$

で定義される。(3-67)式の右辺第 1 項は液滴の粘性が小さい場合の臨界ウェーバー数、第 2 項は液滴分裂に対する粘性効果を表している。(3-67)式から、安定気泡径に対して

$$D_{d,\infty} = \frac{We_{d,\infty}\sigma}{2\rho_c (V_c - V_d)^2} + \frac{1}{2}\left[\left(\frac{We_{d,\infty}\sigma}{2\rho_c (V_c - V_d)^2}\right)^2 + \frac{14\mu_d^2}{\rho_c \rho_d (V_c - V_d)^2}\right]^{1/2} \tag{3-69}$$

を得る。AFDM コードでは、We_{crt} = 10 とした。

分裂に必要な時間$\Delta\tau_{br}$には、気相中の液滴に対する Engel [32]の式に基づいた次の経験式

$$\Delta\tau_{br} \approx 2.8\frac{D_d}{|V_d - V_c|}\left(\frac{\rho_d}{\rho_c}\right)^{1/2} \tag{3-70}$$

を用いた。AFDM コードでは、大きな速度差での分裂を抑えるために上式を

$$\Delta\tau_{br} \approx C_{FT}\frac{D_d}{|V_d - V_c|}\max\left(1, \frac{|V_d - V_c|}{\Delta V_{RT}}\right)\left(\frac{\rho_d}{\rho_c}\right)^{1/2} \tag{3-71}$$

に修正したものを用いている。ここで、C_{TT}（= 1.0）、ΔV_{RT}（= 0.2 m/s）は入力定数である。

（2）Kolev モデル

気泡径に対しては次の流体力学的安定限界

$$We_{d,\infty} = \frac{\rho_c (V_c - V_{d,\infty})^2 D_{d,\infty}}{\sigma} \approx 12 \tag{3-72}$$

がしばしば用いられる。ここで、$V_{d,\infty}$：最終的な分裂速度、$D_{d,\infty}$：最終的な安定直径である。すなわち

$$D_{d,\infty} = We_{d,\infty}\frac{\sigma}{\rho_c (V_c - V_{d,\infty})^2} \tag{3-73}$$

である。$D_{d,\infty}$の上限値は、気泡流における終端速度$\Delta V_{d,\infty}$（= $\sqrt{2}[\sigma g(\rho_c - \rho_d)/\rho_c^2]^{1/4}$）を用いて

$$D_{d,\infty\max} \approx We_{d,\infty}\frac{\sigma}{\rho_c \Delta V_{d,\infty}^2} = We_{d,\infty}\frac{1}{2}\lambda_{RT} \tag{3-74}$$

で与えられる。ここで、λ_{RT}：Rayleigh-Taylor 不安定波長（$=\sqrt{\sigma/g(\rho_c - \rho_d)}$）である。一方、固体球のようにこれ以上分裂しない下限値は、Brodkey [31]によって

$$D_{d,\infty\min} \approx 2.53\frac{1}{2}\lambda_{RT} \tag{3-75}$$

で与えられている。従って、分裂後の安定気泡の大きさは$D_{d,\infty\min} < D_{d,\infty} < D_{d,\infty\max}$の範囲になくてはならない。

一方、分裂に必要な時間$\Delta\tau_{br}$は、ボイド率α_dの流れにおける二つの気泡の平均距離$\Delta\ell_d$

$$\Delta\ell_d \approx D_d\left(\frac{\pi\sqrt{2}}{6\alpha_d}\right)^{1/3} \tag{3-76}$$

を気液間の相対速度ΔV_{cd}で移動する時間に比例するとして

$$\Delta\tau_{br} \approx const \cdot \frac{\Delta\ell_d}{|\Delta V_{cd}|} = const \cdot \left(\frac{\pi\sqrt{2}}{6}\right)^{1/3} \frac{D_d}{|\Delta V_{cd}|\alpha_d^{1/3}} \tag{3-77}$$

で与えた。ここで、*const* は経験定数である。

Kolev [18]は、このモデル化においては、1）平均直径が D_d である気泡群の大きさが、分裂後に(3-73)式で与えられるのか、2）(3-77)式の定数の値あるいは定数で与えられるのか　について実験的な研究が必要であるとしている。

3．5 まとめ

以上の各種の解析コードや実験解析で提案された境界面積対流式のソース項のモデル化手法を参考にして、SIMMER-III コードで用いるソース項モデルの改良・検討項目についてまとめる。

（1）乱流による合体モデル

粒子が衝突する際の衝突頻度f_{coll}については、何れの手法においても分子運動論とのアナロジーに基づいてモデル化されており、定式化の詳細度に差違はあるものの、合体確率を支配する物理量には類似した関係が用いられている。しかしながら、「film thinning model」に基づくモデル化が提案されている合体確率$f^{\mathrm{p}}_{\mathrm{coal}}$については、Wu らによる気泡流実験解析では、その不適切さが示唆されている。一方、Wu らが提案するソース項モデルは、この実験から合体確率を含む経験定数を定めている。従って、SIMMER-III コードの乱流による気泡合体モデルについては、管内流であることを考慮した上で Wu らのモデルと定量的な比較が可能であると考えられる。

（2）乱流による分裂モデル

乱流による分裂モデルでは、何れのモデルでも液相乱流における気泡分裂の臨界ウェーバー数We'_{crt}については、ほぼ同程度の値が用いられている。一方、分裂時定数$\Delta\tau_{br}$あるいは分裂頻度f_{br}については、それぞれモデル化の方法が異なっている。ここでも、Wu らが提案するソース項モデルのみが、気泡流実験によってその経験定数が定められており、SIMMER-III コードの乱流による気泡分裂モデルとも定量的な比較が可能であると考えられる。但し、管内流であること、乱流変動速度V'の評価式の違いに注意する必要がある。

（3）加速による気泡分裂モデル

SIMMER-III コードで用いられている加速による気泡分裂モデルは、臨界ウェーバー数、分裂時定数ともに気相中の液滴分裂の経験値あるいは経験式に基づいており、気泡分裂に対する外挿性については注意が必要である。しかしながら、他に一般的なモデル式を提案した例はなく、また、鉛直管内気泡流解析において実験結果との良い一致を得ることに成功した Wu らのモデルでも、このメカニズムは考慮されていない。本ソース項については、気泡柱実験の解析などを通じて、他のソース項とのバランスも考慮した上で、その感度を確認しておく必要がある。

4. 結言

損傷炉心の熱流動現象の数値解析において、物理モデルの高度化が必要かつ有効な支配機構について検討し、以下の課題を実施した。

1) 多成分蒸発／凝縮モデルの開発： 多成分蒸気に含まれる非凝縮性ガスの蒸発／凝縮挙動に及ぼす影響を扱うための拡散律速モデルについて検討した。この結果、2成分系での蒸発／凝縮挙動に適用可能な物理モデルを開発し、サイクル機構で開発中の高速炉安全解析コードに組み込んだ。さらに、実験解析によって開発モデルの基本的な妥当性を検証した。

2) 相間界面積変化モデルの開発： 流動変化に伴う気泡や液滴の界面積変化の挙動に関する過去の実験データ、各種相関式等について広く文献をサーベイした。この結果、界面積濃度の対流方程式におけるソース項について、高速炉安全解析コードで用いられているモデル化手法の妥当性について検討し、今後のモデル改良の指針を得た。

平成11年度の成果に基づき、以下の課題を実施する。

1) 多成分蒸発／凝縮モデルの開発： これまで開発した2成分系での拡散律速型蒸発／凝縮モデルを多成分系にも適用化可能な一般化モデルとして拡張し、高速炉安全解析コードに組み込む。さらに、実験解析によって開発モデルの検証を実施する。

2) 相間界面積変化モデルの開発： これまで検討した流動変化に伴う界面積変化挙動のモデル化手法に基づき、実験解析等を通じて高速炉安全解析コードの改良を図る。一方、相変化に伴う気泡や液滴の界面積変化の挙動について、過去の実験データ、各種相関式等を広くサーベイすることで、ソース項のモデル化手法について検討を進める。

記号表

記号

a	単位体積当りの接触境界面積
A	表面積
c_p	比熱
d, D	直径
D_{kg}	混合ガス内を拡散する成分 k の拡散係数
D_{im}	実効拡散係数
e	比内部エネルギー
f	頻度
F	境界面上の気泡内部から働く力
Gr	グラスホフ数, $g\rho^2\beta\Delta T\ell^3/\mu^2$
h	熱伝達係数 (W/m^2/K)
i	バルクの比エンタルピ
i^I	境界面の比エンタルピ
k_k	物質伝達係数
ℓ	代表長さ
Le	ルイス数, Sc/Pr
m	質量
n	分散相数密度
n_k	成分 k の y 方向の質量流束, $\rho_k v_k$
Nu	ヌセルト数, $h\ell/\kappa$
N_μ	粘性数, $\mu_d^2/\rho_d D_{d,\infty}\sigma$
p	圧力 (Pa)
Pr	プラントル数, ν/α
q	熱移行率
$q_{A,B}$	界面から成分 A への熱移行率
q^I	境界面での正味の熱移行率
r	半径
R	境界面積に対する修正係数
Re	レイノルズ数, $\rho V\ell/\mu$
s	単位体積当りの分散相の粒子数のソース／シンク項
S	単位体積当りの分散相の界面積濃度のソース／シンク項
Sc	シュミット数, ν/D
Sh	シャーウッド数, $k\ell/\rho D$
t	時間
T	温度

v 質量平均移動速度
v_k 成分 k の y 方向の移動速度
W 分子量
We ウェーバー数，$\rho v^2 D/\sigma$

ギリシャ文字

α 体積率
β 熱伝達に関する膨張係数，$-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_{p,x_k}$
δ 気泡間の径方向膜厚さ
ε Lennard-Jones パラメータ
ε_c 単位質量当りの連続相のエネルギー消散率
η 粘性係数
κ 熱伝達係数
θ 物質伝達係数あるいは熱伝達係数に対する補正係数
μ 粘性係数
ρ 密度
$\overline{\rho}$ スミア密度
λ_{RT} Rayleigh-Taylor 不安定波長，$\sqrt{\sigma / g(\rho_c - \rho_d)}$
ς 物質伝達に関する膨張係数，$-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial x_k}\right)_{p,T}$
σ 拡散に対する Lennard-Jones 衝突半径あるいは表面張力
υ 比体積
ω_k 成分 k の質量分率，ρ_k/ρ_g
ψ 分散相の形に依存した係数（球形の場合=1/36π）
$\Delta\tau$ 時定数
Δx_k 濃度差
ΔT 温度差
Γ 単位体積当りの質量移行率
Γ^I 境界面における単位体積当りの質量移行率
Ω_D 拡散に対する衝突積分

添字

A, B エネルギー成分のラベル
br 分裂
c 連続相
cd 連続相と分散相との差

coal	合体
coll	衝突
con	飽和液体
crit	臨界
d	分散相
e	乱流渦
g, G	気体状態、蒸気側
h	熱伝達係数に対する値
i, I	接触界面
init	初期
M	分散相成分のラベル
k	成分のラベル
l	液体状態
lg	液膜側
mk	物質伝達係数に対する値
ng	相変化しない蒸気成分
o	凝縮側
p	確率
rel	相対
turb	乱流変動
Vap	飽和蒸気
w	壁側
∞	バルク値あるいは分裂後の安定な値
*	対流速度による物質輸送が無視できない場合

参考文献

[1] Sa. Kondo et al., "Status and Achievement of Assessment Program for SIMMER-III, A Multiphase, Multicomponent Code for LMFR Safety Analysis," Proc. 8th Int. Topical Mtg. on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-8), Vol. 3, pp. 1340-1348, Kyoto, Japan, Sept. 30-Oct. 3, 1997.

[2] W. R. Bohl, L.B. Luck, "SIMMER-II: A computer program for LMFBR disrupted core analysis," Los Alamos National Laboratory, LA-11415-MS, June 1990.

[3] R. B. Bird et al., Transport Phenomena, Wiley, New York, 1960.

[4] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, B. E. Poling, "The Properties of Gases and Liquids," McGraw-Hill, New York. 1988.

[5] P. D. Neufeld, A. R. Janzen, R. A. Aziz, "Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals $\Omega(l,s)^*$ for the Lennard-Jones (12-6) Potential," J. Chem. Physics, 57, 3, pp. 1100-1102, Aug. 1972.

[6] C. R. Wilke, "Diffusional Properties of Multicomponent Gases," Chem. Eng. Prog., 46, 2, pp. 95-104, Feb. 1950.

[7] A. J. Suo-Anttila, "Analysis of Multicomponent Condensation Experiments, in Nuclear Reactor Safety, Quarterly Progress Report, October 1-December 31, 1977," Los Alamos Scientific Laboratory, LA-7195-PR, Apr. 1978.

[8] V. K. Dhir, "Quasi-Steady Laminar Film Condensation of Steam on Copper Spheres," J. Heat Transfer, 347-351, Aug. 1975.

[9] J. P. Holman, Heat Transfer, McGraw-Hill, New York, 1981.

[10] Q. Wu, S. Kim, M. Ishii, S. G. Beus, "One-group Interfacial Area Transport in Vertical Bubbly Flow," Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 41, Nos. 8-9, pp. 1103-1112, 1998.

[11] J. R. Riznic, M. Ishii, "Bubble Number Density and Vapor Generation in Flashing Flow," Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 32, No. 10, pp. 1821-1833, 1989.

[12] V. N. Blinkov, O. C. Jones, B. I. Nigmatulin, "Nucleation and Flashing in Nozzles-2: Comparison with Experiments using a Five-Equation Model for Vapor Void Development," Int. J. Multiphase Flow, Vol. 19, No. 6, pp. 965-986, 1993.

[13] D. Wilhelm, "AFDM: An Advanced Fluid-Dynamics Model Volume II: Topologies, Flow Regimes, and Interfacial Areas," Los Alamos National Laboratory, LA-11692-MS, Vol. II, Sept. 1990.

[14] K. Morita, Sa. Kondo, Y. Tobita, D. J. Brear, "SIMMER-III Applications to Fuel-Coolant Interactions," Nucl. Eng. Des., Vol. 189, pp. 337-357, 1999.

[15] K. Morita, "Development of Heat and Mass Transfer Model for Multiphase, Multicomponent Flows in Reactor Safety Analysis," Doctor thesis, Kyushu Univ.,

1998.

[16] N. I. Kolev, "A Three-Field Model of Transient 3D Multiphase, Three-Component Flow for the Computer Code IV A3, Part 2: Models for the Interfacial Transport Phenomena. Code Validation," Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4949, Dec. 1991.

[17] N. I. Kolev, "The code IVA4: Nucleation and Flashing Model," Kerntechnik, Vol. 60, No. 4, 157-165, 1995.

[18] N. I. Kolev, "Fragmentation and Coalescence Dynamics in Multiphase Flows," Experimental Thermal and Fluid Science, Vol. 6, 211-251, 1993.

[19] A. Blahak, H. Städtke, "Modelling of Transport of Interfacial Area Concentration in Two-Phase Flow Systems," European Two-Phase Flow Group Mtg., Grenoble, France, June 3-5, 1996.

[20] H. Städtke, A. Blahak, B. Worth, "Modelling of Transport of Interfacial Area Concentration in Two-Phase Flow Systems," Proc. 8th Int. Topical Mtg. on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-8), Vol. 1, pp. 69-78, Kyoto, Japan, Sept. 30-Oct. 3, 1997.

[21] Q. Wu, M. Ishii, "One-Dimensional Model for Bubbly Sauter Mean Diameter Development in Vertical Air-Water Bubbly Flow," Proc. 8th Int. Topical Mtg. on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH-8), Vol. 1, pp. 101-108, Kyoto, Japan, Sept. 30-Oct. 3, 1997.

[22] W. J. Howarth, "Measurement of Coalescence Frequency in an Agitated Tank," AIChE J., Vol. 13, No. 5, pp. 1007-1013, 1967.

[23] W. Meusel, "Einfluss der Partikelkoaleszenz auf den Stroffübergang un turbulenten Gas-flüssing-Systemen," Ph. D. Thesis, Ingenieurhochschule Köthen, 1980.

[24] C. A. Coulaloglou, L. L. Tavlarides, "Description of Interaction Processes in Agitated Liquid-Liquid Dispersions," Chem. Eng. Sci., Vol. 32, pp. 1289-1279, 1977.

[25] M. Sevik, S. H. Park, "The Splitting of Drops and Bubbles by Turbulent Fluid Flow," J. Fluids Eng., Vol. 95, pp. 53-60, Mar. 1973.

[26] R. M. Thomas, "Bubble Coalescence in Turbulent Flows," Int. J. Multiphase Flow, Vol. 7, No. 6, pp. 709-717, 1981.

[27] M. J. Prince, H. W. Blanch, "Bubble Coalescence and Break-Up in Air-Sparged Bubble Columns," AIChE J., Vol, 36, No. 10, pp. 1485-1499, 1990.

[28] V. G. Levich, Physcicochemical Hydrodynamics, PrenticeHall, Englewood Clifs, NJ, 1962.

[29] T. G. Theofanous & J. Sullivan, "Turbulence in Two-Phase Dispersed Flows," J. Fluids

Mech., Vol. 116, pp. 343-362, 1982.

[30] J. O. Hinze, "Fundamentals of Hydrodynamic Mechanism of Splitting in Dispersion Processes," AIChE J, Vol. 1, No. 3, pp. 289-295, Sept. 1955.

[31] R. S. Brodkey, The phenomena of Fluid Motions, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1967.

[32] O. G. Engel, "Fragmentation of Water in the Zone behind of Air Shock," J, Res. Natl Bureau of Standard, Vol. 60, pp. 254-249, 1958.

Appendix Historian Correction sets

```
*ID MRA89
*/
*/ IMPROVEMENT OF DIFFUSION-LIMITED MODEL
*/ FOR BINARY MASS-TRANSFER SYSTEM
*/ (BY K. MORITA, KYUSHU UNIV.)
*/
*/ *** VCRFCT ***
*/
*D VCRFCT.2
      FUNCTION VCRFCT(M      ,N      ,WMA    ,WMB    ,PTOT   ,WBB
*D SG5D8.33
     *                ,XMTC   ,TSAT   ,HLGS
*D VCRFCT.5
*I VCRFCT.13
C            WMA    -  MOLECULAR WEIGHT OF CONDENSABLE GAS
C            WMB    -  MOLECULAR WEIGHT OF NON-CONDENSABLE GAS
*D VCRFCT.15,16
C            WBB    -  MASS FRACTION OF NON-CONDENSABLE GAS
C            XMTC   -  MASS-TRANSFER COEFFICIENT
*D VCRFCT.33,35
*D SG8K7.119
*D VCRFCT.40
*D SG5D8.37,42
      PSAI   = XPLMZ (M,N,TIK)
      PSAIDT = XPLMDZ(M,N,TIK)
C
      XAI    = MIN(ONE,MAX(SMALL,PSAI/PTOT))
      XBI    = MIN(ONE,MAX(SMALL,ONE-XAI))
      XWABI  = XAI*WMA+XBI*WMB
      WBI    = XBI*WMB/XWABI
      WBIDT  =-PSAIDT/PTOT*WMA*WMB/XWABI**2
C
      F      = (HTC1*(TIK-T1)+HTC2*(TIK-T2))/HLGS+XMTC*LOG(WBB/WBI)
      DF     = XH-XMTC*WBIDT/WBI
*/
*/ *** VCRFCT ***
*/
*D SG8K7.105
*D VCERGL.55,58
      ROG = ONE/SVGK(IJ,1)*XRGM(IJ,1)+ONE/SVGK(IJ,2)*XRGM(IJ,2)
     *     +ONE/SVGK(IJ,3)*XRGM(IJ,3)+ONE/SVGK(IJ,4)*XRGM(IJ,4)
      PTOT= PGM(IJ,1) + PGM(IJ,2) + PGM(IJ,3) + PGM(IJ,4)
*D VCERGL.63,67
       PNON = PGM(IJ,2) + PGM(IJ,3) + PGM(IJ,4)
       XAB  = PGM(IJ,1)/PTOT
       XBB  = PNON     /PTOT
       WMA  = WM(NG1,MG1)
       WMB  = ( PGM(IJ,2)*WM(NG2,MG2)+PGM(IJ,3)*WM(NG3,MG3)
     *          +PGM(IJ,4)*WM(NG4,MG4)                      )
     *         /MAX(SMALL,PNON)
       WBB  = XBB*WMB/(XAB*WMA+XBB*WMB)
       XCDF = ROG*DIFGE(IJ,1)
*D VCERGL.72,73
      IF( ART(IJ, 6).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,1,1)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,1))
*D VCERGL.75
*D SG5D8.13
*D VCERGL.77
     *       = VCRFCT(MG1        ,NG1          ,WMA         ,WMB
     *                ,PTOT      ,WBB
     *                ,XMTC      ,TSAT(IJ,1)   ,HLGS(IJ,1)
     *                ,HLMG(IJ,1),HGLM(IJ,1)   ,TLK(IJ,1)   ,TGK(IJ)
     *                )
*D VCERGL.81
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.88
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,2,1)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,2))
*D VCERGL.90
*D SG5D8.14
*D VCERGL.92
     *       = VCRFCT(MG1        ,NG1          ,WMA         ,WMB
     *                ,PTOT      ,WBB
     *                ,XMTC      ,TSAT(IJ,1)   ,HLGS(IJ,1)
     *                ,HLMG(IJ,2),HGLM(IJ,2)   ,TLK(IJ,2)   ,TGK(IJ)
     *                )
*D VCERGL.101
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,3,1)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,3))
*D VCERGL.103
*D SG5D8.15
*D VCERGL.105
     *       = VCRFCT(MG1        ,NG1          ,WMA         ,WMB
     *                ,PTOT      ,WBB
     *                ,XMTC      ,TSAT(IJ,1)   ,HLGS(IJ,1)
     *                ,HLMG(IJ,3),HGLM(IJ,3)   ,TLK(IJ,3)   ,TGK(IJ)
     *                )
*D VCERGL.121,122
      IF( ART(IJ,IFA).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,MP,1)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,MP))
*D VCERGL.124
*D SG5D8.16
*D VCERGL.126
     *       = VCRFCT(MG1        ,NG1          ,WMA         ,WMB
     *                ,PTOT      ,WBB
     *                ,XMTC      ,TSAT(IJ,1)   ,HLGS(IJ,1)
     *                ,HPT(IJ,M) ,HGLM(IJ,MP)  ,TLK(IJ,MP)  ,TGK(IJ)
```

```
     *                )
*D VCERGL.130
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.136,137
      IF( ASKR(IJ,7*M).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGS(IJ,1)/MAX(SMALL,DGS(IJ))
*D VCERGL.139
*D SG5D8.17
*D VCERGL.141
     *        = VCRFCT(MG1        ,NG1          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,1)   ,HLGS(IJ,1)
     *                 ,HK(IJ,M)  ,HGS(IJ)      ,TSK(IJ,K)   ,TGK(IJ)
     *                 )
*D VCERGL.145
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.166,170
*D SG5D8.18
       PNON = PGM(IJ,1) + PGM(IJ,3) + PGM(IJ,4)
       XAB  = PGM(IJ,2)/PTOT
       XBB  = PNON     /PTOT
       WMA  = WM(NG2,MG2)
       WMB  = ( PGM(IJ,1)*WM(NG1,MG1)+PGM(IJ,3)*WM(NG3,MG3)
     *          +PGM(IJ,4)*WM(NG4,MG4)                          )
     *         /MAX(SMALL,PNON)
       WBB  = XBB*WMB/(XAB*WMA+XBB*WMB)
       XCDF = ROG*DIFGE(IJ,2)
       RMIN = PGM(IJ,2)/PTOT
*D VCERGL.175,176
      IF( ART(IJ,11).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,2,2)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,2))
*D VCERGL.178
*D SG5D8.19
*D VCERGL.180
     *        = VCRFCT(MG2        ,NG2          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,2)   ,HLGS(IJ,2)
     *                 ,HLMG(IJ,2),HGLM(IJ,2)   ,TLK(IJ,2)   ,TGK(IJ)
     *                 )
*D VCERGL.184
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.191
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,3,2)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,3))
*D VCERGL.193
*D SG5D8.21
*D VCERGL.195
     *        = VCRFCT(MG2        ,NG2          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,2)   ,HLGS(IJ,2)
     *                 ,HLMG(IJ,3),HGLM(IJ,3)   ,TLK(IJ,3)   ,TGK(IJ)
     *                 )
*D VCERGL.211,212
      IF( ART(IJ,IFA).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,MP,2)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,MP))
*D VCERGL.214
*D SG5D8.22
*D VCERGL.216
     *        = VCRFCT(MG2        ,NG2          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,2)   ,HLGS(IJ,2)
     *                 ,HPT(IJ,M) ,HGLM(IJ,MP)  ,TLK(IJ,MP)  ,TGK(IJ)
     *                 )
*D VCERGL.220
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.226,227
      IF( ASKR(IJ,7*M).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGS(IJ,2)/MAX(SMALL,DGS(IJ))
*D VCERGL.229
*D SG5D8.24
*D VCERGL.231
     *        = VCRFCT(MG2        ,NG2          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,2)   ,HLGS(IJ,2)
     *                 ,HK(IJ,M)  ,HGS(IJ)      ,TSK(IJ,K)   ,TGK(IJ)
     *                 )
*D VCERGL.235
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.255,258
*D SG5D8.26
       PNON = PGM(IJ,1) + PGM(IJ,2) + PGM(IJ,4)
       XAB  = PGM(IJ,3)/PTOT
       XBB  = PNON     /PTOT
       WMA  = WM(NG3,MG3)
       WMB  = ( PGM(IJ,1)*WM(NG1,MG1)+PGM(IJ,2)*WM(NG2,MG2)
     *          +PGM(IJ,4)*WM(NG4,MG4)                          )
     *         /MAX(SMALL,PNON)
       WBB  = XBB*WMB/(XAB*WMA+XBB*WMB)
       XCDF = ROG*DIFGE(IJ,3)
       RMIN = PGM(IJ,3)/PTOT
*D VCERGL.263,264
      IF( ART(IJ,15).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,3,3)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,3))
*D VCERGL.266
*D SG5D8.27
*D VCERGL.268
     *        = VCRFCT(MG3        ,NG3          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,3)   ,HLGS(IJ,3)
     *                 ,HLMG(IJ,3),HGLM(IJ,3),TLK(IJ,3)   ,TGK(IJ)
```

```
     *                )
*D VCERGL.272
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.286,287
      IF( ART(IJ,IFA).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGLM(IJ,MP,3)/MAX(SMALL,DGLM(IJ,MP))
*D VCERGL.289
*D SG5D8.29
*D VCERGL.291
     *        = VCRFCT(MG3        ,NG3          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,3)   ,HLGS(IJ,3)
     *                 ,HPT(IJ,M) ,HGLM(IJ,MP)  ,TLK(IJ,MP)  ,TGK(IJ)
     *                 )
*D VCERGL.295
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*D VCERGL.301,302
      IF( ASKR(IJ,7*M).GT.ZERO .AND. WBB.GT.ZERO ) THEN
       XMTC = XCDF*SGS(IJ,3)/MAX(SMALL,DGS(IJ))
*D VCERGL.304
*D SG5D8.31
*D VCERGL.306
     *        = VCRFCT(MG3        ,NG3          ,WMA         ,WMB
     *                 ,PTOT      ,WBB
     *                 ,XMTC      ,TSAT(IJ,3)   ,HLGS(IJ,3)
     *                 ,HK(IJ,M)  ,HGS(IJ)      ,TSK(IJ,K)    ,TGK(IJ)
     *                 )
*D VCERGL.310
      ELSE IF( WBB.LE.ZERO ) THEN
*/
*/ *** THEPHY ***
*/
*D SG996.73,74
        CGT = CG1 + CG2 + CG3 + CG4
*D SG996.76,80
        DENO1 = (CG2/BDC12+CG3/BDC13+CG4/BDC14)/CGT
        DENO2 = (CG1/BDC12+CG3/BDC23+CG4/BDC24)/CGT
        DENO3 = (CG1/BDC13+CG2/BDC23+CG4/BDC34)/CGT
        DIFGE(N,1) = (ONE-CG1/CGT)/DENO1
        DIFGE(N,2) = (ONE-CG2/CGT)/DENO2
        DIFGE(N,3) = (ONE-CG3/CGT)/DENO3
```