論 文

3次元格子ガスオートマトン法を用いた高温粒子表面上の 蒸気膜崩壊挙動に関する数値シミュレーション

栃尾 大輔^{1,*}, 阿部 豊², 松隈 洋介³

Numerical Simulation of Vapor Film Collapse Behavior on High-Temperature Droplet Surface with Three-Dimensional Lattice Gas Cellular Automata

Daisuke TOCHIO^{1,*}, Yutaka ABE² and Yosuke MATSUKUMA³

¹Oarai Research and Development Center, Japan Atomic Energy Agency, 4002 Narita-cho, Oarai-machi, Higashi-ibaraki-gun, Ibaraki 311-1394, Japan

²Institute of Engineering Mechanics and Systems, Univ. of Tsukuba, 1-1-1 Tennoudai, Tsukuba-shi, Ibaraki 305-8572, Japan

³Faculty of Engineering, Kyushu Univ., 6-10-1 Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka 812-8581, Japan

(Received February 5, 2008 and accepted in revised form May 9, 2008)

It is pointed out that a vapor film on a premixed high-temperature droplet surface is needed to be collapsed to trigger vapor explosion. Thus, it is important to clarify the micromechanism of vapor film collapse behavior for the occurrence of vapor explosion. In a previous study, it is suggested experimentally that vapor film collapse behavior is dominated by phase change phenomena rather than by the surrounding fluid motion. In the present study, vapor film collapse behavior is investigated to clarify the dominant factor of vapor film collapse behavior with lattice gas automata of three-dimensional immiscible lattice gas model (3-D ILG model). First, in order to represent the boiling and phase change phenomena, the thermal model of a heat wall model and a phase change model is newly constructed. Next, the numerical simulation of vapor film collapse behavior is performed with and without the phase change effect. As a result, the computational result with the phase change effect is observed to be almost same as the experimental result. It can be considered that vapor film collapse behavior is dominated by phase change phenomena.

KEYWORDS: vapor film collapse behavior, lattice gas automata method, three-dimensional model, boiling model, phase change model

I. 緒 言

現在, 様々な工業プラント, または火山噴火のような自然環境において蒸気爆発によるものと思われる大規模な事故, 災害が発生している。また, 軽水炉やナトリウム炉のシビアアクシデント時に炉心が熔融した場合, 水-熔融燃料による相互作用により蒸気爆発が発生する可能性が示唆されている。このため, 蒸気爆発の発生条件および発生機構などを明らかにすることが極めて重要となっている。

過去の研究において, 蒸気爆発の発生には粗混合した高温粒子表面上の蒸気膜の崩壊が必要とされている。すなわち, 蒸気膜の崩壊挙動の有無によって蒸気爆発の発生が決定付けられ, 蒸気膜の微視的な崩壊挙動を調べることで,

蒸気爆発の発生条件やそのメカニズムを明らかにできると考えられる¹⁾。

前報の実験²⁾より得られた結果より, 圧力パルスが到達した時刻において界面温度以下であった飽和温度が上昇し, 圧力パルス通過後に再び界面温度以下に降下することが示された。すなわち, 界面近傍において凝縮が起きており, 蒸気膜の崩壊現象は凝縮に起因する現象である可能性が実験的に示唆されている。この実験結果を受けて, 蒸気膜の崩壊挙動に関して支配的となる要因をさらに詳細に調べるために, 近年急速に発達した計算機を用いた蒸気膜の崩壊挙動に関する数値シミュレーションを行うこととした。しかしながら, 従来行われている平均化された物理変数を用いた多流体モデルコードでは, 蒸気膜の崩壊挙動のような短時間で界面が複雑に変動する微視的な現象を記述し, それを解析的に解くことは非常に困難である。

そこで本研究では, 流体力学と分子動力学の中間スケールで流動を解析する手法の1つとして提唱されている格

¹ ㈱日本原子力研究開発機構 大洗研究開発センター

² 筑波大学 機能工学系

³ 九州大学大学院 工学研究院

* Corresponding author, E-mail: tochio.daisuke@jaea.go.jp

子ガスオートマトン法³⁻⁶⁾に着目した。格子ガスオートマトン法には単成分流体を扱う FHP モデルと 2 成分混合流体の分離を扱う ILG モデルがある。格子ガスオートマトン法では流体を粒子の集合体とみなし、その粒子の運動を解くため、従来多流体モデルコードでは困難であった複雑な界面の挙動を表現することが可能である。

本研究では、松隈ら^{7,8)}および筆者ら⁹⁾が提案した 3 次元 15 速度 ILG モデルを用いて蒸気膜の崩壊挙動の解析を行うこととした。従来の格子ガスオートマトン法を用いた研究では流動を解析するモデルが提唱されているが、このモデルでは蒸気膜の崩壊挙動のような伝熱・相変化現象を伴う現象を再現するのは不可能であると考えられる。そこで、本研究では 3 次元体系の格子ガスオートマトン法をもとに新たに伝熱・相変化モデルを構築し、それらのモデルが現象を再現しているかどうかの検討を行うとともに蒸気膜の崩壊挙動に関する解析を行うこととした。

II. 3 次元格子ガスオートマトン法

1. 3 次元 15 速度モデル

格子ガスオートマトン法は 2 次元の流れを模擬する FHP モデルを基本モデルとして様々な拡張がなされている。このモデルは空間を三角格子で離散化し、その上を単位質量をもつ複数の粒子が単位速度で移動する。i 方向の粒子の存在は Bool 変数 $n_i(\mathbf{x}, t)$ で記述される。粒子の衝突と並進を繰り返すことにより系は時間進展してゆく。この衝突と並進の過程を 1 サイクルと呼ぶ。これら運動している粒子を統計処理することにより FHP モデルは巨視的に質量保存式と Navier-Stokes 方程式を満足することが知られている。

松隈らはこのモデルを 3 次元へと拡張し、立方体の形状をした 3 次元 15 速度モデル(以下、「3D15V」という。)を提唱した⁷⁾。Figure 1 に 3D15V モデルの格子の構造を示す。本モデルは立方体を 1 格子とし、立方体の中心より各面の面心へ向かう長さ 1 のリンク 6 本と、立方体の中心から角に向かう長さ $\sqrt{3}$ のリンク 8 本を有している。このリンク上を単位質量をもつ粒子が移動するものとする。このため、提案したモデルは静止粒子を含めて 15 種類の速度となる。

2. 3 次元 15 速度 ILG モデル

格子ガスオートマトン法では、2 次元で単成分の流体を扱う FHP モデルがある。このモデルを 2 成分流体を扱うように拡張したモデルが ILG モデルである。Figure 2 に ILG モデルにおける粒子の衝突の一例を示す。このモデルでは粒子に黒と白の色付けを行う。ILG モデルでは、始めに粒子の質量、運動量および運動エネルギーを保存するように粒子を衝突させる。その後、黒粒子は周囲の格子点で黒粒子の割合が一番多い格子(図中、黒菱形で示した方向)へ、また白粒子は周囲の格子点で白粒子の割合

Fig. 1 Lattice geometry for 3-D 15-velocity model

Fig. 2 Typical collision rule for ILG model

Fig. 3 Heat wall model

が一番多い格子(図中、白菱形で示した方向)へと向かわせる。このような衝突則を設定することにより混ざり合わない 2 成分流体を表現するモデルである。松隈ら⁷⁾および筆者ら⁹⁾はこの ILG モデルを 3D15V LGA モデルに適用し、3D15V ILG モデルを提唱している。

III. 伝熱・相変化モデル

3 次元格子ガスオートマトン法で熱的な効果を再現するために、伝熱・相変化モデルを構築することとした。伝熱・相変化モデルには 3D15V ILG モデルを応用することとした。本モデルでは水と蒸気の 2 成分を扱うこととし、白粒子を蒸気成分、黒粒子を水成分と見立てることとし、相変化現象は粒子の色を変化させることで模擬した。

1. 加熱壁モデル

Figure 3 に加熱壁条件の概要図を示す。加熱壁を設定した境界に黒粒子が到達した場合、ある確率で黒粒子(水成分)を白粒子(蒸気成分)へと変化させる。その後、到来した方向に向けてバウンスバックさせる。このようにすることによって、壁面での相変化を表現することとした。

2. 重力効果モデル

白粒子(蒸気成分)と黒粒子(水成分)の比重差を表現するために、松隈らによって提唱されたモデル¹⁰⁾をもとに、重力効果を表現するモデルを構築した。**Figure 4**に重力効果モデルの概要図を示す。重力効果は黒粒子のみに与えることとする。衝突則に従って衝突させた後に、斜め上方向の速度をもつ黒粒子が存在する場合、この黒粒子をある確率 g で斜め下方向に変化させる。このようにすることによって、黒粒子と白粒子の比重差を表現することとした。

3. 相変化モデル

流体内での蒸気と水の相変化現象を再現するために相変化モデルを構築した。**Figure 5**に相変化モデルの概要図を示す。**Figure 5(a)**は圧力—温度曲線の概略図を示している。縦軸は温度、横軸は圧力を示している。図中の曲線は飽和温度を示している。実現象では、飽和曲線以上の領域では蒸発現象が起こりやすい状態となり、飽和曲線以下

Fig. 4 Gravity effect model

(a) Pressure-Temperature diagram

(b) Vaporization model

(c) Condensation model

Fig. 5 Phase change model

の領域であれば凝縮現象が起こりやすい状態となる。そこで、この現象をモデル化することとした。

まず始めに、次式により格子点における圧力 P と温度 T を算出する。

$$P = \sum_{i=1}^{15} n_i(\mathbf{x}, t) \cdot |\mathbf{c}_i|^2 \quad (1)$$

$$T = C \cdot \frac{\sum_{i=1}^{15} n_i(\mathbf{x}, t) \cdot |\mathbf{c}_i|^2}{\sum_{i=1}^{15} n_i(\mathbf{x}, t)} \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{c}_i$ は i 方向に対する速度ベクトルであり、 C は扱う流体によって定まる定数である。本論文で扱う計算では $C=1$ と設定した。評価した点が蒸発領域内に存在する場合には **Fig. 5(b)** に示す蒸発モデルを適用することとする。これに対して、評価した点が凝縮領域内に存在する場合には **Fig. 5(c)** に示す凝縮モデルを適用することとする。

Figure 5(b) に示す蒸発モデルは、ある格子点において白粒子の数が黒粒子の数より多い場合には、ある確率 θ_v ですべての粒子を白粒子に変化させるモデルである。これに対し、**Fig. 5(c)** に示す凝縮モデルは、ある格子点において黒粒子の数が白粒子の数より多い場合には、ある確率 θ_c ですべての粒子を黒粒子に変化させるモデルである。

4. 沸騰現象の解析による伝熱・相変化モデルの検証

新たに構築した伝熱・相変化モデルが、蒸発・凝縮現象をどの程度再現できるかの検討を行うために、高温金属球周りの沸騰現象に関する数値計算を行うこととした。

Figure 6 に計算体系を示す。計算領域は x, y, z 方向に $64 \times 64 \times 192$ 格子と設定し、 $z=32$ の位置に高温球を模擬した加熱壁を有する固体球(半径5)を配置した。上下および側面の境界は滑りなし壁と設定した。

Fig. 6 Computational domain for boiling phenomena

Table 1 Computational condition for boiling phenomena

Condition	Parameter	Value	
		(a)	(b)
Particle number density	d_L	0.5	←
Heat wall effect	ε	1.0	←
Gravity effect	g	0.01	←
Phase change effect			
(Vaporization)	θ_V	0	←
(Condensation)	θ_C	0	0.1

Table 2 Computational condition for vapor film collapse behavior

Condition	Parameter	Value	
		(a)	(b)
Particle number density			
(Lower pressure region)	d_L	0.5	←
(Higher pressure region)	d_H	0.95	←
Heat wall effect	ε	—	1.0
Gravity effect	g	0.01	←
Phase change effect			
(Vaporization)	θ_V	—	0
(Condensation)	θ_C	—	0.1

また、**Table 1**に本解析の計算条件を示す。(a)は壁伝熱の効果のみを考慮した場合の計算であり、(b)は壁伝熱および凝縮の効果を検討した場合の計算である。

Figure 7に沸騰現象に関する計算結果を示す。この図において、灰色の球は加熱壁を有する固体球を表わしている。また、黒の面は蒸気・水成分の割合が等しくなる等値面を示している。

Figure 7(a)は壁伝熱のみを考慮した場合の沸騰現象に関する計算結果を示している。時間の進展とともに固体球表面上に蒸気成分が生成し始め、蒸気成分が固体球表面全体を覆う様子が示された。そして、蒸気成分が上方へと伸張し、気泡が離脱・上昇する様子が再現された。

Figure 7(b)は壁伝熱および凝縮効果を検討した場合の沸騰現象に関する計算結果を示している。時間の進展とともに固体球表面上に蒸気成分が生成し始め、蒸気成分が固体球表面全体を覆う様子が示された。しかしながら、本計算では時間の更なる進展とともに蒸気成分が重力効果によって上方へと伸張して気泡が離脱・上昇する様子はみられなかった。

また、新たに開発した伝熱・相変化モデルが実現象における圧力-温度曲線と同様の変化を示しているかを確認するために数値実験を行った。計算体系はFig. 6と同じ体系であり、計算条件は、Table 1(b)と同じく設定した。

Figure 8に計算結果を示す。縦軸は温度、横軸は圧力を示している。また図中の灰色丸印は蒸発が生じた点、黒三角印は凝縮が生じた点を示し、図中の曲線は飽和曲線を

Fig. 7 Computational result of boiling phenomena **Fig. 8** Numerical result of pressure-temperature diagram

示している。この図より、Fig. 5と同様に飽和曲線以上では蒸発現象が生じており、飽和曲線以下では凝縮が生じていることが確認できた。

これらの結果より、本研究で構築した伝熱・相変化モデルを用いて沸騰現象を定性的に再現することができた。また、凝縮の効果も定性的に再現することができた。すなわち、新たに開発した伝熱・相変化モデルは沸騰・凝縮現象

を再現するのに有効なツールとなり得ることが示された。なお、本解析で設定した確率は暫定的に定めたものであり、その妥当性については今後更なる検討が必要であるが、実験等で観測された現象¹⁾を定性的に再現できることが確認できたため、以降の解析では、これらの値を用いることとする。

IV. 3次元伝熱・相変化格子ガスオートマトン法を用いた蒸気膜の崩壊挙動に関する解析

1. 本解析の概要

本章では、蒸気膜の崩壊挙動に支配的となる要因を調べるために、蒸気膜の崩壊挙動に関する数値計算を行うこととした。数値計算では、1)流動のみを考慮した場合の計算および2)流動、相変化を考慮した場合の計算を行った。本解析では、始めに高温の鋼球を模擬した固体球と蒸気膜を模擬した蒸気成分の膜からなるターゲットを領域内に配置し、それに圧力パルス当てて蒸気成分の挙動を観察することとする。なお、本論文で扱う、ある方向への強い圧力波と流れが生じる場合の計算については、過去に松隈ら⁷⁾が実施しており、圧力波を再現できることを定性的に確認している。

Figure 9に本計算で設定した計算領域の概要図を示す。計算領域はx, y, z方向に64×64×256格子と設定した。z=96の位置に高温球を模擬した加熱壁を有する固体球(半径18)を配置し、その周囲に厚さ4の蒸気成分の膜を配置した。上側の境界は流出境界、下側の境界は滑りなし壁と設定し、側面の壁は滑りなし壁と設定した。

計算領域の下部分は高圧領域を模擬しており、上部分は低圧領域を模擬している。領域内を水成分(黒粒子)で

Fig. 9 Computational domain for vapor film collapse

満たしたのちに、蒸気成分(白粒子)と固体球からなるターゲットは低圧領域の下方に配置した。なお、初期の粒子数密度は高圧領域で $d_0=0.95$ 、低圧領域で $d_0=0.5$ と設定した。高圧領域と低圧領域は隔壁で区切られており、所定の時刻にこの隔壁を移動させることで圧力波がz方向の正方向に伝播して行く。

2. 流動のみを考慮した場合の解析結果

始めに、流動のみを考慮したモデルを用いて数値解析を行った。Figure 10に計算結果を示す。Figure 10の上側のグラフは、固体球中心と同じ高さの側壁における圧力の時間変化を示している。縦軸は圧力を示しており、横軸はサイクルを示している。Figure 10の下側の図は、固体球近傍における蒸気成分の挙動を示している。この図では蒸気成分の挙動を詳細に観察するために固体球近傍の領域を抜き出している。図中に示されている黒の面は、蒸気・水成分の割合が同じとなる等値面(界面)を示している。図の下側の記号A~FはFig. 10のグラフ中の記号A~Fに対応している。

圧力パルスが到来する以前の時刻Aにおいては、固体球上に球形の蒸気成分の膜が形成されており、圧力パルスのピークが到達した時刻Cにおいて、蒸気成分は鋼球表面より剥離し始め、下流側に蒸気成分が移動している様子がみられた。圧力パルスのピークが通過した時刻Eでは、蒸気成分が下流側に引き伸ばされている様子がみられ

Fig. 10 Computational result of vapor film collapse with pressure pulse (flow effect only)

た。

この結果と実験より得られた結果を比較すると、圧力波が到来したときに蒸気膜が収縮する実験結果より得られた可視観測結果とは定性的に異なることが示された。

3. 流動および伝熱・相変化を考慮した場合の解析結果

次に、流動および伝熱・相変化の効果を考慮したモデルを用いて、数値解析を行った。**Figure 11** に計算結果を示す。この計算では安定な蒸気膜を形成させるために、計算開始後500サイクルに低圧領域と高圧領域を隔てている隔壁を取り除くこととした。

Figure 11 の上側のグラフは、固体球中心と同じ高さの側壁における圧力の時間変化および固体球表面上における蒸気成分の膜厚の時間変化を示している。蒸気成分の膜厚は、計算結果より得られた画像の固体球の下半分における部分より評価した。縦軸はそれぞれ圧力および膜厚を示しており、横軸はサイクルを示している。図中の黒線は圧力の時間変化を示し、灰色線は膜厚の時間変化を示す。

Figure 11 の下側の図は、固体球近傍における蒸気成分の挙動を示している。この図では蒸気成分の挙動を詳細に観察するために固体球近傍の領域を抜き出している。図中に示されている黒の面は、蒸気・水成分の割合が同じとなる等値面(界面)を示している。図の下の記事 A~F は上のグラフ中の記号 A~F に対応している。

Fig. 11 Computational result of vapor film collapse with pressure pulse (flow and phase change)

圧力パルスが到来する以前の時刻 A においては固体球表面上において球形の膜が観測された。圧力パルス到来したときには、流体圧力の上昇により凝縮が発生して膜厚が減少し始め、圧力パルスのピークが到達した時刻 D には膜厚が最小値となることが示された。圧力パルス通過後は、流体圧力の降下に伴い沸騰現象が発生して膜が膨張し、膜厚が圧力パルス到達前の状態に回復することが示された。

この結果と実験より得られた結果を比較すると、解析結果は圧力波が到来したときに蒸気膜が収縮するという実験結果と定性的に一致する挙動となった。

以上の解析結果より、流動のみを考慮した場合の解析結果は実験結果と定性的に異なっていたが、流動および相変化を考慮した場合の解析結果は実験結果と定性的に一致する結果となった。このことは、蒸気膜の崩壊挙動は周囲流体の流動よりむしろ流体の相変化現象に支配される現象である可能性がより明確に示された。

V. 結 言

本研究では、蒸気膜の崩壊挙動を再現するために 3 次元格子ガスオートマトン法を用いることとした。また、伝熱・相変化現象を格子ガスオートマトン法で表現するために本研究で新たに壁伝熱、重力効果、相変化モデルを構築した。

始めに、沸騰現象に関する数値計算を行い、新たに開発した伝熱・相変化モデルの沸騰現象への適用性を検証した結果、本モデルは沸騰・凝縮現象を再現するのに有効なツールとなり得ることが示された。

次に、新たに開発した 3 次元伝熱・相変化格子ガスオートマトン法を用いて、圧力パルスによって蒸気膜を強制的に崩壊させたときの蒸気膜の崩壊挙動に関する数値計算を行った。

その結果、流動のみを考慮した場合には、固体球上の膜は剥離する様子が示され、下流側へと伸長する様子が示されたが、実験結果と比較すると、実験結果と定性的に異なることが示された。

一方、流動および相変化を考慮した場合には、圧力パルスの到来とともに膜は収縮し、圧力パルス通過後は膜が膨張する様子が示された。実験結果と比較を行うと、この解析結果は実験結果と定性的にはほぼ一致することが示された。

以上、本研究で得られた解析結果および実験結果を総合すると、圧力パルスを用いて蒸気膜を強制的に崩壊させた場合の蒸気膜の崩壊挙動は周囲流体の流動より流体の相変化が支配的となる可能性があることが明確に示された。

— 参考文献 —

- 1) 阿部ら, “高温粒子表面上の蒸気膜崩壊に関する研究(第2報 微視的崩壊挙動に及ぼすサブクーリングの影響),” 日本機械学会論文集 B 編, **66**[642], 633–639 (2000).
 - 2) 阿部ら, “高温粒子表面上の蒸気膜崩壊時における微視的界面挙動に関する研究,” 日本原子力学会和文誌(投稿中).
 - 3) U. Frish *et al.*, “Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations,” *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 1505–1508 (1986).
 - 4) U. Frish *et al.*, “Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions,” *Complex Systems*, **1**, 649–707 (1987).
 - 5) D. H. Rothman, M. Keller, “Immiscible cellular-automaton fluids,” *J. Stat. Phys.*, **52**, 1119–1127 (1988).
 - 6) D. H. Rothman, *Lattice-Gas Cellular Automata*, Cambridge University Press (1997).
 - 7) 松隈ら, “3次元格子ガスオートマトン法による液滴微粒化の数値計算,” 日本機械学会論文集 B 編, **67**[659], 1654–1661 (2001).
 - 8) 松隈ら, “格子ガスオートマトン法による二成分流体の凝集・分離の数値計算,” 日本機械学会論文集 B 編, **66**[652], 3049–3055 (2000).
 - 9) 析尾ら, “3次元格子ガスオートマトン法を用いた高空孔率多孔性固体の流動特性解析,” 日本機械学会論文集 B 編, **68**[666], 35–40 (2002).
 - 10) 松隈ら, “格子ガスオートマトン法による複雑形状流路内の自然対流解析,” 日本機械学会論文集 B 編, **67**[654], 313–320 (2001).
-