

格子ボルツマン法による溶融ジェットの微粒化シミュレーション

課題責任者
阿部 豊

筑波大学 システム情報系

著者
齋藤 慎平

筑波大学大学院 システム情報工学研究科

原子炉施設において炉心溶融を伴う過酷事故が発生した場合、溶融燃料が噴流状に流下する可能性がある。この溶融物噴流の微粒化メカニズムを明らかにすることは、最終的な冷却性の評価のために極めて重要である。本研究では、格子ボルツマン法を用いて液液二相噴流のモデリングを行い、シミュレーションを行った。定式化を行うにあたり、Color-gradient 格子ボルツマンモデルをベースとし、中央モーメントに基づく衝突演算を導入することで、Reynolds 数について $O(10^6)$ においても数値的安定性が保たれることを確認した。本手法を用い、既存の低融点合金-水系の実験や、 UO_2 -Na 系の実験の条件を与えた溶融ジェット流動シミュレーションを実施し、妥当性の確認および実機相当条件での流動様相の予測を行った。

キーワード：格子ボルツマン法，中央モーメント，Color-gradient モデル，混相流

1. 緒言

原子力施設において、炉心溶融を伴う過酷事故が生じた際に発生する溶融物と冷却材間の相互作用は極めて複雑である。溶融物は噴流として冷却材中を流下する可能性があり、その微粒化に至る挙動を明らかにすることは、最終的な溶融物の冷却性を評価する上で重要である。著者らはこれまでに、噴流崩壊現象の素過程に着目した実験として、溶融物を水中に放出する実験[1]や等温の液液二相系における可視化計測[2]を実施してきた。これらの実験を通して、微粒化メカニズムの解明に関する重要な知見が得られている一方、実験における模擬物質の制約等から、界面張力などの物性値をパラメトリックに扱うことは困難である。また、想定される実機相当条件では、実験の実施自体が困難という問題もある。

本研究では、数値解析的アプローチにより溶融ジェットの微粒化現象をモデリングし現象のメカニズム解明を目指すべく、格子ボルツマン法（LBM: Lattice Boltzmann Method）に基づく方法論を構築し、これを用いて数値シミュレーションを行った。

2. 格子ボルツマン法

数値流体解析手法の一つである LBM は、格子点上で衝突と並進の繰り返しで流体のふるまいを表現する。アルゴリズムは簡潔かつメモリアクセスは局所的であり、完全陽解法という特徴も含めて大規模な計算に適した流体解析法であるといえる。

二相系に対する LBM モデルは、導出の過程やモデルの前提によって大別でき、たとえば、Color-gradient, Pseudopotential, Free-energy, Phase-field のように分類できる[3]。本研究では微小な液滴や気泡に対する保存性に優れた Color-gradient モデルをベースとして計算モデルを構築した。解くべき式は、以下に示す粒子分布関数 f_i^k の時間発展方程式である。

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i^k(\mathbf{x}, t) = \Omega_i^k \quad (1)$$

ここで、式 (1) の右辺は衝突演算子であり、以下に示す 3 つの副演算子に分割される。

$$\Omega_i^k = (\Omega_i^k)^{(3)} [(\Omega_i^k)^{(1)} + (\Omega_i^k)^{(2)}] \quad (2)$$

添え字 i は粒子の移動方向を表し、添え字 k ($= r$ or b) は仮想的な流体の色を表す。LBM においてしばしば問題となる「低粘性（高 Reynolds 数）の流れにおける数値不安定」を克服すべく、本研究では衝突項 $(\Omega_i^k)^{(1)}$ に対して中央モーメントに基づく定式化を行っている。これにより、Reynolds 数のオーダーが $O(10^6)$ という条件においても、本研究で対象とする溶融ジェットの微粒化現象を安定に解析でき、素モーメントに基づく著者らの従来モデル[4]よりも大幅に計算安定性が向上していることを確認している。

計算アルゴリズムの詳細については、文献[5]を参照されたい。計算コードは Fortran で記述されており、MPI によるプロセス並列が実装されている。MPI による通信は、勾配演算および粒子分布関数の並進演算でのみ発生する。

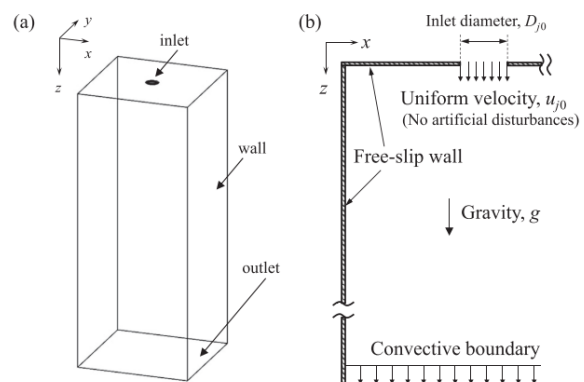


図1 本計算で用いた境界条件

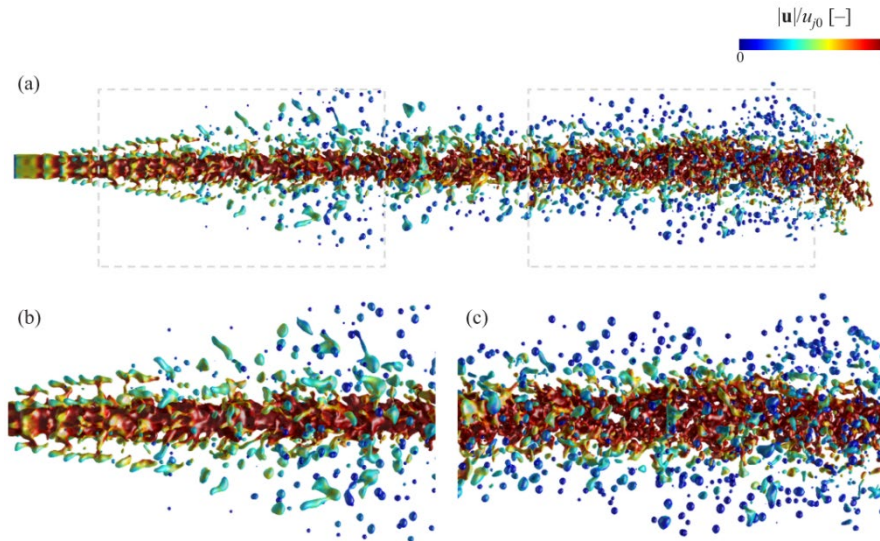


図2 低融点合金-水系のシミュレーション結果例

3. 結果

図1に示す境界条件を用い、熔融ジェットの流れシミュレーションを行った。低融点合金を水中に放出した実験[6]と同様のパラメータを与えたシミュレーションを行った。図2に、シミュレーション結果の一例を示す。当該条件での Reynolds 数は 1.1×10^5 である。計算の結果得られた界面に対し、速度の絶対値をカラーマップで示している。図より、界面が不安定化して微細な液滴が生成している様子が示されている。本結果を、実験で取得された可視像と比較したのが図3である。ジェットの侵入開始直後から、微粒化に至る後半の過程まで、シミュレーション結果は実験をよく再現できていると判断できる。

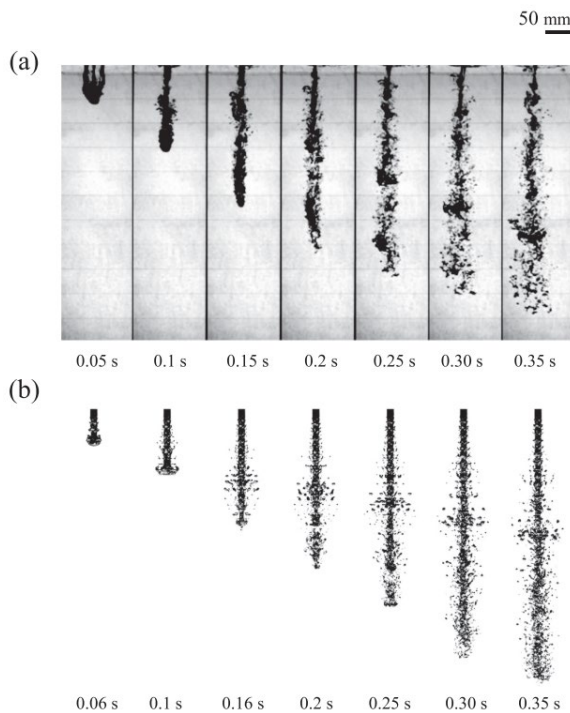


図3 実験で取得した可視像とシミュレーションの比較

ジェットの到達距離および生成する液滴サイズについて定量比較を行い、それぞれ最大で、32%および40%以内の確度で実験値を予測できることを確認している。

JRC-Ispra 研究所で実施された、FARO-TERMOS と呼ばれる試験[7]のうち、T1 と呼ばれる試験のパラメータを与えたシミュレーションを実施した結果を図4に示す。当該条件での Reynolds 数は 1.1×10^6 である。本試験では、熔融した UO_2 を液体ナトリウム中に放出している。ナトリウムは不透明であるため、熔融ジェットの可視化データは取得されていないが、試験部の底に堆積したデブリは高々数百 μm と微粒であったことが報告されている。図4より、本シミュレーションの結果は、当該条件での熔融ジェットにおいて非常に微細な液滴が、いたるところから数多く発生していることを示している。本結果は、実験の結果観測されたデブリが微細であったという事実と整合するものである。また、著者ら液液二相系での実験を基に構築した流動予測線図[2]による予測結果である Atomization regime の特徴も現れている。

以上のように、本シミュレーションにより、複雑性のために結果の解釈が難しかった実験結果に対して、その微粒化メカニズムに二相間の流体的相互作用は重要である

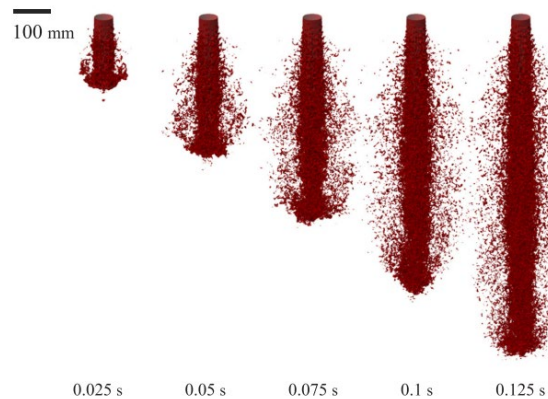


図4 UO_2 -Na 系のシミュレーション結果

という数値的な解釈を与えるとともに、液液二相系でのモデル実験に基づく流動予測の妥当性も併せて示されたものといえる。

4. 結言

本研究では、微小液滴の捕獲性に優れた Color-gradient LBM モデルに基づき、高 Reynolds 数流れに対応するために中央モーメントに基づき定式化した。本手法を用い、既存の低融点合金-水系の実験や、 $\text{UO}_2\text{-Na}$ 系の実験の条件を与えた溶融ジェット流動シミュレーションを実施し、妥当性の確認および実機相当条件での流動様相の予測を行った。本シミュレーションにより、複雑性のために結果の解釈が難しかった実験結果に対して、その微粒化メカニズムに二相間の流体的相互作用は重要であるという数値的な解釈を与えるとともに、液液二相系でのモデル実験に基づく流動予測の妥当性も併せて示された。一方で、本シミュレーションは熱的な相互作用（温度による粘性変化や溶融物の凝固、あるいは冷却材の沸騰）は考慮されていない。このような点は今後の課題として残された点である。これに対して著者らは、上述した溶融ジェットの流動シミュレーションに加えて、溶融ジェットから生成した単一の微粒化物を想定した粒子周りの沸騰熱伝達（相変化を伴う流れ）という素過程のシミュレーションの検討も行っている[8]。

最近の研究[9]では、LBM における種々の衝突項モデルに関して、単なる数値的な安定化といった観点ではなく、理論解析に基づき物理的解釈が与えられている。元々計算効率の観点で優位ということもあり、従来の CFD 手法では適用が困難であった大規模あるいは複雑な系への LBM の応用がますます進んでいくものと考えられる。

謝辞

本研究は、JSPS 科研費 16J02077 の助成を受けたものである。

文献

- [1] Y. Abe, E. Matsuo, T. Arai, H. Nariai, K. Chitose, K. Koyama, and K. Itoh, “[Fragmentation behavior during molten material and coolant interactions](#),” Nucl. Eng. Des. 236(14–16), 1668–1681 (2006).
- [2] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, “[Flow transition criteria of a liquid jet into a liquid pool](#),” Nucl. Eng. Des. 315, 128–143 (2017).
- [3] H. Liu, Q. Kang, C. R. Leonardi, S. Schmieschek, A. Narváez, B. D. Jones, J. R. Williams, A. J. Valocchi, and J. Harting, “[Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications](#),” Comput. Geosci. 20(4), 777–805 (2016).
- [4] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, “[Lattice Boltzmann modeling and simulation of liquid jet breakup](#),” Phys. Rev. E 96(1), 013317 (2017).
- [5] S. Saito, A. De Rosis, A. Festuccia, A. Kaneko, Y. Abe, K. Koyama, “[Color-gradient lattice Boltzmann model with nonorthogonal central moments: Hydrodynamic melt-jet breakup simulations](#),” Phys. Rev. E 98(1), 013305 (2018).
- [6] 松尾英治, “ナトリウム冷却高速炉における溶融炉心冷却性に関する研究”, 筑波大学博士論文 (2013).
- [7] D. Magallon, H. Hohmann, H. Schins, “[Pouring of 100-kg-Scale Molten UO₂ into Sodium](#),” Nucl. Technol. 98, 79–90 (1992).
- [8] S. Saito, A. De Rosis, L. Fei, K.H. Luo, K. Ebihara, A. Kaneko, Y. Abe, K. Koyama, “[Lattice Boltzmann modeling and simulation of forced-convection boiling on a cylinder](#),” arXiv:1912.02018 (2019).
- [9] C. Coreixas, G. Wissocq, B. Chopard, J. Latt, “[Impact of collision models on the physical properties and the stability of lattice Boltzmann methods](#),” arXiv:2002.05265 (2020).

Lattice Boltzmann Simulation of Hydrodynamic Melt-jet Fragmentation

Project Representative

Yutaka Abe

Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba

Author

Shimpei Saito

Graduate School of Systems and Information Engineering, University of Tsukuba

It is essential to understand the fundamental processes between melt jet and coolant during a postulated severe accident of a nuclear power plant. In the present study, we develop a lattice Boltzmann (LB) model for immiscible two-phase flow simulations with central moments (CMs). Hydrodynamic melt-jet breakup simulations show that the proposed model is significantly more stable, even for flow with extremely high Reynolds numbers, up to $O(10^6)$. This enables us to investigate the phenomena expected under actual reactor conditions.

Keywords: Lattice Boltzmann method, Central moments, Color-gradient model, Multiphase flow,

1. Introduction

In nuclear power plants, the core material might melt during severe accidents. In such scenario, the melt material is considered to flow in the coolant as the jet. The interaction between the melt jet and coolant will very complex. It is therefore particularly important to estimate and evaluate the behavior known as jet breakup or fragmentation in the coolant. It would, however, be very difficult to investigate the breakup of a melt jet directly in an actual reactor or performing experiments using actual materials. Instead, a scoping study of the fundamental process is an effective approach to understanding the actual situation. The authors have performed experiments using the molten metal-water systems [1] and isothermal liquid-liquid systems [2]. These experiments gave us fruitful understandings on the fragmentation mechanism of melt jet. However, the combinations of test fluid pairs for visualization were limited, and it is difficult to deal with physical properties (e.g., density or interfacial tension) parametrically in experiments.

Motivation of the present study is modeling melt-jet breakup with numerical approaches to clarify the mechanism of fragmentation process. We developed a lattice Boltzmann method (LBM) for immiscible two-phase flow simulations with central moments (CMs) to conduct the simulations.

2. Lattice Boltzmann method

In general, multiphase lattice Boltzmann model can be classified into four models, including color-gradient, pseudopotential, free-energy, and phase-field models. In the present study, the color-gradient model is adopted because this model has excellent property for tiny droplets or bubbles [3]. The distribution function f_i^k is introduced to represent the fluid k , where r or b denotes the color (“red” or “blue”), and i is the lattice velocity direction. The evolution of the distribution function is expressed by the following lattice Boltzmann equation:

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i^k(\mathbf{x}, t) = \Omega_i^k. \quad (1)$$

The collision operator consists of three sub-operators:

$$\Omega_i^k = (\Omega_i^k)^{(3)} \left[(\Omega_i^k)^{(1)} + (\Omega_i^k)^{(2)} \right], \quad (2)$$

To overcome the numerical instability for extremely high Reynolds number flows, we employ the nonorthogonal CMs-based scheme for the single-phase collision operator $(\Omega_i^k)^{(1)}$. According to this approach, the multiphase flow simulations with Reynolds number $O(10^6)$ were stably carried out in this study. We confirmed that the present CMs-based scheme has superior numerical stability to our previous one [4]. Details of the present algorithm are shown in Ref. [5]. The source code is written in Fortran language, where parallelization is performed with MPI.

3. Results

With the computational setup shown in Fig. 1, we conducted hydrodynamic melt-jet breakup simulations. First, we conducted the simulations of experiments in [6]. A typical simulation result of the generated fragments and the flow field are shown in Fig. 2. The corresponding Reynolds number of this case is $Re = 1.5 \times 10^5$. We can find that the liquid jet column has large velocity, while the generated fragments has small velocity. In the snapshot at upstream region [Fig. 2(b)], the fragments generate from the unstable liquid-jet interface. Most of the fragments in this region are stretched, which appear not to be spherical shapes. The velocity magnitude of stretched fragments is large, while that of

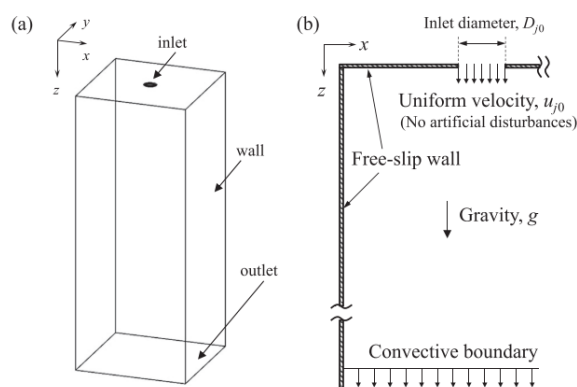


Fig. 1 Computational setup

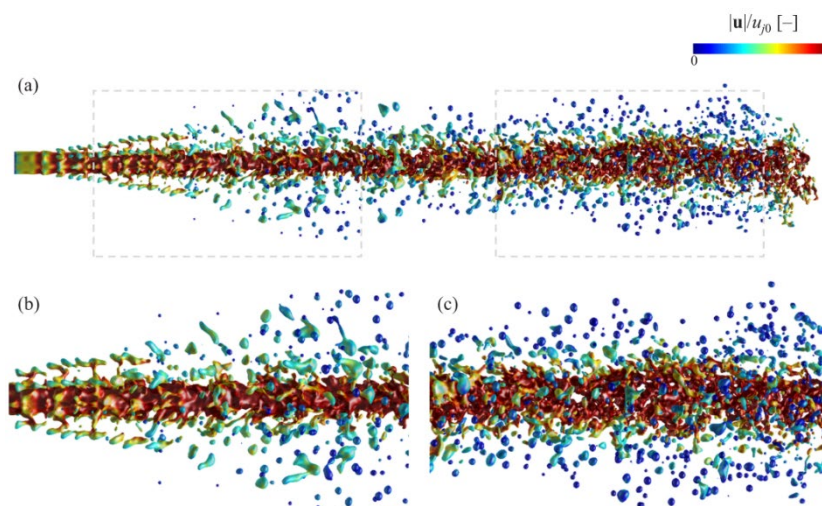


Fig. 2 Snapshot of detailed interface structure

spherical ones is small. In the snapshot at downstream region [Fig. 2(c)], most of the fragments are spherical shapes with low velocity magnitude.

We performed the simulation of the so-called FARO-TERMOS experiments [7]. In the tests, around 100-kg-scale of UO₂ melt was poured into a liquid-sodium pool. Two experiments, called T1 and T2, were carried out, with release diameters of 50 and 80mm, respectively. Here, we focus on the T1 experiment. A notable feature of the FT experiments is that sodium is not transparent, so these simulations will hopefully help us to better understand the phenomena involved. Fig. 3 shows the results of this simulation. The corresponding Reynolds number of this case is $Re = 1.1 \times 10^6$. Droplets generated from the jet are so small, and fragmentation now occurs around the jet's leading edge and side. The liquid-liquid-jet breakup flow-regime map [2] indicates this case is in the atomization regime; in fact, the atomization regime appeared in the present simulation.

4. Summary

In this study, we have extended the previous color-gradient LB model [4] by introducing nonorthogonal CMs in three dimensions. We applied our model to hydrodynamic melt-jet

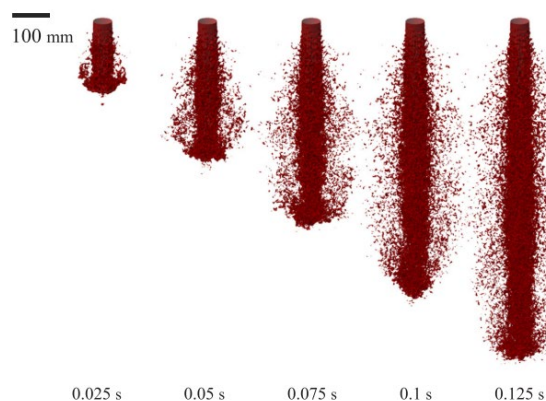


Fig. 3 Simulation results of FARO-TERMOS T1 test

breakup simulations, targeting two different experiments [6,7]. Numerical simulations under corresponding conditions, including those equivalent to an actual reactor, demonstrated that our model was more stable. In particular, our model allowed the Reynolds number to be increased significantly, up to $O(10^6)$.

Acknowledgement

This work was supported by JSPS KAKENHI Grant No. 16J02077.

References

- [1] Y. Abe, E. Matsuo, T. Arai, H. Nariai, K. Chitose, K. Koyama, and K. Itoh, "Fragmentation behavior during molten material and coolant interactions," Nucl. Eng. Des. 236(14–16), 1668–1681 (2006).
- [2] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, "Flow transition criteria of a liquid jet into a liquid pool," Nucl. Eng. Des. 315, 128–143 (2017).
- [3] H. Liu, Q. Kang, C. R. Leonardi, S. Schmieschek, A. Narváez, B. D. Jones, J. R. Williams, A. J. Valocchi, and J. Harting, "Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications," Comput. Geosci. 20(4), 777–805 (2016).
- [4] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, "Lattice Boltzmann modeling and simulation of liquid jet breakup," Phys. Rev. E 96(1), 013317 (2017).
- [5] S. Saito, A. De Rosi, A. Festuccia, A. Kaneko, Y. Abe, K. Koyama, "Color-gradient lattice Boltzmann model with nonorthogonal central moments: Hydrodynamic melt-jet breakup simulations," Phys. Rev. E 98(1), 013305 (2018).
- [6] E. Matsuo, Ph.D. thesis (in Japanese), University of Tsukuba (2013).
- [7] D. Magallon, H. Hohmann, H. Schins, "Pouring of 100-kg-Scale Molten UO₂ into Sodium," Nucl. Technol. 98, 79–90 (1992).