

# 格子ボルツマン法による液体噴流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

阿部 豊 筑波大学 システム情報系

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、多緩和時間衝突を導入することで数値的安定性の向上を達成した。シミュレーションの結果、著者らが過去に行った実験に基づく液液二相噴流の流動様式線図を再現できた。すなわち、液滴が液柱の先端から生成する varicose、液柱が非対称となる sinuous、エントレインメント支配となる atomization の崩壊レジームが観測された。

キーワード：格子ボルツマン法, Color-gradient モデル, 多緩和時間衝突則, 液体噴流, 微粒化

## 1. はじめに

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], [3] 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。そこで本研究では、数値解析のアプローチにより噴流の崩壊挙動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. 数値計算法

二相系に対する格子ボルツマンモデルは、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 [4]。本研究では微小な液滴や気泡に対する保存性に最も優れる [4]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。

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

添え字  $i$  は粒子の移動方向を表し、添え字  $k (= r \text{ or } b)$  は流体の色を表す。格子ボルツマン法においてしばしば問題となる「低粘性（高レイノルズ数）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  $(\Omega_i^k)^{(1)}$  に対して従来の単一緩和時間（SRT: Single Relaxation Time）衝突則

$$(\Omega_i^k)^{(1)} = -1/\tau_k (f_i^k - f_i^{k(\text{eq})}) \quad (3)$$

に代わって多緩和時間（MRT: Multiple Relaxation Time）衝突則

$$(\Omega_i^k)^{(1)} = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{M} (|f_i^k\rangle - |f_i^{k(\text{eq})}\rangle) \quad (4)$$

を導入している。ここで、 $\mathbf{M}$  は変換行列を表し、分布関数を速度空間からモーメント空間へと移す関数である。 $\mathbf{K}$  は緩和行列であり、モーメントを緩和させる。 $\mathbf{K}$  を単位行列  $\mathbf{I}$  に置き換えれば、式 (4) は SRT 衝突則 [式 (3)] に、数学的に等価である。MRT 衝突則の導入は、従来一つの緩和時間を用いていた緩和過程を、対応するモーメントごとに個別に行うことで、流体解析の主要な輸送係数を維持しつつ計算の安定化を可能とするものである。この改良により、著者らの既存実験 [3] と同様のレイノルズ数 ( $\sim O(10^3)$ ) における数値的安定性を保つことを可能とした。本研究では 3 次元 27 速度格 ( $i = 0, \dots, 26$ ) を用いて定式した。数値モデルの詳細は文献 [5] に記載されている。

## 3. 結果

図 1 に示す境界条件を用い、液体噴流のシミュレーションを行った。著者らが過去に行った液液二相系の実験 [2], [3] を模擬した条件を含むシミュレーションを行った。図 2 から 4 に、シミュレーションの結果を示す。図 2 では液滴が液柱の先端から生成する varicose、図 3 では液柱が非

対称となる sinuous、図4ではエントレインメント支配となる atomization の崩壊レジームが観測された。これらの結果を、無次元数による液液二相噴流の流動様式線図 [3] 上でまとめたものが図5である。横軸はレイノルズ数 (慣性力と粘性力の比)、縦軸はオーネゾルゲ数 (粘性力と界面張力の比) である。図5に示すように、本シミュレーションでは、実験データに基づき構築した流動様式線図を再現できることがわかった。

以上のように、本研究で構築した格子ボルツマンモデルを用いて、液液二相系の噴流崩壊実験を再現すること

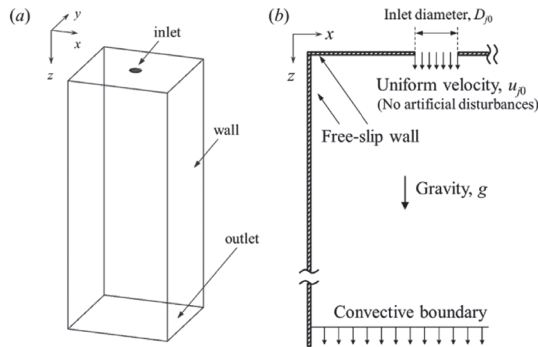


図1 液体噴流シミュレーションの境界条件

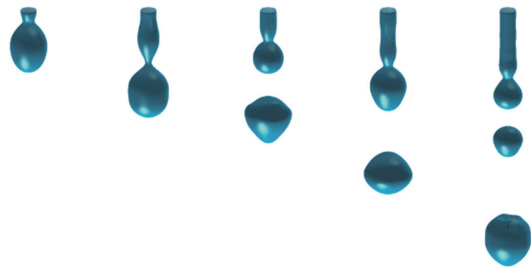


図2 液滴が液柱先端から生成する varicose regime



図3 液柱が非対称となる sinuous regime

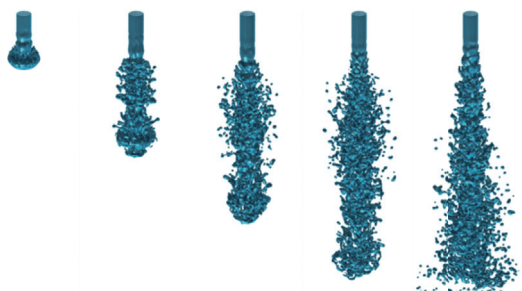


図4 エントレインメントが支配的となる atomization regime

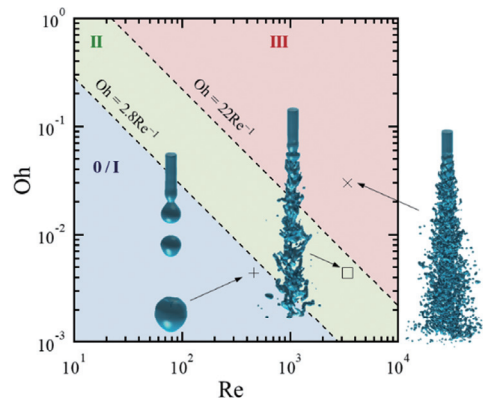


図5 シミュレーションは流動様式線図を再現

ができた。しかしながら、現状のモデルでは実機相当の条件に対応する高レイノルズ数の条件で数値的に不安定となることを確認している。そこで著者らは、さらに数値安定な中央モーメントに基づく格子ボルツマンモデルを開発している [6], [7]。

謝辞

本研究は、三菱重工業株式会社および科研費 (16J02077) の支援を受けて実施した。ここに謝意を表する。

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.*, vol. 236, no. 14–16, pp. 1668–1681, 2006.
- [2] S. Saito, Y. Abe, A. Kaneko, T. Kanagawa, Y. Iwasawa, and K. Koyama, "Simulation of a Liquid Jet using the Lattice Boltzmann Model for Immiscible Two-Phase Flow," *Japanese J. Multiphase Flow*, vol. 29, no. 5, pp. 433–441, 2016 (in Japanese).
- [3] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, "Flow transition criteria of a liquid jet into a liquid pool," *Nucl. Eng. Des.*, vol. 315, pp. 128–143, 2017.
- [4] 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.*, vol. 20, no. 4, pp. 777–805, 2016.
- [5] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, "Lattice Boltzmann modeling and simulation of liquid jet breakup," *Phys. Rev. E*, vol. 96, no. 1, 2017.
- [6] S. Saito, A. De Rosis, A. Festuccia, A. Kaneko, Y. Abe, and K. Koyama, "Color-gradient lattice Boltzmann model with nonorthogonal central moments: Hydrodynamic melt-jet breakup simulations," arXiv: 1804.08923.
- [7] A. De Rosis, S. Saito, A. Kaneko, and Y. Abe, "Central-moments-based lattice Boltzmann scheme for coupled Cahn-Hilliard-Navier-Stokes equations," arXiv: 1803.11345.

# Numerical Simulation of Liquid Jet Fragmentation by Lattice Boltzmann Method

Project Representative

Yutaka Abe

Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba

Authors

Shimpei Saito

Graduate School of Systems and Information Engineering, University of Tsukuba

Yutaka Abe

Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba

It is essential to understand the fundamental processes between melt jet and coolant during a postulated core-disruptive accident of a sodium-cooled fast reactor. In the present study, jet breakup and droplet formation in immiscible liquid-liquid system were studied numerically. A lattice Boltzmann two-phase model was modified in framework of multiple-relaxation time (MRT) collision operator to enhance the numerical stability. This model was applied to the conditions of jet breakup simulations. The present lattice Boltzmann simulations qualitatively reproduced the characteristic transitions of breakup regimes.

**Keywords:** Lattice Boltzmann methods, Color-gradient model, Multiple relaxation time, Liquid jet, fragmentation

## 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 SFR 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], [3]. 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 to formulate stable LB two-phase model and to apply the model to jet breakup conditions. Firstly, we improve the model based on the MRT collision operator. This model is applied to the conditions for liquid jet breakup simulations by implementing appropriate boundary conditions.

## 2. Numerical 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 [4]. The distribution function 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 in the lattice Boltzmann community, we employ the multiple-relaxation time collision operator as follows:

$$(\Omega_i^k)^{(1)} = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{M} (|f_i^k\rangle - |f_i^{k(\text{eq})}\rangle) \quad (3)$$

where  $\mathbf{M}$ , transferring the distribution function from velocity space to moment space, is the transformation matrix;  $\mathbf{K}$  is the relaxation matrix. When  $\mathbf{K} = \mathbf{I}$  (unit matrix), Eq. (3) degrades into the single-relaxation time (SRT) collision operator. Using MRT collision operator instead of traditional single-relaxation time collision operator contributes to enhance the numerical stability and accuracy even with additional computational cost.

See Ref. [5] for details of our model.

## 3. Results

Figure 1 depicts a schematic diagram of boundary conditions for the liquid jet simulations. The conditions are accordance with our previous experiments [2], [3]. The simulation results are summarized in the dimensionless flow regime map for liquid-liquid jet breakup as shown in Fig. 2. Three typical regimes were successfully reproduced, namely, the varicose regime (drops generated from the tip of liquid column), the sinuous regime (liquid column becomes asymmetry), and atomization

regime (entrainment at jet side distinguishes). The dimensionless groups appeared in the diagram is Reynolds number (inertia vs viscous forces) and Ohnesorge number (viscous vs interfacial forces). Summarizing, the present simulations well reproduced the flow regime map developed based on the experiments.

As mentioned above, we successfully simulated liquid jet breakup. However, the present model cannot be applied to higher Reynolds number, such as melt jet breakup under reactor conditions. We then are developing the new lattice Boltzmann model with *central moments* [6], [7].

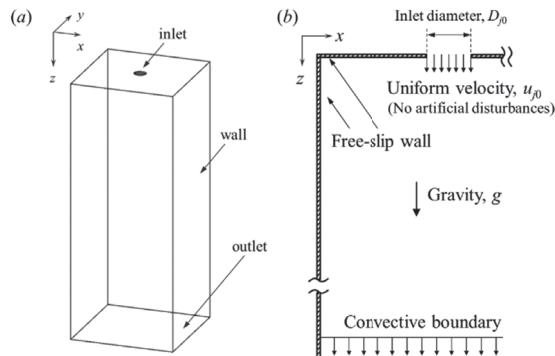


Fig. 1 Boundary conditions for liquid jet breakup.

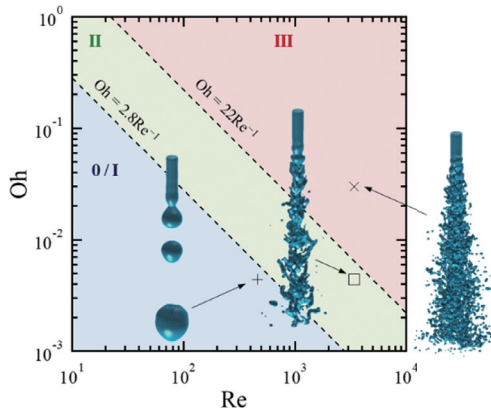


Fig. 2 Simulation results in the flow regime map for liquid-liquid jet breakup.

## Acknowledgement

This work was supported by Mitsubishi Heavy Industries, Ltd and JSPS KAKENHI Grant Number 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.*, vol. 236, no. 14–16, pp. 1668–1681, 2006.
- [2] S. Saito, Y. Abe, A. Kaneko, T. Kanagawa, Y. Iwasawa, and K. Koyama, "Simulation of a Liquid Jet using the Lattice Boltzmann Model for Immiscible Two-Phase Flow," *Japanese J. Multiphase Flow*, vol. 29, no. 5, pp. 433–441, 2016 (in Japanese).
- [3] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, "Flow transition criteria of a liquid jet into a liquid pool," *Nucl. Eng. Des.*, vol. 315, pp. 128–143, 2017.
- [4] H. Liu, Q. Kang, C. R. Leonardi, S. Schmiechek, A. Narváez, B. D. Jones, J. R. Williams, A. J. Valocchi, and J. Harting, "Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications," *Comput. Geosci.*, vol. 20, no. 4, pp. 777–805, 2016.
- [5] S. Saito, Y. Abe, and K. Koyama, "Lattice Boltzmann modeling and simulation of liquid jet breakup," *Phys. Rev. E*, vol. 96, no. 1, 2017.
- [6] S. Saito, A. De Rosis, A. Festuccia, A. Kaneko, Y. Abe, and K. Koyama, "Color-gradient lattice Boltzmann model with nonorthogonal central moments: Hydrodynamic melt-jet breakup simulations," arXiv: 1804.08923.
- [7] A. De Rosis, S. Saito, A. Kaneko, and Y. Abe, "Central-moments-based lattice Boltzmann scheme for coupled Cahn-Hilliard-Navier-Stokes equations," arXiv: 1803.11345.