



JP9811017

ナトリウム液滴燃焼解析コードとその検証解析

DNIR - TN - 0110 - 07 - 097

1997年11月

30 - 03

動力炉・核燃料開発事業団

日本原子力研究開発機構

大洗工学センター



330026737⑧

L

複製又はこの資料の入手については、下記にお問い合わせ下さい。

〒311-13 茨城県東茨城郡大洗町成田町4002

動力炉・核燃料開発事業団

大洗工学センター

システム開発推進部・技術管理室

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to: Technology Management Section, O-arai Engineering Center, Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation 4002 Narita-machi, O-arai-machi, Higashi-Ibaraki, Ibaraki-Ken 311-13, Japan.

動力炉・核燃料開発事業団 (Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation) 1997

ナトリウム液滴燃焼解析コードとその検証解析

要旨

岡野 靖 *

漏洩・燃焼挙動の機構論的解析手法の開発を目的としたコード体系の整備の一環として、直接シミュレーションによる強制対流場でのナトリウム液滴燃焼解析手法が整備された。これに基づきナトリウム液滴燃焼解析コードが開発され、ナトリウム液滴の落下中の燃焼に関し、燃焼領域内の発熱・温度分布や酸化物・水酸化物の生成量の詳細な解析・評価が実施されている。

直接シミュレーションによるナトリウム液滴燃焼解析コードは、炭化水素の燃焼シミュレーションで実績のある拡張MAC法に、ナトリウム燃焼モデルを導入した解析コードである。本報告では、ナトリウムの単一液滴の燃焼挙動の数値シミュレーションを行い、本解析コードの適用性について検証を行った。

液滴径、空気の流速などの解析条件の変化に対する燃焼量や反応物生成量の変化について、定性的・定量的な検討を行った。解析結果が、液滴燃焼に関する燃焼工学上の知見と適合することが確認され、本解析コードがナトリウム液滴燃焼の解明に有効との見通しを得た。

* 大洗工学センター 基盤技術開発部 熱流体技術開発室

Numerical Simulation Code for Combustion of Sodium Liquid Droplet and its Verification

Yasushi Okano *

Abstract

The computer programs for sodium leak and burning phenomena had been developed based on mechanistic approach. Direct numerical simulation code for sodium liquid droplet burning had been developed for numerical analysis of droplet combustion in forced convection air flow. Distributions of heat generation and temperature and reaction rate of chemical productions, such as sodium oxide and hydroxide, are calculated and evaluated with using this numerical code.

Extended MAC method coupled with a higher-order upwind scheme had been used for combustion simulation of methane-air mixture. In the numerical simulation code for combustion of sodium liquid droplet, chemical reaction model of sodium was connected with the extended MAC method. Combustion of single sodium liquid droplet was simulated in this report for the verification of developed numerical simulation code.

The changes of burning rate and reaction product with droplet diameter and inlet wind velocity were investigated. These calculation results were qualitatively and quantitatively conformed to the experimental and calculation observations in combustion engineering. It was confirmed that the numerical simulation code was available for the calculation of sodium liquid droplet burning.

* Thermal Hydraulic Research Section, Advanced Technology Division, O-arai Engineering Center

目次

第1章	緒言	1
1-1	研究の背景	1
1-2	研究の目的	2
第2章	液滴燃焼解析手法	3
2-1	過去の研究	3
2-2	ナトリウム液滴燃焼解析コード	5
第3章	評価解析	8
3-1	問題設定	8
3-2	予備的解析	9
	計算安定条件	9
	メッシュ分割数の影響評価解析	10
3-3	液滴径の影響評価解析	11
3-4	風速の影響評価解析	12
第4章	今後の課題	14
4-1	エアロゾルモデル	14
4-2	詳細温度場モデル	14
4-3	ナトリウム蒸発モデル	14
4-4	コードの高速化	14
第5章	結言	15
	謝辞	16
	参考文献	17

図表リスト

- 図 1 : ナトリウム液滴燃焼解析で考慮する現象と相互関係
- 図 2 : ナトリウム液滴燃焼解析体系
- 図 3 : x-z 平面内の温度分布 (ケース 1)
- 図 4 : x-z 平面内の温度分布 (ケース 2)
- 図 5 : 発熱量の時間変化 (ケース 1、2)
- 図 6 : ナトリウム酸化物平均モル分率の流出側における時間変化 (ケース 1、2)
- 図 7 : 発熱量の時間変化 (ケース 2、3、4)
- 図 8 : 液滴表面積あたりの発熱量の時間変化 (ケース 2、3、4)
- 図 9 : ナトリウム液滴温度の時間変化 (ケース 2、5、6)
- 図 10 : 発熱量の時間変化 (ケース 2、5、6)
- 図 11 : 化学反応種平均モル分率の流出側における時間変化 (ケース 6)
- 図 12 : 水酸化ナトリウムの流出量の時間変化 (ケース 2、5、6)

- 表 1 : 解析パラメータ範囲
- 表 2 : 解析境界条件
- 表 3 : メッシュ分割数の影響評価での解析条件
- 表 4 : 液滴径の影響評価での解析条件
- 表 5 : 風速の影響評価での解析条件

[Nomenclature]

C	:	クーラン数	[Greek]	
C _p	:	比熱	Δ	: 時間・空間刻み幅
D	:	拡散係数	φ	: 液滴直径
d	:	拡散数	λ	: 熱伝導率
K	:	圧力平衡定数、蒸発速度	ρ	: 密度
M	:	拡散係数行列	τ	: 応力テンソル
P	:	圧力	ω	: 燃焼率
Q̇	:	発生熱		
R	:	気体定数		
Re	:	レイノルズ数	[Subscript]	
Sc	:	シュミット数	*	: 予測量
T	:	温度	0	: 自然対流場
t	:	時間	1	: 体積平均量
u	:	速度	2	: 局所変分量
V	:	拡散速度	air	: 空気
X	:	モル分率	droplet	: 液滴
x	:	空間座標	i, j	: 化学反応種
Y	:	質量分率	Na	: ナトリウム
Ȳ	:	質量分率変化率	sat	: 飽和蒸気

[Superscript]

n	:	タイムステップ
N, M	:	化学量論数

第1章 緒言

1-1 研究の背景

高速増殖原型炉「もんじゅ」における2次主冷却系のナトリウム漏洩事故が平成7年12月8日に発生し、約640kgのナトリウムが漏洩した。しかしながら、炉心の冷却機能は損なわれることなく、ナトリウム化合物のエアロゾルと2次系ナトリウム中のごく微量のトリチウムの放出以外の外部環境への影響もなかった¹⁾。

事故発生後の現場調査により、漏洩の直接の原因が2次冷却系の配管に挿入された温度計さやの折損であることが判明し、その後、破損メカニズムが各種試験および解析により解明されている。これと同時に、ナトリウム漏洩の発生後の事象の推移を考察し、現象のメカニズムを総合的に理解するため、漏洩燃焼実験や計算コードによる現象解析が実施されている。

また、ナトリウム漏洩燃焼実験が、もんじゅでの漏洩現場を模擬した体系で行われ、その燃焼挙動の解析、エアロゾル挙動の解析、および部屋内の空気の流れについて解析による検討が実施されている。また、事故後の調査および模擬実験では、漏洩したナトリウムは漏洩箇所と床の間に配置されていた空調ダクトやグレーチングに衝突後、液滴化して飛散し、床に落下したことがわかっている。

ナトリウム火災については、ナトリウムの燃焼挙動に応じて燃焼挙動を評価する計算コードが開発・検証されている。すなわち、多数のナトリウム液滴が落下運動している状態での燃焼（スプレイ燃焼）と床面に平面状に広がった状態での燃焼（プール燃焼）に分類され、スプレイ燃焼解析用には SPRAY-II が、プール燃焼解析用には SOFIRE-MII が存在する。さらに両現象を同時に扱えるよう、2つのコードを統合した ASSCOPS も存在する。ASSCOPS は、もんじゅでのナトリウム漏洩事故のような小規模な漏洩も解析できるように、燃焼形態、燃焼反応生成物、湿分効果、エアロゾル挙動に関して、モデルの改良が成された。また、過酷事故により納容器内に起こると考えられているナトリウム火災、ナトリウム・コンクリート反応、デブリ・コンクリート反応、放射性エアロゾルの発生、などを同時かつ長時間にわたり解析するために、安全解析コード CONTAIN が開発されている。最近では CONTAIN を基礎に、燃焼化学反応モデル、反応熱移行モデル、などの改良を行った安全解析コード SPHINCS が開発されている。

一方、漏洩事故全体の数値シミュレーションを行い、事故で発生した現象を解明することが考えられている。すなわちナトリウム漏洩事故を、ナトリウムの漏洩と液滴の飛散、液滴の落下中の燃焼、床上でのプール燃焼、空気の対流とエアロゾルの移動、に分類し、それぞれの数値シミュレーションを通じて、ナトリウム漏洩を総合的に検討しようとするものである。ここでは、ナトリウムや雰囲気温度などの状態量を1つの代表値で近似し、現象を一括して扱うことはせず、漏洩事故における液滴の運動、燃焼化学反応、ナトリウムの蓄積、空気の対流、エアロゾルの移動など、個々の物理現象に戻ってモデル化した上で、数値計算を用いてシミュレーションを行う。この方法では、原理的に、物理モデルの適用範囲内であれば、漏洩の規模、湿分、強制対流の有無、部屋の大

きさ、などによらず、現象の予測が可能となる。すなわち実機による実験に変わる数値実験が可能となる。

1 - 2 研究の目的

ナトリウム漏洩時の総括的なシミュレーションを行うにあたり、漏洩に伴うさまざまな現象を、ナトリウムの漏洩と液滴の飛散、液滴の落下中の燃焼、床上でのプール燃焼、空気の対流とエアロゾルの移動の4つに分類することが考えられている。その各々に対して数値シミュレーションを行い、解析結果を相互に関連づけることにより、漏洩事故全体の挙動を評価する。

ナトリウム液滴は空気中を落下する間、周囲の酸素および水蒸気と化学反応を起こし、燃焼することが実験的に確かめられている。化学反応の際には、ナトリウム酸化物および水酸化ナトリウム、さらにはそれらのエアロゾルなどを生成すると考えられている。これまでは漏洩後の発生熱の評価は、漏洩ナトリウムを一括して扱うなどの手法により取り扱われてきた。

しかし少量のナトリウムが漏洩した場合などは、ナトリウムを一括して扱うこと難しくなる。すなわち、個々のナトリウム液滴の燃焼挙動を解明する必要がある。しかし、ナトリウム液滴の燃焼挙動を解明する手法は、現在のところ確立されていない。

一方、炭化水素の単一液滴に対しては、その燃焼現象が実験的・解析的に従来より研究されている^[2]。また計算手法としては、対流項に3次精度風上差分を適用することにより直接シミュレーション(以下DNS)を行う燃焼解析手法が知られており、レシプロエンジン内燃焼解析などの実績がある^[3]。本報告ではDNSを用いた燃焼解析手法をナトリウムの燃焼解析に適用したシミュレーションコードを用い^[4]、空気中でのナトリウム液滴の燃焼解析を行った結果について報告する。解析結果の定量的な検討により、DNSによる燃焼解析手法のナトリウム液滴燃焼に対する適用性について検討することが本報告の目的である。

第 2 章 液滴燃焼解析手法

2 - 1 過去の研究

空気中のナトリウム液滴は、周囲の期待に含まれる酸素、水蒸気と化学反応をする。その時、液滴の近傍には薄いナトリウム蒸気層が形成され、空気とその蒸気層の間で発生する燃焼化学反応により化学反応種が生成・消滅すると同時に、多量の熱が発生する。この発熱反応により、周囲の空気温度は熱伝導や輻射により熱せられる。さらにナトリウム液滴が空気中を落下する場合、液滴周囲には対流や拡散による流れ場が生じており、これが燃焼化学反応による発熱や化学反応種の生成・消滅と相互に影響を及ぼし合いながら、複雑な流れ場が形成されていると考えられる。

炭化水素などの一般的な液体燃料では、そのほとんどが蒸発過程を経て気体となり、その気体が燃焼する。よってさまざまな蒸発過程を伴った燃焼形態が考えられ、多くの燃焼機器が考案され実用化されている。しかし工業的には、液体を噴霧器により無数の微粒子に微粒化し、表面積を大きくするとともに酸素と十分混合することによって燃焼させる、いわゆる噴霧燃焼が一般的である。単一液滴の燃焼は、噴霧燃焼の素過程として、従来より研究が行われている。1960年代までは主に準定常近似を用いた解析が行われていたが、液滴燃焼が本質的に非定常であることから、1970年以降は非定常解析が行われており、熱伝導率や比熱などの物性値の温度、濃度による変化の影響、自然対流および強制対流の影響、火炎からの輻射の影響、雰囲気圧力の影響、熱拡散の影響などが定量的に検討されている⁵⁾。

自然落下する液滴の燃焼や予混合気の閉塞容器内の燃焼などの燃焼現象は、マッハ数近傍の非常に高速な流れとは異なり、低速の流れ場を伴う現象である。よって、局所的な圧力変動は小さいが、火炎などの燃焼領域の前後で密度および温度は急激に変化しており、圧縮性の影響を考慮した解析が必要である。しかしながら、一般的な圧縮性流体の数値解析では、圧力伝播の時間スケールで解析を行うため、低速な流れ場に対しては収束性が悪く、実用的には不都合が多い。また燃焼化学反応による発熱や化学反応種の生成・消滅を伴うため、複雑な流れ場が形成されており、乱流流れ場を扱う必要がある。このような圧縮性乱流計算を行うために、従来の数値計算では時間平均されたモデルが使用されてきた。この手法はボイラー設計などの伝熱解析には有効とされ、実用レベルにある。しかしながら、反応生成物や燃焼の安定性などの検討を行うにはより詳細な解析が必要であり、従来手法の延長のみで対応することが難しくなっている。

一方、近年の流体数値計算技術の進歩に伴い、解明された燃焼の機構に基づいて燃焼をモデル化することにより、燃焼を含む流れ場を数値計算することが行われている。

燃焼を含む流れ場の数値解析として、レシプロエンジン内の燃焼に関して数値シミュレーションが行われ、有効な結果が得られたとする報告⁶⁾がある。そこでは局所的な密度変動は扱うものの、圧力に関しては微少変動を仮定した拡張 MAC 法が使用されている。また対流項に 3 次精度風上差分を適用することにより、あらわに乱流モデルを用いることなく、複雑な流れ場の数値解析を行っている。

またバーナによるメタンの乱流拡散火炎に関する数値シミュレーションについての報告¹⁰⁾がある。これは低 NO_x 燃焼技術の確立などの、より高度化する開発課題に対応する数値計算技術の確立を目指した研究として行われている。NO_x 生成反応は、温度・濃度に対する非線型性が強く非定常乱流解析が必要であり、そこでは CIP 法を用いて圧縮性流体方程式を扱っている。また乱流モデルとしては格子平均モデルである LES により扱っている。しかしながら、燃焼領域においては非燃焼流れとは異なるメカニズムによる流れの乱れが発生している可能性があり、密度変化や火炎の伝播を考慮した圧縮性流体に対する LES モデルの必要性が述べられている。

2-2 ナトリウム液滴燃焼解析コード

ナトリウム液滴の蒸発速度や反応生成物の濃度変化は、液滴周りの対流および拡散、化学反応に伴う反応種の生成・消滅および反応熱の発生を再現しなければならない。燃焼解析コードで考慮すべき現象の相互関係を図1に示す。数値解析手法を用いてこれらの現象を再現し、燃焼に伴う発熱の状況、温度分布、反応生成物の濃度分布を把握するために本報告で使用される、拡張 MAC 法を用いた直接シミュレーションによるナトリウム液滴燃焼解析コードの計算手法について説明する。燃焼解析コードでは、液滴周りの流れ場を記述する各種保存則（質量保存則、運動量保存則、エネルギー保存則、化学反応種質量保存則）、気体の状態の記述式（状態方程式、蒸発）、化学種の移行の記述式（濃度拡散）および化学反応の記述式（平衡化学反応）を考慮した基礎方程式を用いて、有限差分法（高次精度風上差分）による直接シミュレーションを行っている。

燃焼解析コードで使用される流れ場に関する式⁽⁷⁾、ナトリウム液滴に関する式、化学反応種に関する式、化学反応に関する式を具体的に以下に示す。

流れ場に関する式)

エネルギー保存式

$$\frac{DT_2^{n+1}}{Dt} = \frac{dT_1^{n+1}}{dt} + \frac{1}{\rho^n C_p^n} \left(\frac{dp_1^*}{dt} + \nabla \cdot (\lambda \nabla T^n) + \dot{Q}^n \right)$$

圧力ポアソン方程式

$$\Delta p_2^{n+1} = -\rho^{n+1} \left[\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] + \frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla \rho_2^{n+1} \cdot \nabla p_2^{n+1}$$

速度ダイバージェンス式

$$\mathbf{D} = -\frac{C_p^n - R}{C_p^n P^{n+1}} \frac{Dp}{Dt} + \frac{1}{\rho^{n+1} C_p^n T^{n+1}} \left[\nabla \cdot (\lambda \nabla T^{n+1}) + \dot{Q}^n \right]$$

ナビア・ストークス方程式

$$\rho^{n+1} \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p_2^{n+1} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$$

ナトリウム液滴に関する式)

$$\int_{V_{\text{droplet}}} \left(C_p \cdot \rho \cdot \frac{dT}{dt} \right) dv = - \int_s \lambda_{\text{air}} (T_{\text{droplet}} - T_{\text{air}}) dndS - \int_{V_{\text{droplet}}} L (\rho_{\text{Na,sat}} - \rho_{\text{air}} Y_{\text{Na}}) dv$$

$$\frac{\phi^{n+1}}{\phi^n} = 1 - \left(\frac{\int_{V_{\text{droplet}}} (\rho_{\text{Na,sat}} - \rho_{\text{air}} Y_{\text{Na}}) dv}{\rho_{\text{droplet}}} \right)^{1/3}$$

化学反応種に関する式)

化学反応種質量保存式

$$\frac{DY_i^{n+1}}{Dt} = \dot{Y}_i + \frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla \cdot (\rho \cdot Y_i^{n+1} \mathbf{V}_i^{n+1})$$

拡散方程式

$$M_{ij} \mathbf{V}_j = \nabla X_j$$

状態方程式

$$p = \rho R T \sum_i^8 \left(\frac{Y_i}{m_i} \right)$$

化学反応に関する式)

圧力平衡定数

$$K = \frac{1}{P_i^N P_j^M}$$

拡張 MAC 法では、従来の MAC 法で現れる圧力ポアソン方程式の速度ダイバージェンス補正項に対して陽的に速度場を対応させるのではなく、連続の式とエネルギー保存式および気体の状態方程式を介させていることが特徴である。

ナトリウム液滴は完全な球体であると仮定され、その変形は考慮しない。また液滴内部でのナトリウムの流動は考慮せず、温度分布は一様であるとする。これは熱伝導度が無限大の剛体球と仮定していることに相当する。液滴の温度変化は、周囲の空気への熱伝導とナトリウムの蒸発分から決まる気化潜熱より求められる。ただし蒸発によるナトリウム液滴の質量・体積の減少は考慮しない。

化学反応種としては、Na、O₂、H₂O、H₂、NaOH、Na₂O、Na₂O₂、N₂ の 8 種類が想定され、N₂ を除く 7 種類の化学種間の反応が、それぞれ局所的に化学平衡状態に達していると仮定される。また N₂ は化学反応に関与しないと仮定される。拡散係数は分子動力学に基づく導出式が用いられる

圧力平衡定数は、場の温度に対してあらかじめ評価しておき、燃焼解析コード内部では温度に対する 7 次の関数として計算する。ナトリウム蒸気の分圧は、液滴表面の隣接ノードで常に飽和蒸気圧に達しているものとして計算される。

差分法による離散化は、対流に関する空間微分には 3 次精度風上差分法、それ以外の空間微分には 2 次精度の中心差分法を用いている。また時間積分にはオイラー陰解法を用いている。

第3章 評価解析

3-1 問題設定

本章では、ナトリウム液滴燃焼解析コードによる解析結果と、それに対する考察を述べる。本章で解析を行った計算体系を図2に示す。空気中を一定速度で落下している状況を想定しており、縦長の直方体内部に液滴が固定され、下部から一様な空気が流れている。解析を行った体系の大きさ、メッシュ分割数、液滴の直径と初期温度、一様流の流速と温度の各パラメータ範囲を表1に示す。また、流入側、流出側、側壁側のそれぞれについて、流速、圧力、温度に関する境界条件を表2に示す。

表1 解析パラメータ範囲

ナトリウム液滴		流入一様流				
直径 (ϕ)	初期温度 (T_{Na})	空気条件	流速 (V)	密度 (ρ)	圧力 (P)	温度 (T)
2.0~6.0 (mm)	853.15 (K)	N ₂ :73%, O ₂ :26% , H ₂ O:1%	2.0~8.0 (m/s)	0.5925 (kg/m ³)	1.013x10 ⁵ (Pa)	573.15 (K)

表2 解析境界条件

	流入側	流出側	側壁側
流速 (V)	一様流流速、 V_0	1次外挿	一様流流速で移動、 V_0
圧力 (P)	ノイマン条件	ノイマン条件	ノイマン条件
温度 (T)	一様流温度、 T_0	1次外挿	一様流温度、 T_0

3 - 2 予備的解析

計算安定条件)

本計算における時間刻みと計算安定条件について考察する。流れ場の解析ではクーラン条件が制限となる。代表速度として風速 ($V=5.0\text{m/s}$) を、格子幅として $0.25(\text{mm})$ をとると、そのクーラン条件は以下ようになる。

$$C = u \frac{\Delta t}{\Delta x} = 2.0 \times 10^4 \Delta t \leq 1.0$$

よって時間刻みは $\Delta t < 5.0 \times 10^{-5} (\text{s})$ となる。

また、化学反応種間の拡散を取り扱うため、拡散数も制限となる。簡単のため2種類の化学種に着目すると、拡散方程式から以下のように拡散速度が求められる。

$$V_i \approx \frac{D_{ij}}{X_i X_j} \cdot \nabla X_i$$

この拡散速度を化学反応種質量保存式に代入し、以下の放物型方程式を得る。

$$\frac{DY_i}{Dt} = \frac{\dot{\omega}}{\rho} - \frac{D_{ij}}{X_j} \cdot \Delta Y_i$$

分子動力学に基づく拡散係数導出式から、拡散係数は以下となる。

$$D = \frac{D_{ij}}{X_j} = 1.8573 \times 10^{-7} \cdot \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right)}}{\rho \sigma^2 \Omega} \cdot \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$$

分子量として空気、温度として $1,300 (\text{K})$ 、圧力として $1.013 \times 10^5 (\text{Pa})$ 、格子幅として $0.25(\text{mm})$ を与えることにより、拡散方程式の安定条件は以下ようになる。

$$d = D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} = 4.0 \times 10^3 \Delta t \leq \frac{1}{2}$$

よって時間刻みは $\Delta t < 1.25 \times 10^{-4} (\text{s})$ となる。分子量として水素を考えた場合、より時間刻みの条件は厳しくなり、 $\Delta t < 3.3 \times 10^{-5} (\text{s})$ となる。

以上の考察から、液滴燃焼計算を安定して進めるには拡散数の条件を満足させねばならない。拡散数は体系の温度によりほぼ一意に定まるため、本計算は本質的に時間刻み幅を 10^{-5} のオーダーとしなければならない。

メッシュ分割数の影響評価解析)

ナトリウム液滴燃焼解析コードの検証に際し、予備的な解析として、解析体系のメッシュ分割の影響について考察する。液滴径・初期温度、一様流速度・温度、解析体系、時間刻み幅などの解析条件を同一とし、メッシュ分割数のみを変化させた表3に示される2ケースについて、解析結果を比較する。

表3 メッシュ分割数の影響評価での解析条件

ケース #	液滴径 (mm)	液滴初期温度(K)	一様流流入速度(m/s)	一様流温度(K)	解析体系 (mm)	メッシュ分割数	時間刻み(ms)
1	4.6	853.15	5.0	573.15	15x15x30	32x32x64	0.05
2						64x64x128	

計算結果)

ケース1、2の、Na液滴中心を含むx-z平面内の温度分布を図3および図4に示す。まず、ケース2での燃焼の様子を時系列で考察する。

0~0.75 (ms) : 液滴後方で激しい燃焼と膨張が観察される。

10 (ms) : 液滴後方にチューリップ状の高温温度領域が形成。
以後、高温領域が左右にゆれる様子が観測される。

25 (ms) : 液滴後方に流れの巻き込みが観測される。この領域の燃焼率は低い。

50 (ms)~ : 高温温度領域の若干の膨張、収縮が観測されるが、燃焼はほぼ安定。最高温度は約1200Kとなっている。一方、ケース1では、

10 (ms) : 液滴後方にチューリップ状の高温温度領域が形成。

50 (ms)~ : 高温温度領域の若干の膨張、収縮が観測されるが、燃焼はほぼ安定。

しかし、ケース1で観測された、高温温度領域の左右へのゆれや液滴後方での巻き込みによる低燃焼領域の形成は観察されない。最高温度は約100℃高い約1300Kである。

解析体系全体で発熱密度を体積積分した総発熱量を、ケース1、2で比較したものを図5に示す。また、解析体系流出部におけるナトリウム酸化物(Na_2O 、 Na_2O_2)の平均モル分率を比較したものを図6に示す。ケース1での発熱量、ナトリウム酸化物は、ケース2の場合と比較し大幅に高く、解析結果がメッシュ分割に依存していることが分かる。よって本報告では、メッシュ分割数を同一として以後の解析を実施した。

本来、蒸発現象は、液滴の表面温度や周囲の温度、対流・拡散速度などの物理量に依存しており、メッシュ依存性のない新たな蒸発モデルを開発する必要がある。

3 - 3 液滴径の影響評価解析

ナトリウム液滴径の影響について考察する。液滴初期温度、一様流速度・温度、メッシュ分割数などの解析条件を同一とし、液滴径のみを変化させた表 4 に示された 3 ケースについての解析結果を比較する。解析体系の大きさは、液滴径に対する大きさがほぼ相似になるよう定めた。またケース 3 の時間刻み幅については、数値計算上の安定性の観点から、拡散数の条件より、ケース 2 の 1 / 5 と定めた。

表 4 液滴径の影響評価での解析条件

ケース #	液滴径 (mm)	液滴初期温度 (K)	一様流流入速度 (m/s)	一様流温度 (K)	解析体系 (mm)	メッシュ分割数	時間刻み (ms)
3	2.0	853.15	5.0	573.15	6.5x6.5x13	64x64x128	0.01
2	4.6				15x15x30		0.05
4	6.0				20x20x40		0.05

計算結果)

解析体系全体で発熱密度を体積積分した総発熱量について、ケース 2, 3, 4 で比較したものを図 7 に示す。いずれの場合も時間の経過に従い、液滴温度の低下によるナトリウム蒸発量の減少により、発熱量はほぼ一定の傾きをもって低下していく。また発熱量の振動も小さくなって行くが、振動が収束するまでの時間を比較した場合、液滴径の増加に従い収束までの時間が長くなることがわかる。特に 6.0mm の場合、0.02s~0.05s の間、発熱量が大きく変化している。これは液滴後方の空気の流れ込みが激しく、低発熱領域が広く、かつ左右へのゆれが大きいことが原因である。

また液滴表面積あたりの発熱量変化を図 8 に示す。時間の経過とともに、液滴径に関わらずほぼ同一値に収束していく様子が観察できる。発熱量と液滴燃焼速度との間に比例関係を仮定すれば、液滴の燃焼速度が液滴径の約 2 乗に比例した計算結果が得られたことになり、本計算条件内では、燃焼量が液滴径で整理できる可能性がある。

3-4 風速の影響評価解析

流入側一様流の流速の影響について考察する。液滴径・初期温度、一様流温度、メッシュ分割数、解析体系、時間刻み幅などの解析条件を同一とし、一様流流入速度のみを変化させた表5に示される3ケースについて比較する。時間刻み幅については、風速の変化によりクーラン数は変化するものの、数値計算上の安定性は拡散数の条件より定まるため、特に変更を要しない。

表5 風速の影響評価での解析条件

ケース #	液滴径 (mm)	液滴初期温度 (K)	一様流流入速度 (m/s)	一様流温度 (K)	解析体系 (mm)	メッシュ分割数	時間刻み (ms)
5	4.6	853.15	3.0	573.15	15x15x30	64x64x128	0.05
2			5.0				
6			8.0				

計算結果)

液滴の温度変化を、ケース2, 5, 6について比較したものを図9に示す。液滴の温度変化は、ナトリウム蒸気の蒸発熱と液滴表面近傍での空気の熱伝達からエネルギーの増減から求められている。本解析における液滴温度853K程度の場合、蒸発熱による液滴の内部エネルギー変化は、熱伝導によるものより約2桁大きい。温度低下率が一定で風速の影響がほとんどないことは、ナトリウム蒸発量がほぼ一定であることを意味する。

解析体系全体で発熱密度を体積積分した総発熱量の比較を図10に示す。いずれの場合も、発熱量は時間の経過とともに、ほぼ一定の傾きをもって低下していく。風速の増加とともに、発熱量が増加する傾向も確認できる。これは、液滴粒子の蒸発について Frossling が見出した強制対流における蒸発速度の実験式¹⁴⁾

$$\frac{m}{m_0} = \left(1 + 0.276 \text{Re}^{1/2} \cdot \text{Sc}^{1/3}\right)$$

の傾向と一致する。すなわち上式は、液滴径一定かつ液滴周囲の動粘性係数が同一の条件下では、Re数の平方根、すなわち風速の平方根が発生熱量と線形関係を持つことを意味している。

ケース 6 での、化学反応種 ($O_2, H_2O, NaOH, Na_2O, Na_2O_2$) の流出側出口面における平均モル分率の時間変化を図 11 に示す。事象初期では酸化物が比較的多く発生している。これは、事象初期での急激な燃焼の結果、液滴後部において水分が欠乏した領域が生じたためである。また、時間が経過とともに、水酸化物が酸化物より支配的に発生するようになる。これは、燃焼が比較的穏やかに進行している状態では、周囲から水分が拡散により供給され、水酸化物生成反応が進行するためである。以上より、水分が存在する場合、NaOH 生成反応が支配的となることから、環境中の湿度がナトリウム液滴の燃焼反応に大きな影響を及ぼすことがわかる。

流出側出口での水酸化ナトリウム (NaOH) の流出量の時間変化を図 12 に示す。これは、流出側における NaOH 平均モル分率に、流入側一様流の流速を乗じることにより、NaOH 流出量を簡易的に評価したものである。図 12 により、NaOH 生成量の多少が、発生熱量の大小と一致した傾向をしめすことが確認できる。低流速の場合に NaOH 生成量が少ないのは、拡散による側壁からの漏れが相対的に大きくなるためである。また、事象初期において NaOH 流出量が少ないのは、液滴周囲で生成されたナトリウム化合物が対流に乗って流出するのに時間を要するためである。

第4章 今後の課題

4-1 エアロゾルモデル

本報告では、燃焼化学反応では気体状のナトリウム酸化物、水酸化物が発生すると仮定し、平衡化学反応論を用いて生成量を評価している。しかし現実には気体のほかにエアロゾル状の酸化物、水酸化物が生成すると考えられる。エアロゾルが生成する場合、気体が生成する場合と比較し、気化潜熱に相当するエネルギーが余分に放出され、液滴周囲の温度がより高くなると考えられる。また、エアロゾルの体積は気体と比べ無視できるため、エアロゾル生成領域での圧力は局所的に低くなっていると考えられる。さらにエアロゾルの拡散速度は気体と異なるとともに、重力沈降、熱泳動、拡散泳動などの特有の現象があり、その移動挙動は複雑である。より現実的なシミュレーションには、燃焼を伴う強制対流場におけるエアロゾルの移行挙動を評価する必要がある。

4-2 詳細温度場モデル

化学反応は、反応種濃度や温度に対する依存性が強い。現在、液滴内部は均質化して扱っており、その温度分布は考慮していない。また液滴のごく近傍では燃焼により急激な温度変化が生じていると考えられる。さらに液滴燃焼では、輻射の影響が無視できないことが知られており、これらを考慮したより詳細な温度場計算が必要である。

液滴内部およびごく近傍の温度場計算は、より詳細なメッシュ分割が可能な熱流動解析コードを用いて評価し、その解析結果を燃焼解析に反映させることが考えられる。

4-3 ナトリウム蒸発モデル

本報告では、ナトリウム蒸発量は、ナトリウム蒸気が表面近傍で飽和蒸気圧条件にあると仮定することにより評価を行っている。そのため蒸発量がメッシュ分割に大きく影響されるという問題が生じている。

本来、蒸発は物理的な現象であり、メッシュ分割に影響されないモデル化が必要である。ナトリウム液滴表面には、ナトリウム蒸気が飽和した層が存在していると考えられる。この層からナトリウム蒸気が対流・拡散により供給されると考えることにより、蒸発現象をモデル化し、定式化することができる。

4-4 コードの高速化

液滴燃焼計算には多大な時間を要している。例えば、液滴径 2mm の計算では、実時間 0.1 秒の計算に Alpha チップ（クロック周波数 500MHz）を用いて、約 1 ヶ月を要している。実用的な評価解析を行うためには、計算の高速化が必要不可欠である。

本コードでは、圧縮性の乱流流体解析に拡張 MAC 法を用いており、圧力ポアソン方程式の収束計算に多大な時間を必要としている。収束計算では、各計算点において SOR 法を用いて残差計算を行っている。SOR 法はベクトル化、並列化による高速化が有効であることが知られており、本計算コードでも大幅な計算時間短縮が期待できる。

第5章 結言

本研究では、拡張 MAC 法を用いたナトリウム液滴の燃焼解析コードの検証解析を実施した。液滴径、一様流流速などのさまざまな計算条件に対してパラメータ解析を行い、それらの解析結果に対して定性的・定量的な検討を行った。その結果、以下のことを明らかにした。

- ・ 燃焼量の液滴径に対する増加傾向が、燃焼工学上の知見と適合すること。
- ・ 燃焼量が風速に伴い増加し、液滴燃焼における蒸発量評価式と傾向が一致すること。

以上のことから、本燃焼解析シミュレーションコードが、ナトリウム液滴の燃焼解析に有効との見通しを得ることができた。

謝辞

ナトリウム液滴燃焼解析コードの開発者であり、研究において助言を頂いた熱流体技術開発室の大平博昭副主任研究員、研究会の場で多くの助言をいただいた山口彰熱流体室長代理に感謝の意を表します。

参考文献

- [1] 伊藤和元 他 10 名、“[もんじゅ] ナトリウム漏えい事故に関する技術報告”、日本原子力学会誌、39、9、pp. 704-732 (1997)
- [2] J. C. Birchley and N. Riley, ‘Transient Evaporation and Combustion of a Composite Water-Oil Droplet’, *Combustion and Flame*, 29, pp.145-165 (1977)
- [3] K. Naitoh and K. Kuwahara, ‘Large eddy simulation and direct simulation of compressible turbulence and combusting flows in engines based on the BI-SCALES method’, *Fluid Dynamics Research*, 10, pp.299-325 (1992)
- [4] 山口 彰 他 3 名、“ナトリウム漏洩・燃焼挙動の機構論的解析手法の開発”、PNC TN9410 97-040 (1997)
- [5] 燃焼工学ハンドブック、日本機械学会 (1995)
- [6] 伊藤誠一、“乱流拡散火炎のラージエディシミュレーション”、第 33 回燃焼シンポジウム、27、pp.81-83、東京 (1995)
- [7] K. Kuzuu, K. Ishii and K. Kuwahara, ‘Numerical simulation of premixed flame propagation in a closed tube’, *Fluid Dynamics Research*, 18, pp.165-182 (1996)

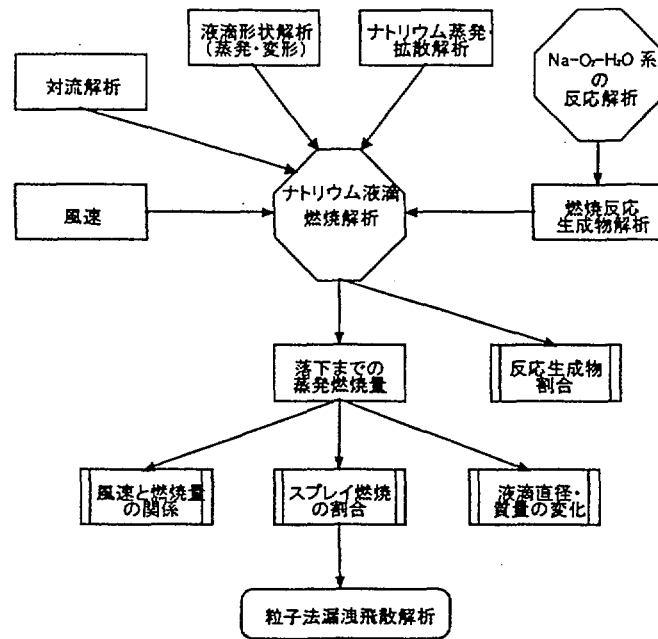


図1 ナトリウム液滴燃焼解析で考慮する現象と相互関係

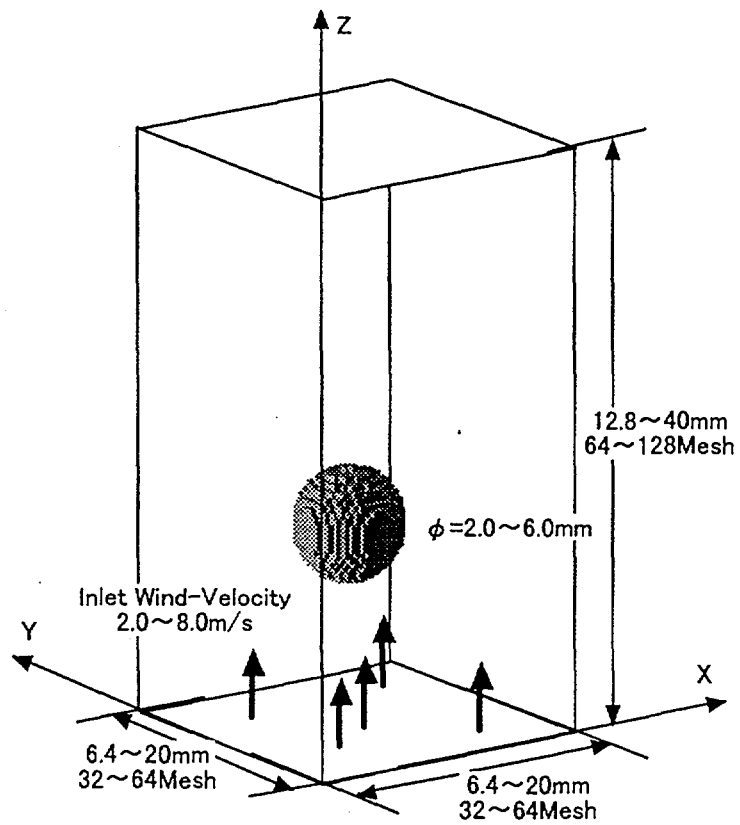


図2 ナトリウム液滴燃焼解析体系

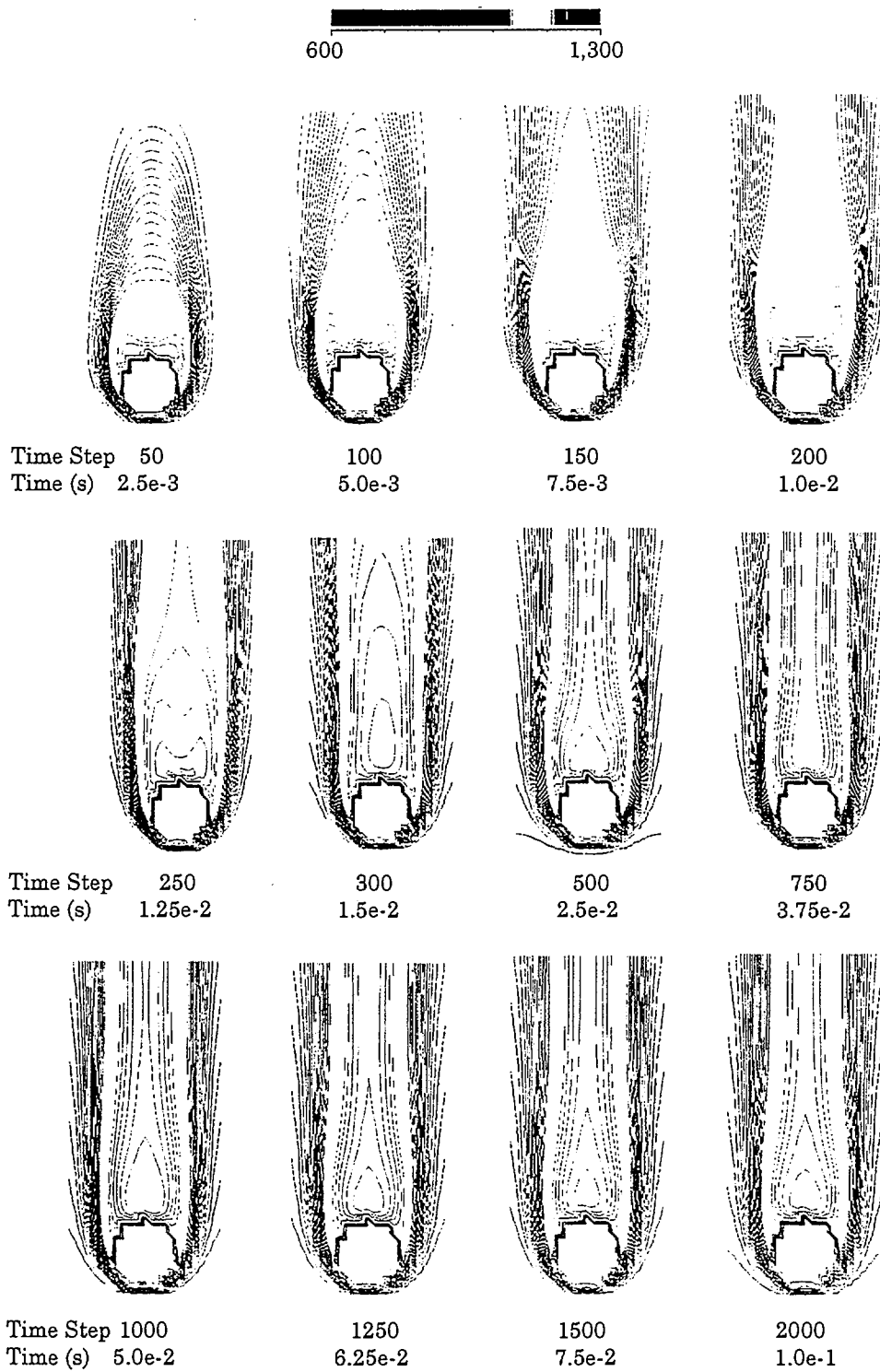


図3 x-z 平面内の温度分布 (ケース1)
(単位 K)

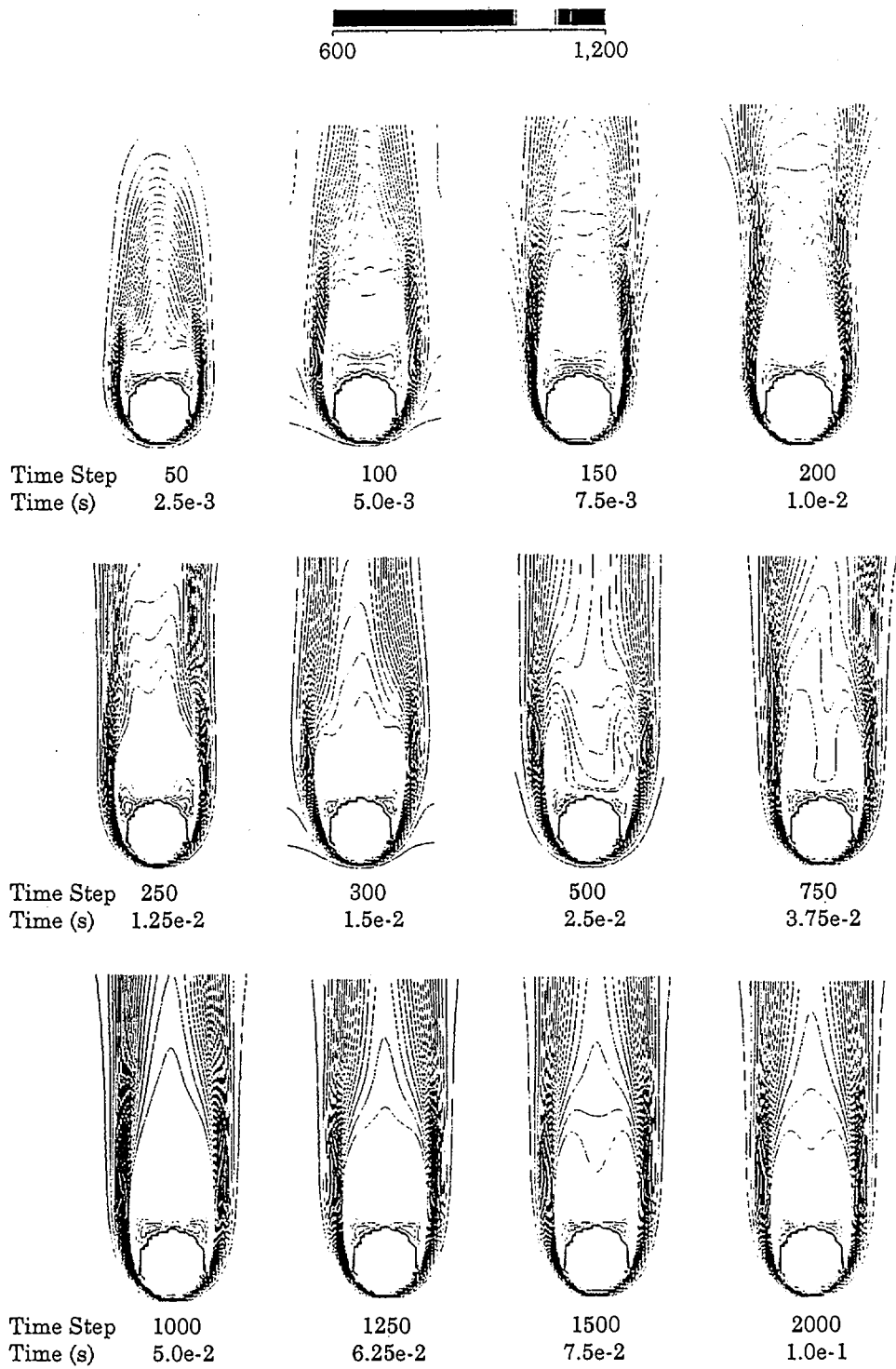


図4 x-z 平面内の温度分布 (ケース2)
(単位 K)

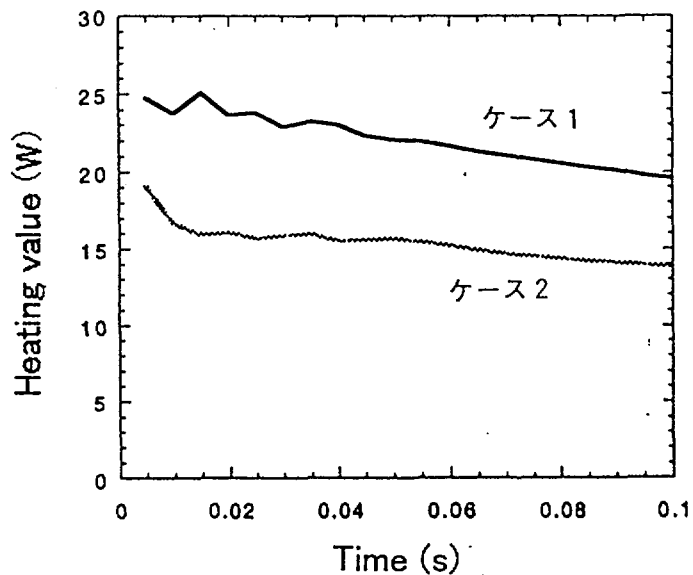


図5 発熱量の時間変化 (ケース1、2)

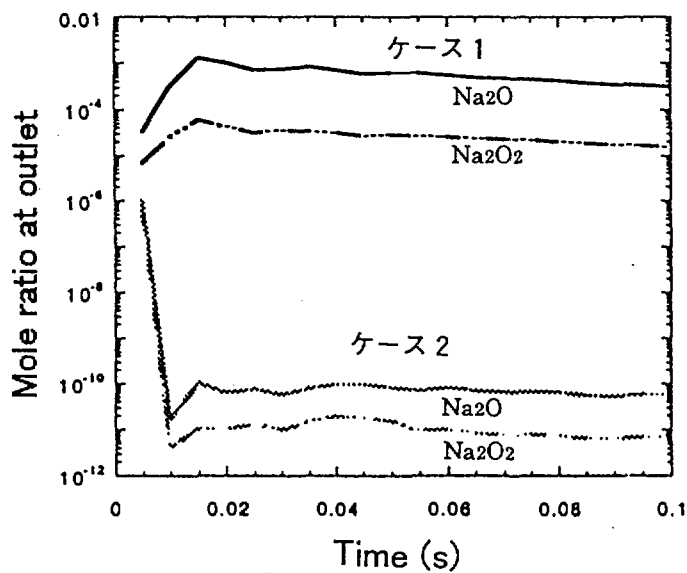


図6 ナトリウム酸化物平均モル分率の流出側における時間変化 (ケース1、2)

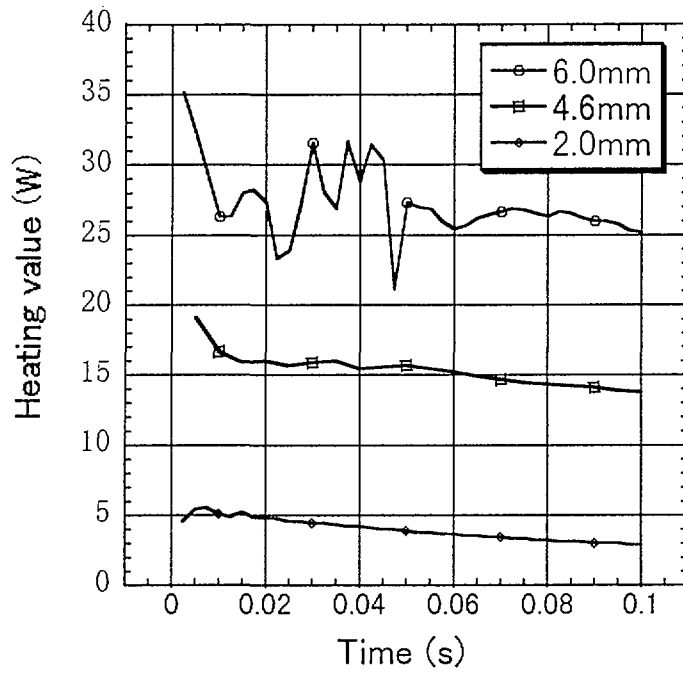


図7 発熱量の時間変化 (ケース 2、3、4)

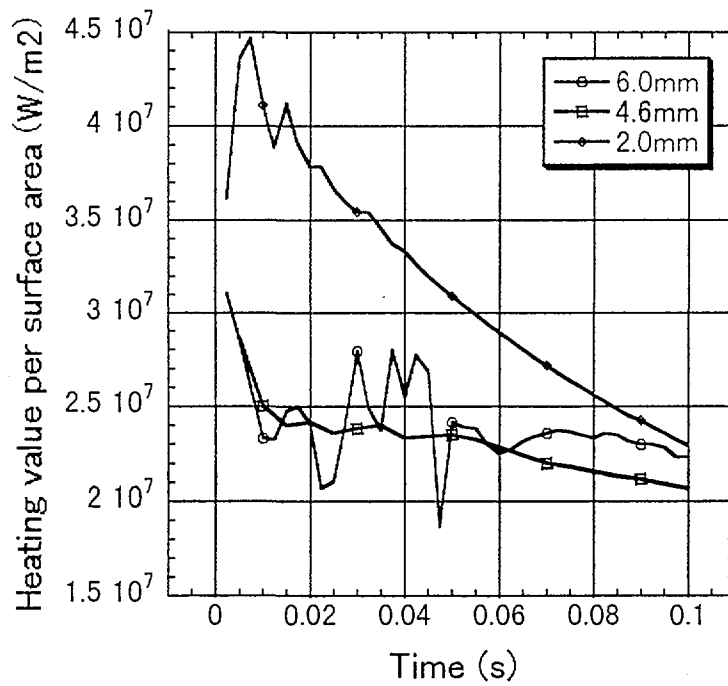


図8 液滴表面積あたりの発熱量の時間変化 (ケース 2、3、4)

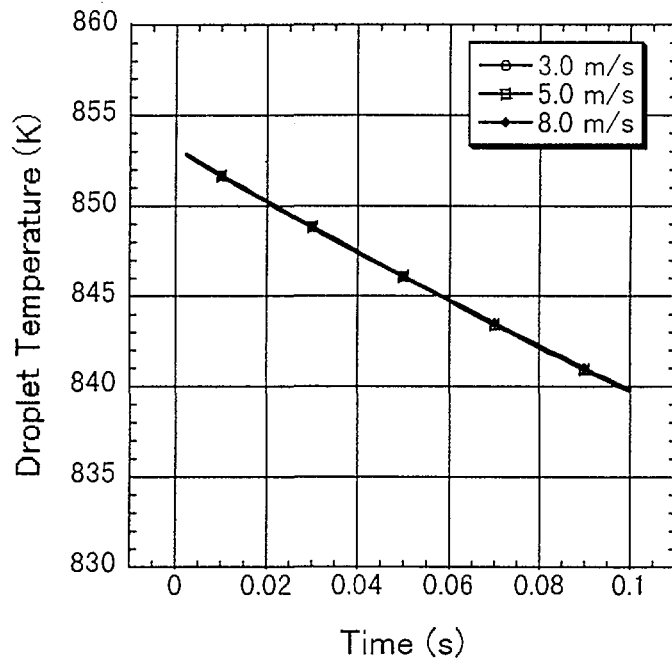


図9 ナトリウム液滴温度の時間変化 (ケース2、5、6)

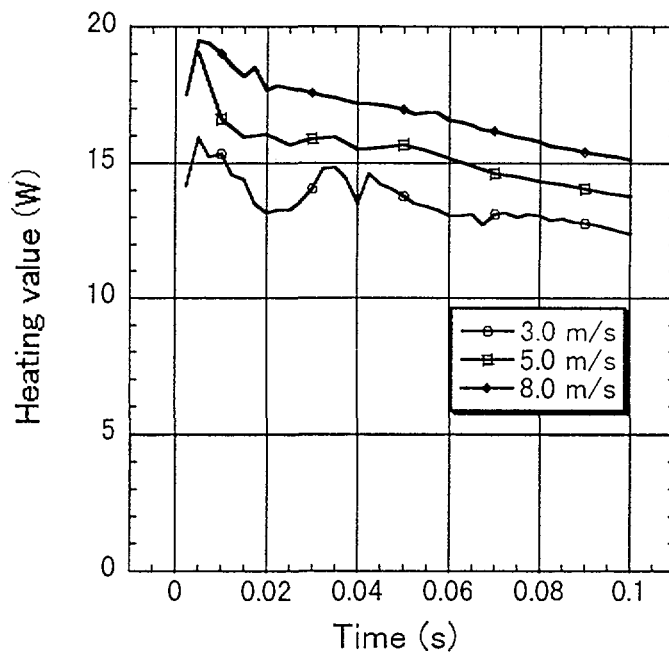


図10 発熱量の時間変化 (ケース2、5、6)

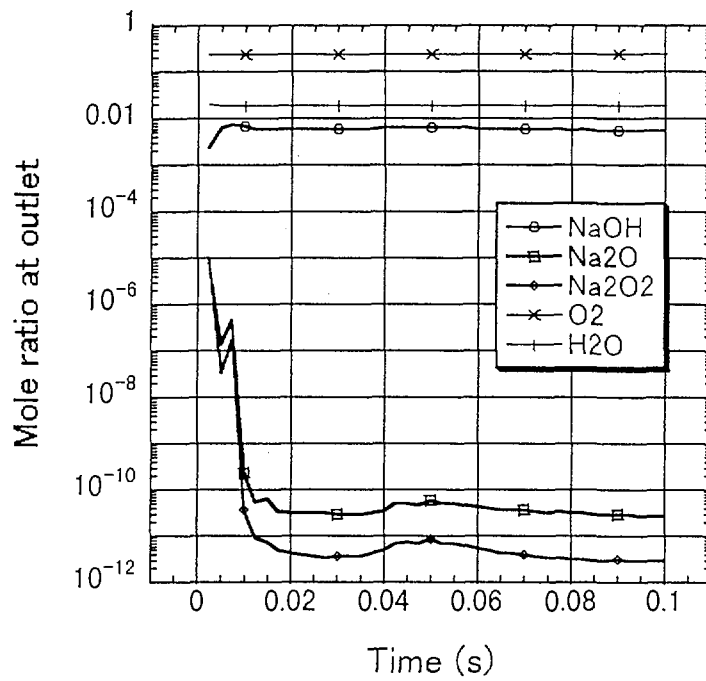


図 1.1 化学反応種平均モル分率の流出側における時間変化 (ケース 6)

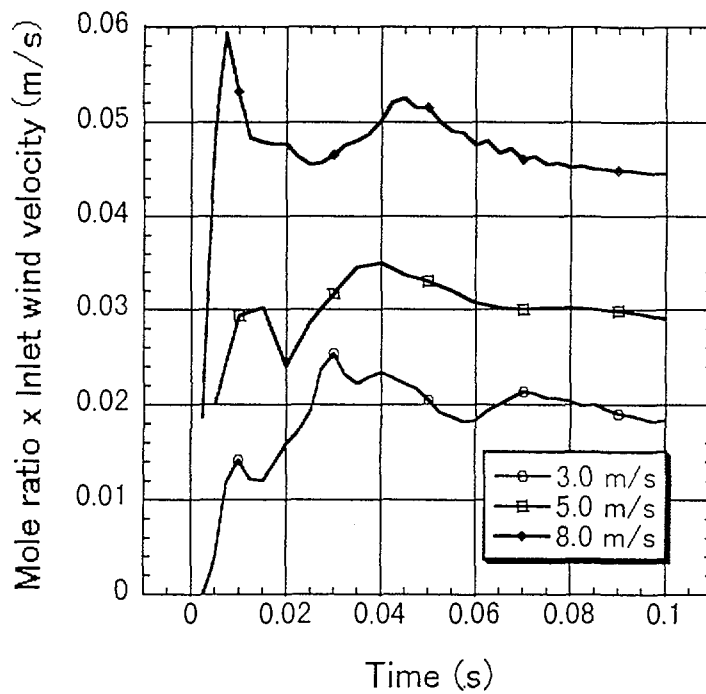


図 1.2 水酸化ナトリウムの流出量の時間変化 (ケース 2, 5, 6)