ランダムフーリエモード法と Lagrange 的分子混合モデルによる 反応性乱流混合層の数値シミュレーション*

鈴木 健^{*1}, 酒井 康彦^{*2}

Numerical Simulation of Reactive Turbulent Scalar Mixing Layer by the Random Fourier Modes Method and Lagrangian Molecular Mixing Model

Takeshi SUZUKI^{*1} and Yasuhiko SAKAI

^{*1} Advanced Manufacturing Research Institute, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
AIST Tsukuba East, 1-2-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki, 305-8564 Japan

A new computational scheme using Lagrangian model of the velocity and molecular mixing for the fluid particle is developed to calculate the reactive scalar field in grid generated turbulence. The model is composed of three parts. The Lagrangian velocity of fluid particle which carries the reacting species is generated by the Random Fourier Modes method. The molecular mixing model (the modified Curl's model) is used to calculate the mixing and diffusion of reactive concentration field, and the chemical reaction model is a second-order and irreversible reaction in the scalar mixing layer. It is shown that the simulated results of the first and second moments of reactive and productive species show the good agreements with of the experimental data.

Key Words : Kinematic Simulation, Diffusion, Turbulent-Like Flow, Fluid Particles, Random Fourier Modes, Reaction

1. は じ め に

乱流中における温度・濃度といったスカラー量の拡散の様子が、層流中のそれとは異なることはよく知られている。乱れによるスカラー量の混合促進作用は、乱流の基本的な特性として流体力学の問題として興味深いばかりでなく、その応用が広範であるため工学的にも重要である。その応用の一つである化学反応を伴う流れは、乱流現象自体の複雑さに加え、反応物質・生成物質の濃度の分布によって場所毎に反応・混合・拡散の挙動が異なるなど多種多様な問題があるため、古くから多くの研究が行われてきた。近年では理論・実験に加え、計算機の性能向上に伴い数値シミュレーションが盛んに行なわれている。

スカラー量の乱流拡散の数値計算法は、基礎方程式の記述法によって、Euler 的手法と Lagrange 的手法の 2 種類に分けることができる。本研究では、Lagrange 的手法の一つである統計シミュレーションモデルを用いて、基本的な流れ場である格子乱流中の化学反応をシミュレートできるコンパクトな計算モデルを構築することを目的とする。なおこの手法は、アルゴリズムが簡単、初期条件・境界条件の設定が容易、空間を離散化しないため数値的安定性の問題が生じにくいなどの計算手法としての特徴をもち、また、乱流拡散現象自体を Lagrange 的な現象として表現するのに適していると考えられる。

Lagrange 的な統計シミュレーションモデルでは、流体中でスカラー量を輸送する流体粒子を仮定し、それら粒子の軌跡を追跡し、モンテカルロ法によってスカラー量の統計量を計算する。この計算法で必要とされるのが、流体粒子の軌跡と直接関係する、乱流場の各座標における流体粒子の速度ベクトルである。その求め方は、Navier-Stokes 方程式を直接、あるいはそこから導出された式を解いて速度場を導く力学的な方法と、乱流場の限定された特徴を反映した式を導き、これを解くことによって速度場を得る運動学的な方法の 2 つに分類できる。前者に属し現

* 原稿受付 2012 年 2 月 28 日

^{*1} 正員, (独)産業技術総合研究所先進製造プロセス研究部門
(〒305-8564 茨城県つくば市並木 1-2-1)

^{*2} 正員, フェロー, 名古屋大学大学院工学研究科
E-mail: suzuki.t@aist.go.jp

在最も良く研究がなされている DNS や LES は、高いレイノルズ数の三次元乱流場に対して十分な時間、空間的な解像度と計算の安定性を保つためには多くの計算時間・演算能力・記憶容量を必要とする。また、計算のために空間を有限個に離散化する必要があり、そのため、数値的な安定性の問題が生じる、空間の任意位置の速度の値は周囲の格子・節点の値から補完しなければならないなどの問題がある。

一方、後者の一つであるランダムフーリエモード法⁽¹⁾⁽²⁾は、一様等方性乱流場を統計的に独立な有限個の非定常フーリエ成分の和として表現する方法であり、空間的に領域分割を必要とする DNS, LES などと比べて必要とされる計算量は少ない。また、任意位置の速度ベクトルを与えられた統計量から再構成できるため、空間に固定された格子に依存しない軌跡を扱う Lagrange 的なシミュレーションに適した計算法である。ランダムフーリエモード法については、Fung ら⁽²⁾によって一様等方乱流場に対して適当な Euler の三次元スペクトル分布を与えることにより高レイノルズ数乱流慣性小領域における乱れの多くの統計的な性質が実験とよく合うことが示された。著者ら⁽³⁾はこの手法によって格子乱流中の乱流スカラー拡散場の数値予測を行った。本研究ではこれを発展させた化学反応を伴う乱流混合モデルを構築する。

なお、ランダムフーリエモード法によって生成された速度場は、カスケード過程のようなモード間のエネルギー移動が考慮されていないなど実際の乱流場とは異なった力学的な性質を有する、いわば「擬似」乱流場である。しかしながら、速度場が常に連続の条件を満足していること、任意の時空間点での 3 次元速度ベクトルを直接得ることができるなど、従来の伊藤型の確率微分方程式⁽⁴⁾を基礎とする確率過程モデルでは実現困難な重要な性質を持ち、粒子追跡のための速度場構成に適した方法であると言える。

生成された速度によって運動する流体粒子が輸送するスカラー量から、拡散や化学反応によるスカラー量の分布の平均値・分散などの統計量を導くモデルとしては Durbin⁽⁵⁾に始まる 2 粒子対モデルがあり、Komori ら⁽⁶⁾, Crone ら⁽⁷⁾, van Dop⁽⁸⁾, 鈴木ら⁽⁹⁾による適用研究例がある。しかしながら、このモデルでは扱える問題が等方一様乱流場および局所的に一様乱流場を仮定できる流れに限られており、また、計算できる量が 2 次モーメントまでであり高次モーメントが計算できない等の欠点がある。したがって、多様な流れ場へのさらなる応用という点で問題点が残る。近年、2 粒子対モデルに代わりスカラーの変動を局所的な混合モデル (micro-mixing model) で表現し、1 個の粒子のみを扱う Lagrange 粒子モデルが提案され、例えば Sawford⁽¹⁰⁾は混合モデルと保存スカラー⁽¹¹⁾を組み合わせたモデルによって、線源拡散の実験や DNS の反応計算との比較を行っている。しかしながら流れ場や化学反応が複雑になった場合の適用にはやはり問題が残っている。

一方、本研究で用いた PDF 法⁽¹²⁾⁽¹³⁾は多種の反応を同時に扱うことができる、分子拡散以外の仮定を必要としない、高次の統計量の算出に高次モーメントの発展方程式を必要としないなどの利点の割に計算量が少なく、本研究の目的であるコンパクトな計算モデルの構築に合致するものである。PDF 法を用いた計算には Sakai ら⁽¹⁴⁾の研究があるが、速度場に確率過程モデルである一般化 Langevin モデルを用いており速度の構成法に問題が残る。

本研究では PDF 法と速度ベクトルの再現性に優れたランダムフーリエモード法を組み合わせ、さらに、分子拡散を表現する混合モデルと組み合わせて多目的に拡張可能なシミュレーションモデルを構築し、計算手法の有効性を考察するために、具体的な問題として格子乱流中に発達する二次の反応を伴う混合層を取り上げ、計算結果と実験結果の比較を行った結果について報告する。

2. シミュレーションモデルの概要

本研究で提案するシミュレーションモデルは、速度場をランダムフーリエモード法⁽¹⁾⁽²⁾により生成し、これに分子混合モデルを組み合わせるスカラー統計量を算出する Lagrange 的な PDF 法⁽¹²⁾⁽¹³⁾である。以下にその概略を示す。

2.1 ランダムフーリエモード法による速度構成のモデル

一様な乱流中のランダムな速度ベクトル $\mathbf{u}$ は、そのフーリエ変換 $S(\mathbf{k}, \omega)$ を与えることによって、一般に次式で示される。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} S(\mathbf{k}, \omega) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)) d\mathbf{k} d\omega \quad (1)$$

ここで, $\mathbf{k}$, ω は波数ベクトルと角周波数を示す. 数値計算では, $\mathbf{u}$ は有限のモード数 N のフーリエ成分の和として次式で表現される.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^N [(\mathbf{a}_n \times \hat{\mathbf{k}}_n) \cos(\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x} - \omega_n t) + (\mathbf{b}_n \times \hat{\mathbf{k}}_n) \sin(\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x} - \omega_n t)] \quad (2)$$

添字 n は n 番目のフーリエモードに関する量であることを示し, $\hat{\mathbf{k}}_n$ は方向が $\mathbf{k}_n$ と一致する単位ベクトル $\hat{\mathbf{k}}_n = \mathbf{k}_n / |\mathbf{k}_n|$ である. ベクトル $\mathbf{a}_n$, $\mathbf{b}_n$, $\mathbf{k}_n$ は各モードに対しそれぞれ独立して選択され, それらが位置 $\mathbf{x}$ に対して独立である場合に $\mathbf{u}$ は自動的に連続の条件を満足する. $\mathbf{k}_n$ は流れ場の各実現に対して完全にランダム (等方的) に配分されるように決定される. $\mathbf{a}_n$, $\mathbf{b}_n$ は, 平均値が零で, 分散が次式で計算される値を持つ 3 次元ガウシアンランダムベクトルである.

$$\langle |\mathbf{a}_n|^2 \rangle = \langle |\mathbf{b}_n|^2 \rangle = 3 \int_{k_n}^{k_{n+1}} E(k) dk \quad (3)$$

ここで $k = |\mathbf{k}|$, $E(k)$ は 3 次元エネルギースペクトル, $\langle A \rangle$ は量 A の式 (2) で計算される乱れ速度場の全ての実現についての集合平均を表す. ランダムフーリエモード法で用いることのできるエネルギースペクトルは, 例えば Karman の 3 次元エネルギースペクトル⁽¹⁵⁾などが考えられるが, 再現する乱流場のレイノルズ数に応じて適当な関数を選択する必要がある. 本研究におけるエネルギースペクトルの選択については後述する.

波数 k の離散化の方法は計算される速度場の良否に大きな影響を及ぼす. ここでは次式の対数的分割⁽²⁾を採用した.

$$k_n = k_1 \left(\frac{k_N}{k_1} \right)^{\frac{n-1}{N-1}} \quad (4)$$

N は分割数, k_N は最大波数, k_1 は最小波数を示す. また, 角周波数 ω_n の離散化は酒井ら⁽¹⁶⁾による分割 $\omega_n = k_n \cdot v_n$ を用いる. ここで, v_n は次式で与えられる.

$$v_n^2 = \frac{2}{3} \int_{k_n}^{k_{n+1}} E(k) dk \quad (5)$$

2.2 PDF 法によるスカラー拡散モデル

非圧縮性流体に対する速度, スカラーの結合 PDF $f(\mathbf{V}, \Psi; \mathbf{x}, t)$ の時間発展方程式は以下のようになる⁽¹³⁾.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V_j \frac{\partial f}{\partial x_j} + \left(g_j - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j} \right) \frac{\partial f}{\partial V_j} + \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} (s_\alpha f) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial V_j} \left[\left(-\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \right) \mathbf{V}, \Psi \right] f + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[\left(\frac{\partial J_i^\alpha}{\partial x_i} \right) \mathbf{V}, \Psi \right] f \quad (6)$$

$\mathbf{V}$, Ψ はそれぞれ速度ベクトル $\mathbf{U}$, スカラー量の配列 $\mathbf{\Gamma} = (\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots)$ に相当するサンプル空間である. $\mathbf{\Gamma}$ の成分 Γ_a は物質 a のスカラー量を表す. 式 (6) の各項の意味は, 左辺の第 1 項が非定常項, 第 2 項が物理空間での f の移流による輸送項, 第 3 項が重力と平均圧力 $\langle p \rangle$ の勾配による $\mathbf{V}$ 空間での f の輸送項, 第 4 項が化学反応による Ψ 空間での f の輸送項である. s_α は物質 α の化学反応による生成である. また, 右辺の第 1 項は粘性応力 τ_{ij} と変動圧力 p' による $\mathbf{V}$ 空間での f の輸送項, 第 2 項は分子拡散による Ψ 空間での f の輸送項である. J_i^α は物質 α の分子拡散フラックスである. $\langle A|B \rangle$ は条件 B についての量 A の条件付の集合平均であることを表す.

本研究で用いる Lagrange 的な PDF 法では, 流体粒子の速度ベクトル $\mathbf{U}$, スカラー量配列 $\mathbf{\Gamma}$, 位置の座標 $\mathbf{x}$ といた状態量 $(\mathbf{U}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{x})$ をモデリングし, 適切な初期条件, 境界条件の下で積分することによって式 (6) の PDF f を有限個数 N の流体粒子の集合として近似した離散 PDF f_N を求め, モンテカルロ法により各種統計量を集合平均として計算する. 近似された離散 PDF f_N と真の PDF f は式 $f(\mathbf{V}, \Psi; \mathbf{x}, t) = \langle f_N(\mathbf{V}, \Psi; \mathbf{x}, t) \rangle$ ⁽¹²⁾ で関係づけられる. すなわち, 離散 PDF f_N の期待値が真の PDF f である.

次に, PDF から求められる統計量について考える. $\mathbf{U}$ と $\mathbf{\Gamma}$ を変数とし, PDF が f で与えられる任意関数 Q を考えると, その期待値は

$$\langle Q(\mathbf{U}, \mathbf{\Gamma}) \rangle = \iint Q(\mathbf{V}, \Psi) f(\mathbf{V}, \Psi; \mathbf{x}, t) d\mathbf{V} d\Psi \quad (7)$$

となる. 同様に, 離散 PDF f_N による Q の期待値は

$$\langle Q(\mathbf{U}, \mathbf{\Gamma}) \rangle_N \equiv \iint Q(\mathbf{V}, \Psi) f_N(\mathbf{V}, \Psi) d\mathbf{V} d\Psi = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Q(\mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{\Gamma}^{(n)}) \quad (8)$$

である。上付き添字 (n) は n 番目の流体粒子に関する量であることを示す。両者の関係は $N \rightarrow \infty$ の極限を考えると中心極限定理より $\langle Q(\mathbf{U}, \mathbf{\Gamma}) \rangle_N = \langle Q(\mathbf{U}, \mathbf{\Gamma}) \rangle$ となり、シミュレーションによる計算結果が試行回数を増加することにより実際の値に近くなることが統計的に示される⁽¹²⁾。ここでは期待値の検証を行ったが、二次以上の高次のモーメントについても同様である。

また、問題を設定するに当たって以下の条件を仮定した。

- (1) PDF は z 方向一様に分布する。
 - (2) 速度場 $\mathbf{U} = (u, v, w)$ は非圧縮であり、ランダムフーリエモード法によってスカラーの発展方程式とは独立に決定される。
 - (3) 反応物質は A, B の 2 種類、生成物質は P の 1 種類、従って $\mathbf{\Gamma} = (\Gamma_A, \Gamma_B, \Gamma_P)$ 。また、 $s_A = s_B = -s_P = -k_R \Gamma_A \Gamma_B$ 。ここで k_R は反応速度定数である。
- (1)~(3) の条件下で、式 (6) を速度空間について積分すれば、各物質 α についての離散化された結合 PDF $f_{\alpha N}$ の輸送方程式は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\alpha N}}{\partial t} + u \frac{\partial f_{\alpha N}}{\partial x} + v \frac{\partial f_{\alpha N}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \Psi_A} (-k \Psi_A \Psi_B f_{\alpha N}) + \frac{\partial}{\partial \Psi_B} (-k \Psi_A \Psi_B f_{\alpha N}) \\ = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \Psi_A} \left[\left\langle \frac{\partial J_i^A}{\partial x_i} \middle| \Psi \right\rangle f_{\alpha N} \right] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \Psi_B} \left[\left\langle \frac{\partial J_i^B}{\partial x_i} \middle| \Psi \right\rangle f_{\alpha N} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

2.3 分子拡散と粒子の移流のモデル化

式 (9) の右辺は分子拡散の効果を表すものであり、式を閉じるために適当なモデリングを必要とする。PDF 法に対する分子拡散のモデルについては多くの方法が提案されている^{(17)~(19)}。本研究ではモデルの簡便性より修正 Curl モデル^{(20)~(22)}を用いた。以下に概要を示す。

n 番目の流体粒子が分子拡散により他の粒子と混合する確率 $p^{(n)}$ を次式で与える。

$$p^{(n)} = \frac{3C_\phi dt}{\tau(\mathbf{x}^{(n)}(t))} \quad (10)$$

ここで、 C_ϕ は定数、 $\tau(\mathbf{x}(t))$ は乱れの時間スケールである。 m 番目の粒子が混合の対となるとすると、この確率で混合が起きるときそれぞれの粒子の持つ物質 α についてのスカラー量 Γ_α を物質毎に

$$\begin{aligned} \Gamma_\alpha^{(m)} &= (1-\beta)\Gamma_\alpha^{(m)} + \frac{1}{2}\beta(\Gamma_\alpha^{(n)} + \Gamma_\alpha^{(m)}) \\ \Gamma_\alpha^{(n)} &= (1-\beta)\Gamma_\alpha^{(n)} + \frac{1}{2}\beta(\Gamma_\alpha^{(n)} + \Gamma_\alpha^{(m)}) \end{aligned} \quad (11)$$

で置きかえる。 β は $0 \leq \beta \leq 1$ の一様乱数である。対となる粒子の選択については、混合の局所性を考慮し距離が最も近い粒子を選ぶものとする。

流体粒子の移流については $d\mathbf{x} = \mathbf{U}dt$ で計算し、特別な物理モデルは用いない。なお、流体粒子は質量を持たないものとし、浮力および熱対流の影響は考慮しないものとする。従って、反応物質と生成物資の移流・拡散に伴う密度の変化、反応に伴う発熱など、拡散や化学反応の結果は流れ場に影響を及ぼさないものとする。

3. 数 値 実 験

前章で示したシミュレーションモデルを用いて、反応を伴う予混合のない乱流中のスカラー混合層の数値シミュレーションを行った結果を示す。

3.1 計算の条件

本研究で対象とした流れ場は Komori ら⁽²³⁾⁽²⁴⁾による格子乱流中の反応性スカラー混合層である。流れ場、濃度拡散場の概要を図 1 に示す。座標系は乱流格子の位置を原点として下流方向を x 軸として右手系で定められる。流れ場は乱流格子直前まで上下に分離されており、それぞれに反応物質 A, B が注入される。反応物質 A, B は乱流格子の直前まで分離しているが、乱流格子の直後から混じり合い、スカラー混合層を形成しつつ反応が成立し、生

Fig. 1 Coordinate system and schematic sketch of reactive mixing layer in grid-turbulence.

成物質 P が生じる。反応物質 A, B の領域で速度差が無い場合スカラー混合層内では大規模な渦構造が生じることなく、格子によって生じた乱れが下流へ減衰しながら移流する流れ場である。乱流格子の寸法 M は $M = 0.02\text{m}$ 、平均流速 U_m は $U_m = 0.25\text{m/s}$ であり、格子 Reynolds 数は 5 000 となる。

計算で用いる速度場およびスカラー量を決定する各パラメータは Komori ら⁽²³⁾の実験条件に合わせて決定した。シミュレーションの対象とする化学反応は、例えば、 $\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$, $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{NH}_4\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COONH}_4 + \text{H}_2\text{O}$ のような $A + B \rightarrow P$ の形で示される 2 成分不可逆反応であり、Damköhler 数 $Da = k_R(\Gamma_A \Gamma_B)^{1/2} T_L = 0.34$ の反応の場合と無反応の単純な混合 ($Da = 0$) の場合について計算を行った。ここで、 k_R は反応速度係数、 T_L は Lagrange の時間スケールであり $T_L = M/U_m$ の見積りを用いた。

さらに、保存スカラー理論⁽¹¹⁾を用いて化学反応が瞬間的に生じる場合の統計量を以下の式より算出した。物質 A, B, P の濃度は保存スカラーである混合分率 F を用いて次の関係があることが示される⁽¹¹⁾。

$$\Gamma_A - \Gamma_B = F(\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0}) - \Gamma_{B0} \quad (12)$$

$$\Gamma_A + \Gamma_P = F\Gamma_{A0} \quad (13)$$

$$\Gamma_B + \Gamma_P = (1 - F)\Gamma_{B0} \quad (14)$$

混合分率 F の化学量論値 $F_S = \Gamma_{B0}/(\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0})$ を用いて $Da = O(10^8)$ の実験に相当する瞬間的な反応の場合の濃度は Da が無限の極限を取るとき ($Da \rightarrow \infty$) の値として次式で求められる。

$$\lim_{Da \rightarrow \infty} \Gamma_A = (\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0})(F - F_S)H(F - F_S) \quad (15)$$

$$\lim_{Da \rightarrow \infty} \Gamma_B = (\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0})(F_S - F)H(F_S - F) \quad (16)$$

$H(x)$ は Heaviside 関数である。式 (13) と式 (15) から $Da \rightarrow \infty$ の場合の Γ_P の値を計算する。

速度場生成に用いるエネルギースペクトルは、計算対象となる流れ場の格子 Reynolds 数が 5 000 程度と比較的高くないことを考慮し、慣性小領域の部分が小さい等比較的低い Reynolds 数の流れ場の特徴を有している Kraichnan⁽¹⁾ の提案した以下の 3 次元エネルギースペクトルを用いた。

$$E(k) = 16(2/\pi)^{1/2} u_0'^2 k^4 k_0^{-5} \exp(-2k^2/k_0^2) \quad (17)$$

u_0' は流れ場の乱れ速度の rms 値、 k_0 は流れ場の代表長さの逆数である。波数の分割数 N は 50、最大波数 k_N 、最小波数 k_1 は単位質量あたりの運動エネルギーが $u_0'^2/2$ となるように調整される。

k_0^{-1} として Euler の長さスケール L_E を用い、 L_E は Kaplan ら⁽²⁵⁾と同様に、Lagrange の時間スケール $T_L/\tau = 4/(3C_0)$ から $L_E = u_0' T_L/0.6$ として見積もる。 τ は乱れの時間スケール、 C_0 は Kolmogorov 定数である。 u_0' は Komori ら⁽²³⁾の測定結果に合わせて次式で与える。

$$u_0'^2 = 0.0556 U_m^2 \left(\frac{x}{M} \right)^{-1.59} \quad (18)$$

ランダムフーリエモード法は一様等方的な擬乱流場をシミュレーションする計算方法であり、計算される速度場は一様等方的ガウシアン乱流場の統計法則に従うものである。しかしながら、本研究でシミュレーションの対

象とする格子乱流場では乱れの一様性が厳密に保たれることはなく、乱流格子から遠くなるにつれて速度の乱れは減少し、長さ・時間のスケールは大きくなるため、この方法をそのまま用いるのは適当ではない。よって、本研究では与えるエネルギースペクトルの空間的变化、具体的には、式 (17) に示すエネルギースペクトル $E(k)$ の中のパラメータである u'_0 と k_0 を粒子の位置毎に設定することにより、格子乱流場の減衰性を表現した。

乱れの時間スケール τ は流れのエネルギー κ と散逸 ε の比から $\tau = \kappa/\varepsilon$ として見積もる。本研究では等方性を仮定し、凍結乱流仮説より、

$$\tau = \left(\frac{3}{2} u_0'^2 \right) \left/ \left(-\frac{3}{2} U_m \frac{\partial u_0'^2}{\partial x} \right) \right. = 0.627 \frac{M}{U_m} \left(\frac{x}{M} \right) \quad (19)$$

とした。Kolmogorov 定数 C_0 は Pope⁽¹²⁾ と同様に 2.1 とした。

混合の確率を表す式 (10) 中の定数 C_ϕ は以下の様に定めた。 C_ϕ とスカラー量の分散 γ'^2 の時間変化には次式の関係がある⁽¹⁷⁾。

$$\frac{d\gamma'^2}{dt} = -C_\phi \frac{\varepsilon}{\kappa} \gamma'^2 = -\frac{C_\phi}{\tau} \gamma'^2 \quad (20)$$

Komori ら⁽²³⁾の実験では $\gamma_A'^2 = 0.325(x/M)^{-0.331}$ であるので、これを式 (20) に代入し、さらに凍結乱流仮説により時間微分と空間微分の置き換えを行い、 $C_\phi = 0.21$ を得る。計算領域は $2 \leq x/M \leq 20$, $-2 \leq y/M \leq 2$, 時間増分は $\Delta t = 0.01s$ である。

計算方法は、まず計算領域全体にランダムに流体粒子を配置し、全ての粒子に、その y の位置に対応した濃度の値を以下のように与える。

$$\begin{aligned} \Gamma_A/\Gamma_{A0} &= 1, & \Gamma_B/\Gamma_{B0} &= 0 & \text{if } y \leq 0 \\ \Gamma_A/\Gamma_{A0} &= 0, & \Gamma_B/\Gamma_{B0} &= 1 & \text{if } y > 0 \end{aligned} \quad (21)$$

Γ_{A0} , Γ_{B0} は混合前の反応物質 A, B の濃度値である。次に、ランダムフーリエモード法で生成された乱れ速度および平均速度 U_m により全ての粒子を移流させる。移流の結果、領域の下流側境界 ($x/M = 20$) を超えた流体粒子については、それと同数の流体粒子を上流側境界上に y 方向はランダムに再配置し、式 (21) に従って濃度の値を再度与える。その後全粒子についてスカラー量の反応、混合の計算を行う。これを 1 ステップとし、時間を Δt で増加しながらステップを繰り返し実行し、全流体粒子数の 150% 程度の数 of 流体粒子が流出・再配置された時点でスカラー統計量の計算を行う。 y 方向の境界を越えた流体粒子については完全反射壁の条件を適用する。

粒子数は 400 000 で、統計量は領域内を $0.2M \times 0.2M$ 毎に分割した 1 800 の小領域において集合平均をとったものである。粒子個数の偏りについては、例えば繰り返しの最終の時間ステップにおいて、小領域内の平均粒子個数 222 に対して標準偏差は 32 であった。粒子の速度から位置を決める時間積分には 2 次の Adams-Bashforth 法を用いた。

3.2 計算結果および考察

図 2 にはランダムフーリエモード法を用いて計算した乱れ速度の rms 値の流れ下流方向の変化を示す。横軸は格子寸法 M で無次元化された格子からの距離 x である。図中の実線 u'_0 は Komori ら⁽²³⁾の測定から得られた式 (18) である。またシンボルで示された $\langle u' \rangle$, $\langle v' \rangle$, $\langle w' \rangle$ はそれぞれ x , y , z 方向の計算された乱れ速度の rms 値を示す。図 2 より、計算された各方向の乱れ速度の rms 値は測定された値によく一致しており、乱れの速度場がランダムフーリエモード法を用いた計算によってよく再現されていることが示された。

図 3 は反応物質 A の濃度の平均値 $\langle \Gamma_A \rangle$ の $y = 0$ における流れ下流方向への推移を示す。また図 4 には生成物質 P の濃度の平均値 $\langle \Gamma_P \rangle$ の $y = 0$ における流れ下流方向への推移を示す。格子位置からの下流方向距離 x は格子寸法 M で無次元化され、濃度の平均値 $\langle \Gamma \rangle$ は、反応物質 A については混合前の濃度の値 Γ_{A0} , 生成物質 P については $\Gamma_{P0} = \Gamma_{A0}\Gamma_{B0}/(\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0})$ で各々無次元化される。図中に示した“Exp”は Komori ら⁽²⁴⁾による実験の結果を示す。いずれの計算結果も実験の結果とほぼ一致しており、計算モデルが現象をよく表現していることが示される。なお、図中には示さなかったが反応物質 B の推移の傾向は反応物質 A と同様であることを確認している。

なお、Komori ら⁽²³⁾の実験は速度差を伴わないスカラー混合層であり、速度差を有する流れ場⁽²⁶⁾⁽²⁷⁾の場合とはスカラー量の分布が異なる。反応の無い場合は速度差の有無に依らず同様の分布を示すが、反応がある場合は速度差の無い場合とある場合で大きな差があることが示される。即ち、速度差の無い Komori ら⁽²³⁾の結果では反応に

Fig. 2 Variation of the rms value of turbulent velocity components in grid-turbulence.

Fig. 3 Longitudinal profiles of the mean concentration of species A

Fig. 4 Longitudinal profiles of the mean concentration of product P

Fig. 5 Longitudinal profiles of mean squared value of the concentration fluctuation of species A and product P

に伴い徐々に反応物質が減少する結果となるが、速度差のある Matsutani ら⁽²⁷⁾の結果では反応に伴う減少だけではなく速度差による速度混合層中の渦構造によって反応物質が反応することによる大きな輸送が確認できる。

図 5 には $y=0$ における反応物質 A と生成物質 P の濃度の値の分散 $\langle \gamma^2 \rangle$ の流れ下流方向への推移を示す。図中にシンボルで示した“Exp”は Komori ら⁽²³⁾による測定結果である。分散の値は Γ_{A0}^2 , Γ_{P0}^2 を用いて無次元化される。

反応物質 A については $Da=0$ と $Da \rightarrow \infty$ の計算結果の比較により、常に $Da=0$ の場合が $Da=O(10^8)$ よりも大きいという実験の測定結果に定量的に一致しており、本モデルを用いた計算結果は妥当であると判断できる。 $Da=0.34$ に該当する測定の結果は存在しないが、計算の結果から $Da=0$ と $Da=O(10^8)$ の実験結果の中間の値を取ることが示される。生成物質 P については測定の結果が存在しないが、計算の結果から下流に向かうにつれて混合・反応が激しくなり濃度の濃淡が入り混じる状態となるため、濃度の値の分散 $\langle \gamma_P^2 \rangle$ が増加する傾向が示される。

図 6 は反応物質 A の濃度の平均値 $\langle \Gamma_A \rangle$ の y 方向の分布を示す。無反応に相当する $Da=0$ 、瞬間反応に相当する $Da \rightarrow \infty$ (計算), $Da=O(10^8)$ (実験) のそれぞれの場合について、 $x/M=6, 12, 20$ の各位置について計算の結果と実験による測定の結果の比較を示す。図中にシンボルで示した“Exp”は Komori ら⁽²³⁾による実験の結果である。各値は反応物質 A の混合前の濃度 Γ_{A0} で無次元化されている。

図より、 $Da=0$ の無反応の場合は、濃度の平均値は格子に近いところではステップ形状に近い分布をしているが、下流に向かうに従って混合が進み、完全な混合である $\Gamma_A/\Gamma_{A0}=0.5$ の一様分布へ近づく傾向が示される。瞬間反応に相当する $Da=O(10^8)$ の実験、 $Da \rightarrow \infty$ の計算の場合も同様な傾向が見られるが、反応で物質 A が消費さ

Fig. 6 Transverse profiles of the mean concentration of species A at $x/M=6, 12$ and 20 in a rapid reacting flow ($Da = O(10^8)$, $Da \rightarrow \infty$) and nonreacting flow ($Da = 0$).

Fig. 7 Transverse profiles of the mean concentration of species B at $x/M=6, 12$ and 20 , species A, and product P at $x/M=12$ in a moderately reacting flow ($Da = 0.34$).

れるため、濃度の平均値が同じ x/M の位置であっても無反応の場合と比べて値が小さくなるのがわかる。無反応、瞬間反応のどちらの場合も計算の結果と実験の測定値はよく一致し、本モデルを用いることによって濃度場の平均量は適切に計算されているといえる。

図7は $Da = 0.34$ の場合の $x/M = 12$ の位置における反応物質 A, B, 生成物質 P の濃度の平均値 $\langle \Gamma \rangle$ の y 方向の分布を示す。反応物質 B については、 $x/M = 6, 20$ の場合の計算結果も同時に示す。各値はそれぞれ反応物質 A, B の混合前の濃度の値 Γ_{A0} , Γ_{B0} および Γ_{P0} で無次元化される。

図中にシンボルで示した“Exp”は Komori ら⁽²³⁾による $Da = 0$ および $Da = O(10^8)$ の実験による反応物質 A の濃度の測定結果である。計算により、濃度の平均値の分布については、(1) $x/M = 12$ が同じ位置では反応物質 A, B の分布が対称であること、(2) 反応物質 B は、格子からの距離が離れるほど分布がなだらかになっており、図6に示された $Da = 0$ および $Da = O(10^8)$ の場合の反応物質 A と同じ傾向を示すこと、(3) 生成物質 P の分布は $y = 0$ にピークを取る対称な分布であること、がわかる。

また、反応物質 A については $Da = 0.34$ に該当する実験結果が存在しないが、保存スカラー理論⁽¹¹⁾から $Da = 0.34$ のときの値は $Da = 0$ の場合の値と $Da \rightarrow \infty$ の場合の値の間であることが分かっている。図7に示された計算結果ではこのことが示され、保存スカラー理論から導かれた結果が本モデルを用いた計算によって確認された。

図8, 図9には反応物質 A の濃度の値の分散 $\langle \gamma_A^2 \rangle$ の $x/M = 6, 12, 20$ の各位置における y 方向の分布を示す。図8は $Da = 0$ の無反応の場合の実験および計算の結果を、図9には瞬間反応に対応する $Da = O(10^8)$ の実験および $Da \rightarrow \infty$ の計算の結果を示す。図中にシンボルで示した“Exp”は Komori ら⁽²³⁾による実験の測定の結果を示す。なお、各値はそれぞれ反応物質 A, B の混合前の濃度の値 Γ_{A0} , Γ_{B0} および Γ_{P0} で無次元化される。

実験による測定値は、図8で示される無反応の場合は、反応物質 A の濃度の値の分散 $\langle \gamma_A^2 \rangle$ の分布が $y = 0$ についてほぼ対称であるが、図9に示される反応が生じる場合は反応の混合層の境界と考えられる位置へ分布の頂点が移動することが示される。計算の結果についても無反応の場合、反応を伴う場合共にその特徴的な分布がよく再現される。さらに、混合層の成長と共に、下流へ向かうに従って濃度の値の分散 $\langle \gamma_A^2 \rangle$ の分布が拡がりをもって成長する傾向も実験の結果とよく一致している。

図10には $Da = 0.34$ の場合の反応物質 A, B, 生成物質 P の濃度の値の分散 $\langle \gamma_\alpha^2 \rangle$ ($\alpha = A, B, P$) の位置 $x/M = 12$ における y 方向の分布を示す。分散の値は反応物質 A, B のそれぞれの混合前の濃度の値で無次元化される。比較対象とした実験結果は図8, 図9に示された反応物質 A の $x/M = 12$ における、無反応、瞬間反応の実験⁽²³⁾である。図から反応物質 A, B については図9に示されるように、それぞれの初期位置側に偏った分布をしている様子が再現された。また、本モデルを用いた計算の結果と実験の結果の比較から、反応物質 A についてはその大きさは無反応と瞬間反応の中間値を取っていることがわかる。反応物質 B については測定値が存在しないが、良好な

Fig. 8 Transverse profiles of the mean squared value of the concentration fluctuation of species A at $x/M=6, 12$ and 20 in a nonreacting flow ($D_a = 0$).

Fig. 9 Transverse profiles of the mean squared value of the concentration fluctuation of species A at $x/M=6, 12$ and 20 in a rapid reacting flow ($D_a = O(10^8), D_a \rightarrow \infty$).

Fig. 10 Transverse profiles of the mean squared value of the concentration fluctuation of species A, B and product P at $x/M=12$ in a moderately reacting flow ($D_a = 0.34$).

Fig. 11 Longitudinal profiles of the mass flux of species A in a rapid reacting flow ($D_a = O(10^8), D_a \rightarrow \infty$) and nonreacting flow ($D_a = 0$).

対称性より、反応物質 A と同様な分布であることが推定できる。一方、生成物質 P の分布は反応物質 A と B の分布全体にわたり、中心部にピークを持つ分布であることが示される。

図 11 には $D_a = 0$ および $D_a \rightarrow \infty$ の場合の反応物質 A の濃度フラックス $\langle v \gamma_A \rangle$ の流れ下流方向への推移を示す。図中の“Exp”で示すシンボルは Komori ら⁽²³⁾による実験の結果を示す。また、図 12 には反応物質 A と B の濃度の相関係数 $R_{AB} = \overline{\gamma_A \gamma_B} / \gamma_A' \gamma_B'$ の流れ下流方向への推移を示す。図 13 には反応物質 A と B の濃度の分離パラメータ $\alpha = \overline{\gamma_A \gamma_B} / \Gamma_A \Gamma_B$ の流れ下流方向への推移を示す。図 12, 図 13 中の“Exp”で示すシンボルは図 3 と同様に Komori ら⁽²⁴⁾による実験の結果である。

図 11 の濃度フラックスについては、実験結果で示される反応の有無に関らず単調に減少する傾向が本モデルによって再現される。また、図 12 の濃度の相関係数、および図 13 の濃度の分離パラメータについては、Damköhler 数によって全く異なる傾向を示すことが実験結果によって示されるが、本モデルによって、これら諸量についても、実験結果とほぼ同様の結果を得ることができた。

Fig. 12 Longitudinal profiles of the correlation coefficient between specie A and B.

Fig. 13 Longitudinal profiles of the segregation parameter.

4. お わ り に

本研究では、流れを伴う多種多様な化学反応場のシミュレーションを行うことを目的とし、そのために、乱流速場場のモデルにフーリエモード法、スカラー量の計算モデルとして、分子混合モデルと組み合わせた PDF 法を用いた Lagrange 的な統計シミュレーションモデルを提案した。このモデルの特徴は、(1) 乱流拡散を Lagrange 的な現象としてよく表現できること、(2) 速度場のモデルとして従来のランダムウォークモデルではなくランダムフーリエモード法を用い、流れ場の連続性を保証すると共に剪断流れ場への拡張を可能としたこと、(3) スカラー量の拡散・反応のモデルとして、単純な拡散現象・化学反応から反応が多種に渡る複雑な化学反応まで扱うことができる PDF 法を用い、プラント内部のシミュレーションなど計算モデルの応用の可能性を拡大したこと、である。

計算モデルの検証のため、2 反応物質による格子乱流中の予混合の無い反応性スカラー混合層のシミュレーションを行った。実験と条件を合わせた計算の結果、濃度の平均、分散の値、また、質量フラックス、相関係数、分離パラメータなどの諸統計量について実験の結果と傾向および定量的によく一致することが示され、提案する計算モデルが格子乱流中の化学反応場のシミュレーションに有効であることが示された。

文 献

- (1) Kraichnan, R.H., "Diffusion by a Random Velocity Field", *Physics of Fluids*, Vol.13, No.1 (1970), pp.22-31.
- (2) Fung, J.C.H., Hunt, J.C.R., Malik, N.A., and Perkins, R.J., "Kinematic Simulation of Homogeneous Turbulence by Unsteady Random Fourier Modes", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.236 (1992), pp.281-318.
- (3) Sakai, Y., Suzuki, T., and Nakamura, I., "Simulation of Scalar Fluctuation Field by a Non-buoyant Plume in Grid-generated Turbulence by Random Fourier Modes Method", *IUTAM Symposium on Geometry and Statistics of Turbulence*, (2001), pp.191-196, Kluwer.
- (4) Durbin, P.A., "A Random Flight Model of Inhomogeneous Turbulent Dispersion", *Physics of Fluids*, Vol.23, No.11 (1980), pp.2151-2153.
- (5) Durbin, P.A., "A Stochastic Model of Two-particle Dispersion and Concentration Fluctuations in Homogeneous Turbulence", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.100, No.2 (1980), pp.279-302.
- (6) Komori, S., Hunt, J.C.R., Kanzaki, T., and Murakami, Y., "The Effects of Turbulent Mixing on The Correlation Between Two Species and on Concentration Fluctuations in Non-premixed Reacting Flows", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.228 (1991), pp.629-659.
- (7) Crone, G.C., Dinar, N., van Dop, H., and Verver, G.H.L., "A Lagrangian Approach for Modelling Turbulent Transport and Chemistry", *Atmospheric Environment*, Vol.33 (1999), pp.4919-4934.
- (8) van Dop, H., "The Evaluation of a Lagrangian Model for Turbulent Transport and Chemistry", *Physics of Fluids*, Vol.13, No.5 (2001), pp.1331-1342.

- (9) 鈴木健, 酒井康彦, “フーリエモード法と 2 粒子対逆拡散モデルによる反応性スカラー混合層の数値計算”, 第 51 回理論応用力学講演会講演論文集, (2002), pp.285-286.
- (10) Sawford,B.L., “Lagrangian Stochastic Modelling of Chemical Reaction in a Scalar Mixing Layer”, *Boundary-Layer Meteorology*, Vol.118 (2006), pp.1-23.
- (11) Bilger,R.W., Saetran,L.R., and Krishnamoorthy,L.V., “Reaction in a Scalar Mixing Layer”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.233 (1991), pp.211-242.
- (12) Pope,S.B., “PDF Methods for Turbulent Reactive Flows”, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol.11 (1985), pp.119-192.
- (13) Pope,S.B., “Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol.26 (1994), pp.23-63.
- (14) Sakai,Y., Kubo,T., and Nakamura,I., “Stochastic Simulation of a Reactive-Scalar Mixing Layer in a Grid Turbulence by the PDF method”, *Proceedings of the 3rd ASME/JSME Joint Fluids Engineering Conference*, FEDSM99-7771 (1999).
- (15) Hinze,J.O., *Turbulence 2nd ed.* (1975), p.185, McGraw-Hill.
- (16) 酒井康彦, J.C.R., HUNT, J.C.H., FUNG, “ランダムフーリエモードとランダムフライトの複合モデルによる流体粒子の拡散に関する研究”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol.57, No.537 (1991), pp.1673-1680.
- (17) Mitarai,S., Riley,J.J., and Kosály,G., “Testing of Mixing Models for Monte Carlo Probability Density Function Simulations”, *Physics of Fluids*, Vol.17 (2005), 047101.
- (18) Meyer,D.W. and Jenny,P., “Micromixing Models for Turbulent Flows”, *Journal of Computational Physics*, Vol.228 (2009), pp.1275-1293.
- (19) Meyer,D.W., “A New Particle Interaction Mixing Model for Turbulent Dispersion and Turbulent Reactive Flows”, *Physics of Fluids*, Vol.22 (2010), 035103.
- (20) Janicka,J., Kolbe,W., and Kollmann,W., “Closure of the Transport Equation for the Probability Density Function of Turbulent Scalar Fields”, *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, Vol.4 (1979), pp.47-66.
- (21) Dopazo, C., “Relaxation of Initial Probability Density Functions in the Turbulent Convection of Scalar Fields”, *Physics of Fluids*, Vol.22, No.1 (1979), pp.20-30.
- (22) Pope,S.B., “An Improved Turbulent Mixing Model”, *Combustion Science and Technology*, Vol.28 (1982), pp. 131-145.
- (23) Komori,S., Nagata,K., Kanzaki,T., and Murakami,Y., “Measurements of Mass Flux in a Turbulent Liquid Flow with a Chemical Reaction”, *AIChE Journal*, Vol.39, No.10 (1993), pp.1611-1620.
- (24) Komori,S., Kanzaki,T., and Murakami,Y., “Concentration Correlation in a Turbulent Mixing Layer with Chemical Reactions”, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, Vol.27, No.6 (1994), pp.749-754.
- (25) Kaplan,H. and Dinar,N., “A Three-Dimensional Stochastic Model for Concentration Fluctuation Statistics in Isotropic Homogeneous Turbulence”, *Journal of Computational Physics*, Vol.79 (1988), pp.317-335.
- (26) Batt,R.G., “Turbulent Mixing of Passive and Chemically Reacting Species in a Low-speed Shear Layer”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.82 (1977), pp.53-95.
- (27) Matsutani,S.M. and Brown,C.T., “The Structure of a Chemically Reacting Plane Mixing Layer”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.172 (1986), pp.93-126.