液相混合層での乱流混合反応に及ぼす温度成層の効果*

大西 領^{*1}, 道岡 武 信^{*2}
長田 孝 二^{*3}, 小森 悟^{*3}Effects of Thermal Stratifications on Turbulent Mixing and
Chemical Reaction in Liquid Mixing LayerRyo ONISHI, Takenobu MICHIOKA,
Kouji NAGATA and Satoru KOMORI^{*4}^{*4} Department of Mechanical Engineering, Kyoto University,
Yoshidahonmachi, Sakyo-ku, Kyoto-shi, Kyoto, 606-8501 Japan

The effects of thermal stratifications on turbulent mixing and chemical reaction in the liquid mixing layer were investigated by both laboratory experiments and numerical simulations. The experiments were conducted in neutrally, unstably and stably stratified water flows with a rapid chemical reaction. Instantaneous velocities and concentration were simultaneously measured using a combined technique with a two component laser-Doppler velocimeter (LDV) and a laser-induced fluorescence (LIF) method. Turbulence quantities such as the mean concentration of chemical product and turbulent mass fluxes were estimated and the effects of thermal stratifications on the quantities were clarified. Further, the large-eddy simulation (LES) using the large-eddy probability-density function (LEPDF) model as a SGS model was applied to the thermally-stratified reacting liquid flows. The results show that the effects of the stratifications on the turbulent mixing and chemical reaction can be well explained by the LES.

Key Words: Turbulent Mixing, Chemical Reaction, Stratified Flow, Shear Flow, LDV, LIF, Large-Eddy Simulation

1. 結 言

乱流混合の影響を受けながら化学反応が進行する現象は、燃焼・反応器などの工業装置内の流れや環境中の流れにおいて多く見られる。このような流動場は安定および不安定温度成層の影響を受けることが多いため、装置の最適設計や反応性汚染物質の正確な拡散予測を行ううえで、混合反応現象に及ぼす温度成層の影響を正しく評価することが必要不可欠である。

化学反応を伴う乱流現象を実験的に解明するには、流動場に対しては流れ場の最小スケールであるコルモゴロフスケール程度の空間・時間分解能で、また濃度場に対してはコルモゴロフスケールをシュミット数の平方根で割ったバチラスケール程度の空間・時間分解能で速度および濃度の測定を行わなければならない。しかし、液相ではシュミット数が大きいためにバチエ

ラスケールが気相の場合に比べて1~2オーダー小さく、濃度の測定が非常に困難となる。そのため液相反応乱流場に対する実験は数少なく、温度成層の影響までを詳細に調べた実験はNagata & Komori⁽¹⁾⁽²⁾が不安定成層場でレーザ蛍光法を用いて行ったものだけである。しかし、Nagata & Komoriの実験は簡単な等方性乱流場を対象としており、現実の流れ場に多く見られるせん断乱流場に対する同種の実験を行うまでには至っていない。したがって、温度成層が存在するせん断乱流場での混合反応に及ぼす成層の効果を実験的に明らかにすることが必要である。

一方、乱流統計量や、瞬間濃度および速度の任意の空間上の分布を実験的に求めることは非常に難しいため、混合反応現象を解明するには実験により得られる情報だけでは十分とは言えない。さらに、1つの実験条件下で実験を行うだけでも多大な労力と経費を要するため、種々の反応系・反応速度および流動条件に対して実験を行うことは現実的ではない。それ故、乱流場での混合反応過程に及ぼす温度成層の影響を正しく評価できる数値計算法を開発することも重要な課題で

* 原稿受付 2002年4月30日。

^{*1} 学生員, 京都大学大学院工学研究科(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。^{*2} 正員, 京都大学大学院工学研究科 [現: (財)電力中央研究所 (〒201-8511 狛江市岩戸北2-11-1)]。^{*3} 正員, 京都大学大学院工学研究科。

E-mail: komori@mech.kyoto-u.ac.jp

ある。

近年のコンピュータの飛躍的な進歩に伴い、反応を伴う乱流に対しても直接数値計算 (Direct Numerical Simulation, DNS) が可能となってきた。しかし、DNS は実験と同様、速度場に対してはコルモゴロフスケール程度の空間分解能を、濃度場に対してはバチラスケール程度の空間分解能をそれぞれ必要とする。そのため、コンピュータの記憶容量と計算時間の問題から未だに低レイノルズ数の流れ場やシュミット数の小さな気相の流れ場にその適用が限られている。これに対して、Large-eddy Simulation (LES) と呼ぶ数値計算法では、計算格子よりも大きなスケール (Grid Scale, GS) に対しては直接数値計算を行い、計算格子よりも小さなスケール (Sub-grid Scale, SGS) に対しては SGS モデルを与えて計算する。そのためレイノルズ数の高い現実の流れ場やシュミット数の高い液相の流れ場にも適用可能であり、基礎的研究から工学上の応用まで幅広い範囲で有効な計算手法である。

LES によって精度の高い計算を行うためには適切な SGS モデルが必要である。最近、道岡ら⁽³⁾が液相反応乱流場に対する SGS モデルを提案した。これにより、液相反応乱流場に対して LES を適用する道が開かれたが、温度成層が存在する反応乱流場に対して LES を適用した例はない。

そこで、本研究では代表的なせん断乱流場である混合層に注目し、まず、温度成層が液相混合層における混合反応現象に及ぼす影響を実験的に明らかにした。さらに、実験と同じ混合反応乱流場に対して LES を適用し、実験結果と比較することによってその適用性を検討した。

2. おもな記号

c_f	$\overline{\zeta'^2}$ と $\widetilde{\zeta'^2}$ との相関係数
C_i	物質 i の濃度
c_i	物質 i の濃度変動
k	反応速度定数
T	温度
T_h	上層流体の初期温度
T_l	下層流体の初期温度
U_h	上層流体の主流方向速度
U_l	下層流体の主流方向速度
U_i	i 方向の速度
u_i	i 方向の速度変動 ($= U_i - \langle U_i \rangle$)
x, y, z	主流、鉛直およびスパン方向座標
ΔU	上下層の初期流速差 ($= U_h - U_l$)
ΔT	上下層の初期温度差 ($= T_h - T_l$)

Fig. 1 Measuring system

y_{c1}	$\langle C_A^* \rangle / C_{A0} = 0.1$ となる y 座標
y_{c2}	$\langle C_A^* \rangle / C_{A0} = 0.9$ となる y 座標
y_m	$(y_{c1} + y_{c2})/2$
y_{u1}	$(\langle U \rangle - U_l)/\Delta U = 0.1$ となる y 座標
y_{u2}	$(\langle U \rangle - U_l)/\Delta U = 0.9$ となる y 座標
y_u	$(y_{u1} + y_{u2})/2$
y_{t1}	$(\langle T \rangle - T_l)/\Delta T = 0.1$ となる y 座標
y_{t2}	$(\langle T \rangle - T_l)/\Delta T = 0.9$ となる y 座標
y_t	$(y_{t1} + y_{t2})/2$
β	体膨張係数
δ_c	濃度の混合層厚さ ($= y_{c1} - y_{c2} /0.8$)
δ_u	速度の混合層厚さ ($= y_{u1} - y_{u2} /0.8$)

添字

$\langle \rangle$	時間平均した
$\sim$	フィルタ操作を施した
$\sim$	テストフィルタ操作を施した
*	化学反応を伴わない場合の
A	物質 A (下層成分) の
B	物質 B (上層成分) の
P	物質 P (反応生成物) の
0	初期の

3. 実験装置および測定方法

実験装置および測定システムの概略を図 1 に示す。上下層の流体を縮流部に取り付けられたスプリットプレートにより完全に分離し、予混合がない状態で長さ 1m、断面 0.10m × 0.10m のアクリル製のテストセクション内に供給した。上層流体の流速を $U_h = 0.165$ m/s、下層流体の流速を $U_l = 0.085$ m/s (流速差 $\Delta U = U_h - U_l = 0.080$ m/s) とした。上下層流体を乱流状態でテストセクション内に流入させるため、スプリットプレート先端から上流方向 0.06m におけるスプリットプレート上下面にトリップワイヤ (直径 1.2mm のステンレス線) を設置した^{(4)~(6)}。本実験では温度成層を形成させるために予め上下層流体の温度を表 1 に示すよ

Table 1 Initial temperature

	Initial temperature	
	Upper layer T_h [K]	Lower layer T_l [K]
neutral stratification	298	298
unstable stratification	293	303
stable stratification	303	293

Table 2 Chemical species

	Species	
	Species B (Upper layer)	Species A (Lower layer)
No-reacting case	Fluorescein ($C_{20}H_{10}Na_2O_5$)	-
Reacting case	NH_4OH +Fluorescein	CH_3COOH +Fluorescein

うに設定した上でテストセクションに流入させた。また、瞬間濃度を測定するために上下層流体に化学物質を混入した。その成分を表 2 に示す。化学反応を伴わない場合の実験では、上層成分として蛍光物質ウラニン ($C_{20}H_{10}Na_2O_5$; 成分 B) を用い、初期濃度 $C_{B0} = 5.0 \times 10^{-5} \text{ mol/m}^3$ で上層流中に均一に混入し、レーザ蛍光法を用いて濃度を測定した。また、反応を伴う場合の実験には、二次の不可逆瞬間反応である水酸化アンモニウム ($C_{A0}=0.01 \text{ mol/m}^3$) と酢酸 ($C_{B0}=0.01 \text{ mol/m}^3$) の中和反応

を用いた。この反応の反応速度定数は $k \approx 10^8 \text{ m}^3/(\text{mol}\cdot\text{s})$ であった。化学反応を伴う場合も、レーザ蛍光法による濃度の測定を可能とするために、上下層流中に予め等量 ($5.0 \times 10^{-5} \text{ mol/m}^3$) のウラニンを均一に混入させ、蛍光強度の pH 依存性を利用した。

瞬間速度の測定には二成分流速測定用レーザドップラ流速計 (DANTEC 55X modular system) を用い、レーザ蛍光法と併用することにより非接触で瞬間速度と瞬間濃度の同時測定を行った⁽⁷⁾⁽⁸⁾。また、直径 0.2mm の熱電対を用いて、時間平均温度の測定も行った。測定座標系の主流方向を x 、鉛直方向を y 、スパン方向を z とし、スプリットプレート先端を原点とした。出力信号のサンプリングを 2000Hz で 40s 間行い、その信号をデジタルレコーダ (SONY PC208Ax) に記録した後、コンピュータで統計処理した。

4. Large-eddy simulation

温度成層が存在する液相反応乱流場を支配する方程式は連続の式、Navier-Stokes(N-S) 方程式、物質および熱の拡散方程式であり、これらにフィルタ操作を施すことにより、LES のための支配方程式を得ることができる。フィルタ操作を施した支配方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0 \dots \dots \dots (2)$$

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \beta g_i (\bar{T} - T_s) \dots \dots \dots (3)$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} = \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial^2 \bar{C}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial q_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\omega} \dots \dots (4)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = \frac{\nu}{Pr} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial h_j}{\partial x_j} \dots \dots \dots (5)$$

なお、 T_s は基準温度を表している。反応系としては実験と同様に酢酸 (物質 A) と水酸化アンモニウム (物質 B) の間の二次の不可逆瞬間反応 ($A + B \rightarrow P$) を想定したので、式 (4) 中に現れる反応項 $\bar{\omega}$ は $k \bar{C}_A \bar{C}_B$ となる。この瞬間反応系では反応項を精度良く計算するためには計算時間刻み Δt を非常に小さくしなければならず、計算機の性能上その計算は不可能となる。そこで、本研究では Cook & Riley⁽⁹⁾ が提案した化学反応が起こっても不変な保存スカラー Z (conserved scalar) を導入することにより、GS での反応物質の濃度を求める方法を用いた。今、物質 A、B の分子拡散係数 $D(=\nu/Sc)$ を等しいと仮定し、物質 A の拡散方程式から物質 B の拡散方程式を差し引くと反応項が消去され、物質 A と物質 B の濃度差からなる化学反応に依存しない保存スカラー Z

$$Z = C_A - C_B \dots \dots \dots (6)$$

の拡散方程式が得られる。

さらに、 Z を正規化した変数 ζ を次式のように定義する。

$$\zeta = \frac{Z - Z_{B0}}{Z_{A0} - Z_{B0}} \quad (0 \leq \zeta \leq 1) \dots \dots \dots (7)$$

ここで、 Z_{A0} および Z_{B0} はそれぞれ計算領域入口断面での値、つまり初期条件値であり、反応物質 A のみが存在する所では $Z_{A0} = C_{A0}$ 、反応物質 B のみが存在する所では $Z_{B0} = -C_{B0}$ となる。 ζ の拡散方程式に

フィルタ操作を施したものは、式 (4) において反応項 $\bar{\omega}$ を除いた次式となる。

$$\frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial x_j} = \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial^2 \bar{\zeta}}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \dots \dots \dots (8)$$

つまり、瞬間反応を伴う場合は式 (4) の代わりに式 (8) を用いることにより反応項を計算する必要がなくなる。

化学反応が瞬間反応であるため反応物質 A と反応物質 B は局所的には共存しないので、物質 A, B および生成物 P の局所濃度は ζ を用いて以下のように表される。

$$C_A(\zeta)/C_{A0} = \begin{cases} 0 & (\zeta \leq \zeta_{st}) \\ \frac{\zeta - \zeta_{st}}{1 - \zeta_{st}} & (\zeta > \zeta_{st}) \end{cases} \dots \dots (9)$$

$$C_B(\zeta)/C_{A0} = \begin{cases} -\frac{\zeta - \zeta_{st}}{\zeta_{st}} & (\zeta \leq \zeta_{st}) \\ 0 & (\zeta > \zeta_{st}) \end{cases} \dots \dots (10)$$

$$C_P(\zeta)/C_{A0} = \begin{cases} \frac{\zeta}{\zeta_{st}} & (\zeta \leq \zeta_{st}) \\ \frac{1 - \zeta}{1 - \zeta_{st}} & (\zeta > \zeta_{st}) \end{cases} \dots \dots (11)$$

ここで、

$$\zeta_{st} = \frac{C_{B0}}{C_{A0} + C_{B0}} \dots \dots \dots (12)$$

であり、本研究では $C_{A0} = C_{B0}$ であるので $\zeta_{st} = 0.5$ である。しかしながら、式 (8) からわかるように、LES では ζ を直接計算することができない。仮に、式 (8) から得られた $\bar{\zeta}$ を $\zeta = \bar{\zeta}$ と仮定して式 (9)~(11) に代入すると、それらの式では SGS での物質の混合状態を考慮せず LES での計算格子内を完全混合とすることと同じになる。よって、SGS での ζ の混合状態を考慮するため、SGS での確率密度関数 $P(\zeta)$ を用いた SGS モデルが Cook & Riley⁽⁹⁾により提案された。

$$\bar{C}_i = \int_0^1 C_i(\zeta) P(\zeta) d\zeta \dots \dots \dots (13)$$

$C_i(\zeta)$ には式 (9)~(11) を、 $P(\zeta)$ には Girimaji⁽¹⁰⁾が提案した ζ に対する β -PDF モデルを適用した。

$$P(\zeta) = \frac{\zeta^{a-1}(1-\zeta)^{b-1}}{B(a,b)} \dots \dots \dots (14)$$

ここで、

$$a = \bar{\zeta} \left(\frac{\bar{\zeta}(1-\bar{\zeta})}{\bar{\zeta}^2} - 1 \right), \quad b = (a/\bar{\zeta}) - a$$

$$B(a,b) = \int_0^1 \zeta^{a-1}(1-\zeta)^{b-1} d\zeta$$

しかし、 β -PDF モデルには、LES では直接計算することができない SGS での ζ の分散 $\bar{\zeta}^2$ を入力しなければならないという問題点がある。そこで、LES での計算格子幅 (フィルタ幅 $\bar{\Delta}$) より大きなフィルタ幅 $\tilde{\Delta} (= 2\bar{\Delta})$ をもつテストフィルタを施すことによりそ

Fig. 2 Schematic of the computational domain

の領域内での ζ の分散 $\bar{\zeta}^2$ を求め、次式に示すように SGS での ζ の分散 $\bar{\zeta}^2$ と $\bar{\zeta}^2$ との間に一定の相関関係が存在すると仮定した。

$$\bar{\zeta}^2 \approx c_f \bar{\zeta}^2 = c_f (\bar{\zeta}^2 - \bar{\zeta}^2) \dots \dots \dots (15)$$

ここで、 c_f は相関係数である、この唯一のパラメータ c_f を与えてやれば、式 (8)~(15) を用いることにより、GS での保存スカラー $\bar{\zeta}$ のみからそれぞれの反応物質の GS での濃度を求めることができる。この相関係数 c_f は、反応を伴う液相定常等方性乱流場に対する DNS により $c_f = 5.0$ が最適値であることを道岡ら⁽³⁾が求めた。本研究は液相反応乱流場を対象としているのでこの $c_f = 5.0$ を用いた。

支配方程式 (式 (2)~(5) および式 (8)) を有限体積法に基づき離散化し、HSMAC 法により解を求めた。式 (3)~(5) および式 (8) 中に現れる SGS レイノルズ応力、SGS 乱流物質フラックスおよび SGS 乱流熱フラックスには Dynamic SGS モデル^{(11)~(13)}を用いた。離散化については、対流項および粘性項ともに二次精度の中心差分を、時間積分には陽解法である二次精度の Runge-Kutta 法を用いた。

計算領域の概略を図 2 に示す。主流方向を x 、鉛直方向を y 、スパン方向を z とし、流入部には長さ 40mm のスプリットプレートを設置した。スプリットプレートによって上下層は完全に分離されており、実験と同じく上下層流体が混合を始めるスプリットプレート先端に座標原点をとった。中立の場合、安定温度成層が存在する場合の計算領域の大きさを $480 \times 80 \times 80\text{mm}$ とし、格子数を $360 \times 60 \times 60$ とした。不安定温度成層が存在する場合は中立の場合に比べ混合領域が鉛直方向により速く拡大するので y 方向の計算領域を大きくとり計算領域の大きさを $480 \times 106 \times 80\text{mm}$ とし、格子数を $360 \times 80 \times 60$ とした。全ての場合でスタッガード格子を用い、 y 方向には $\tanh$ 関数で与えられる不等間隔格子を用いた。

流入境界面に対しては速度を時々刻々と与え続けなければならない。室内実験ではスプリットプレートの上下面にトリップワイヤを設置しており、スプリットプレート近傍では乱流境界層が発達していると考えられ

Fig. 3 Vertical distributions of the mean temperature at $x = 0.40$ m. Symbols denote the measurements and lines are the results of the LES: $\triangle$, ---, in unstable stratification; $\diamond$, ..., in stable stratification

る。従って、LESでもスプリットプレート上では乱流境界層が形成されていると仮定し、Spalart⁽¹⁴⁾が行った乱流境界層に対するDNSによって得られた分布を基に流入速度を次のように与えた。

$$u_i(y, z, t) = \sum_{n=1}^{20} u_{rms,i}(y) \sin(2\pi f_n t + \phi_i(y, z, f_n)) \quad (16)$$

$$U_i(y, z, t) = \langle U_i(y, z, t) \rangle + u_i(y, z, t) \dots\dots (17)$$

ここで、 $u_{rms,i}$ は速度変動強度の rms 値であり、Spalart⁽¹⁴⁾によって得られた分布を用い、その最大値を上下層の速度差 ΔU の 10% とした。 ϕ_i は $0 \leq \phi \leq 1$ の一様乱数である。また、 f_n は擾乱の周波数であり 1~10Hz まで 1Hz 刻み、10~100Hz まで 10Hz 刻みで与えた。濃度場に関しては流入境界面上層で $C_A/C_{A0} = 0$, $C_B/C_{A0} = 1$, 下層で $C_A/C_{A0} = 1$, $C_B/C_{A0} = 0$ を与えた。境界条件として、計算領域側面境界にすべり境界条件、出口境界に対流型境界条件、スプリットプレート上にはすべりなし境界条件を用いた。

5. 結果および考察

5.1 安定および不安定成層下の温度場 図3に時間平均温度の鉛直方向分布を示す。ただし、横軸は $y_t = (y_{t1} + y_{t2})/2$ を用いて $y - y_t$ で与えられている。図3より、本実験と本LESではともに同様の安定、不安定温度成層場が形成されていること、本LESは温度場を正確に予測できることがわかる。

5.2 混合層厚さに及ぼす温度成層の効果 図4に速度および濃度混合層厚さの主流方向分布を示す。

(a)

(b)

Fig. 4 Streamwise distributions of the mixing layer width in (a) velocity and (b) concentration fields. Symbols denote the measurements and lines are the results of the LES: $\bullet$, —, in neutral stratification; $\triangle$, ---, in unstable stratification; $\diamond$, ..., in stable stratification

ただし、速度混合層厚さを $(\langle U \rangle - U_i)/\Delta U = 0.1$ となる y 座標を y_{u1} , $(\langle U \rangle - U_i)/\Delta U = 0.9$ となる y 座標を y_{u2} として、 $\delta_u = |y_{u1} - y_{u2}|/0.8$ と定義した。また、濃度混合層厚さを $\langle C_A^* \rangle / C_{A0} = 0.1$ となる y 座標を y_{c1} , $\langle C_A^* \rangle / C_{A0} = 0.9$ となる y 座標を y_{c2} として、 $\delta_c = |y_{c1} - y_{c2}|/0.8$ と定義した。まず、実験結果に注目すると、不安定温度成層が存在する場合には速度および濃度混合層厚さが大きくなり、安定温度成層が存在する場合には小さくなることがわかる。また、LESの結果は、速度混合層厚さだけでなく濃度混合層厚さについても、中立の場合だけでなく温度成層が存在する場合も実験値とよく一致することがわかる。つまり、本LESは温度成層が混合領域の発達に及ぼす効果を精度良く評価できる。

Fig. 5 Vertical distributions of the mean streamwise velocity at $x = 0.40$ m. Symbols as in Fig. 4

5.3 速度場に及ぼす温度成層の効果 図5に主流方向時間平均速度の鉛直方向分布を示す。ただし、横軸は $y_u = (y_{u1} + y_{u2})/2$ で定義される y_u を用いて、 $y - y_u$ で与えられている。図5より本 LES の結果は中立の場合だけでなく温度成層が存在する場合も実験結果とよく一致することがわかる。

図6に主流方向および鉛直方向速度変動強度の鉛直方向分布を示す。図6より、不安定温度成層が存在すると乱れが増加し、安定温度成層が存在すると減少することがわかる。また、LES の結果と実験結果は中立の場合だけでなく温度成層が存在する場合もよく一致することがわかる。

図7にレイノルズ応力の鉛直方向分布を示す。図7より本 LES の結果は中立の場合だけでなく温度成層が存在する場合も実験結果と一致することがわかる。

以上の結果から、温度成層が速度場に及ぼす効果を本 LES が精度良く評価できることがわかる。

5.4 濃度場に及ぼす温度成層の効果 図8に下層成分 (A 成分) 時間平均濃度の鉛直方向分布を示す。ただし、横軸は $y_m = (y_{c1} + y_{c2})/2$ を用いて $y - y_m$ で与えられている。 $y - y_m = 0$ の位置に注目すると、濃度こう配 $d(\langle C_A \rangle / \langle C_{A0} \rangle) / dy$ が不安定温度成層が存在すると緩やかに、安定温度成層が存在すると急になる。このことから不安定温度成層が存在すると混合が促進され、安定温度成層が存在すると混合が抑制されることがわかる。また、図8より LES の結果は中立の場合だけでなく温度成層が存在する場合も実験結果とよく一致することがわかる。

図9に鉛直方向および主流方向の乱流物質フラックスの鉛直方向分布を示す。鉛直方向、主流方向ともに

Fig. 6 Vertical distributions of the turbulence intensities of (a) longitudinal and (b) vertical velocity fluctuations at $x = 0.40$ m. Symbols as in Fig. 4

Fig. 7 Vertical distributions of the Reynolds stress at $x = 0.40$ m. Symbols as in Fig. 4

不安定温度成層が存在するとフラックスの絶対値が大きくなり、安定温度成層が存在すると小さくなることかわかる。このことから不安定温度成層が存在すると物質輸送が促進され、安定温度成層が存在すると抑制

Fig. 8 Vertical distributions of the mean concentration of species A in a non-reacting flow at $x = 0.40$ m. Symbols as in Fig. 4

されることがわかる。また、温度成層が存在することによって特に鉛直方向の物質輸送が大きく変化する。これは浮力が鉛直方向に対して直接的に働くためであると考えられる。LESの結果は実験結果よりも全体的に若干小さい値を示すが、不安定温度成層が存在すると物質輸送が促進され、安定温度成層が存在すると抑制されること、温度成層が存在すると特に鉛直方向の物質輸送が大きく変化する様子などを的確に予測している。なお、乱流物質フラックスはSGS程度の小スケールでの速度変動および濃度変動にほとんど影響を受けない⁽¹⁾ので、LESで得ることが可能であるGSでの濃度のみから図9に示す乱流物質フラックスは求められている。

図10に反応生成物の時間平均濃度の鉛直方向分布を示す。不安定温度成層が存在する場合、反応生成物の分布が広がることから、中立成層の場合よりも反応が促進されていることがわかる。逆に安定温度成層が存在すると分布が狭まることから、反応が抑制されていることがわかる。LESの結果は下層側 ($y - y_m < 0$) で実験結果よりも若干大きな値を示すものの、実験結果とほぼ一致する。

LESが反応生成物量に及ぼす温度成層の効果を正しく評価できるかどうかを調べるために、次式で定義した反応生成物量 M を求めた。

$$M \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \langle C_P \rangle / C_{A0} dy \dots \dots \dots (18)$$

結果を図11に示す。横軸は主流方向を表しており、縦軸は $x = 0.20$ m の断面における反応生成物量 (LESの結果は M_{LES} 、実験結果は M_{EXP}) でそれぞれ割ることによって無次元化された各 x 断面での反応生成物量を示している。なお、 $M_{LES} = 1.21 \times M_{EXP}$ であつ

(a)

(b)

Fig. 9 Vertical distributions of (a) longitudinal and (b) vertical mass fluxes in a non-reacting flow at $x = 0.40$ m. Symbols as in Fig. 4

Fig. 10 Vertical distributions of the mean concentration of species P (chemical product) at $x = 0.40$ m. Symbols as in Fig. 4

た。図11より、本LESは反応生成物量を正しく予測できることがわかる。これらの結果から、本LESは温度成層が濃度場および化学反応に及ぼす効果を正しく評価できることがわかる。

Fig. 11 Streamwise distributions of the amount of chemical product. Symbols as in Fig. 4

6. 結 言

本研究では液相混合層における乱流混合反応現象に及ぼす温度成層効果を実験および数値計算の両面から明らかにした。その結果、以下の知見を得た。

1. 温度成層が存在し、化学反応を伴う液相混合層に対して瞬間濃度と瞬間速度の測定を行い、高精度な速度および濃度統計量を得た。
2. 不安定温度成層によって乱流混合反応が促進され、安定温度成層により抑制される。
3. 本 LES は温度成層が存在する液相反応混合層内の乱流統計量を精度良く予測することができる。

謝 辞

本研究は京都大学大学院 濱塚太一氏の協力を得た。記して深く謝意を表す。また、本数値計算は国立

環境研究所地球環境研究センターのスーパーコンピュータ (NEC: SX-4) を用いて行われた。センターの関係者各位に深く感謝する。本研究は文部科学省科学研究費補助金 (課題番号 11555059, 14102016) の援助を受けて行われた。

文 献

- (1) Nagata, K. & Komori, S., *J. Fluid Mech.* **408**, (2000), 39-52.
- (2) 長田孝二, 小森 悟, 機論 B **63**-612, (1997), 274-281.
- (3) 道岡武信, 長田孝二, 井田敦巳, 小森 悟, 機論 B **66**-651, (2000), 2815-2822.
- (4) Browand, F. K. & Latigo, B. O., *Phys. Fluids* **22**-6, (1979), 1011-1019.
- (5) Mehta, R. D. & Westphal, R. V., *Exp. Fluids* **4**, (1986), 257-266.
- (6) Bell, J. H. & Mehta, R. F., *AIAA J.* **28**-12, (1990), 2034-2042.
- (7) 長田孝二, 小森 悟, 機論 B **61**-586, (1995), 2179-2205.
- (8) Komori, S., & Nagata, K., *J. Fluid Mech.* **324**, (1996), 39-52.
- (9) Cook, A. W. & Riley, J. J., *Phys. Fluids A* **6**-8, (1994), 2868-2870.
- (10) Girimaji, S. S., *Combust. Sci. and Tech.* **78**, (1991), 177-196.
- (11) Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. & Cabot, W. H., *Phys. Fluids A* **3**-7, (1991), 1760-1765.
- (12) Lilly, D. K., *Phys. Fluids A* **4**-3, (1992), 633-635.
- (13) Piomelli, U. & Liu, J., *Phys. Fluids A* **7**-4, (1995), 839-846.
- (14) Spalart, P. R., *J. Fluid Mech.* **187**, (1988), 61-98.