DNS による反応性物質濃度の乱流シュミット数・乱流拡散係数に関する研究*

渡邊 智昭^{*1}, 酒井 康彦^{*2}, 長田 孝二^{*3}
寺島 修^{*3}, 伊藤 靖仁^{*3}, 早瀬 敏幸^{*4}

DNS of turbulent Schmidt number and eddy diffusivity for reactive concentrations

Tomoaki WATANABE^{*1}, Yasuhiko SAKAI, Kouji NAGATA, Osamu TERASHIMA,
Yasumasa ITO and Toshiyuki HAYASE^{*1} Department of Mechanical Science and Engineering, Nagoya University
Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, Aichi, 464-8603 Japan
Research Fellow of Japan Society for the Promotion of Science

Received 4 July 2013

Abstract

The gradient diffusion hypothesis for turbulent mass fluxes of reactive scalar is investigated by using direct numerical simulations (DNS) of a planar jet with a second-order chemical reaction $A + B \rightarrow R$. Reactants A and B are separately supplied in the jet and ambient fluids, respectively. DNS is performed at three different Damköhler numbers, i.e., $Da = 0.1$, 1, and 10. Eddy diffusivity and turbulent Schmidt number of reactive species are calculated from the DNS results. The results show that the longitudinal (x -direction) eddy diffusivity of reactant A near the jet centerline is always positive, whereas the longitudinal eddy diffusivities of reactant B and product R can be negative near the jet centerline. Near the jet centerline, the lateral (y -direction) eddy diffusivity of reactant A, $D_{tA,y}$, becomes small, but the lateral eddy diffusivity of reactant B, $D_{tB,y}$, becomes large because of the chemical reaction. In the outer region of the jet flow, the chemical reaction has the opposite effect on $D_{tA,y}$ and $D_{tB,y}$, and the chemical reaction makes $D_{tA,y}$ large, but $D_{tB,y}$ small. It is concluded that the gradient diffusion hypothesis is largely affected by the chemical reaction, and this effect of chemical reaction should be taken into account when the gradient diffusion model is used to estimate turbulent mass fluxes of reactive scalar.

Key Words : Turbulent flow, Chemical reaction, Direct numerical simulation, Jet, Gradient diffusion model

1. 緒 言

複数の化学物質が乱流運動により混合されながら化学反応が進行する現象は、燃焼器などの工学機器や、汚染物質の環境中への物質拡散などの様々な分野で見られ、その予測手法の確立が望まれている。化学反応を伴う流れ場を最も正確に予測する手法は、ナビエ・ストークス方程式と化学種の瞬時濃度の輸送方程式を数値的に解く直接数値計算 (DNS) である。しかし、現在の計算機を用いても、DNS を行うには多大な計算時間を必要とし、DNS を適用することが可能な流れ場は、レイノルズ数やシュミット数が小さく、単純な流れ場に限られる。複雑な流れ

* 論文 No.13-00533 [DOI: 10.1299/transjsme.2014fe0008]

^{*1} 正員, 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町), 日本学術振興会特別研究員 DC1^{*2} 正員, フェロー, 名古屋大学大学院工学研究科^{*3} 正員, 名古屋大学大学院工学研究科^{*4} 正員, フェロー, 東北大学流体科学研究所 (〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1)

E-mail: watanabe.tomoaki@c.nagoya-u.jp

場の予測には計算時間が比較的少ない手法が望ましく、現在、レイノルズ平均を施した流れ場および拡散場の支配方程式を解く手法 (RANS) が広く用いられている。

レイノルズ平均を施した化学種 α の輸送方程式は以下のように表される。

$$\frac{\partial \langle \Gamma_\alpha \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle U_j \rangle \langle \Gamma_\alpha \rangle) = \frac{\partial}{\partial x_j} (D_\alpha \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \Gamma_\alpha \rangle) - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle u_j \gamma_\alpha \rangle + \langle S_\alpha \rangle \quad (1)$$

ここで、 U_i は i 方向瞬時速度、 Γ_α は化学種 α の瞬時濃度、 D_α は化学種 α の分子拡散係数、 $\langle * \rangle$ は変数 $*$ のアンサンブル平均をそれぞれ表す。また、 i 方向変動速度 u_i および化学種 α の変動濃度 γ_α が $U_i = \langle U_i \rangle + u_i$, $\Gamma_\alpha = \langle \Gamma_\alpha \rangle + \gamma_\alpha$ により定義される。式 (1) の $\langle u_i \gamma_\alpha \rangle$, $\langle S_\alpha \rangle$ はそれぞれ、乱流物質フラックスおよび平均反応速度項であり、式 (1) を解くためにはこれらの項に対するモデル (Veynante and Vervisch, 2002, Fox, 2003,) が必要となる。平均反応速度項に対するモデルについては、Komori ら (Komori, et al., 1994) が過去に提案されたモデルによる予測値を実験による測定結果と比較し評価している。乱流物質フラックスに対しては、こう配拡散モデル (Combest, et al., 2011) が広く用いられており、 $\langle u_i \gamma_\alpha \rangle$ を以下のようにモデル化する。

$$\langle u_i \gamma_\alpha \rangle = -D_{t\alpha,i} \frac{\partial \langle \Gamma_\alpha \rangle}{\partial x_i} \quad (2)$$

ここで、 $D_{t\alpha,i}$ は i 方向の物質 α の乱流拡散係数であり、一般的には渦粘性係数 ν_t と乱流シュミット数 $Sc_{t\alpha,i}$ を用いて以下のように与えられる。

$$D_{t\alpha,i} = \frac{\nu_t}{Sc_{t\alpha,i}} \quad (3)$$

ν_t は別の乱流モデルによって求められる。 $Sc_{t\alpha,i}$ はこう配拡散モデルのパラメータであり、流れ場の中で $Sc_{t\alpha,i}$ が一定であると仮定して数値計算を行うことが多い (Combest, et al., 2011)。 $D_{t\alpha,i}$ および $Sc_{t\alpha,i}$ はこう配拡散モデルにおいて重要な役割を果たす。反応性物質の乱流拡散係数の実験による計測は、スカラ混合層中で Bilger ら (Bilger, et al., 1991) と Komori ら (Komori, et al., 1993) が行っているほか、二次元噴流中で渡邊ら (渡邊他, 2013) が行っているのみである。Komori らは、液相スカラ混合層中で、化学反応が生じることにより、反応物質の乱流拡散係数が無反応の場合と比較して 10% 程度変化することを明らかにしている。渡邊らは、噴流中に含ませた反応物質と周囲流体中の反応物質との反応により、反応性物質の乱流拡散係数および乱流シュミット数が化学反応により大きく変化することを明らかにした。このように、化学反応を伴う乱流中の乱流拡散係数と乱流シュミット数の計測例は僅かにあるが、その計測には反応性物質の濃度と速度の同時計測が必要となるため、反応性物質に対するこう配拡散モデルについては未だ詳細に調べられていない。また、こう配拡散モデルを用いた数値計算を行う場合、化学反応による乱流シュミット数の変化が計算結果に対して大きな影響を与えることが指摘されている (Fabregat, et al., 2010)。Fabregat ら (Fabregat, et al., 2010) により平行平板間の乱流中の反応性物質拡散の DNS が行われ、反応物質や反応生成物の乱流シュミット数が計算されているものの、化学反応によって生じた乱流シュミット数の変化については調べられていない。そこで本研究では、化学反応を伴う二次元噴流の DNS の結果から反応性物質の乱流拡散係数と乱流シュミット数を算出し、化学反応がこう配拡散モデルに対して与える影響について調査した。また、化学反応の反応速度定数を変化させて DNS を行うことで、反応速度がこう配拡散モデルに対して与える影響についても考察した。

2. 反応性二次元噴流の直接数値計算

2.1 計算対象

本研究で計算対象とする流れ場の概略を図 1 に示す。反応物質 B を含む周囲流中に、反応物質 A を含む流体を幅 d のノズルから噴出する。噴流中で二つの反応物質が混合することにより二次の不可逆反応 $A + B \rightarrow R$ が進行し、反応生成物質 R が生成される。噴流出口中心を座標系の原点とし、流れ方向に x 軸を、二次元噴流の広がり方向に y 軸を、スパン方向に z 軸をとる。支配方程式は連続の式、ナビエ・ストークス方程式、反応性物質 A, B, R の瞬時濃度の輸送方程式であり、流れ場の非圧縮性を仮定するとそれぞれ次式のように表される。

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4)$$

Fig. 1 A reactive planar jet.

Fig. 2 Velocity statistics in the jet nozzle.

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial U_j U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (5)$$

$$\frac{\partial \Gamma_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial U_j \Gamma_\alpha}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2 \Gamma_\alpha}{\partial x_j \partial x_j} + S_\alpha \quad (6)$$

ここで, $\alpha = A, B, R$ であり, 各物質の分子拡散係数は等しく D とした. また, S_α は化学反応による物質 α の生成速度であり, 二次反応 $A + B \rightarrow R$ では反応速度定数 k を用いて, $S_R = -S_A = -S_B = k\Gamma_A\Gamma_B$ で与えられる. 本研究では, 反応物質 A, B に対する式 (6) を解く代わりに, $\xi = (\Gamma_A - \Gamma_B + \Gamma_{B0})/(\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0})$ で定義される混合分率 ξ の輸送方程式を解いた. ここで, Γ_{A0}, Γ_{B0} は物質 A, B の初期濃度であり, 渡邉らの実験 (渡邉他, 2012, 2013) と同様に $\Gamma_{A0} = 0.4 \text{ mol/m}^3$, $\Gamma_{B0} = 0.2 \text{ mol/m}^3$ とした. ξ の輸送方程式は反応物質 A, B に対する式 (6) より得られ, 以下ようになる.

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial U_j \xi}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2 \xi}{\partial x_j \partial x_j} \quad (7)$$

式 (7) と生成物質 R の瞬時濃度 Γ_R に対する式 (6) を解いたのち, 反応物質 A, B の瞬時濃度を反応性物質の質量保存則を表す次式より求めた.

$$\Gamma_A = \xi \Gamma_{A0} - \Gamma_R \quad (8)$$

$$\Gamma_B = (1 - \xi) \Gamma_{B0} - \Gamma_R \quad (9)$$

本研究では, レイノルズ数 $Re = U_J d / \nu$ を 2,200, シュミット数 $Sc = \nu / D$ を 1 とした. ここで, U_J は噴流ノズル内の断面平均流速である. 噴流ノズル内の流速分布として, 二次元噴流の実験装置 (渡邉他, 2012, 2013) で計測されたノズル出口流速分布を参考に図 2 の流速分布を用いた. また, $U_J = 1.29 \text{ m/s}$ とし, $x = 0$ での周囲流の流れ方向平均流速を $U_M = 0.073 \text{ m/s}$ とした. 図 2 には, 本 DNS で用いた流れ方向平均流速 $\langle U \rangle$ および x, y, z 方向の速度変動 r.m.s. 値 $u_{rms}, v_{rms}, w_{rms}$ のノズル内の分布が実験による測定値とともに示されている. 流れ場の時間スケールの化学反応の時間スケールに対する比であるダムケラ数 $Da = k(\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0}) / (U_J / d)$ が 0.1, 1, 10 となる三つの条件で DNS を行った. ダムケラ数の違いは反応速度定数の違いを意味する. Da を変化させて DNS を行った結果から, 化学反応がこう配拡散モデルに及ぼす影響が化学反応の反応速度によってどのように変化するかについて考察した.

2.2 計算手法

連続の式とナビエ・ストークス方程式の連立に部分段階法を用いた. 時間進行には y 方向の粘性項にクランク・ニコルソン法を, その他の項に三次精度ルンゲクッタ法を用いた (Spalart, et al., 1991). x, z 方向の空間の離散化に四次精度中心差分を, y 方向の空間の離散化には二次精度中心差分を用いた. ポアソン方程式は共役勾配法により解いた. 計算領域は図 1 に示したように, $L_x = 13.5\pi d, L_y = 13.0\pi d, L_z = 2.6\pi d$ とした. 計算格子にスタガード格

Fig. 3 Lateral profiles of mean streamwise velocity.

Fig. 4 Lateral profiles of mean mixture fraction.

Fig. 5 Streamwise evolution of half width of $\langle U \rangle$ and $\langle \xi \rangle$.

子を用い, x, y, z の各方向の格子数を $N_x = 700, N_y = 430, N_z = 74$ とした. x, z 方向には等間隔格子を, y 方向には噴流中心付近で格子間隔が小さくなるように離散点位置を設定した.

流入境界において, 一様乱数により生成した変動を平均流速に付加することにより境界条件を設定した. また, 流出部境界には粘性対流出条件 (Dai, et al., 1994) を用いた. z 方向については周期境界条件を, y 方向については自由スリップ壁条件を課した. 境界上での反応性物質の濃度は噴流ノズル内で $\Gamma_A = \Gamma_{A0}, \Gamma_B = \Gamma_R = 0$, 周囲流体中で $\Gamma_B = \Gamma_{B0}, \Gamma_A = \Gamma_R = 0$ とした. 統計量の算出は, 時間平均により得た統計量を統計的に一様な z 方向に平均することで行った.

3. 計算結果および考察

3.1 二次元噴流の基本的性質

図 3, 4 に流れ方向速度 U の平均値と $x = 0$ での周囲流平均流速 U_M の差 $\langle U \rangle - U_M$, および混合率の平均値 $\langle \xi \rangle$ の y 方向分布を示す. $\langle U \rangle - U_M, \langle \xi \rangle$ はそれぞれの噴流中心上 ($y = 0$) での値 $\langle U \rangle_C - U_M, \langle \xi \rangle_C$ で正規化されている. また, 鉛直方向距離 y はそれぞれの分布の半値幅 b_U, b_ξ で無次元化されている. 図 3, 4 より, $\langle U \rangle - U_M$ および $\langle \xi \rangle$ の分布は各断面で自己相似性を示すことがわかる.

図 5 に $\langle U \rangle - U_M, \langle \xi \rangle$ の y 方向分布の半値幅 b_U, b_ξ の下流方向変化を示す. 図には $Re = 2,200, Sc = 600$ の二次元噴流中 (渡邊他, 2012) で計測された b_U, b_ξ がともに示されている. 二次元噴流の自己保存領域において, b_U, b_ξ は x/d に比例して下流方向に増加することが知られている. 図 5 より, DNS により得られた b_U, b_ξ も同様に x/d に対して直線的に変化していることがわかる. また, 本研究とはシュミット数が異なるが, DNS により得られた b_U, b_ξ は実験値とほぼ一致している.

以上のように, 二次元噴流の基本的性質が数値計算結果においても確認でき, 本研究で用いた計算手法および

Fig. 6 Mean concentration of reactive species on the jet centerline.

Fig. 7 Lateral profiles of mean concentration of reactive species at $x/d = 10$. Symbols as in Fig. 6.

Fig. 8 Lateral profiles of mean concentration of reactive species at $x/d = 30$. Symbols as in Fig. 6.

計算条件で二次元噴流の DNS が正しく行われたといえる。

Fig. 9 Streamwise turbulent mass flux of reactive species on the jet centerline. Symbols as in Fig. 6.

Fig. 10 Lateral profiles of streamwise turbulent mass flux of reactive species at $x/d = 10$. Symbols as in Fig. 6. Fig. 11 Lateral profiles of streamwise turbulent mass flux of reactive species at $x/d = 30$. Symbols as in Fig. 6.

3.2 反応性物質の平均濃度

図 6 に反応性物質の平均濃度 $\langle \Gamma_\alpha \rangle$ ($\alpha = A, B, R$) の噴流中心上での分布を示す．図 6 中の $\langle \Gamma_\alpha \rangle$ は $\Gamma_{\alpha 0}$ で無次元化されている． Γ_{R0} は次式で表される無次元化された質量保存則を満たすように定義される．

$$\frac{\Gamma_A}{\Gamma_{A0}} + \frac{\Gamma_B}{\Gamma_{B0}} + \frac{\Gamma_R}{\Gamma_{R0}} = 1 \quad (10)$$

式 (8), (9) より $\Gamma_{R0} = \Gamma_{A0}\Gamma_{B0}/(\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0})$ となることが導かれる．図 6(a), (b) には無反応の場合の物質 A, B の平均濃度がともに示されている．反応物質 A, B の場合，化学反応により濃度が減少するため，反応物質の平均濃度 $\langle \Gamma_A \rangle$, $\langle \Gamma_B \rangle$ は無反応の場合と比較して小さくなる．また， Da が大きくなるにつれて，無反応の場合の平均濃度からの減少量が大きくなっている．周囲流体に含まれる物質 B は噴流が発達するとともに噴流内部に取り込まれる．

Fig. 12 Lateral profiles of cross-streamwise turbulent mass flux of reactive species at $x/d = 10$. Symbols as in Fig. 6. Fig. 13 Lateral profiles of cross-streamwise turbulent mass flux of reactive species at $x/d = 30$. Symbols as in Fig. 6.

したがって、図 6(b) のように、噴流中心付近では、無反応の場合の $\langle I_B \rangle$ は下流に行くにつれて増加する。しかし、化学反応により I_B が減少するため、噴流が周囲流体を取り込むことによる物質 B の増加量と化学反応による減少量の違いによって、化学反応が生じる場合の $\langle I_B \rangle$ の噴流中心での分布が変化する。図 6(b) より、 $Da = 1$ の場合、 $\langle I_B \rangle$ は $x/d = 5$ から 9 まで増加し、 $x/d = 20$ 付近まで減少した後、さらに下流では再び増加することがわかる。このような $\langle I_B \rangle$ の下流方向変化は、液相二次元噴流中で計測された周囲流体中の反応物質の平均濃度においても確認されている(渡邊他, 2012)。また、図 6(c) より、下流に行くにつれて化学反応が進行し $\langle I_R \rangle$ が増加すること、そして、 Da が大きくなるにつれて $\langle I_R \rangle$ が大きくなることからわかる。

図 7, 8 に $x/d = 10, 30$ における $\langle I_\alpha \rangle$ の y 方向分布を示す。図中の横軸は混合分率の y 方向分布の半値幅 b_ξ で無次元化されている。図 6 と同様に、化学反応により $\langle I_A \rangle$, $\langle I_B \rangle$ が小さく、 $\langle I_R \rangle$ が大きくなることからわかる。また、 $x/d = 10$ において $\langle I_R \rangle$ は混合分率の y 方向分布の半値幅のやや内側で極大値をとる分布となるが、 $x/d = 30$ での $\langle I_R \rangle$ は噴流中心付近で最大となる分布となっている。

3.3 反応性物質濃度の乱流フラックス

図 9, 10, 11 にそれぞれ、反応性物質濃度の x 方向乱流フラックス $\langle u\gamma_\alpha \rangle$ ($\alpha = A, B, R$) の噴流中心上での分布、 $x/d = 10, 30$ における y 方向分布を示す。また、図 12, 13 に反応性物質濃度の y 方向乱流フラックス $\langle v\gamma_\alpha \rangle$ ($\alpha = A, B, R$) の $x/d = 10, 30$ における y 方向分布を示す。各図において、乱流フラックスは U_I , $\Gamma_{\alpha 0}$ で無次元化されている。反応性物質濃度の乱流フラックスの計測はスカラ混合層(Bilger, et al., 1991, Komori, et al., 1993)や噴流中(渡邊他, 2012, 2013)で行われているほか、スカラ混合層の DNS(de Bruyn Kops, et al., 2001)などにより求められている。これらの結果より、反応物質の乱流フラックスの大きさは、その反応物質濃度が大きい位置では化学反応により大きくなるが、反応物質濃度が小さい位置では逆に化学反応により小さくなることを示されている。二次元噴

Fig. 14 Instantaneous value of $u\gamma_A / \langle u\gamma_A^0 \rangle_C$ in the x - y plane.

Fig. 15 Variation of the chemical reaction rate with the concentration of reactive species.

流中では、噴流上流域の噴流中心付近で物質 A の濃度が大きく、また、噴流外縁部や噴流下流域で物質 B の濃度が大きくなっており、このような位置 (物質 A: 図 9 の $x/d < 30$, 図 10, 12 の $x/d = 10$ での $|y/b_\xi| < 0.8$, 物質 B: 図 9 の $x/d > 30$, 図 10, 12 の $x/d = 10$ での $|y/b_\xi| > 0.8$ や図 11, 13 の $x/d = 30$ の断面) で反応物質 A, B の乱流フラックスの大きさが化学反応により大きくなる傾向を示している。逆に、反応物質濃度が小さい位置 (物質 A: 噴流外縁付近や噴流下流域, 物質 B: 噴流上流域の噴流中心付近) では反応物質の乱流フラックスの大きさが小さくなった。

図 14 に流れ方向速度変動 u と物質 A の濃度変動 γ_A の積の瞬時値 $u\gamma_A$ の x - y 平面における分布を示す。ここで、 $u\gamma_A$ は無反応の場合の乱流フラックスの噴流中心での値 $\langle u\gamma_A^0 \rangle_C$ で無次元化されている。図 14(a) には無反応の場合の $u\gamma_A$ が、図 14(b) には $Da = 1$ の場合の $u\gamma_A$ が示されている。図 14(a) の領域 A のように、噴流上流域の噴流中心付近で正の値となる $u\gamma_A$ は、反応が生じることで図 14(b) のように大きくなるのがわかる。一方、噴流下流域において正の値となる $u\gamma_A$ は反応により小さくなるのが図 14(a), (b) からわかる。上述した乱流フラックスの変化は、このような $u\gamma_A$ の反応による変化と対応している。

液相噴流中の乱流フラックスの化学反応による変化についての考察が既報 (渡邊他, 2012) にて詳細になされている。液相噴流中の場合と同様に、上述した乱流フラックスの変化は以下のように説明できる。ここで、噴流中心に対して反対称な分布となる $\langle v\gamma_\alpha \rangle$ については $y > 0$ を考える。本研究で対象とした二次反応の反応速度は反応物質濃度の積 $\Gamma_A \Gamma_B$ に比例する。 $\Gamma_{\alpha 0}$ で無次元化された瞬時濃度を $\hat{\Gamma}_\alpha = \Gamma_\alpha / \Gamma_{\alpha 0}$ と定義し、反応性物質の保存則であ

る式 (10) を用いると、無次元化された反応物質の濃度積 $\hat{f}_A \hat{f}_B$ を次式のように表すことができる。

$$\hat{f}_A \hat{f}_B = \hat{f}_A (1 - \hat{f}_R - \hat{f}_A) = - \left[\hat{f}_A - \frac{1}{2} (1 - \hat{f}_R) \right]^2 + \frac{1}{4} (1 - \hat{f}_R)^2 \quad (11)$$

$$= \hat{f}_B (1 - \hat{f}_R - \hat{f}_B) = - \left[\hat{f}_B - \frac{1}{2} (1 - \hat{f}_R) \right]^2 + \frac{1}{4} (1 - \hat{f}_R)^2 \quad (12)$$

$\hat{f}_A \hat{f}_B$ と $\hat{f}_\alpha$ の関係を図 15 に示す。式 (8) および式 (9) より、 $\hat{f}_A$ と $\hat{f}_B$ が等しくなる ($\hat{f}_A = \hat{f}_B = (1 - \hat{f}_R)/2$) ととき反応速度が最大となることがわかる。また、図 15(a) より、 $\hat{f}_A > \hat{f}_B$ のとき、反応物質 A の濃度変動が負となり (反応物質 A の濃度が減少する)、物質 B の濃度変動が正となる (反応物質 B の濃度が増加する) とき、反応速度が大きくなり反応によって生じる濃度変化が大きくなることがわかる。 $\langle u\gamma_A \rangle$ および $\langle v\gamma_A \rangle$ は正值、 $\langle u\gamma_B \rangle$ および $\langle v\gamma_B \rangle$ は負値をとることから、噴流中の反応物質 A の濃度変動の負値 ($\gamma_A < 0$) および周囲流体中の反応物質 B の濃度変動の正值 ($\gamma_B > 0$) は、 x 方向流速の負の変動 ($u < 0$) および y 方向流速の負の変動 ($v < 0$) と関連付けられる。前述した反応速度が大きくなるような条件で生じる反応により反応物質濃度が減少することで、反応物質 A の濃度の負の変動が大きく、反応物質 B の濃度の正の変動が小さくなる。その結果、 $\hat{f}_A > \hat{f}_B$ となる位置 (噴流上流域の噴流中心付近) では化学反応により $\langle u\gamma_A \rangle, \langle v\gamma_A \rangle$ は増加し、 $\langle u\gamma_B \rangle, \langle v\gamma_B \rangle$ は絶対値が小さくなる。一方、図 15(b) のように $\hat{f}_A < \hat{f}_B$ となる位置 (噴流下流域や噴流外縁付近) では、反応物質 A の濃度変動が正となり (反応物質 A の濃度が増加する)、物質 B の濃度変動が負となる (反応物質 B の濃度が減少する) ときに反応速度が大きくなる。この場合には、反応により反応物質 A の濃度の正の変動が小さくなることで $\langle u\gamma_A \rangle, \langle v\gamma_A \rangle$ は 0 に近づく。また、周囲流体中の反応物質 B の濃度の負の変動が大きくなることで $\langle u\gamma_B \rangle, \langle v\gamma_B \rangle$ の絶対値が大きくなる。

生成物質 R の場合、噴流上流域や噴流中心線付近 (図 9 の $x/d < 30$, 図 10, 12 の $x/d = 10$ での $|y/b_\xi| < 0.8$) において $\langle u\gamma_R \rangle, \langle v\gamma_R \rangle$ は負の値 (噴流中心に対して反対称な分布となる $\langle v\gamma_R \rangle$ については $y > 0$ を考える) となり、噴流外縁部や噴流下流域 (図 9 の $x/d > 30$, 図 10, 12 の $x/d = 10$ での $|y/b_\xi| > 0.8$ や図 11, 13 の $x/d = 30$ の断面) では $\langle u\gamma_R \rangle, \langle v\gamma_R \rangle$ は正の値となった。

化学反応によって生成物質の濃度が増加するため、反応速度が大きくなるととき生成物質 R の濃度変動 γ_R は正の値をとる傾向にある。上述したように、噴流上流域の噴流中心付近において、これは噴流物質 A の濃度変動 γ_A が負となることと対応している (図 15(a) 参照)。一方、噴流下流域や噴流外縁付近では、反応速度が大きくなり γ_R が正となることは、 γ_A が正となることと対応している (図 15(b) 参照)。このように、噴流上流域の噴流中心付近において生成物質 R の濃度変動と反応物質 A の濃度変動の間には負の相関があり、噴流下流域や噴流外縁付近では正の相関がある。噴流中 ($\langle v\gamma_\alpha \rangle$ については $y > 0$ を考える) で $\langle u\gamma_A \rangle$ および $\langle v\gamma_A \rangle$ が正值をとることから、噴流物質 A の濃度変動 γ_A と x 方向速度変動 u および y 方向速度変動 v は正の相関を持つことがわかる。したがって、 γ_R と γ_A の相関が負となる噴流上流域の噴流中心付近においては $\langle u\gamma_R \rangle, \langle v\gamma_R \rangle$ は負の値となる。また、 γ_R と γ_A の相関が正となる噴流下流域や噴流外縁付近では $\langle u\gamma_R \rangle, \langle v\gamma_R \rangle$ は正の値となる。

3.4 乱流拡散係数

本研究で対象とした二次元噴流においては、化学反応がない場合には平均濃度こう配の大きい噴流広がり (y) 方向の乱流拡散が支配的であり、 y 方向の乱流拡散と比較して流れ (x) 方向の乱流拡散の影響は小さい。しかし、化学反応を伴う場合には、化学反応によって平均濃度こう配や乱流フラックスの値が変化するため、流れ方向の乱流拡散の影響が大きくなる可能性も考えられる。化学反応を伴う乱流場において、反応性物質濃度に対するこう配拡散モデルについて調査した例が非常に少ない。そこで、本論文では噴流広がり (y) 方向だけでなく、流れ (x) 方向の乱流拡散係数についても調査した。なお、本研究で対象とした化学反応は $A + B \rightarrow R$ により表され、反応性物質 A, B, R のうち二つの物質の濃度がわかれば、残りの物質の濃度を反応性物質の質量保存則から算出することが可能である。しかし、化学反応がこう配拡散モデルに対して与える影響は物質ごとに異なる。そこで、本研究では、化学反応がこう配拡散モデルに対して与える影響が物質ごとにどのように異なるかについて考察するため、反応性物質 A, B, R の全てに対する結果を示した。

反応性物質の平均濃度の x 方向微分 $\partial \langle \Gamma_\alpha \rangle / \partial x$ と x 方向乱流フラックス $\langle u\gamma_\alpha \rangle$ より x 方向の乱流拡散係数 $D_{t\alpha,x} = -\langle u\gamma_\alpha \rangle / (\partial \langle \Gamma_\alpha \rangle / \partial x)$ を求めた。

図 16(a), (b), (c) に $D_{tA,x}$ の噴流中心上の分布、 $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す。図 16(a) より、無反応の場合、

Fig. 16 Longitudinal eddy diffusivity of reactant A. Symbols as in Fig. 6. The longitudinal eddy diffusivity of reactant A changes with the chemical reaction.

Fig. 17 Longitudinal eddy diffusivity of reactant B. Symbols as in Fig. 6. The longitudinal eddy diffusivity of reactant B can be negative near the jet centerline.

Fig. 18 Longitudinal eddy diffusivity of reactant R. Symbols as in Fig. 6. The longitudinal eddy diffusivity of product R can be negative near the jet centerline.

噴流中心上の $x/d > 10$ では $D_{tA,x} \approx 0.5$ となることがわかる．図 9(a), 10(a), 11(a) のように，噴流物質 A の x 方向乱流フラックス $\langle u\Gamma_A \rangle$ は常に正の値となる．噴流中心付近では下流方向に噴流物質の平均濃度が減少し $\partial \langle \Gamma_A \rangle / \partial x < 0$ となるため， $D_{tA,x} > 0$ となる．また，噴流外縁付近では，噴流下流に向かうにつれて噴流物質が周囲流体中に拡散することで $\partial \langle \Gamma_A \rangle / \partial x > 0$ となるため， $D_{tA,x} < 0$ となる．図 16(a), (b), (c) より，化学反応の有無によらず， $D_{tA,x}$ は噴流中心付近では正の値を，噴流外縁部付近では負の値となることがわかる．化学反応が生じる場合， $D_{tA,x} > 0$ となっている噴流中心付近の $D_{tA,x}$ は，無反応の場合の $D_{tA,x}$ と比較して小さくなる．また，図 16(a) に示されて

Fig. 19 Lateral eddy diffusivity of reactant A. Symbols as in Fig. 6. Near the jet centerline, the lateral eddy diffusivity of reactant A, $D_{tA,y}$, becomes small because of the chemical reaction. In the outer region of the jet flow, the chemical reaction has the opposite effect on $D_{tA,y}$, and the chemical reaction makes $D_{tA,y}$ large.

Fig. 20 Lateral eddy diffusivity of reactant B. Symbols as in Fig. 6. Near the jet centerline, the lateral eddy diffusivity of reactant B, $D_{tB,y}$, becomes large because of the chemical reaction. In the outer region of the jet flow, the chemical reaction has the opposite effect on $D_{tB,y}$, and the chemical reaction makes $D_{tB,y}$ small.

Fig. 21 Lateral eddy diffusivity of product R. Symbols as in Fig. 6.

いる噴流中心上では，化学反応による $D_{tA,x}$ の変化は Da が大きくなるにつれて小さくなっている．図 16(c) に示した $x/d = 30$ の噴流外縁付近では，化学反応によって反応物質 A の平均濃度が小さくなり， $\partial \langle \Gamma_A \rangle / \partial x$ が零に近

い値となるため、 $D_{tA,x}$ のばらつきが大きくなっている。

図 17(a), (b), (c) に $D_{tB,x}$ の噴流中心上の分布、 $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す。無反応の場合、物質 A, B の乱流拡散係数は等しくなる。一方、乱流拡散係数に対する化学反応の影響は周囲流中に含まれる反応物質 B と噴流中の反応物質 A とで大きく異なることが図 16, 17 よりわかる。周囲流中に含まれた反応物質 B の場合、噴流中心付近での $\partial \langle \Gamma_B \rangle / \partial x$ の符号が化学反応によって変化する (図 6(b))。しかし、 $\langle u \gamma_B \rangle$ は化学反応の有無によらず常に負の値となる (図 9(b))。そのため、無反応の場合、噴流中心付近における周囲流物質 B の x 方向の乱流拡散は常に平均濃度こう配の方向に生じる ($D_{tB,x} > 0$) が、化学反応が生じる場合は噴流中心付近であっても x 方向の乱流拡散の方向がこう配方向と逆を向く ($D_{tB,x} < 0$) 逆こう配拡散が生じる。噴流物質 A の場合、噴流中心付近では化学反応による $\partial \langle \Gamma_A \rangle / \partial x$ の符号の変化がないため、噴流中心付近では逆こう配拡散が生じない。 $D_{tB,x}$ の符号の変化は $\partial \langle \Gamma_B \rangle / \partial x$ の符号の変化によって生じるため、 $D_{tB,x}$ は噴流中心上で不連続な分布となる。また、図 17(b) の $Da = 1, 10$ と図 17(c) の $Da = 0.1$ の $D_{tB,x}$ のように、噴流中心付近で $D_{tB,x} < 0$ となる時、 $D_{tB,x}$ は y 方向位置によらず常に負の値となった。図 17(a) より、噴流中心付近で $D_{tB,x} < 0$ となる位置は Da によって変化し、 Da が大きいほど上流側で $D_{tB,x} < 0$ となることからわかる。 $D_{tB,x} < 0$ は $\partial \langle \Gamma_B \rangle / \partial x < 0$ と対応している。図 6(b) で述べたように、噴流中心付近での $\partial \langle \Gamma_B \rangle / \partial x < 0$ は、物質 B の化学反応による減少量が周囲流体を取り組むことによる物質 B の増加量を上回ることによって生じている。 Da が大きくなるにつれて噴流出口付近での化学反応による物質 B の減少量が大きくなるため、 Da の増加とともに $D_{tB,x} < 0$ となる位置が噴流上流側へと変化する。また、噴流中心上において (図 17(a))、 $Da = 1, 10$ の場合、 $D_{tB,x} < 0$ となったのち下流域で再び $D_{tB,x} > 0$ となった。一方、噴流外縁付近では、噴流が周囲流中に拡散していくことで噴流下流に向かうにつれて物質 B の濃度が減少し $\partial \langle \Gamma_B \rangle / \partial x < 0$ となるため、図 17(b), (c) の噴流外縁付近では $D_{tB,x} < 0$ となる。図 17(c) より、 $x/d = 30$ における $D_{tB,x}$ は Da が大きいほど無反応の場合の $D_{tB,x}$ に近づくことがわかる。噴流中心付近の物質 A に対しても、 Da が大きくなるほど $D_{tA,x}$ が無反応の場合の値に近づく傾向が見られた。 Da が大きい場合、二つの反応物質が混合したのち、化学反応が急速に進行し反応物質の一方がほとんど消費された状態になる。したがって、二つの反応物質は共存せず、この化学反応により余った反応物質は化学反応の影響を受けず無反応物質と同じように混合・拡散するため、化学反応の乱流拡散係数に対する影響が小さくなると考えられる。しかし、 Da が小さい場合の混合や拡散は化学反応と同時に進行するため、乱流拡散係数は化学反応によって大きく変化する。反応物質 A は噴流中心付近に、反応物質 B は噴流下流域の外縁付近にそれぞれ多く存在するため、 Da が大きい場合、噴流中心付近では反応物質 A のみが、噴流下流域の外縁付近では反応物質 B のみが存在する。そのため、こうした位置では、それぞれの反応物質の乱流拡散係数に対する化学反応の影響は Da が大きくなるほど小さくなる傾向が見られたと考えることができる。

図 18(a), (b), (c) に $D_{tR,x}$ の噴流中心上の分布、 $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す。図 18(a) より $D_{tR,x}$ は噴流中心付近であっても負の値をとり得ることがわかる。噴流中心付近での $D_{tR,x}$ の符号の変化は乱流フラックスの符号の変化と対応している。図 18(a) より噴流中心上の $x/d < 25$ の位置では、 Da が大きいほど $D_{tR,x}$ は大きくなることからわかる。 $D_{tR,x}$ は位置や Da によって変化し、無反応物質の乱流拡散係数とも大きく異なった分布形状となっている。

反応性物質の平均濃度の y 方向微分 $\partial \langle \Gamma_\alpha \rangle / \partial y$ と y 方向乱流フラックス $\langle v \gamma_\alpha \rangle$ より乱流拡散係数 $D_{t\alpha,y} = -\langle v \gamma_\alpha \rangle / (\partial \langle \Gamma_\alpha \rangle / \partial y)$ を求めた。噴流中心上では $\langle v \gamma_\alpha \rangle = 0$, $\partial \langle \Gamma_\alpha \rangle / \partial y = 0$ となり、 $D_{t\alpha,y}$ を定義することができないため、以下では $D_{t\alpha,y}$ の $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す。

図 19(a), (b) に $D_{tA,y}$ の $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す。また、図 20(a), (b) に $D_{tB,y}$ の $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す。Bilger ら (Bilger, et al., 1991) は気相のスカラ混合層における二次反応を対象とした実験で、スカラ混合層の広がり方向の乱流拡散係数を計測している。Bilger らによって計測された反応物質の乱流拡散係数は、無反応の場合の乱流拡散係数と比較して、その反応物質の濃度が大きい位置では大きくなるが、濃度が小さい位置では小さくなっている。本研究の二次元噴流中の反応物質濃度の y 方向分布において、噴流中心付近では、噴流中の反応物質 A の濃度は大きい周囲流体中の反応物質 B の濃度は小さい。逆に、噴流外縁付近では、反応物質 A の濃度は小さいが反応物質 B の濃度は大きい。本 DNS で得られた二次元噴流中の $D_{tA,y}$, $D_{tB,y}$ にはスカラ混合層における反応物質の乱流拡散係数と逆の傾向が見られ、無反応の場合と比較して、噴流の中心付近 (図 19(a), 20(a) の $y/b_\xi < 0.5$, 図 19(b), 20(b) の $y/b_\xi < 0.6$) では、濃度が大きい反応物質 A の乱流拡散係数 $D_{tA,y}$ は小さくなり、

濃度が小さい反応物質 B の乱流拡散係数 $D_{tB,y}$ は大きくなる．また，噴流外縁付近 (図 19(a), 20(a) の $y/b_\xi > 0.5$, 図 19(b), 20(b) の $y/b_\xi > 0.6$) では，無反応の場合と比較して，この位置で濃度が小さい反応物質 A の乱流拡散係数 $D_{tA,y}$ は大きくなり，濃度が大きい反応物質 B の乱流拡散係数 $D_{tB,y}$ は小さくなっている．図 19 より，化学反応による $D_{tA,y}$ の変化は，噴流の中心付近より噴流外縁付近で大きいことがわかる．また，化学反応による $D_{tB,y}$ の変化は，図 20(b) の $x/d = 30$ の断面の噴流中心付近や図 20(a) の $x/d = 10$ の断面内で大きくなっている． $x/d = 30$ の断面における $D_{tB,y}$ を除いて，こうした乱流拡散係数の変化が大きい位置では， $D_{tA,y}$ や $D_{tB,y}$ の化学反応による変化は Da が増加するにつれて大きくなる．図 20(b) の $x/d = 30$ の断面では， $D_{tB,y}$ の Da の違いによる差が小さいことがわかる．

図 21(a), (b) に $D_{tR,y}$ の $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す． $x/d = 10$ の $y/b_\xi < 0.6$ では $D_{tR,y}$ は y 方向位置によらずほぼ一定となっている． $y/b_\xi \approx 0.6$ 付近で $\partial \langle I_R \rangle / \partial y = 0$ となるため， $D_{tR,y}$ は不連続な分布となる．また， $x/d = 30$ では噴流中心付近で $D_{tR,y}$ の値にばらつきが見られるものの，噴流外縁に近づくにつれて Da の違いによる $D_{tR,y}$ の差が小さくなっていくことがわかる．

3.5 乱流シュミット数

渦粘性係数 ν_t と乱流拡散係数 $D_{t\alpha,x}, D_{t\alpha,y}$ を用いて，乱流シュミット数 $Sc_{t\alpha,x} = \nu_t / D_{t\alpha,x}$, $Sc_{t\alpha,y} = \nu_t / D_{t\alpha,y}$ を求めた．本研究では化学反応が流れ場に影響を与えないことを仮定しているため，渦粘性係数 ν_t は化学反応によって変化しない．したがって，乱流シュミット数の化学反応による変化は，前節で述べた乱流拡散係数の化学反応による変化と対応している．Feng ら (Feng, et al., 2007, 2010) と同様に，本研究では ν_t を次式により求めた．

$$\nu_t = - \frac{\langle uv \rangle}{\partial \langle U \rangle / \partial y} \quad (13)$$

ここで，噴流中心上では ν_t を定義することができないため， ν_t の噴流中心上の値として，噴流中心付近 ($|y/b_\xi| < 0.2$) の ν_t の y 方向平均値を用いた．

図 22 に $Sc_{tA,x}$ の噴流中心上の分布， $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す．無反応の場合，噴流中心上で $Sc_{tA,x} \approx 0.08$ となった．また， $Sc_{tA,x} > 0$ となる噴流中心付近では化学反応により $Sc_{tA,x}$ が大きくなることがわかる．図 22(a) より， $x/d > 15$ において，化学反応による噴流中心上の $Sc_{tA,x}$ の変化は Da が大きくなるにつれて小さくなることがわかる．

図 23 に $Sc_{tB,x}$ の噴流中心上の分布， $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す．図 23 より化学反応により $Sc_{tB,x}$ が小さくなることがわかる．無反応の場合は噴流中心付近で常に $Sc_{tB,x} > 0$ となるが，化学反応が生じることにより $Sc_{tB,x} < 0$ となる領域が現れる． $D_{tB,x}$ の分布でも見られたように，噴流中心付近で $Sc_{tB,x} < 0$ となる領域は Da によって変化することがわかる．

図 24 に $Sc_{tR,x}$ の噴流中心上の分布， $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す．図 24(a) より噴流中心付近の $x/d < 25$ の位置では， Da が大きくなるにつれて $Sc_{tR,x}$ が小さくなることがわかる．また， $D_{tR,x} = 0$ となる位置で $Sc_{tR,x}$ は不連続に変化している．図 24(b) に示した $x/d = 10$ の噴流中心付近 ($y/b_\xi < 0.5$) では， $Sc_{tR,x}$ は y 方向によらずほぼ一定となっている． $x/d = 10$ での $Sc_{tR,x}$ と比較して，図 24(c) の $x/d = 30$ では $Sc_{tR,x} < 0$ となる領域が広がっている．

図 25 に $Sc_{tA,y}$ の $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す．Yimer ら (Yimer, et al., 2002) により，軸対称噴流の広がり方向の乱流シュミット数 Sc_t が実験により求められており，軸対称噴流中で Sc_t が $0.62 \sim 1.1$ の値となることが示されている．また，Yimer らは乱流シュミット数を一定として数値計算を行う場合，軸対称噴流に対しては $Sc_t = 0.7$ とすることを推奨している．本研究で扱った流れ場は二次元噴流であるが，無反応の場合の乱流シュミット数 $Sc_{t\alpha,y}$ は Yimer らによる軸対称噴流中での計測値と同程度の大きさとなった．図 25 より，化学反応によって， $Sc_{tA,y}$ は噴流中心付近 (図 25(a) $x/d = 10$ の $y/b_\xi < 0.5$, 図 25(b) $x/d = 30$ の $y/b_\xi < 0.6$) で大きく，噴流外縁近く (図 25(a) $x/d = 10$ の $y/b_\xi > 0.5$, 図 25(b) $x/d = 30$ の $y/b_\xi > 0.6$) で小さくなることがわかる．また， Da が大きくなるほど噴流外縁近くにおける化学反応による $Sc_{tA,y}$ の変化が大きくなった．

図 26 に $Sc_{tB,y}$ の $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す．主流物質 B の場合，化学反応により， $Sc_{tB,y}$ は噴流中心付近 (図 26(a) $x/d = 10$ の $y/b_\xi < 0.5$, 図 26(b) $x/d = 30$ の $y/b_\xi < 0.6$) で小さく，噴流外縁近く (図 26(a) $x/d = 10$ の

Fig. 22 Longitudinal turbulent Schmidt number of reactant A. Symbols as in Fig. 6. The turbulent Schmidt number changes with the chemical reaction.

Fig. 23 Longitudinal turbulent Schmidt number of reactant B. Symbols as in Fig. 6. The turbulent Schmidt number changes with the chemical reaction.

Fig. 24 Longitudinal turbulent Schmidt number of product R. Symbols as in Fig. 6. The turbulent Schmidt number depends on the Damköhler number.

$y/b_{\xi} > 0.5$, 図 26(b) $x/d = 30$ の $y/b_{\xi} > 0.6$) で大きくなることがわかる . $x/d = 10$ の断面では Da が大きくなるほど化学反応による $Sc_{tB,y}$ の変化が大きくなる . また , $x/d = 30$ の断面では化学反応による $Sc_{tB,y}$ の変化が $x/d = 10$ と比較して小さく , Da の違いによる影響も小さいことがわかる .

図 27 に $Sc_{tR,y}$ の $x/d = 10, 30$ での y 方向分布を示す . 図 27(a) より , $x/d = 10$ の断面における生成物質 R の $Sc_{tR,y}$ は不連続な分布となることがわかる . また , $x/d = 10$ の噴流中心付近の $Sc_{tR,y}$ は y 方向によらずほぼ一定と

Fig. 25 Lateral turbulent Schmidt number of reactant A. Symbols as in Fig. 6. The turbulent Schmidt number changes with the chemical reaction.

Fig. 26 Lateral turbulent Schmidt number of reactant B. Symbols as in Fig. 6. The turbulent Schmidt number changes with the chemical reaction.

Fig. 27 Lateral turbulent Schmidt number of product R. Symbols as in Fig. 6. The turbulent Schmidt number depends on the Damköhler number.

なり, Da が大きくなるにつれて $Sc_{tR,y}$ は小さくなった. 図 27(b) に示した $x/d = 30$ での $Sc_{tR,y}$ の分布は, 物質 A の無反応の場合と似た傾向を示し, $Sc_{tR,y}$ は噴流中心から外側に向かうにつれて増加した.

以上のように, 乱流拡散係数および乱流シュミット数は化学反応によって大きく変化することがわかった. しかしながら, 化学反応がこう配拡散モデルに対して与える影響は Da や化学物質ごとに異なっており, 化学反応による乱流シュミット数の変化を予測することは困難であると考えられる. 本研究で対象としたような二次反応 $A + B \rightarrow R$ の数値計算を式 (1) を用いて行う場合, 全物質に対して式 (1) を解く必要はなく, 一つの反応性物質の

平均濃度と無反応スカラである混合分率の平均値に対する支配方程式を解き、化学種の質量保存則を用いて残り二つの反応性物質の平均濃度を求めればよい。したがって、こう配拡散モデルを用いる場合、式(1)を解く物質として、化学反応の乱流シュミット数に対する影響が小さい物質を選ぶことが有効であると考えられる。本研究で乱流拡散係数および乱流シュミット数を求めた結果から、周囲流体中の反応物質 B や生成物質 R は逆こう配拡散が生じ、これらの物質の乱流シュミット数は、無反応の場合の乱流シュミット数とは大きく異なることがわかった。こうした物質の乱流フラックスをこう配拡散モデルを用いてモデル化することは困難であり、こう配拡散の仮定そのものに問題があると考えられる。化学反応による平均濃度分布の変化は反応による濃度の減少量・増加量によって決まる一方、化学反応による乱流フラックスの変化には反応速度と濃度変動の相関が関連している。このように、平均濃度分布と乱流フラックスの化学反応による変化の要因の違いが、化学反応による乱流拡散係数の変化としてこう配拡散モデルに現れたとも解釈することができる。こう配拡散モデルは化学反応を伴う乱流場の RANS による数値計算においても用いられている (Wang and Tarbell, 1993) が、その適用には特に注意を要する必要がある。噴流中の物質 A の場合、化学反応によって乱流シュミット数の大きさに変化が見られたものの、無反応の場合の乱流シュミット数と類似した分布となっていることが図 22, 25 よりわかる。そのため、反応性物質の乱流シュミット数が無反応の場合と等しいと仮定して数値計算を行う場合、こう配拡散モデルにより求めた乱流フラックスに生じる予測誤差は噴流中の反応物質 A が最も小さくなると考えられる。このように、こう配拡散モデルを用いた数値計算を行う場合、数値計算をする化学種を適切に選ぶことにより、化学反応による乱流シュミット数の変化の影響を小さくできる可能性がある。

4. 結 言

二次反応 $A + B \rightarrow R$ を伴う二次元噴流 (A: 噴流物質, B: 周囲流中の物質) の DNS を行い、反応性物質の乱流拡散係数および乱流シュミット数を求め、化学反応がこう配拡散モデルに及ぼす影響について調べた。また、 $Da = 0.1, 1, 10$ の三つの化学反応に対して DNS を行うことで、反応速度がこう配拡散モデルに与える影響について調査した。その結果、化学反応が乱流拡散係数に及ぼす影響は、化学種や Da によって大きく変化することがわかった。反応物質 B や生成物質 R の流れ方向の乱流拡散係数は、噴流中心付近であっても負の値となり得る。また、噴流の RANS による数値計算で重要となる噴流の広がり方向の乱流拡散係数についても、化学反応によって変化が生じる。本研究で扱った化学反応は流れ場に影響を与えないため、渦粘性係数は化学反応によって変化しない。そのため、乱流拡散係数の変化に応じて、反応性物質の乱流シュミット数も変化する。

本研究で行った DNS により、乱流拡散係数や乱流シュミット数が化学反応によって大きく変化することが確認できた。反応物質 B や生成物質 R については、流れ方向に逆こう配拡散が生じており、こうした物質の乱流フラックスをこう配拡散モデルによりモデル化することは困難である。こう配拡散モデルに対する化学反応の影響を無視し、反応性物質の乱流シュミット数を無反応の場合と等しいと仮定した場合、こう配拡散モデルにより見積もられた乱流フラックスには大きな予測誤差が含まれることが予想される。したがって、化学反応を伴う乱流場へのこう配拡散モデルの適用には注意を要する。化学反応がこう配拡散モデルに及ぼす影響は Da や化学物質ごとに異なる。そのため、化学反応の影響を考慮せずこう配拡散モデルを用いた数値計算を行う場合、計算対象とする物質として化学反応による乱流シュミット数の変化が小さい物質を選ぶことで、化学反応による乱流シュミット数の変化の影響を小さくできる可能性があると考えられる。

謝 辞

本研究は東北大学流体科学研究所における公募研究により行われた。また、本研究の一部は科研費 (25002531, 25289030, 25289031, 25630052) の援助を受けて行われた。また、共著者の長田は小森悟教授 (京都大学) から有益な助言を多数頂いた。記して謝意を表する。

文 献

- Bilger, R. W., Saetran, L. R. and Krishnamoorthy, L. V., Reaction in a scalar mixing layer, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 233, No. 1 (1991), pp. 211–242.
- Combest, D. P., Ramachandran, P. A. and Dudukovic, M., On the gradient diffusion hypothesis and passive scalar transport in turbulent flows, *Industrial Engineering Chemistry Research*, Vol. 50, No. 15 (2011), pp. 8817–8823.
- Dai, Y., Kobayashi, T. and Taniguchi, N., Large eddy simulation of plane turbulent jet flow using a new outflow velocity boundary condition, *JSME International Journal. Series B*, Vol. 37, No. 2 (1994), pp. 242–253.
- de Bruyn Kops, S. M., Riley, J. J. and Kosaly, G., Direct numerical simulation of reacting scalar mixing layers, *Physics of Fluids*, Vol. 13, No. 5 (2001), pp. 1450–1465.
- Fabregat, A., Pallarès, J., Cuesta, I. and Grau, F. X., Numerical simulations of a second-order chemical reaction in a plane turbulent channel flow, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 53, No. 19 (2010), pp. 4248–4263.
- Feng, H., Olsen, M. G., Hill, J. C. and Fox, R. O., Simultaneous velocity and concentration field measurements of passive-scalar mixing in a confined rectangular jet, *Experiments in Fluids*, Vol. 42, No. 6 (2007), pp. 847–862.
- Feng, H., Olsen, M. G., Hill, J. C. and Fox, R. O., Investigation of passive scalar mixing in a confined rectangular wake using simultaneous PIV and PLIF, *Chemical Engineering Science*, Vol. 65, No. 11 (2010), pp. 3372–3383.
- Fox, R. O. *Computational Models for Turbulent Reacting Flows* (2003), Cambridge University Press.
- 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.
- 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. 742–748.
- Spalart, P. R., Moser, R. D. and Rogers, M. M., Spectral methods for the Navier-Stokes equations with one infinite and two periodic directions, *Journal of Computational Physics*, Vol. 96, No. 2 (1991), pp. 297–324.
- Veynante, D. and Vervisch, L., Turbulent combustion modeling, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 28, No. 3 (2002), pp. 193–266.
- Wang, D. M. and Tarbell, J. M., Closure models for turbulent reacting flows with a nonhomogeneous concentration field, *Chemical Engineering Science*, Vol. 48, No. 23 (1993), pp. 3907–3920.
- 渡邊智昭, 酒井康彦, 安原大樹, 長田孝二, 寺島修, 久保貴, 二次反応を伴う液相二次元噴流における速度と反応性スカラー量の同時測定, *日本機械学会論文集 B 編*, Vol. 78, No. 788 (2012), pp. 769–782.
- 渡邊智昭, 酒井康彦, 長田孝二, 寺島修, 反応性乱流拡散場における乱流拡散係数と乱流シュミット数, *日本機械学会論文集 B 編*, Vol. 79, No. 807 (2013), pp. 2424–2433.
- Yimer, I., Campbell, I. and Jiang, L. Y., Estimation of the turbulent Schmidt number from experimental profiles of axial velocity and concentration for high-Reynolds-number jet flows, *Canadian Aeronautics and Space Journal*, Vol. 48, No. 3 (2002), pp. 195–200.

References

- Bilger, R. W., Saetran, L. R. and Krishnamoorthy, L. V., Reaction in a scalar mixing layer, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 233, No. 1 (1991), pp. 211–242.
- Combest, D. P., Ramachandran, P. A. and Dudukovic, M., On the gradient diffusion hypothesis and passive scalar transport in turbulent flows, *Industrial Engineering Chemistry Research*, Vol. 50, No. 15 (2011), pp. 8817–8823.
- Dai, Y., Kobayashi, T. and Taniguchi, N., Large eddy simulation of plane turbulent jet flow using a new outflow velocity boundary condition, *JSME International Journal. Series B*, Vol. 37, No. 2 (1994), pp. 242–253.
- de Bruyn Kops, S. M., Riley, J. J. and Kosaly, G., Direct numerical simulation of reacting scalar mixing layers, *Physics of Fluids*, Vol. 13, No. 5 (2001), pp. 1450–1465.
- Fabregat, A., Pallarès, J., Cuesta, I. and Grau, F. X., Numerical simulations of a second-order chemical reaction in a plane turbulent channel flow, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 53, No. 19 (2010), pp. 4248–4263.
- Feng, H., Olsen, M. G., Hill, J. C. and Fox, R. O., Simultaneous velocity and concentration field measurements of passive-scalar mixing in a confined rectangular jet, *Experiments in Fluids*, Vol. 42, No. 6 (2007), pp. 847–862.

- Watanabe, Sakai, Nagata, Terashima, Ito and Hayase, Transactions of the JSME (in Japanese), Vol.80, No.809 (2014)
- Feng, H., Olsen, M. G., Hill, J. C. and Fox, R. O., Investigation of passive scalar mixing in a confined rectangular wake using simultaneous PIV and PLIF, Chemical Engineering Science, Vol. 65, No. 11 (2010), pp. 3372–3383.
- Fox, R. O. Computational Models for Turbulent Reacting Flows (2003), Cambridge University Press.
- 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.
- 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. 742–748.
- Spalart, P. R., Moser, R. D. and Rogers, M. M., Spectral methods for the Navier–Stokes equations with one infinite and two periodic directions, Journal of Computational Physics, Vol. 96, No. 2 (1991), pp. 297–324.
- Veynante, D. and Vervisch, L., Turbulent combustion modeling, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 28, No. 3 (2002), pp. 193–266.
- Wang, D. M. and Tarbell, J. M., Closure models for turbulent reacting flows with a nonhomogeneous concentration field, Chemical Engineering Science, Vol. 48, No. 23 (1993), pp. 3907–3920.
- Watanabe, T., Sakai, Y., Yasuhara, T., Nagata, K., Terashima, O., Kubo, K., Simultaneous measurements of velocity and reactive scalar in plane liquid jet with the second-order chemical reaction, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B, Vol. 78, No. 788 (2012), pp. 769–782 (in Japanese).
- Watanabe, T., Sakai, Y., Nagata, K., Terashima, O., Eddy diffusivity and turbulent Schmidt number in a turbulent diffusion field with a chemical reaction, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B, Vol. 79, No. 807 (2013), pp. 2424–2433 (in Japanese).
- Yimer, I., Campbell, I. and Jiang, L. Y., Estimation of the turbulent Schmidt number from experimental profiles of axial velocity and concentration for high-Reynolds-number jet flows, Canadian Aeronautics and Space Journal, Vol. 48, No. 3 (2002), pp. 195–200.