103

化学反応を伴う二次元混合層の渦法解析

Vortex Simulation for Plane Mixing Layer with Chemical Reaction

○ 大槻直洋(名大院),正内山知実(名大)

Naohiro OTSUKI and Tomomi UCHIYAMA, Nagoya University, Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya

Keywords: Numerical Analysis, Vortex Method, Chemical Reaction, Vortical Structure

1. 緒 言

化学反応を伴う混合現象は様々な工業機器や環境 乱流において観察されるため、これまで多くの研究 ⁽¹⁾⁽²⁾が遂行されている.

一方,様々な時空間スケールをもつ物質の運動の数 値解法として,粒子法が注目を集めている⁽³⁾.質量, 電荷および渦度などの物理量が与えられた粒子の運 動をLagrange計算し,その挙動から物質全体の運動 を求める解法である.流体解析に対する粒子法は引 法とも呼ばれ,自由乱流の解析に有効に利用されて いる.渦構造の発展過程を良好に計算できるからで あるが,拡散方程式も同型であることから,拡散高 の解析にも粒子法の適用が試みられてきた.著者ら は,格子乱流中におかれた円柱周りの点源プルーム (4)や二次元混合層⁽⁵⁾の拡散現象を二次元粒子法で 解析した.また,既報⁽⁶⁾では同軸円形噴流における 物質拡散を三次元解析し,拡散に対する渦構造の役 割を合理的に解析できることを示した.

本研究では、化学反応を伴う二次元混合層に対す る粒子法を提案する.また、予混合のない不可逆一 段反応を伴う場合の解析に適用した結果についても 報告する.

2. 基礎式

ここで, sは化学量論比である.

化学種iの濃度および反応速度を γ_i および w_i とすれば、 w_i は次式で表される⁽⁷⁾.

$$w_A = w_B/s = -w_P/(s+1) = -k\gamma_A\gamma_B \tag{2}$$

ただし、kは反応速度定数である.

予混合のない反応の場合には、つぎの無次元濃度 Y_iに関する保存則が成り立つ.

$$Y_A + Y_B + Y_P = 1 \tag{3}$$

ここで, $Y_i = \gamma_i / \gamma_{i0}$ であり, γ_{A0} および γ_{B0} は化学種 AおよびBの初期濃度を表す.

2.2 保存方程式 二次元流れ場を解析の対象と すれば、渦度方程式と濃度の保存方程式は、無次元 形で以下のように表される.

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{Re} \nabla^2 \boldsymbol{\omega}$$
(4)

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla Y_i = \frac{1}{ReSc} \nabla^2 Y_i + \hat{w}_i \quad (i = A, B, P)$$
(5)

ここで、無次元化には基準長さL、代表速度 ΔU が用いられ、反応項 \hat{w}_i は式(2)に基づいた次式で与えられる.

 $\hat{w}_A = -Da(\gamma_{B0}/\gamma_{A0})Y_A Y_B \tag{6}$

$$\hat{w}_B = -sDaY_A Y_B \tag{7}$$

$$\hat{w}_P = (s+1)Da(\gamma_{B0}/\gamma_{P0})Y_A Y_B \tag{8}$$

上式における Reynolds 数 *Re*, Schmidt 数 *Sc* および Damköhler 数 *Da*は, それぞれ次式で定義される.

$$Re = L\Delta U/\nu, \quad Sc = \nu/\kappa, \quad Da = kL\gamma_{A0}/\Delta U$$
 (9)

式 (4) および (5) は, Lagrange 座標系で記述すれば 次式となる.

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{1}{Re} \nabla^2 \omega \tag{10}$$

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{1}{ReSc} \nabla^2 Y_i + \hat{w}_i \qquad (i = A, B, P)$$
(11)

2.3 離散化 渦度場をコア構造をもつ渦要素により離散化する. 渦要素 α の循環を Γ_{α} , コア半径を σ_{α} , 位置ベクトルを x^{α} とすれば, 要素 α による渦度は次式で与えられる.

$$\omega^{\alpha}(\boldsymbol{x}) = \frac{\Gamma_{\alpha}}{\sigma_{\alpha}^{2}} f\left(\frac{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\alpha}|}{\sigma_{\alpha}}\right)$$
(12)

ここで、コア関数 $f(\rho)$ は次式で定められる.

$$f(\rho) = \begin{cases} 1/(2\pi\rho) & \rho \le 1 \\ 0 & \rho > 1 \end{cases}$$
(13)

渦要素の移流を Lagrange 計算し,得られた渦度分 布を Biot-Savart の式に用いれば速度分布が求められ る.式 (10) から知れるように渦度は粘性拡散により 減衰するが, core spreading 法で考慮する.

一方,前報⁽⁴⁾⁽⁵⁾と同様,濃度場を離散化する濃度 要素はコア構造をもち,要素内の濃度が Gauss 分布 を示すものとする.この場合,濃度要素 β のコア半 径を ε_{β} ,位置ベクトルを x^{β} とすれば,要素 β による 濃度は次式で表される.

$$Y_{i\beta}(\boldsymbol{x}) = \frac{C_{i\beta}}{\pi \varepsilon_{\beta}^{2}} \exp\left[-\left(\frac{\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\beta}}{\varepsilon_{\beta}}\right)^{2}\right]$$
(14)

ただし、 $C_{i\beta}$ は要素 β の無次元強度である.

濃度要素の移流を渦要素と同様にLagrange計算し, 各要素の濃度場を重ね合わせれば濃度分布が求めら れる.ただし,式(11)の拡散項は core spreading 法に より模擬し,反応項は拡散項を無視した式(11)に式 (14)を代入して求められる, $C_{i\beta}$ の時間変化率から定 める.すなわち,

$$\frac{dC_{i\beta}}{dt} = \pi \varepsilon_{\beta}^2 \hat{w}_i \tag{15}$$

ここで、 \hat{w}_i は要素 β が占める位置における化学種iの反応速度である.

3. 解析結果と考察

混合層の高速側から化学種 A,低速側から化学種 Bがそれぞれ濃度1で一様に流入する.ただし,速 度比は0.4, Re=10000, Sc=1, Da=1, s=1とした.

日本機械学会東海支部三重地区講演会講演論文集('03.9.2) Na033-2



Fig. 1 Concentration distribution



Fig. 2 Reaction rate



Fig. 3 Concentration distribution on cross-sections



Fig. 4 Mean concentration



Fig. 5 Fluctuation concentration intensity

化学種 A, B, Pの瞬時分布を図1に示す.ただし, y/L>0が高速側, y/L<0が低速側である.化学種 Aおよび B は,大規模渦の内部に取り込まれ,混合 層内部で高い濃度を示す.したがって,反応生成物で ある化学種 Pの濃度が混合層内部で高い.

図 2 は、図 1 の結果と同時刻における反応速度 DaY_AY_B の分布を示す.化学種AとBがよく混合して いる混合層内部で反応が進行していることが知れる.

図1および2と同時刻において、断面 x/L=7.6 と 14.6での濃度の分布を求めると図3のようになる.2 つの大規模渦の中間断面に相当する x/L=7.6 では、 分布が単純である.しかし、大規模渦の中央を通過 する断面 x/L=14.6 では、化学種が極めて不均一に分 布し、複数の細い反応帯が認められる.このような 分布は、差分法解析⁽⁸⁾でも報告されている.

平均濃度分布を図4に示す.ただし,運動量厚さθ_x を用いた無次元座標に対する結果である.自己保存 の分布を示し,妥当な結果が得られているものと考 えられる.化学種Ρは混合層中央で極大値をとる.

図5は濃度変動強さの分布である.大規模渦が混 合および反応を促進するため,中央部で変動強さが 大きい.

4. 結 言

化学反応を伴う二次元混合層に対する粒子法解法 を提案した.また、予混合のない不可逆一段反応を 伴う場合の解析に適用し、大規模渦が反応や拡散に 及ぼす影響を良好に解析できることを示した.

文 献

- Komori, S., ほか3名, AIChE J., 39-10(1993), 1611-1620.
- (2) 酒井康彦・ほか2名, 機論, 64-628, B(1998), 4053-4061.
- (3) Hockney, R. W. and Eastwood, J. W., Computer Simulation Using Particles, (1981), McGraw-Hill, New York.
- (4) Uchiyama, T. and Okita, T., Advances in Environmental Research, 7(2003), 573-581.
- (5) Otsuki, N., Murakami, K. and Uchiyama, T., Proc. 5th JSME-KSME Fluids Eng. Conf., Nagoya, (2002), (on CD-ROM).
- (6) Uchiyama, T. and Ichikawa, A., Proc. 4th ASME/JSME Joint Fluids Eng. Conf., Honolulu, FED2003-45290, (on CD-ROM), (2003).
- (7) Libby, P. A. and Williams, F. A., *Turbulent Reacting Flows*, (1980), 11, Springer-Verlag.
- (8) 長谷川達也・ほか2名, 機論, **53-**488, B(1987), 1403-1410.