Japan Society of Fluid Mechanics

日本流体力学会年会 2003 講演論文集 C-233

ハイブリッド DNS/ LES を用いた気液界面における高シュミット数乱流物質輸送の数値計算

Hybrid DNS/LES Simulation of High Schmidt Number Turbulent Mass Transfer Across an Air-Water Interface

○長谷川洋介，笠木伸英（東大工）

Yosuke HASEGAWA and Nobuhide KASAGI

Department of Mechanical Engineering, The University of Tokyo, 113-8656, Japan

A hybrid DNS/LES scheme, in which DNS with high-resolution grids is applied within the near-surface region while LES with relatively coarse grids in the outer region, has been developed in order to calculate gas absorption into liquid across an air-water interface at the high Schmidt number of $Sc_L = 100$. The gas transfer rate is well compared with that previously obtained by a Lagrangian method. The concentration field near the interface is characterized by fine-scale high concentration streaks produced by the interfacial shear and low concentration spots associated with upwelling flows which impinge on the interface, *i.e.*, splatting. From visualization, it is observed that quasi-streamwise vortices in liquid, which are scaled by the shear units, govern the splatting events and enhance the interfacial mass transfer by replacing the near-surface fluids with those beneath the interface.

1. 序論

気液界面における物質輸送は，海洋界面における炭酸ガス吸収現象など環境科学の分野で頻繁に見られ，その理解と予測は重要な課題である．一般に，気液界面を通した物質移動現象では，液側でのシュミット数が高く($Sc_L \sim O(10^3)$)，界面近傍に薄い濃度境界層が形成される．界面近傍の自由界面乱流場は物質輸送の支配的な因子であるが，実験における速度場，濃度場の同時計測は今なお困難であり，その詳細な機構に関して未解明な点が多い．また，これまでの数値計算例では，計算負荷によるシュミット数の制約があった．

これに対し，長谷川・笠木[1]は，ラグランジュ法を適用することで高Scにおけるガス交換係数を求め，液側界面近傍の縦渦構造により物質輸送が促進されることを示した．しかし，ラグランジュ法で得られるデータは平均濃度分布などの低次の統計量に限られ，瞬時の濃度場の構造や，それらと界面近傍の速度場との関係については十分な知見が得られていない．

そこで，本研究では界面近傍における濃度分布や物質移動機構に関して，より詳細なデータの取得を目的とし，界面近傍では格子を集め直接数値計算(DNS)を適用する一方，界面遠方では比較的粗い格子系にラージ・エディー・シミュレーション(LES)を用いる，ハイブリッド DNS/LES を開発し，高シュミット数における乱流物質輸送の数値計算を行った．

2. 計算手法

2. 1 計算条件

本研究では，図 1 に示す気液対向流を考える．両相のレイノルズ数 $Re_\tau = u_\tau \delta / \nu$は，各相の界面摩擦速度 u_τ，相深さ δ，動粘性係数 νで定義され，各々 $Re_{\tau L} = Re_{\tau G} = 150$とした．シュミット数は気側で$Sc_G = 1.0$とし，液側で $Sc_L = 1.0, 3.0, 5.0, 100$ と変化させた．速度場と濃度場の支配方程式は，連続の式，非圧縮 Navier-Stokes 方程式，スカラーの輸送方程式であり，擬スペクトル法を用い空間離散化を行った．上下端では流れ場への影響を最小化するため滑り条件を課し，界面では速度とせん断応力の連続条件を課した．本研究で扱う低レイノルズ数流れでは，変形量は微少であるため無視し，界面で鉛直方向速度 $v_L = v_G = 0$ とした．一方，濃度場に対して上下境界で等スカラー条件を課し，界面においてヘンリー則とスカラー束の連続条件を課した．計算手法の詳細は長谷川・笠木[1]を参照されたい．速度場及び低シュミット数濃度場($Sc_L = 1.0, 3.0, 5.0$)の計算においては，全領域で DNS を用いる一方，高シュミット数濃度場($Sc_L = 100$)の計算においては，次節で述べるハイブリッド DNS/LES を適用した．

2. 2 ハイブリッド DNS/LES による高 Sc 数濃度場計算

高シュミット数における濃度場の計算にあたり，計算領域を鉛直方向に1. DNS領域 ($y^+_L < 16.8$), 2. バッファー領域 ($16.8 < y^+_L < 21.5$)，3. LES 領域 ($y^+_L > 21.5$) の三領域に分割し，水平方向はFourier級数展開，また鉛直方向は二次精度有限差分法を用い空間離散化を行った．各領域に設けたモード数，格子点数を表 1 に示す．

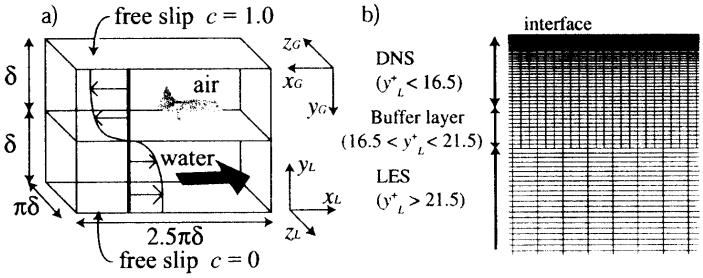

Fig. 1 a): Computational domain and b) grid system for solving scalar field in liquid with hybrid DNS/LES scheme

Table. 1 Number of modes and their spacings in hybrid scheme

	Region	k_x, N_y, k_z	Δx_L^+	Δy_L^+	Δz_L^+
DNS	$0 < y_L^+ < 16.5$	512, 95, 512	2.3	0.002 ~ 0.34	0.9
Buffer	$16.5 < y_L^+ < 21.6$	512, 14, 512	2.3	0.35 ~ 0.38	0.9
LES	$21.6 < y_L^+ < 150$	64, 324, 64	18.4	0.002 ~ 0.38	7.2

DNS領域では十分なモードを設け，モデルを用いることなく濃度場の計算を行う．この際，対流項の評価を行うために，濃度場の格子点上に速度情報を補間する必要がある．本計算では，各 y 断面において，高波数成分に零を代入した後，高速逆フーリエ変換を用いることで補間を行った．

LES 領域では速度場と同じ格子系を用い，濃度変動を適切に散逸させる機構として，渦拡散型の SGS モデルを導入した．この際，濃度場の支配方程式は，

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{1}{Sc \cdot Re_\tau} \frac{\partial^2 c}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \xi_j}{\partial x_j} \tag{1}$$

$$\xi_j = -D_s \Delta^2 |S_{ij}| \frac{\partial c}{\partial x_j}, \quad \Delta = (\Delta x \cdot \Delta z)^{1/2} \tag{2}$$

となる．ここで，モデル中に含まれるスマゴリンスキー定数 D_sは界面近傍でシュミット数に対する依存性は小さいため[2]，低シュミット数における*a priori* テストの結果より決定した．より精度の高い SGS モデルを用いることも可能であるが，後に示すように$Sc_L = 100$において，平均濃度分布の大部分の変化は DNS 領域で発生しており，LES 領域における SGS モデルの影響は比較的小さいと考えられる．

また，DNS 領域と LES 領域とを滑らかに連結するために，両区間の間にバッファー領域を設け，スマゴリンスキー係数を界面から遠ざかるに従い，除々に増加させる工夫を行った．

NII-Electronic Library Service

3. 計算結果

3. 1 濃度場の統計量

界面近傍の平均濃度分布を図2に示す．大部分の濃度変化は液側で発生し，シュミット数の増加に伴い濃度境界層厚さが急速に減少する様子が分かる．バッファー領域を設けたことで各領域の連結点近傍において滑らかな分布が得られた．図3に液相における濃度変動を示す．濃度変動のピークの位置は凡そ$Sc_L^{1/2}$に反比例して界面に近付く一方，$Sc_L = 100$においてもDNS領域外部で比較的大きな濃度変動が確認され，各領域間の強い相互作用が予測される．図4に濃度変動cと，主流方向，界面鉛直方向の速度変動u, vとの相関係数R_{cu}, R_{cv}を示す．シュミット数の増加に伴い，速度場との相似性は崩れるものの，界面近傍においてR_{cv}は0.6程度に保たれており，濃度場は界面鉛直方向速度に敏感に反応することが分かる．

3. 2 界面局所スカラー束分布

$Sc_L = 100$における瞬時の界面スカラー束と，同時刻における界面発散と速度ベクトルの分布を図5 a), b) に示す．図5 a)において，界面スカラー束分布は，微細なストリーク構造を持つ低スカラー束域と，斑点状の高スカラー束域により特徴付けられることが分かる．また高スカラー束領域は，図5 b)における界面発散の大きな領域と良く一致しており，界面下からの高速で低濃度の流体の沸き上がり(スプラティング)により，物質交換が促進されている．ここで，界面発散は界面更新を表す指標であり，以下のように定義される．

$$\beta = \left.\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z}\right|_{interface} = -\left.\frac{\partial v}{\partial y}\right|_{interface} \qquad (3)$$

この流体の上昇運動は，界面下に存在する縦渦構造に起因することが可視化より確認された．

3. 3 ガス交換係数

本計算で得られた$Sc_L = 100$におけるガス交換係数は$K^+ = K / u_{\tau L} = 0.0097$であり，以前に同一条件下でラグランジュ法により得られた値$K^+ = 0.0095$ [1]と良い一致が確認された．これは，過去の実験で得られた経験式[3] $K^+ = 0.12Sc_L^{-0.5}$を過小評価する傾向にあるが，この要因としてレイノルズ数効果や界面変形の影響が挙げられ，これらは今後の研究課題である．

4. 結論

ハイブリッドDNS/LESを用い気液界面における高シュミット数物質輸送の数値計算を行った．界面近傍の濃度場は，微細なストリーク構造を持つ低スカラー束域と間欠的な斑点状の高スカラー束域によって特徴付けられる．高スカラー束域の構造は，シュミット数にほぼ依存せず確認され，液側の縦渦構造に伴うスプラッティングに起因することが分かった．

引用文献

1) 長谷川・笠木: 機論(B), 69-680 (2003), 824.
2) A. Mitsuishi et al: *Proc. 6th ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference* (2003), TED-AJ03-231, CD-ROM.
3) T. J. Hanratty: *Air-Water Gas Transfer* (ASCE, 1991), 10.

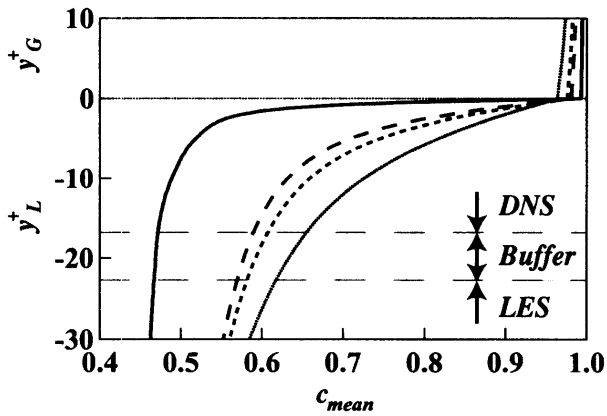

Fig. 2 Mean concentration profiles. ------ : $Sc_L = 1.0$, - - - : $Sc_L = 3.0$, — — : $Sc_L = 5.0$, ——— : $Sc_L = 100$.

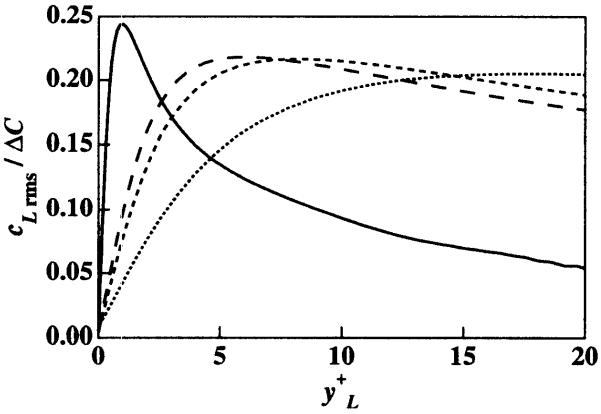

Fig. 3 Concentration fluctuation profiles. For symbols see Fig. 2.

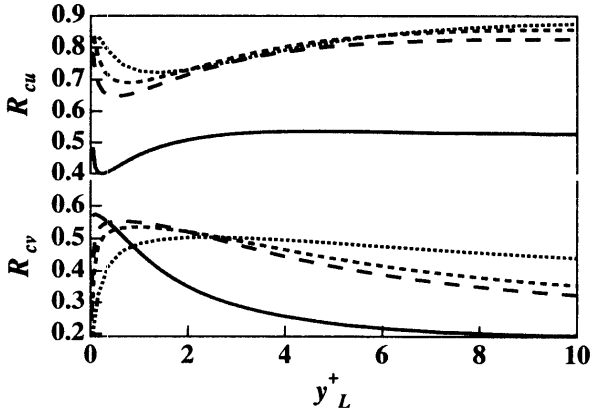

Fig. 4 Correlation coefficients R_{cu} and R_{cv}. For symbols see Fig. 2.

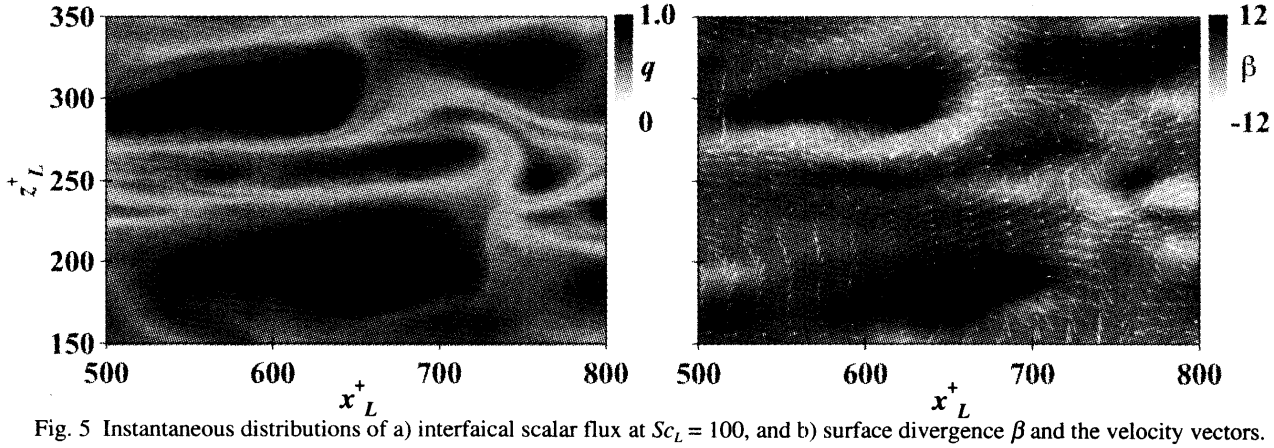

Fig. 5 Instantaneous distributions of a) interfaical scalar flux at $Sc_L = 100$, and b) surface divergence β and the velocity vectors.

NII-Electronic Library Service