

化学反応を伴う乱流混合層中で粒子が乱流およびスカラ拡散に及ぼす影響

電力中央研究所 道岡武信(Takenobu Michioka)、黒瀬良一(Ryoichi Kurose)
Central Research Institute of Electric Power Industry

1 緒言

数十ミクロン程度の径をもつ粒子を伴う流れ場は、噴霧燃焼装置や微粉炭燃焼装置などの工業装置内の流れ場に数多く見られる。それらの流れ場において、粒子(噴霧、微粉炭)と流れ場との相互作用を正確に把握することは、工業プラントの最適化設計などの工業問題に関連して極めて重要である。

このような粒子を伴う流れ場を数値シミュレーションにより再現するためには、粒子間の衝突および粒子と流体との相互干渉を考慮しなければならない。微小粒子を伴う流れ場では、ほとんどの場合で粒子の体積分率は十分に小さいため、粒子間の衝突を無視できる。しかしながら、固体粒子の密度は気体の密度に比べ 2~3 オーダ以上大きく、粒子の質量分率の大きい流れ場が数多く存在するため、粒子流体相互干渉を無視できない。よって、そのような流れ場では粒子流体相互干渉による乱流変動の変化が粒子の挙動、物質の乱流拡散、反応生成物質量を予測する上で非常に重要となる。

これまで、Druzhini¹⁾は微小粒子を伴う等方性乱流場に対して Direct Numerical Simulation (DNS) を実行し、粒子の緩和時間 τ_p がコルモゴロフの時間スケール τ_k に比べ十分に小さな場合には、単相の等方性乱流場に比べて乱れを増加されること、 τ_p が τ_k と同程度の場合には乱れを減少させることを明らかにした。また、Ahmedら²⁾は一様せん断流に対して DNS を実行し、Druzhini の等方性乱流場と同様の結果を得た。さらに、Yamamotoら³⁾はチャネル乱流場に対して Large-Eddy Simulation (LES) を実行し、 τ_p が τ_k と同程度かそれ以上の場合は乱れを減少することを示した。このように、最近では流れ場内に投入された微小粒子による乱れの促進および抑制メカニズムが明らかになりつつある。

しかしながら、これらの既往研究は完全発達した一様な流れ場を対象としており、工業装置内の流れの中でよく見られる空間的に変化する系を対象にした例は数少ない^{4~6)}。例えば、混合層や噴流は流れ場が空間的に変化する系の中では、最も単純なものであるが、一概に上記のような関係を適用できるかどうかは検討されていない。また、これらの微小粒子を伴う混合層や噴流中において、粒子が物質の拡散および反応生成物質量に及ぼす影響を検討した例はほとんど見られない。そこで、本研究では工学的に種々の流れ場の中によく見られる空間的に変化する代表的なせん断乱流場である乱流混合層を対象として、DNS により微小粒子が流れ場および化学反応を伴う拡散場に及ぼす影響を明らかにすることを目的とした。

2. 直接数値計算(DNS)

2.1 支配方程式(流体運動)

DNS において流れ場および拡散場を支配する方程式は、連続の式、Navier-Stokes 方程式および物質

の拡散方程式であり,

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial U_j U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} + \Psi_{u_i} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial t} + \frac{\partial U_j \Gamma_i}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \Gamma_i}{\partial x_j \partial x_j} + \omega_i \quad (3)$$

となる。ここで、 U_i , Γ_i , P は流体の速度, 反応物質 i の濃度および圧力であり, 本文中の変数は, 計算領域の垂直方向長さ L^* , 上下層の流速差 ΔU^* , 流体の密度 ρ_f^* , 粘度 μ^* , 反応物質 A の初期濃度 C_{A0}^* で無次元化されている。化学反応には, 発熱反応では浮力による乱流変動がおこるため, ここでは粒子自身が反応生成物質量に及ぼす影響を検討するため, 簡単な二次の不可逆の等温反応 ($A+B \rightarrow P$) を想定する。なお, 粒子自身は化学反応に寄与しない。式(3)中に現れる化学反応項 ω_i は,

$$\omega_i = \begin{cases} -Da\Gamma_A\Gamma_B & (i = A, B \text{ in (3)}) \\ Da\Gamma_A\Gamma_B & (i = P \text{ in (3)}) \end{cases} \quad (4)$$

と表される。式(1)~(4)の中 Re , Sc , Da は, それぞれレイノルズ数, シュミット数およびダムケラ数である。式(2)中の Ψ_{u_i} は, 粒子と流体の相互干渉項で運動量の交換量を表す項であり, Particle-Source-In-Cell (PSI-Cell)法⁶⁾により,

$$\Psi_{u_i} = -\frac{1}{\delta_c} \sum_p^{n_c} m_p (F_D + F_L) \quad (5)$$

で表される。 F_D , F_L は粒子の運動方程式中の抗力項および揚力項である。また, δ_c は計算格子の体積, n_c は計算格子内に存在する粒子数および τ_p は粒子の緩和時間であり,

$$\tau_p = \frac{d_p^2 \rho_p Re}{18\mu} \quad (6)$$

と定義される。なお, d_p , ρ_p は, それぞれ粒子径および粒子密度である。

2.2 支配方程式(粒子運動)

粒子に関しては, ラグランジュ的に追跡する。粒子の密度は流体の密度よりかなり大きいので, 周囲流体から受ける力は, 抗力と揚力のみとし, 他の力(圧力勾配, 付加質量, バセット)を無視する。

無次元の粒子の方程式は,

$$\frac{dU_{p,i}}{dt} = F_D + F_L \quad (7)$$

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = U_{p,i} \quad (8)$$

である。なお, F_D および F_L はそれぞれ抗力項および揚力項である。抗力項 F_D は,

$$F_D = -\frac{1}{\tau_p} (U_{p,i} - U_i) \Phi \quad (9)$$

と与える。ここで, Φ は

$$\Phi = \begin{cases} 1 + \frac{3}{16} Re_p & (Re_p \leq 0.01) \\ 1 + 0.1315 Re_p^{(0.82-0.05w)} & (0.01 \leq Re_p \leq 20) \end{cases} \quad (10)$$

$$w = \log_{10} Re_p$$

と表される⁷⁾. 粒子径 d_p および相対速度基準の粒子レイノルズ数 Re_p は

$$Re_p = \frac{d_p |U_{p,i} - U_i| \rho_f}{\mu} Re \quad (11)$$

と定義できる. 揚力項 F_L に関しては, Mei の式⁸⁾

$$F_L = 0.443 J(\varepsilon) F_L^S \quad (12)$$

を用いる. 上付き S は, Saffman の式⁹⁾ により与えられる値であり,

$$F_L^S = -6.168 \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{1}{d_p^2} (U_p - U_f) \sqrt{\frac{1}{Re} \frac{dU}{dy}} \quad (13)$$

から得られる. また, 式(12)中の $J(\varepsilon)$ は,

$$J(\varepsilon) = 0.6765 \{1 + \tanh[2.5 \log_{10}(\varepsilon + 0.191)]\} \cdot \{0.667 + \tanh[6(\varepsilon - 0.32)]\} \quad (14)$$

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{Re_a}}{Re_p} = \frac{1}{Re_p} \sqrt{Re \frac{\rho_f d_p^2}{\nu} \frac{dU}{dy}} \quad (15)$$

で与えられる. 上記揚力式の妥当性は, Kurose ら¹⁰⁾ により確認されている.

3 計算領域および計算手法

計算領域の概略図を図1に示す. 計算領域は無次元で $6 \times 1 \times 1$ の直方体である(代表長さ 0.05m). 座標系を主流方向に x , 垂直方向に y およびスパン方向に z とし, 原点 ($x=y=z=0$) を計算領域の流入面の中心とした. すなわち, 無次元の計算領域が $0.0 \leq x \leq 6.0$, $-0.5 \leq y \leq 0.5$, $-0.5 \leq z \leq 0.5$ となるように座標系を設定した. 計算格子を $y=0$ 近傍で密とする不等間隔のスタッガード格子を用い, 計算格子数を x 方向に 300, y 方向に 100, z 方向に 100 とした. 固体粒子は混合層の上層側から均一に投入するものとし, 反応物質 A および B はそれぞれ上層, 下層に完全分離の状態で供給するものとする. 計算領域の流入面である $x=0$ での上層側 ($y \geq 0$) および下層側 ($y \leq 0$) の主流方向速度をそれぞれ $\overline{U}_1 = 2.0$, $\overline{U}_2 = 1.0$ ($\Delta U^* = 2.5$ m/s) とし, 時間平均流速には Spalart が行った乱流境界層に対する DNS¹¹⁾ から得られた分布を与えた. レイノルズ数 Re を 8333, シュミット数 Sc を 1.0, ダムケラ数 Da を 1.0 に設定した.

支配方程式(式(1)~(3))を有限体積法に基づき離散化し, Fractional Step 法により解を求めた. 離散化については, 対流項および粘性項ともに互換性および保存性のある二次精度の中心差分法を, 時間積分には陽解法である二次精度の Runge-Kutta 法を用いた. ただし, 物質の拡散方程式の対流項に対して FCT(Flux-Corrected Transport) スキームを適用した. 速度の境界条件には y 方向に slip 条件を, z 方向に周期境界条件を, 流出境界条件に対流型の境界条件を用いた. また, スカラの境界条件には, y 方向および出口境界条件にノイマン条件を, z 方向に周期境界条件を用いた.

固体粒子としては, 密度が 1200 kg/m^3 の球状の微粉炭を仮定した. 詳細な粒子条件を表1に示す. RUN I は, 流れ場に粒子が存在しない場合の計算である. RUN II~IV では計算領域入口での粒子の体積分率 $\phi_0 = 2.62 \times 10^{-4}$ を一定とし, 粒子の緩和時間とコルモゴルフの時間スケールとの比 τ_p / τ_k を 0.12 から 0.50 に変化させた. なお, ϕ_0 は粒子の体積分率であり, 計算領域入口上層部での値を示す. また, コルモゴルフの時間スケール $\tau_k (= 0.985)$ は, $x=3.0$ の値を用いた.

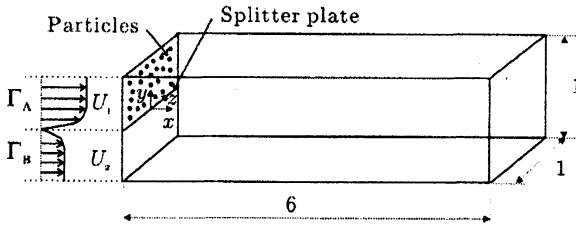


Fig. 1 Schematic of computational domain

Table 1 Particle proprieties

	d_p	τ_p/τ_k	$\phi_{0.0}$
RUN I	—	—	0.0
RUN II	5.0×10^{-4}	0.12	2.62×10^{-4}
RUN III	8.0×10^{-4}	0.30	2.62×10^{-4}
RUN IV	1.25×10^{-3}	0.50	2.62×10^{-4}

4 結果および考察

投入された粒子の条件は表 1 に示すように RUN II-IV であり、混合層の入口上層の粒子体積分率を $\Phi_{0.0} = 2.62 \times 10^{-4}$ の一定とし、粒子の緩和時間とコルモゴルフの時間スケールとの比 τ_p/τ_k を 0.12 ~ 0.50 と変化させた。

図 2 に RUN I から RUN IV の x - y 断面の瞬間粒子分布およびスパン方向渦度の可視化の図を示す。図中の黒プロットは粒子を、等高線は渦度の大きさを表す。図より τ_p/τ_k が小さくなるにつれて、粒子は組織的な渦内に巻き込まれず、渦の周辺に蓄積する傾向がある。これは、 τ_p/τ_k が小さな粒子ほど、粒子は流れ場の乱流運動に追従しやすく、さらに組織的な渦の遠心力の影響を受けやすいためである。また、図より τ_p/τ_k が小さい粒子が存在する流れ場ほど、組織的な渦の発達が下流に遅れ、下流域では、組織的な渦が大きくなる。

図 3 に上流位置 ($x=0.6$) および下流位置 ($x=5.0$) での粒子の体積分率 ϕ_y の鉛直方向分布を示す。 ϕ_y は、流入位置での粒子の体積分率 $\phi_{0.0}$ で無次元化されており、鉛直方向距離 y は運動量厚さ θ と $(\bar{U} - U_i)/\Delta U = 0.5$ となる鉛直方向位置 $y_{0.5}$ で正規化されている。すべてのケースにおいて、 $\phi_y/\phi_{0.0}$ は上層側 ($y>0$) で最大値をもち、下層側 ($y<0$) に行くに従ってゼロに近づく。しかしながら、上流位置では、 τ_p/τ_k が小さいほど $\phi_y/\phi_{0.0}$ の最大値およびその下層側への減少率は大きくなるが、下流側では、全く逆の傾向が見られる。この原因は次のように考えられる。大きな粒子 (τ_p/τ_k : 大) は流れ場の乱流運動に比較的追従しにくいいため、組織的な渦の影響をあまり受けずに、下層側に拡散していく。それに対して、小さな粒子 (τ_p/τ_k : 小) は上流位置での上下層界面で生成される初期の比較的小さな渦の影響を受け、下層側に拡散するのを阻害され上層側に押し返される。しかしながら、下流に行くに従い、小さな粒子は発達した大きな組織的な渦により下層まで運ばれるようになる。つまり、 τ_p/τ_k が小さくなるほど、上流域では粒子は上層側に蓄積しやすく、次第に組織的な渦の発達することにより、逆に粒子は下層に運ばれやすくなる。

粒子による乱れの変化を検討するために、図 4 に $y=y_{0.5}$ における主流、鉛直およびスパン方向の速度変動強度の主流方向分布を示す。混合層上流域において、粒子はすべての条件下で乱れを抑制するが、下流域における乱れの増減は τ_p/τ_k に強く依存している。つまり、下流域において、 τ_p/τ_k が小さくなるにつれて、 $\overline{u^2}$ および $\overline{v^2}$ は単相の混合層 (RUN I) に比べ大きくなることから、粒子は $\overline{u^2}$ および $\overline{v^2}$ を促進するように働く。この現象は、図 2 で示した組織的な渦の挙動に一致している。一方、 $\overline{w^2}$ は下流域でも依然抑制されたままである。図を省略するが、これは流れ場中の粒子が混合層でよく見られる縦渦を抑制するためである。また、 $\tau_p/\tau_k > 1$ の関係にある粒子に関しては詳細な説明を省略するが、 $\tau_p/\tau_k = 1.85$ の値をもった粒子に対して同じような条件下で DNS を行ったところ、このよう領域にある粒子は常に乱れを抑制するように働いた。既往研究^{1),2)}では、 $\tau_p < \tau_k$ の関係にある微小粒子は乱れを常に促進させたが、今回の混合層ではそのような粒子でも乱れを促進または抑制させる 2 つの領域がある興味深い結果を得た。

どのスケールの渦が粒子により促進されたのかを検査するために、図5に $\bar{x}=5.0$, $y=y_{0.5}$ における主流、鉛直およびスパン方向の速度変動のパワースペクトルを示す。 $\overline{u^2}$ および $\overline{v^2}$ のパワースペクトルは、 τ_p/τ_k が小さくなるほど低周波数側において増加し、高周波数側において減少する傾向が見られる。このことから、粒子は大きな乱流運動を増加させ、小さな変動成分を抑制することがわかる。よって、下流域での $\overline{u^2}$ および $\overline{v^2}$ の増加は、組織的な渦に対応する大スケール渦によって支配されている。

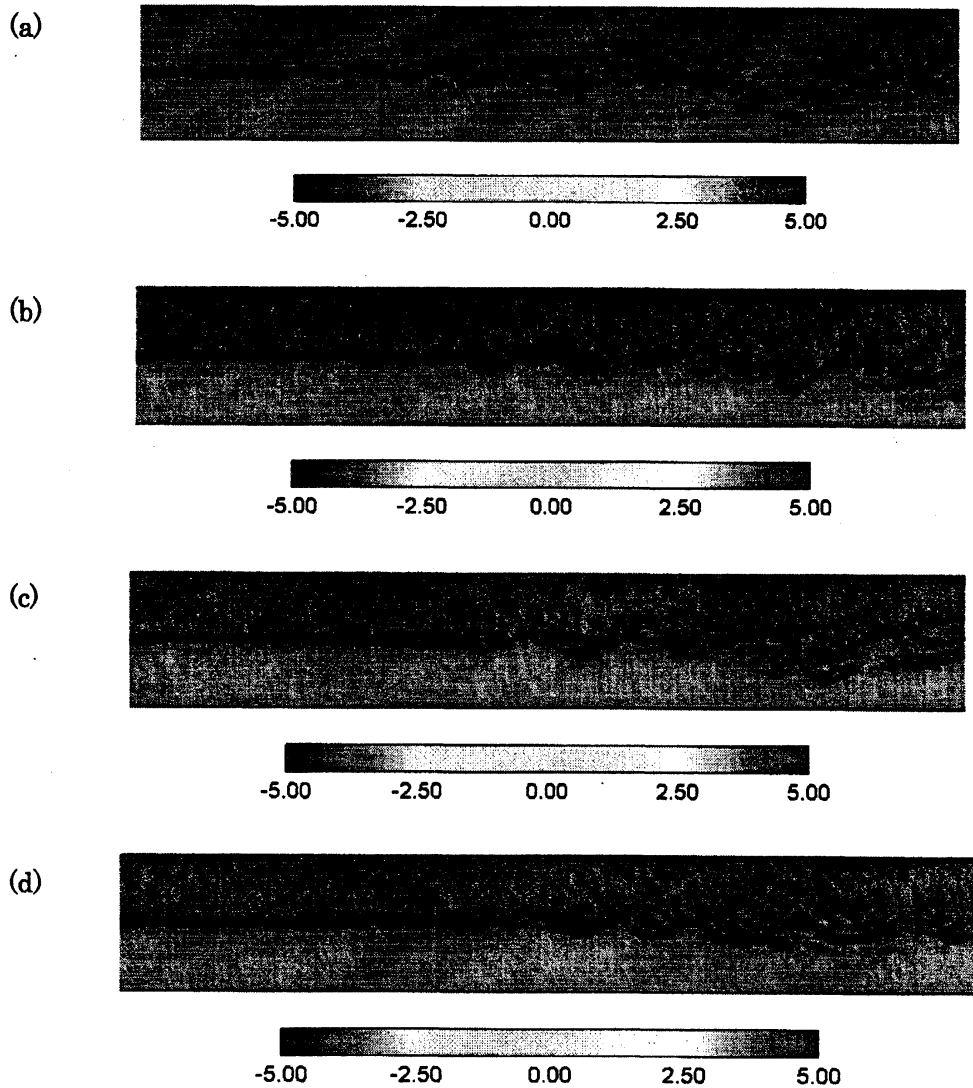


Fig.2 Instantaneous particle distributions superimposed on spanwise vorticity in (x,y)-plan for (a) RUN I; (b)RUN II; (c) RUN III and (d) RUN IV

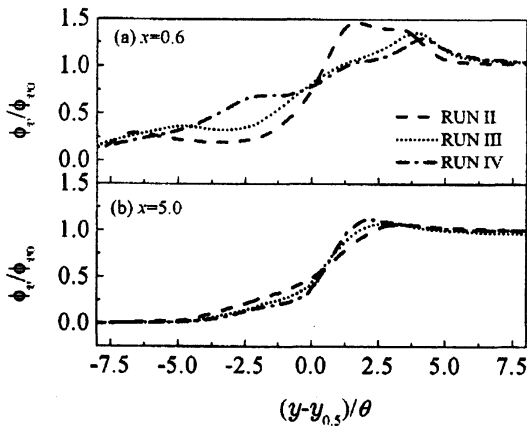


Fig. 3 Vertical distributions of time-averaged vertical and particle volume fraction. (a) $x=0.6$, (b) $x=5.0$

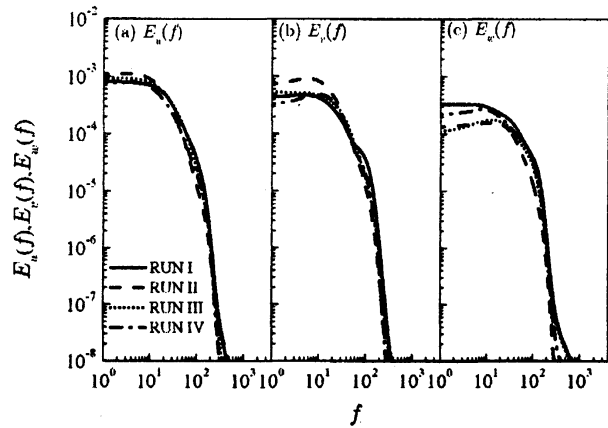


Fig. 5 Power spectra of streamwise, vertical and spanwise velocity fluctuations at $x = 5.0$

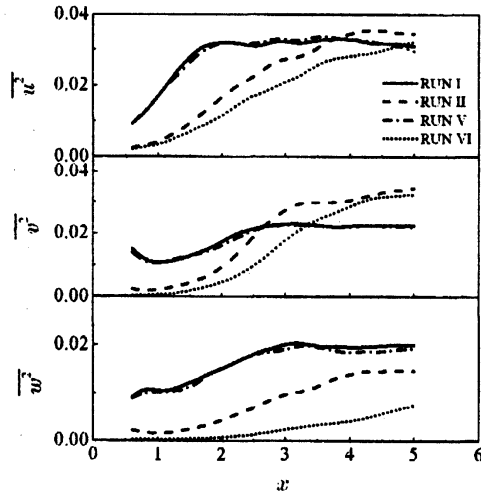


Fig. 4 Streamwise distributions of turbulent intensities for streamwise, vertical and spanwise velocity fluctuations at $y=y_{0.5}$

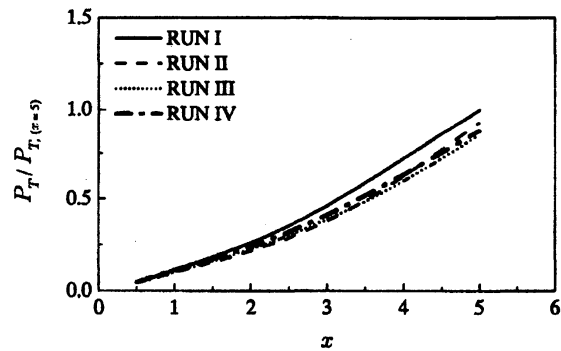


Fig. 6 Streamwise distributions of amount of chemical product P, P_T , at $y=y_{0.5}$

次に、粒子の緩和時間が反応生成物質量に及ぼす影響を検討するために、図 6 に反応生成物質量の主流方向分布を示す。反応生成物質量 P_T は、

$$P_T = \int_{-0.5}^{0.5} \overline{\Gamma_P(y)} dy \tag{16}$$

と定義し、粒子を伴わない場合 (RUN I) の $x=5.0$ の反応生成物質量 $P_{T, (x=5)}$ で正規化されている。粒子を伴う場合の反応生成物質量は粒子を伴わない場合より小さくなるのがわかる。しかしながら、図 4 で示したように、下流域で RUN II や RUN III などにおいて、速度変動強度は増加するにもかかわらず、反応生成量は粒子を伴わない場合に比べ減少する結果となった。この原因は、速度変動のパワースペクトルからわかるように、粒子は大規模運動を促進することにより速度変動強度を増大させたものの、化学反応を促進する小規模渦は抑制されるためである¹²⁾。

5. 結論

空間発展型混合層に対して粒子流体相互干渉を考慮した DNS を実行し、粒子が流れ場および反応生成物質に及ぼす影響を検討した。一様乱流場に対しては、粒子の緩和時間とコルモゴロフの時間スケールとの大小関係により、粒子が流れ場の乱れを促進するか、もしくは抑制するかを判断できると考えられている。しかしながら、非一様な乱流場である乱流混合層では、粒子が乱れを抑制する領域と促進する領域の 2 つの領域が混在することが明らかになった。また、化学反応は普通小スケール渦によって促進されるので、粒子が乱れを促進する場合でもそれが組織渦のような大スケール渦のみであれば、反応生成物質の生成は抑制される場合があることも明らかになった。

参考文献

- 1) O. A. Druzhinin, "The influence of particle inertia on the two-way coupling and modification of isotropic turbulence by microparticles," *Phys. Fluids* **13**, 3738 (2001).
- 2) A. M. Ahmed and S. Elghobashi, "On the mechanisms of modifying the structure of turbulent homogeneous shear flows by dispersed particles," *Phys. Fluids* **12**, 2906 (2000).
- 3) Y. Yamamoto, M. Potthoff, T. Tanaka, T. Kajishima and Y. Tsuji, "Large-eddy simulation of turbulent gas-particle flow in a vertical channel: effect of considering inter-particle collisions," *J. Fluid Mech.* **442**, 303 (2001).
- 4) S. Yuu, T. Umekage and M. Tabuchi, "Direct numerical simulation for three-dimensional gas-solid two-phase jet using two-way method and experimental verification," *JSME Int. J. Series B: Fluids Ther. Eng.* **39**, 230 (1996).
- 5) R. Kurose and H. Makino, "Large Eddy Simulation of a Solid-fuel Jet Flame," *Combust. Flame* **135**, 1 (2003).
- 6) C. T. Crowe, M. P. Sharma and D. E. Stock, "The Particle-Source-in Cell (PSI-Cell) method for Gas-Droplet flows," *Trans. ASME I: J. Fluids Engng* **6**, 325 (1977).
- 7) D. J. Glaze and S. H. Frankel, "Effect of dispersion characteristics on particle temperature in an idealized nonpremixed reacting jet," *Int. J. Multiphase Flow* **26**, 609 (2000).
- 8) R. Mei, "An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite Reynolds number," *Int. J. Multiphase Flow* **18**, 145 (1992).
- 9) P. G. Saffman, "The lift on a small sphere in a slow shear flow," *J. Fluid Mech.* **22**, 385 (1965).
- 10) R. Kurose and S. Komori, "Drag and lift forces on a rotating sphere in a linear shear flow," *J. Fluid Mech.* **384**, 183 (1999).
- 11) P. R. Spalart, "Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $Re_\theta = 1410$," *J. Fluid Mech.* **187**, 61 (1988).
- 12) T. Michioka, R. Kurose, K. Sada and H. Makino, "Direct numerical simulation of a particle-laden mixing layer with a chemical reaction," *Int. J. Multiphase Flow* **31**, 843 (2005).