気液界面における物質輸送に与えるシュミット数の影響

Schmidt Number Effect on the Mass Transfer Across an Air-Water Interface

長谷川 洋介, 東大院,文京区本郷 7-3-1, E-mail:hasegawa@thtlab.t.u-tokyo.ac.jp 笠木 伸英, 東大工,文京区本郷 7-3-1, E-mail:kasagi@thtlab.t.u-tokyo.ac.jp 花崎 秀史, 東北大流体研,仙台市青葉区片平 2-1-1, E-mail:hanazaki@ifs.tohoku.ac.jp

Yosuke Hasegawa¹, Nobuhide Kasagi¹, Hideshi Hanazaki²

¹Dept.of Mechanical Eng., The University of Tokyo, Hongo 7-3-1, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan ²Institute of Fluid Science, Tohoku Univ, Katahira 2-1-1, Aoba-ku, Sendai, Miyagi 980-8577, Japan

The mass transfer across the air-water interface, specifically, the CO₂ exchange between the atmosphere and the sea surface, was investigated by direct numerical simulation (DNS). As the Schmidt number of CO₂ in the seawater is known to be very high (~1000), we have employed a Lagrangian approach, which has been successfully applied to the passive scalar transfer in DNS of turbulent channel flow. The result obtained by this Lagrangian method shows good agreement with Eulerian DNS data for moderate Schmidt numbers (S c=1) and also with experimental data for high Schmidt numbers (100,500,1000). Although a solid wall eddy diffusivity is decreased as increasing the Schmidt number, it does not largely depend on the Schmidt number at the free-slip interface. This suggests that the analogy of scalar transfer for different Schmidt numbers is satisfied at free-slip interface.

1. 序論

近年、人類の産業活動によって多くの地球温暖化物質が排出 されそれに伴う地球規模の温暖化が大きな問題となっている。 産業革命以降、人類によって排出されてきた地球温暖化物質と しては、二酸化炭素、メタン、フロンなどが挙げられるが、今 後の数百年のスパンで気候変動を考慮した場合、その定量的な 評価が困難である水蒸気とオゾンを除くと二酸化炭素による温 暖化の効果は全物質の半分以上を占めると考えられている。ま た、発展途上国によるエネルギー需要とそれに伴う化石燃料の 消費増大を考慮すると、今後は地球規模での省エネにより二酸 化炭素の排出量を削減していくと共に、二酸化炭素の大気中濃 度とそれに伴う気候変動の予測を行うことが重要である。人類 によって排出された二酸化炭素は主に海洋と生物圏によって吸 収されると考えられているが、その見積もりには多くの誤差 (ミッシングシンク)が含まれている。特に、海洋におけるガ ス吸収の問題に関しては未解決な問題が多く、一方現在ではガ ス吸収の予測において主に経験的に得られた関係式が用いられ ている。今後更なる予測精度の向上を考えるとその物理的な物 質輸送のメカニズムを考慮したガス吸収モデルを構築すること が重要となる。

従来、気液界面における物質輸送に関する研究として多くの 実験が行われ、界面近傍における縦渦構造が物質輸送に大きく 寄与することが明らかになり、surface renewal modelなどの界面 での物質輸送モデルが提案された(1)(2)。さらに、近年ではコン ピュータの発達に伴い直接数値シミュレーション(DNS)が盛ん に行われるようになり、気液界面における縦渦構造に関してよ り詳細な知見が得られるようになってきた。界面でfree-slip条 件を課し液側のみを解く open-channel での DNS⁽¹¹⁾ では、下壁付 近において生成された縦渦構造が界面まで上昇しスカラー輸送 を促進する様子が再現された。しかし、実際の海洋 - 大気間に おいて海洋の内部から浮上した縦渦構造が界面でのスカラー輸 送に影響を与えるとは考えにくく、むしろ界面近傍におけるせ ん断により発生する縦渦構造や気体、液体の相互作用を考慮す ることが重要であると考えられる。さらに、気体側、液体側の 相互作用を考慮した気液2相流のDNS⁽⁴⁾も近年行われるように なり、界面近傍から発生した縦渦構造が流体内部に輸送される ことや、界面近傍におけるストリーク構造など自由界面の流れ とは異なる事が明らかになってきている。



Fig. 1 Computational domain and coordinate system

実際の海洋において二酸化炭素のシュミット数は非常に高く (Sc~600)、現在のコンピュータの性能を考慮するとスカラー 場のDNSを行うことは困難である。そのため現在まで行われた 多くの気液界面の DNS では液側のシュミット数を現実のもの と比較するとかなり小さな値 (Sc~1) として計算を行ってい る。近年、高シュミット数における物質輸送をDNSを用いて計 算する手法としてラグランジュ法が提案され、Papavassiiouら によりチャネル乱流に適用された(6-8)。そこでは,過去の実験結 果や、低いシュミット数におけるオイラー法による計算結果な どと十分な一致が示されている。また、シュミット数の増加に 伴い,運動量輸送とスカラー輸送の相似性が崩れ,従来の古典 的なモデルが成立しないことが明らかになっているの。一方、 気液界面での高シュミット数における物質輸送に関して McCready ら⁽¹²⁾は界面近傍における濃度場を線形近似した式を 用いて、固体壁とは異なり気液界面では速度場とスカラー場の 相関がシュミット数に大きく影響を受けないことを示した。

本研究では、ラグランジュ法を用いて高シュミット数での気 液界面における平均濃度分布、ガス交換係数を求めると共に, 壁における高シュミット数での物質輸送との比較を行う。

2. 計算手法

Fig. 1 に計算領域と座標系を示す。計算領域は、気体側、液体側共に界面垂直方向を δ として流れ方向に2.5 $\pi\delta$ 、スパン方向に $\pi\delta$ とした。これは、粘性長さでは流れ方向、界面垂直方向、スパン方向、それぞれ1178,150,471に相当する。気体、液体のレイノルズ数を共に $\text{Re}_{\tau G}=\text{Re}_{\tau L}=150$ とした。境界条件としては気液上下面ではfree-slipとし、界面では気側には速度の連続条件を,液側には,流れ方向,スパン方向に関してせん断応力の連続条件を課し、両相を交互に解くことにより時間発展を行った⁽⁴⁾。過去の実験⁽³⁾及び,シミュレーション結果⁽⁵⁾を元に,今

回の計算条件である低レイノルズ数流れ(Re_c=150)においては, 界面変形は十分小さく,その流れ場に与える影響は無視できる ものとして、界面での界面垂直方向速度成分を0とした。また、 流れ方向、スパン方向に関しては周期境界条件を適用し、圧力 勾配一定の条件下で計算を行った。スカラー場に関しては、オ イラー法では気体側、液側共にSc_G=Sc_L=1.0の条件で計算を行 い、境界条件は気体、液体共に上下面(free-slip)でスカラー濃度 一定とし,気液界面で気側でスカラー濃度が連続、液側でスカ ラー束が連続とした。

気液両相での速度場の方程式は非圧縮性Navier-Stokes方程式 と連続の式で、濃度場の支配方程式も含めて以下のように書け る。

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re_\tau} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j}$$
$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$
$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = \frac{1}{Re_\tau \cdot Sc} \frac{\partial^2 C}{\partial x_j \partial x_j}$$

ここで、 $(x_{\mu}x_{2}x_{3})$ は(x,y,z)を表す。全ての変数は各相の深さ δ 、 界面における摩擦速度 u_{t} によって無次元化されている。Cは濃 度を表し、上下面(free-slip)の濃度差で規格化されている。今回 の計算においては、気体側の上面の濃度が高い(C=1)とした。ま た気体と液体の密度比は $\rho_{L}/\rho_{G} = (29)^{2} = 841$ としたが、これは 320Kにおける空気と水の物性値に対応する。空間離散化には 擬スペクトル法を用い、流れ方向、スパン方向に関してはフー リエ級数展開を、界面垂直方向にはチェビシェフ関数展開を用 いた。各相について、流れ方向、界面垂直方向、スパン方向、 それぞれ64,48,64のモード数を設け、時間離散化は対流項にア ダムス・バッシュフォース法を、拡散項にクランク・ニコルソ ン法を用いた。

Fig.2に気側、液側共にSc=1.0とした場合のオイラー法を用 いて得られた平均濃度分布を示す。ただし,y方向を界面垂直 方向にとり液側の下面(free-slip)をy=-1.0,液側の下面(free-slip) を y=-1.0 とした。スカラー濃度は,上下面の濃度差によって正 規化した。気側と液側のシュミット数が同じであるにも関わら ず、平均スカラー濃度の変化はほぼ液体側で起こり気体に対し て液体側の相対的な抵抗が大きいことが分かる。そのため、実 際の海洋でのシュミット数を考慮するとさらに液側の抵抗が大 きくなると考えられる。次に、先ほどのケースをCase1とし、同 じ条件において界面のスカラー濃度を一定に保って液側のみを 解いた場合をCase2として,液側における濃度場の統計量の比 較を行った。Fig.3に平均濃度分布、Fig.4に乱流物質流束を示 す。ただし、液側の気液界面を y⁺=0 として液側下面 (free-slip) をy+=150とする。グラフより今回の条件において、界面での濃 度変動は濃度場に大きな影響を与えないことが分かる。これ は、気体側に対して液側の抵抗が非常に大きいために液側から 見ると界面の条件がほぼ等スカラー濃度条件になっているため と考えられる(13)。

Fig.5に各種統計量の界面近傍の漸近挙動の比較を示す。およ そ界面近傍y⁺<1.0において濃度変動の統計量にcase1とcase2の 界面での境界条件の違いが現れるが、レイノルズ輸送の値には



Fig. 3 Profile of average concentration (case 1 and case 2)



Fig. 4 Profile of Reynolds transport (case 1 and case 2)



大きな違いが現れない。この領域はFig.3より拡散底層内の領 域であるため平均濃度度分布に大きな影響を与えないと考えら れる。実際の海洋中での二酸化炭素のシュミット数(Sc ~ 600) では,後に示す計算結果からも分かるように,y⁺<0.5の領域が 拡散底層の中であり分子拡散が支配的であると考えられる。今 回のSc=1.0の場合においては、境界条件の影響は大きく現れな かったが,高シュミット数においては、界面近傍の変動が平均 濃度分布,ガス交換係数に影響を与えると考えられる。しかし、 シュミット数が高くなるにしたがって統計量の分布は界面に 寄っていくと考えられ、そのため今回の高シュミット数におけ るラグランジュ法の計算においては、計算の単純化のため界面 で等スカラー濃度条件を課し液側のみを解いた。また、この場 合でも界面で等スカラー濃度条件を課すことで,壁で等スカ ラー濃度条件を課した,壁乱流における高シュミット数での計 算と比較を行う事が可能となる。

3. ラグランジュ法

ラグランジュ法⁽⁶⁾は、近年 Hanratty らによって壁乱流の高 シュミット数における物質輸送に適用され(7.8)、他の計算や実験 と良い一致を示すことが示されている。高シュミット数におい ては、濃度乱れの最小スケールがSc-1/2に比例するために、通常 のオイラー法で濃度場を解くためには多くのグリッドが必要と なる。オイラー法により高シュミット数での計算を行う手法と しては、平均濃度の変化が大きい界面近傍のみ細かくグリッド を切り、一方バルク中央部では平均濃度勾配が非常に小さく濃 度乱れの生成がないものとして等スカラー濃度条件として扱う 手法が考えられる。しかし、ガス交換係数(k,*=k,/u,)とシュミッ ト数 (Sc) で定義される境膜厚さ Z(Z+=(Sc•k,)-1)を濃度境界層 の厚さのスケールとして取った場合でも,古典的な理論による とガス交換係数はSc^{-1/2}に比例するため境膜厚さはSc^{-1/2}に比例 する。そのため界面垂直方向に関してはグリッド数が変化しな いが、流れ方向、スパン方向に関しては濃度スケールの減少分 だけ細かく計算格子を用いる必要が出てくる。

ー方、ラグランジュ法とはオイラー法とは異なりスカラー濃度を多数の粒子(マーカー粒子)の確率密度で代表させ、平均 濃度分布を求める手法である。各々の粒子を流体に追従させる と共に、各ステップ毎にシュミット数に応じた分散値を持った ガウシアン分布に従い、ランダムウォークを課す。ただし,ス カラーはパッシブなものとして扱う。その際、ガウシアン分布 の分散値σはタイムステップ幅ΔT、シュミット数Scを用いて 以下の様に表される。



すでにラグランジュ法が適用されているチャネル乱流を例に 下壁面と上壁面にそれぞれ等スカラー濃度条件を与えた場合を 考える。ただし,スカラーはパッシブスカラーとして扱う。ま た、x,y,zをそれぞれ流れ方向、壁面垂直方向、スパン方向にと リ,チャネル中央をy=0としてチャネル半幅をHとする。粒子 の初期条件として、下壁面全体に渡り多数の粒子を均等に配置 し、時刻t=0において壁面から粒子の放出を行う。壁面ではnoslip条件のため粒子はランダムウォークによって拡散底層を通 過し、その後乱流によって流体内部へ輸送される。各時間ス テップ毎に、マーカー粒子の放出点(t=0での位置)に対する相 対位置を計算することで、下壁面のある位置 (x,,-H, z) から放 出された粒子が時刻t=Tの時に場所(x, y, z)に到達する確率密度 関数 P(x-x₀, y, z-z₀: T) を求めることができる。ここで、流れ場 はx方向に関して一様かつ定常であるとする。この確率密度関 数を時間と壁面全域に渡って積分することにより下壁面から物 質流速がある場合のスカラー濃度分布を知る事ができる。

$$p^{*}(y) = \int_{t_{o}} \int_{z_{o}} \int_{x_{o}} p(x - x_{0}, y, z - z_{0}; t) dx dz dt$$



Fig. 6 Profile of average concentration at low Schmidt number



Fig. 7 Profile of average concentration at high Schmidt number

上壁面からの吸収の影響は、チャネルの上下壁の対称性により,下壁面から得られた確率密度分布をy=0に対して対称に折り返すことで得られる。

 $\overline{T}(y) = p^*(y) - p^*(-y)$

4. チャネル乱流における計算結果

次に、チャネル乱流におけるラグランジュ法を適用した場合 の計算結果を示す。計算条件はRe_=u_\delta/v=150とし、計算領域 はチャネル半幅δとして、流れ方向に5πδとしスパン方向に 2.5πδとした。空間離散化は擬スペクトル法を用い、x方向、y 方向、z方向それぞれ128 x 64 x 128の波数を設けた。Fig. 6 に、 オイラー法との比較を行うためSc=0.1,0.71 それぞれのケース においてラグランジュ法とオイラー法を用いた時の平均濃度分 布を示す。低いScにおける平均濃度分布の一致が確認できる。 次に、Fig. 7 に Sc=100, 500, 1000 におけるラグランジュ法によ る平均濃度分布を示す。これよりどの場合でも y⁺<1.0 の領域 は拡散底層に含まれており、平均濃度変化は主にy*<10 で起き ている。特に高シュミット数では平均濃度の変化が壁面ごく近 傍のみにおいて起きるため、壁面近傍の漸近挙動を調べること が有効だと考えられる。速度場に関して壁面でno-slip条件と連 続の式を用い、またスカラー場に関しては壁面でスカラー濃度 一定の条件を用い,壁面において流れ場、スカラー場をテイ ラー展開すると以下のように書き表される。

$$\begin{split} u(x, y, z, t) &= \alpha_1(x, z, t) \cdot y + \alpha_2(x, z, t) \cdot y^2 + \alpha_3(x, z, t) \cdot y^3 \cdots \\ v(x, y, z, t) &= \beta_2(x, z, t) \cdot y^2 + \beta_3(x, z, t) \cdot y^3 \cdots \\ w(x, y, z, t) &= \gamma_1(x, z, t) \cdot y + \gamma_2(x, z, t) \cdot y^2 + \gamma_3(x, z, t) \cdot y^3 \cdots \\ c(x, y, z, t) &= c_1(x, z, t) \cdot y + c_3(x, z, t) \cdot y^3 \cdots \\ \overline{u'v'} &= \overline{\alpha_1 \beta_2} \cdot y^3 + (\overline{\alpha_1 \beta_3 + \alpha_2 \beta_2}) \cdot y^4 \cdots \\ \overline{c'v'} &= \overline{c_1 \beta_2} \cdot y^3 + \overline{c_1 \beta_3} \cdot y^4 \cdots \end{split}$$
 (wall unit)

先ほども述べたように高シュミット数では濃度境界層は壁面 近傍に限られるため,最小次数の項のみを考えると,渦粘性係 数と渦拡散係数に関して以下の式が得られる。

$$Ev^{+} = \overline{\alpha_{1}\beta_{2}} \cdot y^{3}$$
$$Ec^{+} = \frac{\overline{c_{1}\beta_{2}}}{Sc} \cdot y^{3}$$

ここで,従来の古典的な理論では運動量輸送とスカラー輸送の 相似性を仮定する。つまり壁面近傍では渦粘性係数と渦拡散係 数を等しいと見なし,高シュミット数においては渦拡散係数は y⁺³に比例しその係数はシュミット数に依存しないとする。する と,この渦拡散係数を用いて平均濃度場の式を書き直すと以下 のような式が得られる。

$$1 = -(\frac{1}{Sc} + Ec^{+})\frac{d\overline{C}}{dy} = -(\frac{1}{Sc} + Ay^{+3})\frac{d\overline{C}}{dy}$$
$$A = \frac{\overline{c_{1}\beta_{2}}}{Sc} = const$$

この式を解く事により,ガス交換係数はSc²³に比例することが 導かれる。一般には,渦拡散係数の漸近挙動がSc^mに比例する 場合,ガス交換係数はSc^(1-1/m)に比例する。そのため気液界面の 場合においては後に示すように渦拡散係数が界面近傍でに比例 するため,同様な議論によって古典的な理論によるとガス交換 係数はSc¹²に比例することになる。

次にこの領域おいて実際に渦拡散係数を求め,その漸近挙動 に関してFig. 8に示す。Fig. 8よりSc=1.0では、渦拡散係数(Ec+) と渦粘性係数(Ev+)の漸近挙動は一致している。これは境界条 件として壁で等濃度条件を課した場合、壁面近傍において境界 条件を含めて速度場の支配方程式とスカラー場の支配方程式が 同型となるためである。一方、Sc=10までに関してはすでに Papavassiliou⁽⁷⁾, Naら⁽⁸⁾によってオイラー法による計算結果が得 られており、Sc=5,10においてそれぞれy+~0でEc+/y+3=6.98x10-4,5.03x104に漸近することが分かっている。今回、ラグランジュ 法により得られたデータによるとSc=100,500,1000の場合に関 してもy*>1の領域において壁面に向かうにつれEc*/y*3の値が減 少している事が分かる。これより壁面近傍の領域 (y+<1) では、 ラグランジュ法によって正確な値を得ることが困難であった。 しかし、すでに Na らによって示されたように、高シュミット 数における物質輸送に関して従来仮定されていた運動量輸送と 物質輸送との相似性を仮定した物質輸送モデルは二つの点で誤 リであることが言える⁽⁹⁾。一つは、渦拡散係数 Ec⁺/y⁺³の漸近挙 動はシュミット数の影響を受け、高シュミット数では運動量と 物質輸送に相似性が成立しない。また、シュミット数が高くな るにつれEc+/y+3=constとなる領域は壁面近傍に近づき拡散底層 の中に入ってしまう。Fig.7によるとSc=100,500,1000におい てy⁺<1の領域は拡散底層の中であり、むしろ1<y⁺<10の領域に おける乱流拡散が平均濃度分布を決める上で重要である。しか し、この領域では Fig. 8 から明らかなように渦拡散係数 Ec+ は y⁺³に比例しない。これらの結果から、高シュミット数での壁乱 流では古典的な理論で用いられている運動量輸送とスカラー輸 送に相似性が成立せず、ガス交換係数はSc⁻²³に比例しないと考 えられる。Fig.9にシュミット数の変化に対するガス交換係数 の変化を示す。特に高シュミット数においてガス交換係数は シュミット数のおよそ-0.7乗に比例し、Papavassiliou⁽⁷⁾, Naら⁽⁸⁾ によるラグランジュ法による結果である-0.704乗と同様の結果 となった。



Fig. 8 Limiting behavior of eddy viscosity and eddy diffusivities at different Schmidt number



5. 気液界面でのラグランジュ法による計算結果

先に述べたように、高シュミット数では気側に比べて液側の 抵抗が相対的に大きくなるため界面でのスカラー濃度を一定と して液側のみを解いた。またこのような条件を課すことで固体 壁近傍における物質輸送と気液界面での物質輸送を比較する事 を目的とする。計算条件としてはラグランジュ法を用いて Sc=100,500,1000のケースに関して計算を行った。Fig. 10に平均 濃度分布を示す。ただし、界面の位置を y⁺=0 とし、液側の下面 (free-slip)を y⁺=150 とした。チャネルにおける高シュミット数 の計算と同様に気液界面ごく近傍(主に y+<1.0 の領域)におい て平均濃度が変化しており、さらに近傍のy+<0.1の領域に関し ては拡散底層の中に入っている事が分かる。壁乱流に比べ気液 界面での濃度境界層の厚さは同程度のシュミット数に対して粘 性長さで一桁小さい値となっている。これは過去の実験結果に 見られるように、このレンジの高シュミット数において気液界 面のガス交換係数がチャネルのそれと比べて一桁程度大きい事 を反映していると考えられる。先程と同様に気液界面近傍の速 度場と濃度場に関して界面においてテイラー展開を行うと以下 の様になる。

 $u(x, y, z, t) = \alpha_0(x, z, t) + \alpha_1(x, z, t) \cdot y + \alpha_2(x, z, t) \cdot y^2 + \cdots$ $v(x, y, z, t) = \beta_1(x, z, t) \cdot y^1 + \beta_2(x, z, t) \cdot y^2 \cdots$ $w(x, y, z, t) = \gamma_0(x, z, t) + \gamma_1(x, z, t) \cdot y + \gamma_2(x, z, t) \cdot y^2 + \cdots$ $c(x, y, z, t) = c_1(x, z, t) \cdot y + c_2(x, z, t) \cdot y^2 \cdots$ $\overline{u'v'} = \overline{\alpha_0\beta_1} \cdot y^1 + (\overline{\alpha_0\beta_2 + \alpha_1\beta_1}) \cdot y^2 \cdots$ $\overline{c'v'} = \overline{c_1\beta_1} \cdot y^2 + \overline{(c_1\beta_2 + c_2\beta_1)} \cdot y^3 \cdots$

気液界面では、界面で流れ方向とスパン方向に関して速度変動を持つために壁における式とは異なり、同様に界面近傍における渦粘性係数と渦拡散係数は以下のように表される。

$$Ev^{+} = \overline{\alpha_0 \beta_1} \cdot y^1$$
$$Ec^{+} = \frac{\overline{c_1 \beta_1}}{Sc} \cdot y^2$$

壁面での式とは異なり,気液界面では渦粘性係数と渦拡散係 数は漸近挙動が異なり,明らかに運動量輸送とスカラー輸送の 相似性を仮定することはできない。

次に、気液界面近傍において、渦拡散係数の漸近挙動をFig. 11に示す。ここでは、比較のためオイラー法によるSc=1.0の条 件で界面で等スカラー条件を課した場合も同様に示した。 Fig.10より、気液界面ではシュミット数が大きく変化している にも関わらず、渦拡散係数の界面での漸近挙動は大きな影響を 受けない事が分かる。そのため従来の古典的な理論を用いて界 面近傍で渦拡散係数Ec+がシュミット数によらずy+2に比例する と仮定したモデルが壁乱流に比べ良く成立していると考えられ る。次に, Fig. 12 にそれぞれのシュミット数におけるガス交換 係数と他の実験結果を示す。ただし、この場合ガス交換係数は 気液界面における値を求めるために、液側バルクでの平均濃度 と界面の濃度差を用いて無次元化している。Fig. 12によるとガ ス交換係数はSc-0.485に比例し古典的な理論によって求められる-0.5 乗に近い結果が得られた。また、同様に Hanratty ら⁽¹⁴⁾ によ る気液界面における物質輸送に関する過去の実験結果をまとめ たデータによると

$$k_r / u_r = 0.12 \sim 0.15 \text{ x Sc}^{-0.5}$$

が得られている。また、Banerjeeらのによる気液二相流における Sc=100 程度までの計算結果によると

$$x_{\rm L} / u_{\rm f} = 0.108 \sim 0.158 \text{ x Sc}^{-0.158}$$

となる。また Calmet ら⁽¹⁴⁾ によって行われた LES による Re_t=1280,Sc=200における計算結果も同様にプロットした。今回 の計算では,界面でのガス交換係数の求める際,液体側のバル クでの濃度と界面濃度を用いて以下のように無次元化した。

$$k_{L}^{+} = k_{L} / u_{t} = \frac{1}{Sc(C_{I} - C_{B}) dy}|_{y=0}$$
 (wall unit

一方 Banerjeeらは以下のようにガス交換係数を定義している。

$$k_{L}^{+} = k_{L} / u_{t} = \frac{1}{\sqrt{2}Sc(C_{I} - C_{B}) dy} |_{y=1}$$
$$C_{B} = \frac{\int_{0}^{2\pi} \overline{u_{I}cdy}}{\int_{0}^{2\pi} \overline{u_{I}dy}}$$

これら,計算条件やガス交換係数の定義に違いがあるにもかか わらず今回の計算結果は過去の計算,実験結果と良い一致を示 していると言える。



Fig. 12 Gas transfer coefficient as a function of Schmidt number at the air-water interface

Sc

6.壁面と気液界面における可視化による比較 壁と気液界面において、スカラー輸送と乱流構造の関係を見 るため、スカラー粒子の条件付き抽出を行うことで可視化を 行った。百個のスカラー粒子を壁面(もしくは界面)から同時 に放出し、界面(もしくは壁面)から垂直方向にyだけ離れた x-z断面を通過した際の粒子の周りの流れ場を保存し足しこむ ことによって、あるyにおける鉛直方向のスカラー輸送に効果 的な渦構造を抽出することを目的とする。気液界面と壁面とも に Sc=100とし、粒子のサンプリングを行う位置として、気液 界面においては界面からそれぞれy⁺=0.3,1.15,1.78 の位置とし た。これは、Fig. 10からも分かる様にそれぞれ拡散底層内、濃 度境界層の中ほど、濃度境界層の外側に対応する。一方、壁面 においても気液界面と同様の条件になるようサンプリング場所 を壁面から垂直方向にそれぞれy⁺=1.0,5.0,10離れた場所とした。

Fig. 13,Fig. 14,Fig. 15 に気液界面においてそれぞれ界面から 鉛直方向にy⁺=0.3,1.15,1.78離れた場所を粒子が通過した際のyz 断面における粒子の周囲の流れ場の様子を表す。y⁺=0.3 では 拡散底層の中に入っているため、ほとんど流れ場の影響を受け ずスカラー粒子は主に分子拡散によって輸送されることが分か る。一方、y⁺=1.15,1.78においては次第に乱流による輸送の効果 が大きくなり、y⁺=15 近辺を中心とする縦渦構造がスカラー粒 子の輸送に大きな影響を与えていることが分かる。

一方、同様に Fig. 16, Fig. 17, Fig. 18 に壁面から放出された粒 子がそれぞれ垂直方向にy⁺=1.0,5.0,10離れた場所をスカラー粒 子が通過した際のy-z 断面における粒子の周囲の流れ場の様子 を表す。気液界面と同様に壁乱流ではy⁺=1.0は拡散底層内に含 まれ、スカラー輸送は流れの影響を受けないが壁面から離れる に従いおよそy⁺=15付近を中心とした縦渦構造がスカラー輸送



Fig. 13 velocity field around a marker which passes $y^+=0.3$ plane from the air-water interface





Fig. 14 velocity field around a marker which passes $y^{+}=0.65$ plane from the air-water interface



Fig. 17 velocity field around a marker which passes $y^+=5.0$ plane from the wall



Fig.15 velocity field around a marker which passes y⁺=1.78 plane from the air-water interface

Fig.18 velocity field around a marker which passes $y^+=10.0$ plane from the wall

に大きな影響を与えていると考えられる。また壁面近傍におい て、壁面でのno-slip条件によって縦渦の影響は軽減されるが、 気液界面では縦渦構造によってその真上の界面における水平速 度成分が大きな値を持ち界面近傍において大きな界面垂直方向 の流れをもたらしている事が分かる。このため、気液界面近傍 では,固体壁近傍に比べて乱流物質輸送が大きくなり,高シュ ミット数においてよりガス交換が促進されると考えられる。

7. 結論

1)気液界面のDNSを行い、ラグランジュ法を用いることで高 シュミット数での計算を行い、平均濃度分布、ガス交換係数を 求めた。また、過去の実験結果等との比較を行い,良い一致を 確認した。

2) 固体壁では、高シュミット数において渦拡散係数の漸近挙 動がシュミット数の影響を受けて変化するため、運動量輸送と スカラー輸送の相似性が成立しない.一方気液界面においては 高シュミット数(Sc~1000)においても渦拡散係数の漸近挙動 がシュミット数に大きく依存しない。これはスカラー場と速度 場の相関が保たれていることを意味する。

3) 可視化によって、気液界面近傍において壁乱流と同様に y*=15 付近を中心とした縦渦構造がスカラー輸送に大きな影響 を与える事を確認した。このような気液界面における縦渦構造 は界面のごく近傍の速度場を大きく変化させるため高シュミッ ト数での物質輸送に大きく貢献すると考えられる。

参考文献

(1)Fortescue, G. E. and Pearson, J. R. A., On gas absorption into a turbulent liquid.í Chem. Engng. Sci. 22, 1163-1176

(2)Komori, S., Ueda, H., Ogino, F. and Mizushima, T.,Int. J. Heat and Mass Transfer, 25(1982), pp.513-522

(3)Komori,S., Nagaosa, R. and Murakami, Y., 1993, Tubulent structure and mass transfer across a sheared air- water interface in winddriven turbulence ëJ. fluid Mech. 249, 161-183.

(4)De Angelis, V. and Banerjee, S.,Direct numerical simulation of near -interface turbulence in coupled gas-liquid flowí,Phys. Fluids 8 (6), pp. 1643-1665(1996)

(5)De Angelis, V. and Banerjee, S.,'Heat and mass transfer mechanism at wavy gas-liquid interfaces'TSFP pp.1249-1254,(1999) (6)Papavassiliou, D., and Hanratty T. J., The use of Lagrangian method to describe turbulent transport of heat from a wallí, Ind. Eng. Chem. Res. 34, pp 3359-3367(1995)

(7)Papavassiliou, D., and Hanratty T. J., Transport of a passive scalar in a turbulent channel flow, Int. J. Heat and Mass transfer(40(6), pp. 1303-1311(1997)

(8)Na, Y., Papavassiliou, D., and Hanratty T. J., 'Use of direct numerical simulation to study the effect of Prandtl number on temperature fields', Int. J. Heat and Mass transfer, 20, pp. 187-195.(1999)

(9)Na, Y., and Hanratty T. J., Limiting behavior of turbulent scalar transport close to a wallí, In. J. Heat and Mass transfer, 43, pp. 1749-1758.(2000)

(10)Handler, R. A. et al.'Transport of a passive scalar at a share-free

boundary in fully developed turbulent channel flow', Phys.Fluids, vol.11, no.9, pp.2607-2625(1999)

(11)Nagaosa, R., 'Direct numerical simulation of vortex structures and turblent scalar transfer across a free surface in a fully developed turbulence', Phys.Fluids,vol.11, no.6, pp.2607-2625(1999)

(12)McCready, M. J., et al 'Computer simulation of turbulent mass transfer at a mobile interface', AIChE Journal, vol.32, no.7, pp.1108-1115(1986)

(13)水矢,高柳,花崎,笠木,'気液界面における乱流スカラー 輸送のDNS'第36回日本伝熱シンポジウム講演論文集1, pp.49-50(1999)

(14)Calmet et al, 'High-Schmidt number mass transfer through gasliquid interfaces', Int. J. Heat and Fluid Flow, 19, pp.522-532,(1998)