IV－13　表面曝気モデルについての一考察

九州大学工学部　正会員　栗谷陽一
学生員○多田基公

1、まえがき

表面曝気理論については従来より、Lewis-Whitman の境膜説，Higbie の浸透説，Danckwerts の表面更新説等がある。King は表面からの物質輸送は分子拡散と乱流拡散との和によって支配され、乱流拡散係数は表面からの距離の n 乗に比例するとしている。筆者らは自由表面での表面伸縮を考え、物質輸送速度は自由表面の伸縮に律速されると考えた。ここでは気液界面に於ける界面近傍の乱れの様子から推察すると、物質輸送を分子拡散と乱流拡散の和に支配されるとすることには疑問があるため、物質輸送の構造をモデル化して、電算によってシミュレートしてみた。

2、表面乱れの様子

表面からの距離が、最小渦の程度を越える所では完全な乱流の状態になっており、これより近くでは鉛直方向の動きが束縛される。そうすると、表面からの距離が最小渦径より小さくなると最小渦も偏平な運動にならざるを得なくなり、最小渦の水平運動スケールは水面まで有限に保たれるであろう。

一方、界面での物質輸送を制限するのは、最小渦スケールに比べて極く薄い濃度境界層である。従って、濃度境界層程度の範囲での乱れによる運動が液膜係数を支配していると考えられる。この範囲で、平面的に最小渦より狭い範囲を考えて水平運動速度を展開し、一次の項までとる。平面内直角二方向 x, y の運動速度 u, v，及び連続の式より、鉛直速度 w をもとめると、

$$u=u_0+(\partial u/\partial x)\cdot\Delta x+(\partial u/\partial y)\cdot\Delta y \qquad v=v_0+(\partial v/\partial x)\cdot\Delta x+(\partial v/\partial y)\cdot\Delta y$$

$$\therefore\ w=-(\partial u/\partial x+\partial v/\partial y)\cdot z=-\alpha\cdot z \qquad \text{------------------(1)}$$

で近似される。ここで、$\partial u/\partial x+\partial v/\partial y$ には最小渦が支配的役割を持つ。z は水深。α は表面伸縮速度である。局所的にみれば、α は最小渦の寿命時間を変動の時定数として random な変動をする。King の理論では、この様な運動による物質輸送を単なる乱流拡散として取扱っている。即ち、乱流拡散係数を $a\cdot z^n$ とおき、surface age が充分に長い場合に対し、$K_L/a^{1/n}\cdot D^{(1-1/n)}=f(n)$ を導いている。しかし、(1) の w は z 方向に対して同期的な運動をするために、物質輸送に関して単なる乱流拡散と同様な作用をもつか疑問である。それで、鉛直方向の同期的運動を乱数を用いて、時間には random に与えることにより、この様な場合の物質輸送を simulate した。

3．Simulate の方法

水深方向を界面に平行な cell に分割し、1 cell を $z=z_1=0\sim z=z_2$，i cell を $z=z_i\sim z=z_{i+1}$ とする。cell 間隔は $z_{i+1}=\sqrt{2}\cdot z_i$ とした。各 cell 内で濃度は均一とし、Δt 時間後の拡散による分布は正規分布で近似した。拡散が界面に達する場合には、境界条件を考えて分布曲線を $z=0$ で鏡面反射させた形を用いた。今、$t=0$ で i cell のみに拡散物質が存在し、その濃度を C_i とすると、Δt 時間後の濃度分布は、

$$C_i(z,\Delta t)=(C_i/\sqrt{4D\Delta t})\times\int_{z_i}^{z_{i+1}}\{exp(-(z-z')^2/4D\Delta t)+exp(-(z+z')^2/4D\Delta t)\}\cdot dz'$$

従って、j cell 内への i cell の拡散による平均濃度を $C_{ij}(\Delta t)$ とすると、

$$C_{ij}(\Delta t)=\left\{\int_{z_j}^{z_{j+1}}C_i(z,\Delta t)\,dz\right\}/(z_{j+1}-z_j)$$

これを解いて、無次元化距離を $\xi=z/\sqrt{4D\Delta t}$、$F(\xi)\equiv\xi\cdot\mathrm{erf}\,\xi+e^{-\xi^2}/\sqrt{\pi}$，$G(\xi_i,\xi_j)\equiv F(\xi_i+\xi_j)-F(\xi_i-\xi_j)$ として、

$$C_{ij}(\Delta t)=C_i\cdot[G(\xi_{i+1},\xi_{j+1})-G(\xi_{i+1},\xi_j)-G(\xi_i,\xi_{j+1})+G(\xi_i,\xi_j)]/2(z_{j+1}-z_j)$$

Δt 時間後の j cell の濃度 $C_j(\Delta t)$ は、$C_j(\Delta t)=\sum_i C_{ij}(\Delta t)$ で与えられる。

次に、表面乱れのモデル化は、各 cell がそのままの濃度をもって、全 cell が同時に上方向または下方向へ one cellずつ移るとした。上下動の方向は乱数をひくことできめた。

上述の二つの拡散操作によって表面$z=0$での濃度は変化するが、cell間隔が狭い場合にはΔt時間内に物質輸送は数cell先まで進む。それで、上述の如き操作を一回加えた場合、1cellの濃度C_1が境界条件と著しく異なる時に、1cellのみに補給するのでは1cellの大きさに界面輸送量が規定されることになり不都合である。それで、上述の拡散操作により1cellの濃度が境界条件の濃度より低下した分だけ補給を要するのだが、補給は先のcellまで及ぶとして、平均的にみて補給はflux Φ=const.と考えてまめることにする。拡散方程式、境界条件は次の如くになり、これを解く。1cellに於ける不足分をΔC_1とする。

$$\partial C/\partial t = D\cdot\partial^2 C/\partial z^2 \qquad \text{B.C.}\quad \partial C/\partial z\big|_{z=0} = -\frac{\Phi}{D} = \text{const.},\quad C\to 0 \text{ as } z\to\infty$$

補給によるj cellの濃度増分ΔC_jは　$I(\xi)\equiv \xi^2/2-(1+2\xi^2)\,\mathrm{erf}\,\xi/4-\xi\cdot e^{-\xi^2}/2\sqrt{\pi}$　として、

$$\Delta C_j = -\sqrt{\pi}\cdot\Delta C_1\left[I(\xi_{j+1})-I(\xi_j)\right]/(\xi_{j+1}-\xi_j)$$

ΔC_jを拡散操作によって得られた濃度C_jに加え、計算の一行程を終える。この行程を充分な回数N回行って、実際の現象の時間経過に対応させる。これらの計算によりn回毎の濃度分布、n回目までの平均濃度分布、液膜係数を求める。平均濃度及び液膜係数は表面伸縮を考慮した重みつき平均である。

4. 計算結果及び考察

混合距離をlとすると乱流では、$l=\kappa z$である。伸縮の場合にも同様の関係が成立すると考えてよく、i cellでは、$l_i=z_{i+1}-z_i=0.41z_i$ ($z_{i+1}/z_i=\sqrt{2}$)である。z_iの最大をz_mとすると、$z>z_m$では通常の乱れになる。l_iの最大l_mは、$l_m=0.41z_m$である。l_mを最小渦スケールλに等しくとってやり、$z_m=2.41\lambda$とする。その点に於ける最小渦スケールv_mをorder estimateすると、表面近傍ではReynolds数を1のorderであるとして$v_m\sim\nu/\lambda$。従って、渦の寿命時間をΔtとすると$\Delta t\sim\lambda/v_m\sim\lambda^2/\nu$。無次元化距離$\xi$は　$\xi=z/\sqrt{4D\cdot\Delta t}\sim\frac{1}{2}P_r^{1/2}(z/\lambda)$。従って、$\xi_m\simeq P_r^{1/2}$　となる。今回の計算では、$\xi_m=4, 8, 16, 32, 64$と取ってみた。

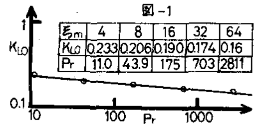
次に、表面乱れのenergy dissipationをεとすると$v_m\sim\varepsilon^{1/3}\lambda^{1/3}\sim\varepsilon^{1/4}\nu^{1/4}$より、$\Delta t\sim\lambda/v_m\sim\nu^{1/2}\varepsilon^{-1/2}$であるから、無次元化距離$\xi$は　$\xi\simeq z/\sqrt{4D\cdot(\nu/\varepsilon)^{1/2}}$

液膜係数K_Lは、計算によるものをK_{L0}として、$K_L=(z\xi/\Delta t)\cdot K_{L0}\simeq\sqrt{4D\cdot\Delta t}\cdot K_{L0}$

$$K_L=A\cdot D^{1/2}\cdot\varepsilon^{1/4}\cdot\nu^{-1/4}\cdot K_{L0}\qquad (A\equiv\text{const.})$$

K_{L0}はP_r数によって決る。K_{L0}とP_r数の関係は図-1の如くになる。

図-1



ξ_m	4	8	16	32	64
K_{L0}	0.233	0.206	0.190	0.174	0.16
P_r	11.0	43.9	175	703	2811

Kingの理論によると、流入flux Φは

$$\Phi=\{D+(\kappa v_m/z_m)\cdot z^2\}\cdot dC/dz$$

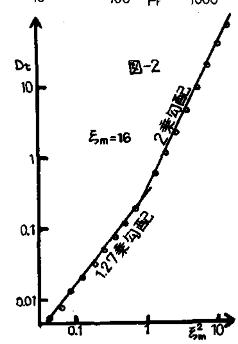
で、これを$z=0\sim\infty$で解くと、表面での条件による補給量ΔCは、

$$\Delta C=\frac{\pi}{2}\cdot\frac{\Phi}{D}\cdot\sqrt{z_m D/\kappa v_m}$$

となり、液膜係数K_Lは、

$$K_L=\Phi/\Delta C=A'\cdot D^{1/2}\varepsilon^{1/4}\nu^{-1/4}\cdot\kappa^{1/2}\qquad (A'\equiv\text{const.})$$

図-2



となる。Kingの理論によると、分子拡散係数をD_m、乱流拡散係数をD_tとして、$D=D_m+D_t$、$D_t=\kappa z^2/\Delta t$であるから、$D_m=1$として無次元化距離ξの二乗とD_tとの関係は図-2の如くになる。$\xi>1$では、普通の乱流理論とほぼ同様になった。これは、random walkによる輸送を考えれば、動きがz方向に同期していることは影響がない筈で、当然である。しかし、$\xi<1$ではD_tのξに対するベキが1.27となっており、分子拡散と乱流拡散とが完全に相加的になっていないことが判る。

この計算の際、cell内では均一濃度としている為のcell間の流入fluxの関係、表面乱れの水深方向の伸縮のモデル化等、simulateの方法を細部まで改良すると伴に、界面活性の影響を受ける場合、この様なことがどう影響するかを追求していきたい。尚、この計算には、九州大学大型電算センターを使用した。

5、参考文献

C.J.King. A.I.Ch.E. vol.5. P1.(1966)