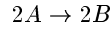


【緒言】 衝撃波の背後で燃焼反応が起こることで生成される衝撃波と燃焼波の連合波はデトネーションとよばれ、広く興味を持たれている。実験によって得られる情報には限界があるため、近年の計算機の高性能化によりデトネーションの研究において計算機シミュレーションがますます重要となっている。一般に燃焼のシミュレーションでは系を連続体とみなし、微視的な反応過程を速度論パラメータとして取り込んだ流体力学モデルが広く用いられている。しかし乱流や衝撃波を伴った化学反応流を通常の数値流体力学によって取り扱うことはしばしば困難となりうる。特にデトネーションにおいては、衝撃波面の厚さはしばしば平均自由行程の数倍程度の値となるため、この領域内では気体を連続体とみなす近似が破綻する。そのため波面の微細な構造を精密に取り扱うためには波面を通過する流れを分子・原子のレベルで考慮する必要がある。またデトネーションの波面近傍では強い非平衡分布が実現している可能性があるため、ここでは Arrhenius 式のように反応速度を単に並進温度の関数として表現することに無理が生じる。そのため単純な流体力学モデルではデトネーションの特徴を正確には再現できなくなる恐れがある。

デトネーションの精密なシミュレーション技法の開発を目指して、本研究では分子モデルと連続体モデルを結合した反応性気体に対する連結階層アルゴリズムを開発し、それをモデル反応系に対して適用した。

【モデル】 本研究では、流れ場を連続流体マクロモデルを用いる領域と Boltzmann 方程式に基づいた分子マイクロモデルを用いる領域に分割する。それぞれの領域は境界条件を通じて互いに連結されている。化学反応として、以下のモデル反応を用いる



分子モデルの解法としては直接シミュレーションモンテカルロ法 (DSMC 法) を用いる。簡単のため、それぞれの分子種は内部自由度を持たないとし、反応の分子モデルには reactive hard-sphere モデルを用いる。このモデルにおいて反応断面積 θ_R は以下の式で表される。

$$\theta_R = \begin{cases} 0 & \text{if } E < E^a, \\ \pi d^2 \left(1 - \frac{E^a}{E}\right) & \text{if } E \geq E^a. \end{cases} \quad (1)$$

ここで E は衝突のエネルギー、 E^a は活性化エネルギー、 d は分子の衝突半径である。

連続領域の時間発展は Euler 方程式に化学種の質量保存則を組み込んだ以下の方程式によって記述される：

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = S \quad (2)$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_x \\ \rho u_y \\ \rho u_z \\ E, \rho_i \end{pmatrix}, F_x = \begin{pmatrix} \rho u_x \\ \rho u_x^2 + p \\ \rho u_x u_y \\ \rho u_x u_z \\ (E + p)u_x \\ \rho_i u_x \end{pmatrix}, F_y = \begin{pmatrix} \rho u_y \\ \rho u_x u_y \\ \rho u_y^2 + p \\ \rho u_y u_z \\ (E + p)u_y \\ \rho_i u_y \end{pmatrix}, F_z = \begin{pmatrix} \rho u_z \\ \rho u_z u_x \\ \rho u_y u_z \\ \rho u_z^2 + p \\ (E + p)u_z \\ \rho_i u_z \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_i \end{pmatrix},$$

$$\rho = \sum \rho_i, p = T \sum \rho_i R_i, E = \sum \rho_i H_i - p(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)\rho/2, H_i = \sum \int_0^T C_{p,i} dT.$$

本研究ではこの方程式を HLLC 法を用いて解く。

【結果】 Fig. 1 に 1 次元デトネーションの分子シミュレーションによって得られた衝撃波面近傍における速度分布を示す。パネル A, B, C, および D は反応分子 A と生成分子 B の波面の進行方向に垂直な速度分布を表す。特に反応物の速度分布に強い非平衡性が現れており、局所平衡の仮定が破綻していることが分かる。この結果から、波面近傍を分子モデルで記述することが有効であることが示唆される。

Fig 2 に分子モデル-連続モデルを連結した連結階層シミュレーションのデモンストレーションを示す。左の部分は連続モデルで記述され、右の部分は分子モデルで記述されている。その境界を通じてそれぞれの情報を交換しつつ計算を進めていく。

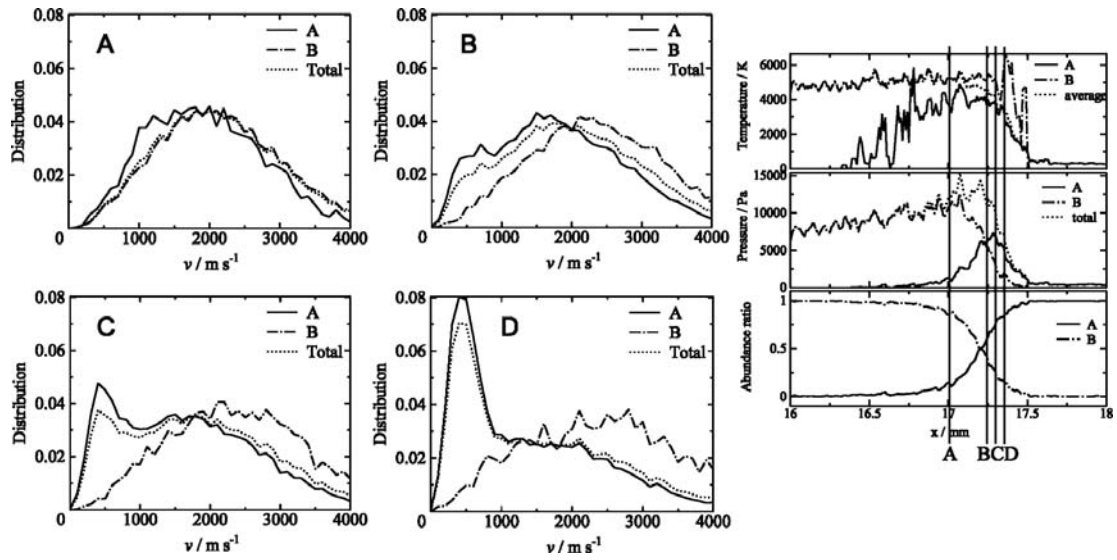


Fig.1: 1次元デトネーションの分子シミュレーションによって得られた衝撃波面近傍における速度分布。

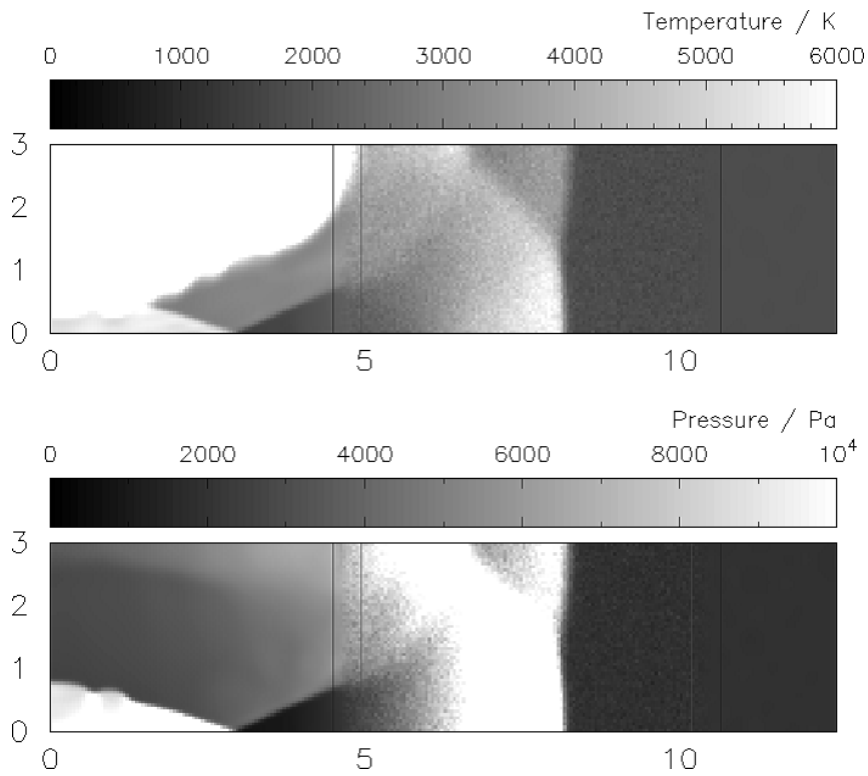


Fig.2: 気体デトネーションの連結階層シミュレーションのデモンストレーション。