

気相反応系におけるデトネーション伝播の分子シミュレーション

河野明男, 草野完也

独立行政法人海洋研究開発機構 (JAMSTEC) 地球シミュレータセンター

連結階層シミュレーション研究開発プログラム

(〒236-0001 横浜市金沢区昭和町 3173-25)

【緒言】

通常の計算機シミュレーションにおいては、モデルに含まれない微視的な過程はパラメータとして取り込まれる。しかし多くの先端的課題においては時間・空間スケールの大きく異なった物理階層間での過程の相互作用が本質的に重要な役割を果たしている。そのような複雑現象を効率良くシミュレートするために、我々のグループでは異なる階層のモデルを結合したシミュレーションの方法論を開発している。例えば燃焼のシミュレーションに対しては一般には微視的な反応過程を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。しかしそのような連続体モデルは本質的に局所平衡仮定に基づいたものであって、デトネーションのような激しい非平衡やスケールの小さい複雑な構造を有する現象に対して適用することには限界があると考えられる。すなわち分布が急激に変化する波面においては原子・分子レベルの動力学を考慮しなければならない。気相デトネーションの波面近傍では衝撃波の存在による非 Maxwell 速度分布が実現しているとされており、したがって波面近傍では Arrhenius 則が成り立たず、素反応の速度係数は速度分布関数の汎関数として記述されることになる。この非平衡効果に対しては未だ十分な理解がなされていない。

我々は気相化学反応系におけるマイクロ・マクロ連結階層シミュレーションの研究開発を進めている。本研究ではそのマイクロ階層に着目して、希薄気体中のデトネーション伝播解析のための分子シミュレーションコードを開発し、モデル分子系に対して数値解析を試みた。

【方法と結果】

モデル分子系のシミュレーションには直接シミュレーションモンテカルロ(DSMC)法を用い、衝突判定には no time counter 法を用いた。反応分子の反応断面積は衝突分子対の相対運動エネルギーのみに依存するとする単純なモデル

を採用した。図 1 にシミュレーションから得られた二次元波面のプロファイルの例を示す。発表では分子シミュレーションの結果を連続体モデルから得られたシミュレーション結果と比較し、デトネーションに対する分子シミュレーションの有効性および強い非平衡を伴う化学反応の連結階層シミュレーションについて議論する。

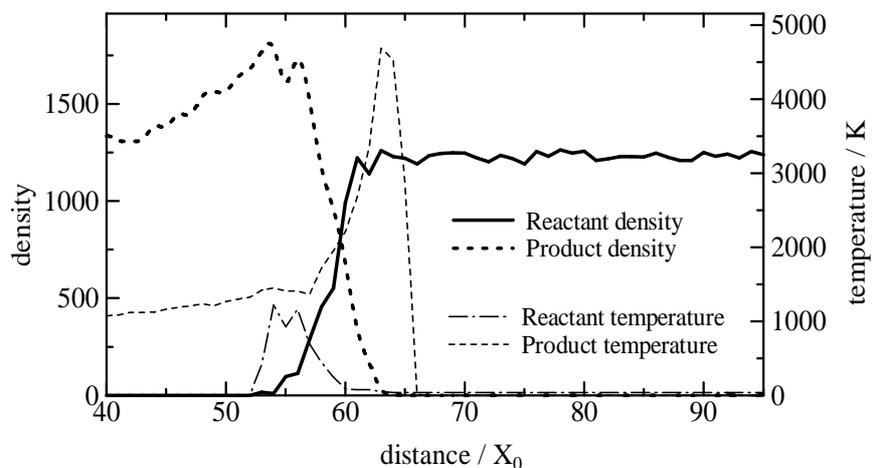


図 1: 二次元デトネーションの波面のプロファイル