

爆燃および爆轟の数値シミュレーションについて

富塚 孝之* 中森 一郎*

Numerical Simulation of deflagration and detonation

Ichiro Nakamori* and Takayuki Tomizuka*

近年、産業技術および科学技術の発展とともに数値計算技術も大きな飛躍を遂げ、航空宇宙、原子力、自動車および気象分野などで数値シミュレーションが実用的に利用されてきている。安全工学分野においても、従来、実験式や経験式を用いてリスク評価や安全指標作成が行われていたが、製造・運用プロセスの複雑化と現象（漏洩、燃焼、爆発など）の詳細機構が解明されてきたことに伴い、数値シミュレーション結果をリスク予測や安全指標に取り入れる傾向が出てきた。特に燃焼や爆発については詳細反応機構と流体力学をカップリングさせた数値シミュレーションを行うことにより、実験では計測できない物理情報を得るところまで来ている。本稿では爆発現象の中でも特に可燃性ガスによる爆燃および爆轟に対する数値シミュレーションの現状について紹介する。

Key word: 爆燃、爆轟、燃焼、数値シミュレーション

1. はじめに

産業現場では、可燃性のガス、液体、固体がしばしば取り扱われているが、その扱いを誤ったり、管理に不備があったりすると、燃焼が起こり、さらに燃焼が制御できなくなると、火災・爆発災害となり大きな被害が発生する。その中でも可燃性ガスについては雰囲気温度で気体になっているもの、雰囲気温度では液体もしくは固体であるが火災などの熱により蒸発し、可燃性蒸気となるものもある。可燃性ガスの危険なところは配管や貯蔵施設から漏洩した後に移流・拡散しながら酸化剤となる空気と混合し、広域の爆発範囲を形成する可能性があることである。

「予め」燃料と酸化剤である空気とが「混合」した状態で燃焼する現象を「予混合燃焼」という。それに対し、ロウソクやバーナーのように燃料と空気を別々に供給し、燃料と空気が「拡散」・混合しながら燃焼する現象を「拡散燃焼」という。可燃性ガスによる爆発現象が起きるのはほとんど予混合の場合であり、本稿では予混合燃焼の数

値シミュレーションについて記述する。

まずは予混合燃焼の中でも爆燃と爆轟の物理現象の違い、さらに予混合燃焼が大きなスケールで発生することにより、爆発現象に至る物理的機構について解説する。次には各現象の違いだけではなく、数値シミュレーションを行う目的によっても手法が異なることから、適用されるさまざまな数値解法と解析事例を紹介する。

2. 爆燃現象と爆轟現象

2.1. 爆燃現象

爆燃（deflagration；デフラグレーション）とは予混合ガス中を火炎が伝播する際に、その速度が音速未満の現象をいう（図 1 参照）。このような爆発では、燃焼によるガス膨張で圧力波が発生するが火炎（燃焼波）よりも先行するため、大きな圧力波となることが少なく、破壊に至るような事故になりにくい。

可燃性ガスとしてはメタンやプロパンのように層流燃焼速度が比較的遅く、さらに開放空間では爆燃現象になりやすい。

*アドバンスソフト株式会社 第2事業部

2nd Computational Science and Engineering

Group, AdvanceSoft Corporation

2.2. 爆轟現象

爆轟 (detonation ; デトネーション) とは、衝撃波が先行し、衝撃波に誘起された燃焼波が予混合気中を衝撃波とともに持続的に伝播する現象である (図 2 参照)。

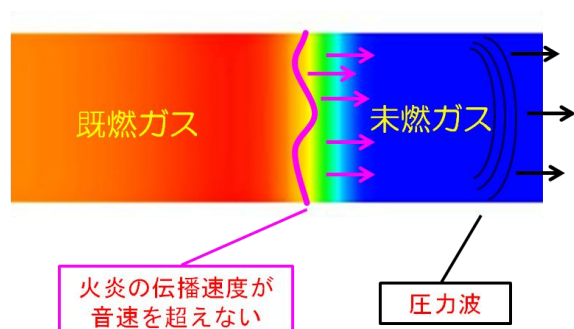


図 1 爆燃イメージ図

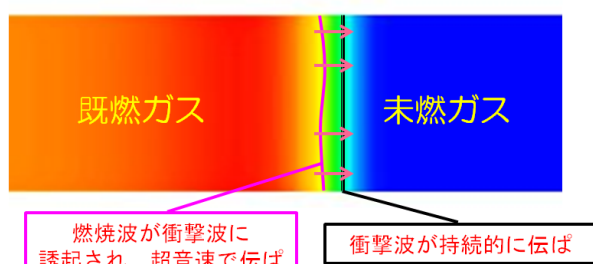


図 2 爆轟イメージ図

爆轟は燃焼波と圧力波が干渉し合い、圧力波は衝撃波となって伝播するため、大きな破壊力を持つことから大災害につながりやすい。特にガス種では水素のように層流燃焼速度が大きく、かつ細長い管路内で発生しやすい。近年の事故例では浜岡原子力発電所における配管破断事故原因が、配管内に蓄積した高濃度の水素と酸素による爆轟である (図 3)

爆轟の研究は約 130 年前から行われており、基礎現象の解明、特に自走デトネーションの詳細な伝播機構、管路内デトネーションに見られる 3 重点によるセル構造 (うろこ状の模様) の解明、爆燃から爆轟への遷移 (DDT ; Deflagration to Detonation Transition) メカニズムの解明、そして爆轟波面の 3 次元構造などが挙げられる。

爆轟速度の予測手法については、1 次元理論が現実的な方法として用いられており、ZND モデ

ルがその代表である。ZND モデルは Zel'dovich と John von Neumann のそれぞれが構築した爆轟現象の予測理論に基づいており、Agafonov[2] は化学反応モデルとエネルギー損失を組み込んだ ZND モデルを用いて爆轟伝播限界を求めるなど、実用的な近似方法として幅広く利用されている。1 次元理論の概要としては図 4 に示すように、爆轟の流れを 1 次的に考えると、衝撃波が先行し、その背後に高温、高压状態が形成されることにより予混合気の化学反応が発生し、火炎帯が作られる。



図 3 水素爆轟による配管破断事故[1]

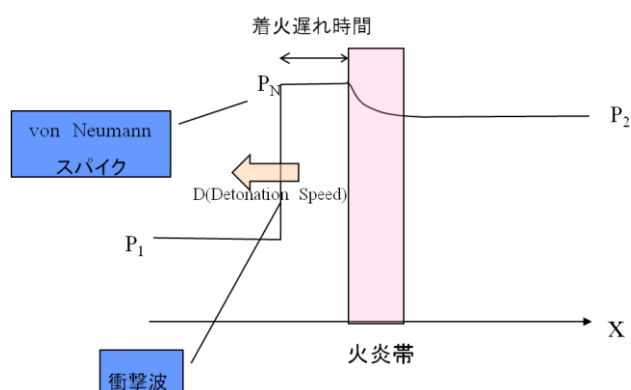


図 4 爆轟の 1 次元モデル[3]

しかし近年の研究成果により爆轟の 3 次的構造がある程度解明され、燃焼のラジカル連鎖反応と相互作用をもつ現象であることが分かっている。流体構造については、実験的にさまざまな煤膜を取得する実験[4]や開放シャッター写真の取得が行われ、デトネーションは小さな小爆発の集まりであることが明らかにされてきた。定常的な

爆轟波でも厳密には爆轟波面において入射衝撃波、横波およびマッハ衝撃波が交差する多次元構造を持っており、この構造の形成が爆轟限界と大きく係わっている。とはいえ、この3次元構造を数値シミュレーションで再現しながら、実用的なスケールの計算を行うことは不可能であり、実用的な爆轟予測はやはり1次元モデルに依存するほかない。

2.3. 乱流予混合燃焼

初期の火炎伝播速度は層流燃焼速度で比較的ゆっくり燃え広がるが、徐々に燃焼速度が大きくなることにより火炎伝播は加速され、圧力が上昇する。この現象により発生した高い圧力波が構造物等を破壊に至らしめ、高速に広がる火炎は周囲の機器や人に燃焼、火傷を負わせることがある。これは予混合燃焼の伝播が進むにつれて火炎面に皺状の細かい乱れが生じ、火炎面の局所的には層流燃焼速度で燃焼反応が起こっていても、反応面積の増加によってマクロ的には燃焼速度が増加しているように見える（図5参照）。この時の火炎を皺状火炎という。

このような現象を乱流予混合燃焼と呼び、この時のマクロな燃焼速度を乱流燃焼速度という。

燃焼流れの計測が詳細に行われるようになってきたのは、つい最近のレーザー計測技術の進歩によるところが大きく、現状ではいまだ乱流火炎の詳細構造等を捉えるには至っていない。

濃度均一で気流に乱れのない混合気中では、火炎の各部分で燃焼反応が同一となり、火炎は乱れのない形を保持しながら伝播するはずである。現実には濃度が均一で乱れのない混合気は存在せず、必ず微小な擾乱が存在している。このような擾乱により火炎は一時的に変形するが、もしこの変形を元に戻す機構が存在すれば、火炎はほぼなめらかな形を保ちながら定常に伝播してゆく。しかし、もしこの変形が成長する機構がある場合には火炎に乱れが成長してゆく。後者のように微小な擾乱（火炎の変形）が成長してゆく場合には、何らかの擾乱が常に存在している現実の場では、火炎は乱れのないなめらかな形を保ちながら伝

播することはできず、乱れが成長していく。これを火炎が不安定であるといい、このように火炎を不安定化する機構を不安定化機構あるいは不安定性と呼ぶ。

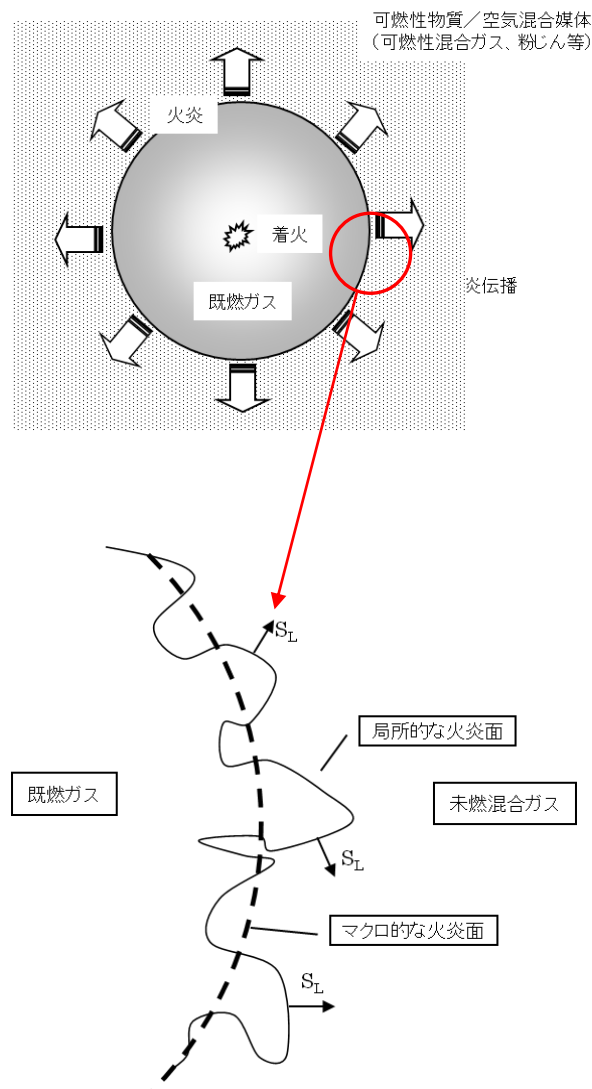


図5 皺状火炎モデル図[5]

3. 爆燃、爆轟の数値シミュレーション手法

3.1. 爆燃シミュレーションの数値モデル

爆燃シミュレーションの場合、火炎の挙動を再現するための数値モデルが主体となり、一般には予混合燃焼モデルといわれる。CFDにおける予混合燃焼モデルは主に内燃機関における混合気の乱流燃焼現象を対象として発達してきた。近年、予混合燃焼シミュレーションは、計算機能力の向上や乱流モデリングの発達により、 $k-\epsilon$ モデルからLES (Large Eddy Simulation) による乱流燃

焼解析が行われるようになり、一様な濃度場における基礎的な燃焼解析はもとより、濃度場が空間的かつ時間的に変動を持つような乱流燃焼解析も徐々に行われるようになってきた。しかし、その対象空間のほとんどは内燃機関内の一部といった微小空間がほとんどで、大規模爆発のようなスケールにおいては、燃焼速度が層流燃焼速度となる場合であれば可能であるが、火炎の乱れと共に火炎伝播速度が増大する現象を再現する燃焼モデルはまだ確立されていない。

CFD によるシミュレーションにおいて、火炎をマクロスケールで取り扱う場合、未燃ガスと既燃ガスの二領域がありその境界が火炎と考える。計算解像度の問題から火炎の厚みはないものとする。このようなモデルを **Two-Zone Model** という。**Two-Zone Model** が下地となっている燃焼モデルはいくつかあるが、個々の現象により境界の火炎における化学反応、乱流の影響が異なってくるため、モデルに違いが生じる。通常の乱流燃焼の計算では、Magnussen and Hjertager [6] の渦散逸の考え方をを用いることが多い。つまり、乱流渦が散逸することにより反応が起こると考え、反応速度が $\rho \varepsilon / k$ に比例すると仮定するものである。燃料、酸素、燃焼ガスの渦塊が崩壊していく過程での燃焼反応は三者のうち最も少ないものの量に支配されると考え、次式で表す。

$$R_{fu} = -\rho(\varepsilon/k) \min \{Am_{fu}, Am_{ox}/i, A'm_{pr}/(i+1)\} \quad (1)$$

ここで、 R_{fu} は時間平均反応率、 m_{fu} 、 m_{ox} 、 m_{pr} は燃料、酸素および燃焼ガスの質量分率、 $A \doteq 4$ 、 $A' \doteq 2$ の経験定数、 i は量論酸素燃料比である。しかし、この渦消散モデルをはじめ反応率が $\rho \varepsilon / k$ に比例するモデルでは、流体計算から得られる k 、 ε に依存することから、採用する乱流モデルおよび計算格子の解像度の影響を大きく受ける。例えば壁近傍では過大な反応率が生じ、逆に障害物のない空間においては乱流が発達しにくいことから反応率は過小評価され、自発的な乱れにより加速する火炎の挙動と乖離が生じる。

3次元空間における火炎の位置を定義するため

に、あるスカラー量を割り当てその輸送方程式を解くことにより、火炎の挙動を求める方法がある。代表的なものとして **G** 方程式モデルと反応進行度モデルがある。基本的な考え方はいずれも同じで、例えば **G** 方程式でいえば、未燃ガス領域は $G=0$ 、既燃ガス領域では $G=1$ となるようなスカラー量を定義する。このスカラー量は予混合気中を燃焼速度で伝播すると考え、瞬時の火炎位置を求めるために3次元輸送方程式の非定常計算を行うものである。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho G) + \nabla(\rho \mathbf{v} G) = \nabla \left(\frac{\mu_t}{Sc} \nabla G \right) + \rho S \quad (2)$$

本モデルでは **G** の等値面で火炎伸長率や曲率を求めることができ、火炎特有の加速、消炎などのモデルを右辺第2項の生成項に導入することにより、火炎伝播をシミュレーションすることが可能である。

反応進行度モデルは Zimont ら [7][8][9] が提唱したモデルで、反応進行度 c を導入することにより火炎面の存在確率密度を考え、 c の輸送方程式を解くものである。図6に示すように、 c は0で未燃、1で既燃状態であり火炎面は $0 < c < 1$ の領域に存在することになる。火炎面付近における反応進行度を1次元的な分布で表現したものが図7である。

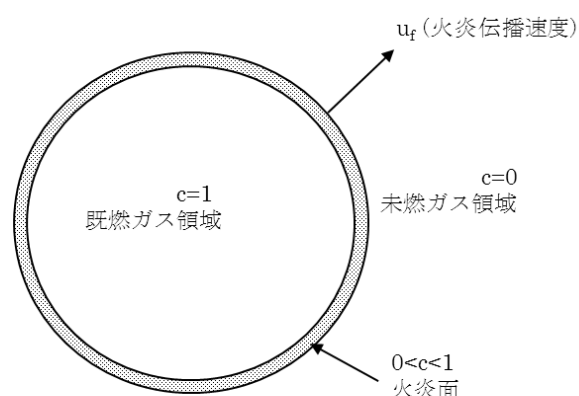


図6 反応進行度概念図

3次元輸送方程式は **G** 方程式と同じで、反応進行度による生成項 ρS には乱流燃焼速度による効果として次式を導入する。

$$\rho S = \rho_u S_T \nabla c \quad (3)$$

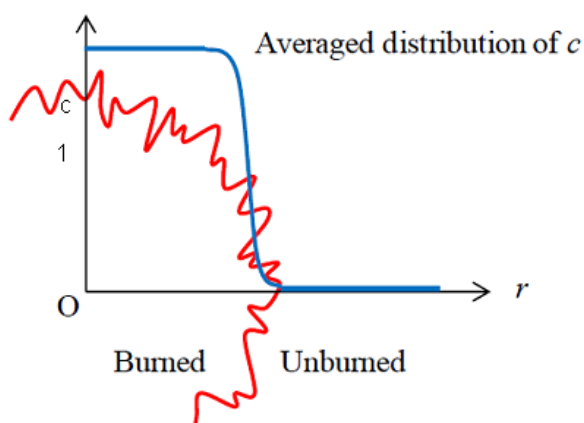


図7 火炎面近傍における反応進行度の分布

ここで ρu は未燃ガス密度、 S_T は乱流燃焼速度となる。 S_T の乱流燃焼モデルについては燃焼条件によりさまざま、多数のモデルがある。高橋ら[10]は次式のモデル[11]を採用しており、これは乱流強度 u' に依存するモデルであり、前述の渦消散モデルと同様で、計算格子解像度の影響を受ける。

$$S_T = S_L \left\{ 1 + k_1 (u'/S_L)^n \right\} \quad (4)$$

火炎の不安定性による自発的乱れを考慮したフラクタル火炎伝播モデルでは、次式のように乱流燃焼速度にフラクタル理論を導入し、実スケールにおける水素および DME の爆発実験と比較検証を行った[12] [13]。図 8 には比較結果を示す。

$$S_T = \frac{3}{2} c_g \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} \right) \frac{S_L^2}{\sqrt{\kappa}} t^{1/2} \quad (5)$$

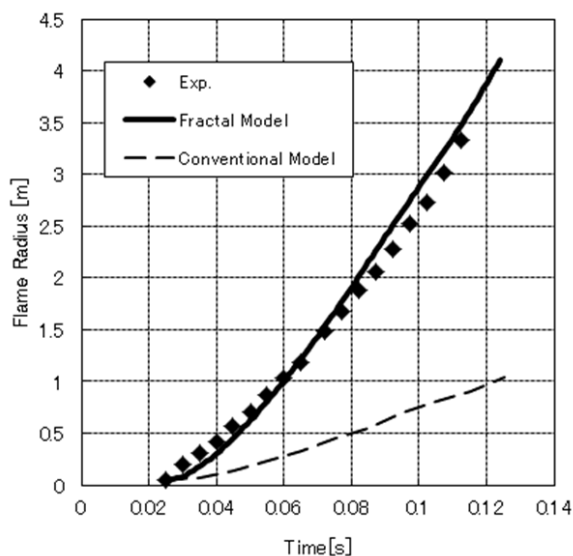


図8 水素爆発実験における火炎半径[13]

3.2. 爆轟シミュレーションの数値モデル

前章で述べたように爆轟波面は3次元構造を有しているが、実用的な予測手法としては1次元モデルによる評価が重要である。深尾ら[14]はZNDモデルに摩擦損失と熱損失を考慮し、爆轟伝播限界予測を行い、大門ら[15]は再着火過程の物理現象を確認した。

ZND モデルにおける保存式を以下に記す。

質量保存式

$$\frac{d(\rho u)}{dz} = 0 \quad (6)$$

運動量保存式

$$\frac{d}{dz} (p + \rho u^2) = \frac{4\sigma}{d} \equiv f \quad (7)$$

エネルギー保存式

$$\rho u \frac{d}{dz} \left(h + \frac{u^2}{2} \right) = \frac{4\sigma}{d} D - \frac{4\theta}{d} \equiv g \quad (8)$$

熱および摩擦損失項

$$\sigma = \xi \rho (D - u)^2 / 2, \quad (9)$$

$$\theta = \frac{1}{2} \xi \rho (D - u) \left[c_p (T - T_0) + \frac{(D - u)^2}{2} \right] \quad (10)$$

$$\xi = 0.3164 \text{Re}^{-0.25} \quad (11)$$

ここで

D : 爆轟速度

u : 流速

ρ : 密度

d : 反応管の直径

σ : 反応器壁との外部摩擦と粘性による内部摩擦による損失項

θ : 熱伝導による損失項 ξ : Blasius の摩擦係数

図9には爆轟伝播限界予測の結果として実験と計算結果の比較を示す。損失項の導入により初期圧力の違いによる爆轟速度の変化が再現されており、ZNDモデルの実用性を示している。

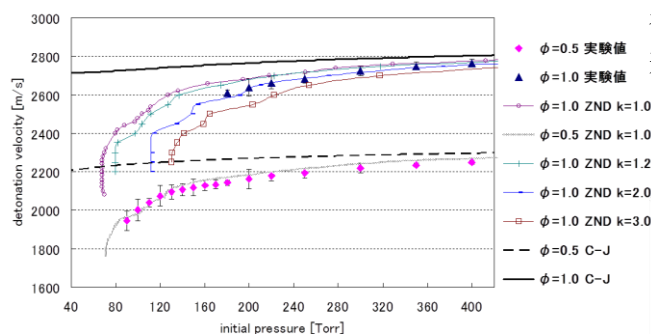


図9 ZNDモデルによる爆轟速度の比較結果[14]

2次元および3次元モデルの場合、一般的な爆轟では音速の数倍以上の現象であるため、高速流れとしての圧縮性流体の解法を用いることが多い。粘性の影響も小さいため、Navier-Stokes 方程式ではなく、Euler 方程式による計算となり、双曲型の偏微分方程式を解くことになる。

基礎方程式は、圧縮性 Euler 方程式、すなわち連続の式、運動量の保存式、エネルギー保存式に加えて各化学種の保存式を考慮したものとなる。2次元の場合は、下記の通りとなる[16]。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{\partial F_d}{\partial x} + \frac{\partial G_d}{\partial y} + s \quad (12)$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho_i \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \\ \rho_i u \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \\ \rho_i v \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$F_d = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -q_x \\ \rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \end{pmatrix} \quad G_d = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -q_y \\ \rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial y} \end{pmatrix} \quad S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_i \end{pmatrix} \quad (14)$$

爆轟は非定常現象であることから陽解法を用いることが多い。また空間スキームについては Harten-Yee の TVD 法に代表されるような、衝撃波を捕獲できるスキームを適用する必要がある。

図 10、11 には解析例として 2 次元爆轟と 3 次元爆轟の分布図[17]を示す。シミュレーション結

果より入射衝撃波、横波およびマッハ衝撃波が交差する 3 重点が再現できており、爆轟波面の複雑な挙動を詳細に確認することができる。

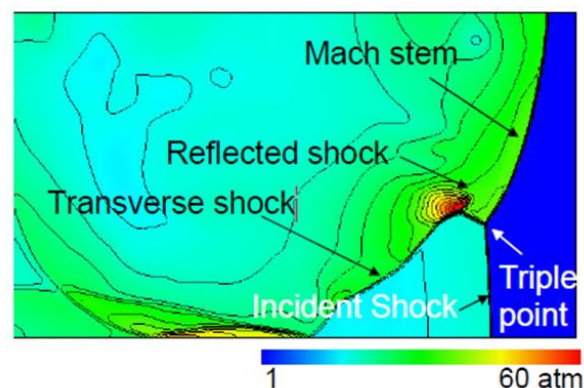


図10 2次元爆轟の瞬間圧力分布図

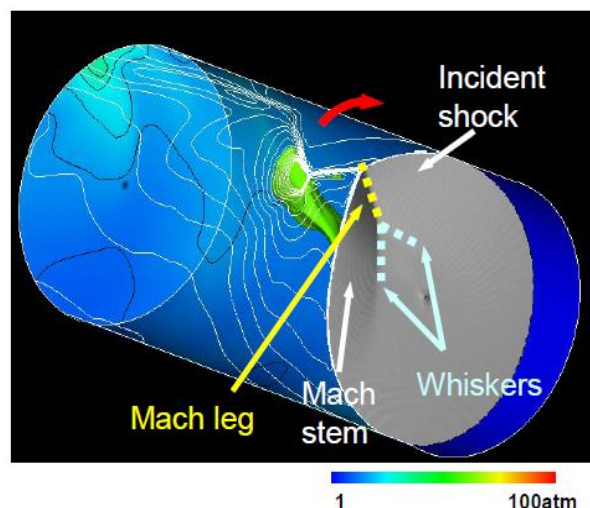


図11 3次元爆轟の瞬間圧力分布図

4. おわりに

本稿では、可燃性ガスによる爆燃、爆轟現象に対する数値シミュレーションの現状を解説した。爆発現象の中で爆燃と爆轟の違いについて物理的に説明し、各現象に対する数値シミュレーションの手法を紹介した。

参考文献

- [1] JAERI-Tech 2001-094(2001 年 12 月)、P.15
- [2] G.L. Agafonov, S. M. Frolov, 1994, 30(1), 91-100
- [3] 富塚, 毛利, 吉田, 越, “気相デトネーション限界の数値シミュレーション”, 水素の燃焼

- と爆発のワークショップ, 東京大学
- [4] Roger A. Strehlow, *Astronautica Acta*, 1969, 14, 539-548
- [5] 富塚, “数値シミュレーションによる可燃性ガスの爆発危険性解析”, 博士論文, 東京大学
- [6] Magnussen, B.F. and Hjertager, B.J., 1976. Symposium (International) on Combustion 16, pp. 719-729.
- [7] Zimont, V. L., Polifke, W., Bettelini, M. and Weisenstein, W., An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure. *J. of Gas Turbines Power*, 120:526-532, 1998.
- [8] Zimont, V. L., Biagioli, F. and Syed, K. J., Modelling Turbulent Premixed Combustion in the Intermediate Steady Propagation Regime. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 1(1):14-28, 2001.
- [9] Zimont, V. L. and Lipatnikov, A. N., A Numerical Model of Premixed Turbulent Combustion of Gases. *Chem. Phys. Report*, 14(7):993-1025, 1995.
- [10] 高橋, 富塚, 永野, 高桑, 武井, 越, 土橋, 山鹿, 難波, “実規模 LP ガス漏洩・爆発評価システムの開発”, *Science and Technology of Energetic Materials*, Vol.65, No.4, p.116-124 (2004)
- [11] Bielert, U., Klug, M. and Adomeit, G., Application of Front Tracking Techniques to the Turbulent Combustion Processes in a Single Stroke Device, *COMBUSTION AND FLAME* 106, pp.11-28 (1996).
- [12] Tomizuka, T., et al., Estimation of turbulent flame speed during DME/air premixed gaseous explosions, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Volume 26, Issue 2, March 2013, Pages 369-373
- [13] Tomizuka T, et al., A study of numerical hazard prediction method of gas explosion, *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 38, Issue 12, 22 April 2013, Pages 5176-5180
- [14] 深尾将士他, “ H_2/O_2 燃料のデトネーションの伝播限界の測定”, 第 44 回燃焼シンポジウム講演論文集, 2006
- [15] 大門, 松尾, “1 次元デトネーションにおける再着火過程の数値解析”, 衝撃波シンポジウム講演論文集, Vol.1999, pp. 417-420, 2000
- [16] 清水博志, 坪井伸幸, 林光一, “水素/空気デトネーションにおける詳細化学反応が与える影響”, 第 14 回数値流体シンポジウム 2000
- [17] 坪井伸幸, 林光一, “3 次元爆轟現象の数値解析”, *ながれ* 26(2007), 183-192
- ※技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、【カラー版】がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)