

## 爆発・衝撃波挙動のシミュレーションの現状と今後の展望

産業技術総合研究所

田中克己

### Progress on the Numerical Simulation of Explosions and Shock Wave Phenomena

Katsumi Tanaka

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

キーワード：爆発，衝撃波，デトネーション，不安定性，シミュレーション

keyword : Explosion, Shock Wave, Detonation, Instability, Simulation

#### 1. はじめに

産業、科学技術の創造的な研究開発には爆発現象に関わることが多く、このような困難な問題を克服することにより革新的な産業技術が創出されることは言うまでもない。一方、予期せぬ事故が発生した場合には事象をモデル化し、シミュレーションにより事故原因の究明が行われることも多い。ここではいくつかの事例に基づくシミュレーションを紹介する。

#### 2. 爆発現象のシミュレーション

燃焼、デトネーション等による爆発に伴い発生する衝撃波のシミュレーションは気相はもとより固相、液相も含めて流体力学式（または連続体力学）を基礎式とした数値解析により行われる。気相では空気力学、凝縮相では水力学や材料力学が関係し、爆発現象では化学反応理論が適用される。流体力学式は Newton 力学そのものであり、密度、流れ速度、圧力、エネルギーの質量、運動量、エネルギーの 3 保存則からなる。化学反応を伴う場合には燃焼反応機構が必要となる。圧縮性を考慮した凝縮相の場合には圧縮率や材料強度等のデータが必要となる。したがって爆発・衝撃のシミュレーションには対象となる物質の材料特性についての広汎な知見が要求される。

計算スキームは解析対象が非定常圧縮性流体に対しては特性曲線法、格子を用いる差分法、有限要素法他に最近発達している SPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)等のメッシュレスな解析法に大別される。圧縮性流体の乱流燃焼は  $k-\epsilon$ モデルや最近大きく進歩している LES(Large Eddy Simulation)などがある。解析手法の詳細は省略するが、衝撃波を伴う場合は波面での圧力、密度、流れ速度が不連続的に変化することにより生ずる数値解の安定化が基本的な課題である。衝撃波を伴うシミュレーションの安定化のためには疑似粘性または数値粘性により波面での不連続変化を連続化する手法が一般的に用いられる。気体力学では完全気体を想定することにより、高解像度の解析スキームが知られているが、凝縮系では物質固有の問題がある。

火薬・爆薬、可燃性ガスの爆発現象では起爆と伝爆過程のシミュレーションが行われる。起爆過程では酸・水素のように素反応速度が知られている場合を除き熱発火または衝撃起爆モデルが適用される。素反応機構が知られている場合はほとんど無いし、メタンなどの炭化水素の場合は多くのラジカルの生成と素反応があるため、起鎖反応と連鎖反応からなる 2 段階反応モデルが使用される。熱起爆モデルではほとんどが DSC 等による熱分析測定から経験的に得られるアレニウス型の分解反応式が適用される。ニトロメタン等の均質液体爆薬には衝撃加熱による熱起爆モデルが適用される。アレニウス型の熱反応モデルに衝撃圧縮理論を適用して解析を行うと Fig.1 (左図) に示されるように  $0.4 \mu s$  後に入射境界面で強い起爆が起こる。

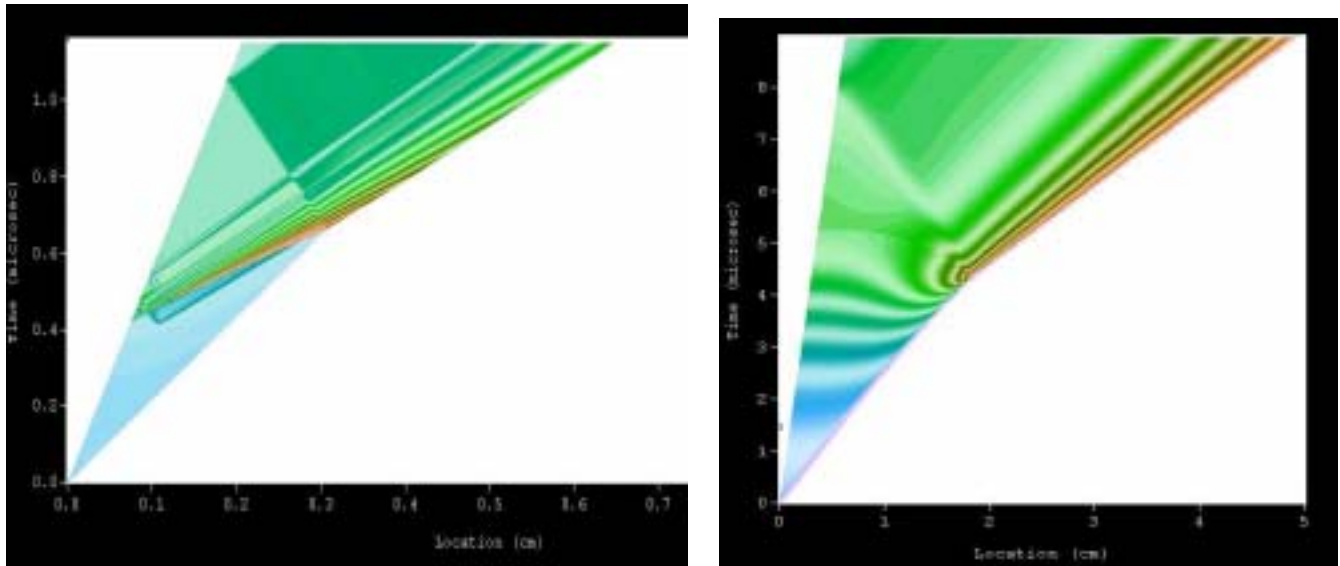


Fig.1 Shock initiation of nitromethane by 9GPa(left) and cast TNT by 5GPA (right).

しかし、TNTなどの固体爆薬の場合、衝撃起爆圧力は数 GPa 程度である。そのため衝撃加熱温度が低く熱起爆モデルが適用できない。デフラグレーションからデトネーションへの転移 (DDT)は実験結果に基づいてモデル化された反応を適用することにより Fig.1 (右図) に示すように再現できる。このモデルは経験的なもので同じ物質でも爆発時に起こる反応形態は物質の状態によって異なるため、実験データが無ければ予測はできない。

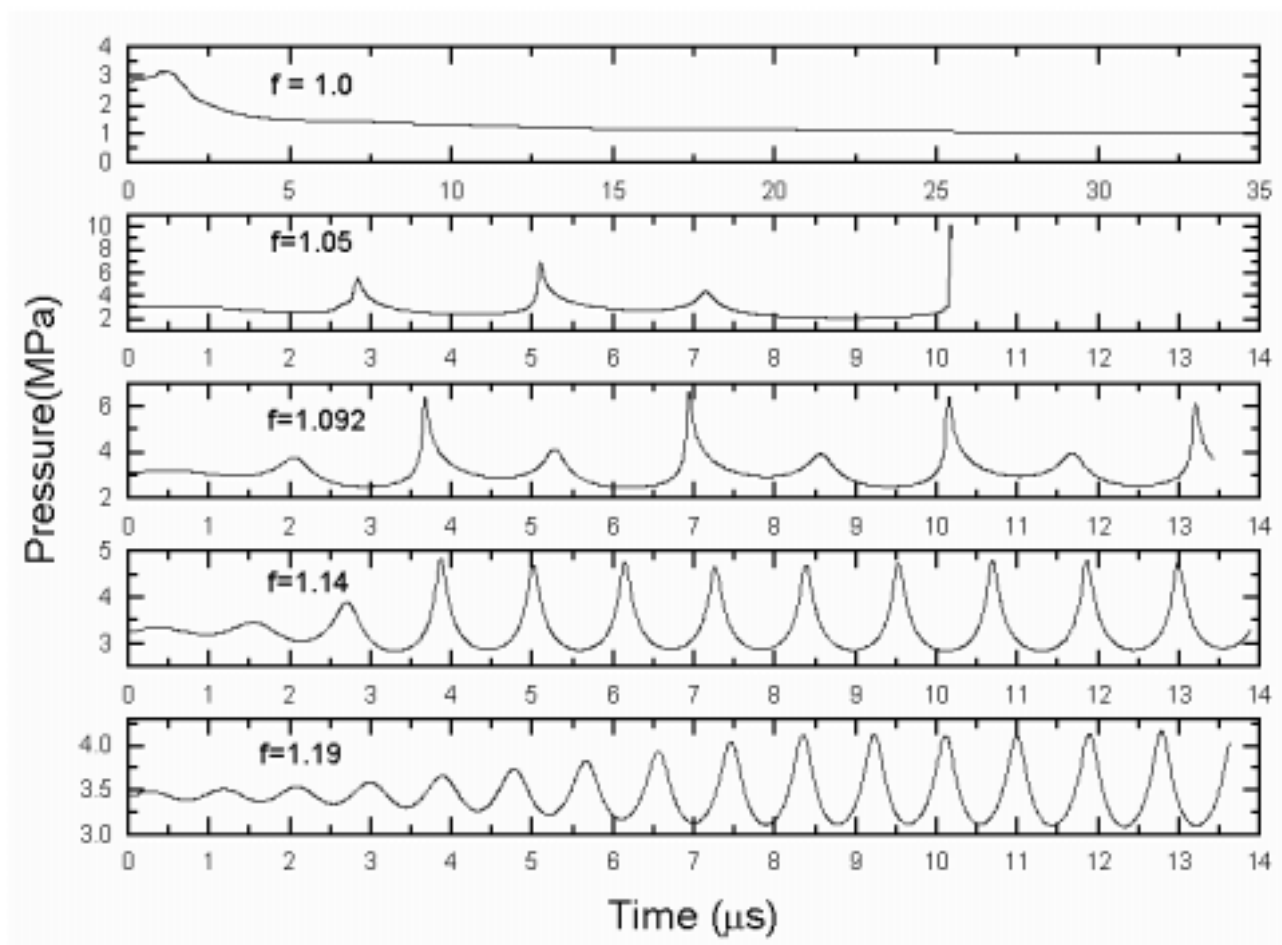


Fig.2 Computed shock pressure for various degrees of overdrive  $f=(D/D_{c1})^2$  in H<sub>2</sub>-Air stoichiometric mixture under 1 atm.

平面定常デトネーションの特性は C-J (Chapman-Jouguet) 条件により予測される。C-J デトネーション特性は気体デトネーションでは理想気体、爆薬や初期圧力が 10MPa 以上の可燃性混合気には分子間ポテンシャルに基づく実在気体効果を考慮した状態式が適用される。C-J デトネーション特性は実験値に近い結果を与えるが、すす等の固体生成物や液滴等の混相流については適用性には疑問がある。平面デトネーション波の構造をいわゆる ZND モデルと素反応モデルにより解析すると Fig.2 に示すように C-J デトネーション状態は反応誘導時間が長くなり、過駆動デトネーションでないと安定な伝播が再現できないことが知られている。同様にニトロメタンでも反応誘導時間は 100nm 程度でやはり C-J デトネーションは不安定である。

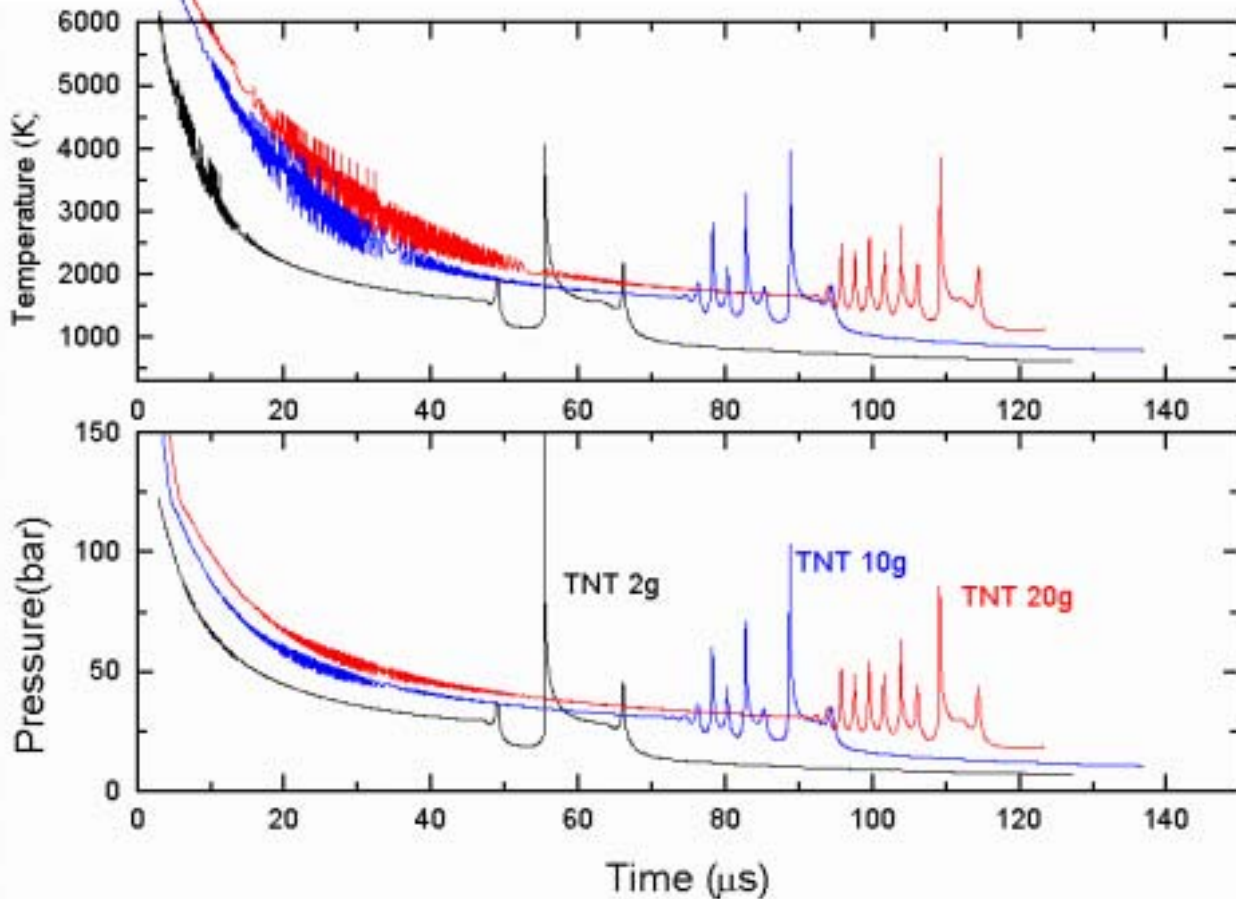


Fig.3 Pressure and Temperature at shock front for the direct initiation in hydrogen-air stoichiometric mixture by TNT.

素反応による詳細反応モデルにより化学量論組成の酸素・空気の直接デトネーション起爆について球面波モデルで微細構造の解析を行うと TNT20g、つまり 100kJ のエネルギーでもデトネーションが生じない結果となる。実際には酸・水素の直接起爆エネルギーは kJ 程度である。このような実験結果との矛盾はデトネーション等の爆発現象が衝撃波面および反応帯において何らかの不安定性により生じた乱れに起因している。TNT の例では微少気泡が崩壊することによりジェットが生成され局所的高温部 (ホットスポット) が多数起こることにより弱い衝撃波でもデトネーションを起こすとされている。しかし、空隙の圧壊により生ずるホットスポットを解析すると数 GPa 程度では起爆機構を再現できない。Fig.4 に円板状の空隙が上方へ伝播する衝撃波によってつぶされて、ホットスポットが生成するとともに渦が発生している様子を示す。このように凝縮系物質では衝撃加熱の他に渦の形成や粘性による摩擦、拡散・熱伝導などの輸送項も考慮する必要があると考えられる。爆発性危険物中の気泡や空隙は安全上好ましく

ない役割を果たすことが多い。昨年神岡鉱山のニュートリノ観測用のスーパーカミオカンデで 1つの光電子増倍管が 30m の水圧で押しつぶされ爆縮を起こし、これが引き金になって 70cm 間隔で設置されていた約 7000 本の増倍管が破損した。これをシミュレーションすると管の中心部で秒速 20~30m の速度で水が衝突して中心部で高圧を発生し、隣接する増倍管に 20 気圧以上の水中衝撃圧力が加わった結果、連鎖的に数秒間で水中の大半の増倍管が轟音とともに破壊され 20 億円近い被害を受けた。一種の物理的なデトネーションである。使用されている増倍管は他で使用されている増倍管の直径に比べて 10 倍程度の大きさであるため壊れやすくかつ爆縮効果が大きくなったと推定される。1本の増倍管が破壊された原因はよくわからないが軽い物質の上に重い物質が乗っている場合にはレーリー・テラー不安定性による破壊を生じる可能性がある。気象学にバタフライ効果といわれる「ブラジルで1羽の蝶が羽ばたくとテキサスで竜巻が発生する」という逸話がある。カミオカンデ事故は、どこかで誰かがしたクシャミか、小石の落下等によって起こった水の乱れが引き金になった可能性もあながち否定はできない。この気泡の効果を利用して鈍感な硝酸アンモニウム水溶液に気泡剤を混入することにより安全で安価なエマルジョン爆薬が産業用に活用されている。気体デトネーションの平面デトネーションの起爆、伝播理論が実験と異なるのはデトネーション波における反応帯でのマッハ反射による3次元構造と背後での渦の生成による不安定な流れに由来している。最近ではデトネーションは安全上好ましくないが、パルスデトネーションエンジンではこのような乱れが DDT を助長する性質が利用されている。

Fig.5 は土堤内の火薬庫で TNT 爆薬 1 トンが爆発した場合を想定したシミュレーションである。火薬庫の土堤は爆発事故が起こった場合飛散物による近辺での被害を緩和し、爆風を上空へ逃がす効果がある。しかし土堤から離れた位置ではマッハ反射による衝撃圧力の増大効果により爆風軽減効果は低くなる。また土堤上空へ爆風が伝播することにより気象条件によっては遠方での爆風効果を強める可能性がある。著者は北海道での爆風実験で数 km も離れた養鶏場の鶏が 500 羽近く死ぬという苦い経験をしたことがある。これは爆風による衝撃波が上空で反射回折して蒲鉾型のトタン屋根を叩き、驚いた鶏がパニックになったことによると言われている。当時は大雨が降るような気象変化が激しい状態で上空の大気の気温や気流の変化が激しかった。

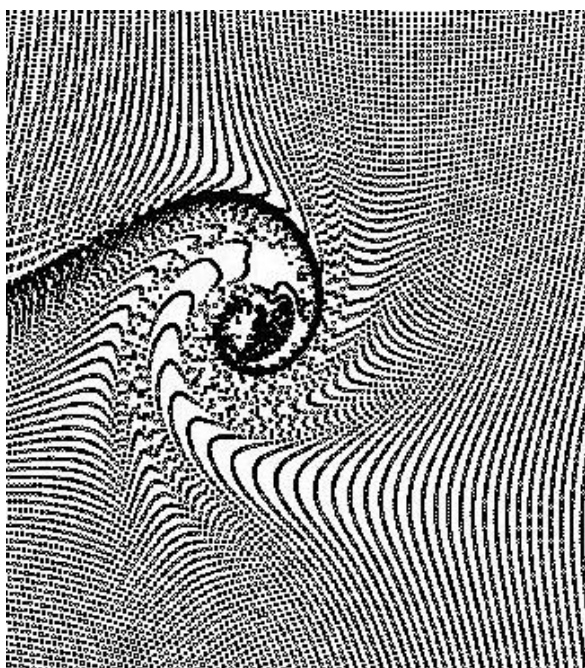


Fig.4 Void collapse by shock wave in solid.

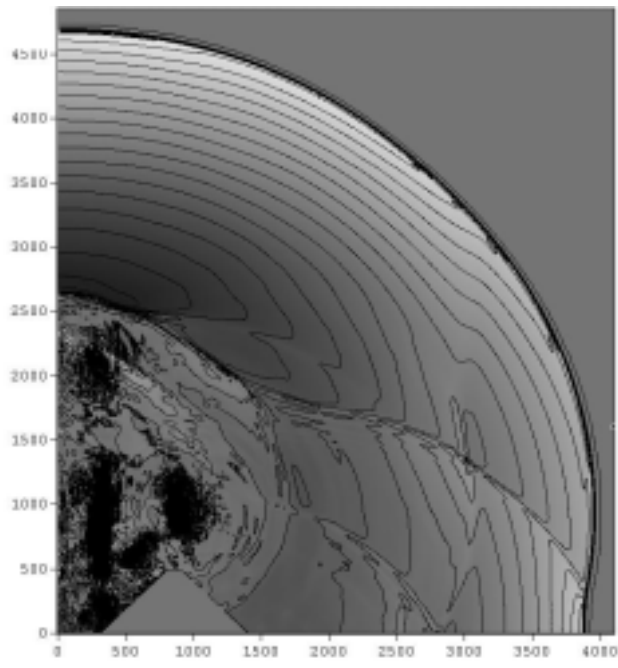


Fig.5 Blast wave interaction with banker.(unit cm)

爆発はデトネーションに限らず密閉空間での急激な燃焼によっても発生する。特に原子力施設は放射性物質の閉じこめ機能が優先されるため、内部で爆発が起こった場合は被害が大きくなる。最近の例では動燃東海アスファルト固化施設での火災・爆発事故、浜岡原子力発電所での配管破断事故が記憶に新しい。両方とも主要な事故原因は解明されており、動燃事故については本研究会でも消防研の長谷川等により火災原因について報告されている。Fig.6 は爆発事故

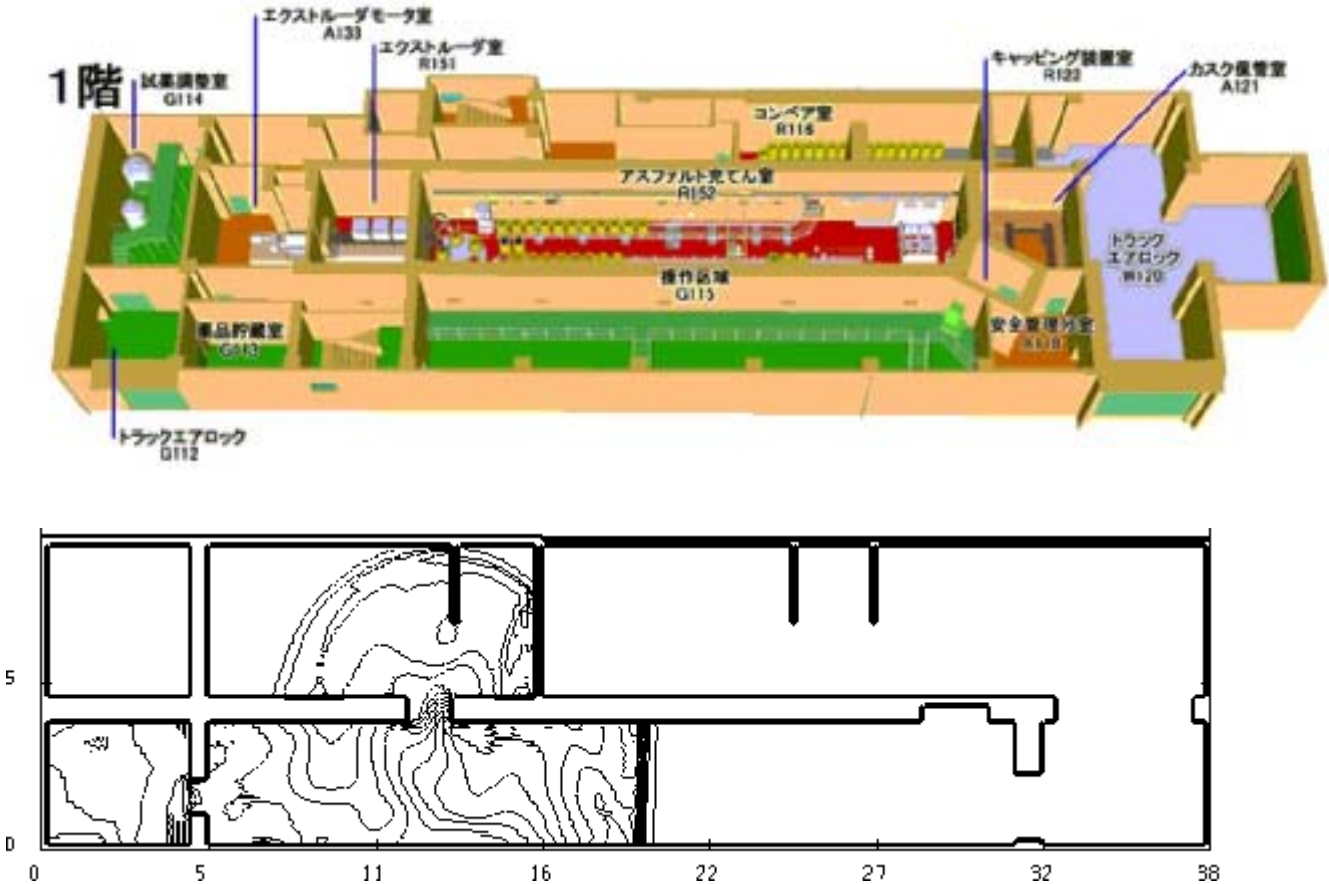


Fig.6 Simulation of explosion accident in reprocessing facility in PNC Tokai. (Courtesy by PNC)

が起こった施設と場所の推定のため行った爆風伝播における圧力の粗計算である。事故が起こった施設は地上4階、地下2階の堅固な建物で、事故当時は爆発が起こった場所は火災の発生した1階のアスファルト充填室とされたが内部の状況からエクストルーダ室の疑いがもたれた。しかし事故後半年間ほど内部への立ち入りができなかったため爆発の起きた場所の特定が困難であった。そこで爆発の起きた場所を想定してシミュレーションを行いエクストルーダ室で起こった爆発により隣のアスファルト充填室内の可燃性ガスが燃焼・爆発したものと推定された。しかし、エクストルーダ室には着火原が無く、2回目の充填室内での火災と同時に爆発が起きていることから着火場所は充填室という奇妙な事故であった。爆発した可燃性混合気も火災で発生した未燃ガスで成分については明確にはわかっていない。シミュレーションは爆発事故原因の手がかりを得るための有効な手段ではあるが、このような密閉室内では3次元空間内での衝撃波伝播についての解析が必要で、入力データの作成、境界条件の設定が極めて困難である。当時の計算機資源の制約もあって Fig.6 の側面図の他に断面についての計算も行い、被害状況から爆発場所と爆発量の推定を行ったが、シミュレーションでは衝撃波が扉を開けながら廊下

をまるで走るように伝播していき、予想しなかった場所で衝撃波が衝突する様子など事故状況の把握には有効であった。特に外開きの鉄製ドアが吹き飛ばされたことにより被害が大きくなっていて、扉の一部は施設の外に飛び散っていた。爆発の可能性のある部屋の扉は遠心力で留め金が外れて遠くまで飛散するので爆風による危害に比べると大きな負傷をする可能性がある。注意が必要である。

昨年起きた浜岡原発での爆発事故は中性子により分解した水から発生した酸素・水素が約 70 気圧、180 の状態で蓄積され、白金触媒効果により着火し爆燃状態からデトネーションへ転移した可能性が高いとされている。70 気圧の化学量論比の酸・水素のデトネーションは実在気体効果を考慮した計算によると速度 3000m/s、圧力 1600 気圧で温度は 5000K 近くに達するため圧力と同時に加熱による破壊効果が加わる。原子力施設の高放射性物質を取り扱う施設では放射線分解による水素ガスの蓄積を防ぐ必要があるため換気系のバックアップ用非常電源設備が設けられていて万全を期していると思われるが、シミュレーションを行うことは万が一の爆発に備えてのイメージトレーニングの意味でも有効である。

### 3. 今後の課題と展望

シミュレーション技術の課題としては不安定性問題、計算機資源、シミュレーションの前処理と後処理、及び長時間計算の安定性、信頼性があげられる。爆発・衝撃現象における不安定性については圧力、流れ速度および密度差等に起因するが現状のシミュレーション技術では定量的信頼性には問題が多く混相流とともに今後の課題である。計算機資源についてはこの数年間で CPU、メモリー、ディスクなどの性能の向上と並列処理技術の発展に伴い大規模計算が可能となった。また計算機が安価になり、家庭用に普及しているパソコンでも数年前の大規模計算が可能となってきた。3次元計算は入力データや境界条件の設定が困難なことと計算結果の処理量が膨大なためユーザフレンドリーな GUI(グラフィックユーザインターフェース)が必要不可欠である。将来的には家庭用テレビゲーム並みの GUI が身近になると予想される。長時間計算、特に多大の計算ステップが要求される計算については今後とも大きな課題である。爆発・衝撃のシミュレーションでは通常、格子点数は 1000 万程度が限界であり、銀河宇宙のように渦の中に渦が存在するような乱流問題の詳細解析は今後の DNS(Direct Numerical Simulation)の発展に期するところが大きい。地球温暖化予測等では 100 年先の長期間の予測シミュレーションが行われることもある。非定常現象のシミュレーションは 10~100 万 step 程度が限界で 100 年も先の計算をやるとなると刻み時間は 1 日程度が限度である。バタフライ効果のような「風が吹けば桶屋が儲かる」類の不安定性問題はシミュレーションでは必ずしも定量的な予測は期待できない。非平衡過程が含まれる場合には多くの課題があることは言うまでもない。実験データに依らず、全て理論解析のみで爆発衝撃現象をシミュレーションで予測することは我々にとって挑戦的な将来の課題である。その上で爆発に関わる正確な事故情報のデータベースは今後最も重要になる。間違いや事故はシミュレーションでは予測しにくいことにより起こることが多く、コロンブスの卵のようなものでそこから多くの新しい事実や発見が得られるのは多くの研究者の経験することである。

ここで例として取り上げたものはスーパーカミオカンデ事故を除き、著者が何らかの形で関与したものであるが、公式見解とは必ずしも一致するものではない。シミュレーションは多くの技法があり、不可能であるとかいった固定観念にとらわれない様々な視点から異なる手法を取り入れることにより問題を解決することが重要ではないだろうか。