

# 凝縮媒体中の衝撃波の反射に関する研究 (数値計算方法)

灘 光 陽<sup>1</sup>・本田 隆 志<sup>1</sup>

<sup>1</sup>第一工業大学教授 機械システム工学科 (〒899-4395 鹿児島県霧島市国分中央1-10-2)  
E-mail:y-nadamitsu@daiichi-koudai.ac.jp

高性能爆薬の水中爆ごうによって凝縮媒体中に発生した高圧の衝撃波を金属加工など工学的に利用する場合、加工目的に合わせ衝撃波の伝播・屈折・反射・回折・収束現象などを用いて、その強さや形状を適切に制御する必要がある。そのために筆者らは水、PMMAなどの凝縮媒体中の衝撃波現象を実験・理論・数値シミュレーションによって定量的に解明してきた<sup>(1),(2),(3)</sup>。

本報告では高性能爆薬の水中爆ごうによって凝縮媒体中に発生した衝撃波の伝播・反射・回折・収束現象を解明するために用いた数値シミュレーションについて述べる。

**Key Words** : Numerical Simulation, ALE Scheme, TVD Scheme, Condensed Matter, Underwater Explosion, Underwater Shock Wave

## 1. まえがき

衝撃波現象の数値シミュレーションは一般的に有限差分法がよく利用される。本研究の計算で対象とする爆薬の凝縮媒体中の爆ごう現象は、爆薬中を爆ごう波が伝播するとともにその後方の爆轟ガスが膨張し、それに接する水やPMMAの界面も移動する。このように界面が移動するような場を数値解析する場合、一般に任意の流体粒子に着目してその速度や加速度などの時々刻々の変化を観測するLagrangeの方法を用いるのが有効である。しかしながら、水やPMMA中の爆ごう現象は流れ場に大きな変形を伴うため、上述のLagrangeの方法では、しばしば解が破壊する。そこでこの方法と、速度や圧力などの変化を空間内の点の位置と時間の関数として取り扱うEulerの方法とを組み合わせたArbitrary Lagrangian-Eulerian(ALE)差分法<sup>(4)</sup>と陰的な方程式を解くことができるImplicit Continuous-fluid Eulerian(ICE)法<sup>(5)</sup>を組み合わせたSimplified Arbitrary Lagrangian-Eulerian(SALE)差分法<sup>(6)</sup>を用いて数値解析した(以下ALE差分法と呼ぶ)。また、爆轟生成ガスの膨張によって発生した膨張波は媒質中に発生した衝撃波の伝播現象に影響を与えるだけでなく、反射現象にも大きな影響を及ぼ

す。この影響を調べるために、実験では困難であるが数値計算では容易に得られる媒質中の一様な強さの平面衝撃波が斜衝突する場合の数値計算も行った<sup>(2)</sup>。この計算にはTotal Variation Diminishing(TVD)差分法<sup>(7),(8),(9)</sup>で行った。なお、本研究が対象とする凝縮系媒質の動粘度は小さく、そのために計算は非粘性で行った。本報告では筆者らの研究に採用したALE差分法、ならびにTVD差分法の概要を述べる。

## 2. 数値計算方法

### (1) 基礎式

非粘性・圧縮性二次元流れに対する保存則は質量、x、y方向の運動量、エネルギーについてそれぞれ以下の式で表せる。

連続の式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0$$

x方向およびy方向の運動量の式：

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} = - \frac{\partial(P+q)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y} = - \frac{\partial(P+q)}{\partial y}$$

エネルギーの式：

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho e u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho e v)}{\partial y} = -(P+q)H$$

ここでは  $x$  を半径方向座標、 $y$  を軸方向座標とする。円筒座標で  $r = x$ 、直角座標で  $r = 1$  である。また、 $u, v$  はそれぞれ  $x, y$  方向速度成分、 $p, \rho, q, e$  はそれぞれ圧力、密度、人工粘性圧力、単位質量あたりの内部エネルギーであり、 $H$  は速度散逸を表す。数値解析は非粘性、圧縮性二次元流れに対し質量、運動量、エネルギーの保存則を離散化し、状態方程式と組み合わせて行う。

## (2) ALE 差分法

ALE 差分法の特徴は、異なった媒質が存在しているような物理場も比較的容易に解析できるところにある。さらに陰解法が容易に適用でき、安定性の条件が陽解法に比べて大きく緩和され、計算時間が短縮できるという利点もある。

図-1 は計算格子 (●) と変数を示している。(i, j) は空間格子を示し、1~4 の番号を付している。4 つの格子点 (i, j), (i+1, j), (i+1, j+1), (i, j+1) で囲まれた領域がセルである。座標 (x, y) とその速度成分 (u, v) は格子点上に、そして圧力 (P)、密度 ( $\rho$ )、比内部エネルギー (e)、体積 (V)、セルの質量 (Mc) はセルの内部で定義する。セルの体積 (V) は次式で定義される。

$$V_{i+1/2, j+1/2} = \frac{1}{3} [(r_{i+1, j} + r_{i+1, j+1} + r_{i, j+1}) Area1 + (r_{i, j+1} + r_{i, j} + r_{i+1, j}) Area2]$$

ここで、 $r$  は円筒座標系で  $r = x$ 、直角座標系で  $r = 1$  である。Area1 は図-1 の格子番号 1, 2, 3 で囲まれた領域の面積、Area2 は格子番号 1, 3, 4 で囲まれた領域の面積であり、それぞれ次式で表せる。

$$Area1 = \frac{1}{2} [(x_{i, j+1} - x_{i+1, j+1})(y_{i+1, j} - y_{i+1, j+1}) - (x_{i+1, j} - x_{i+1, j+1})(y_{i, j+1} - y_{i+1, j+1})]$$

$$Area2 = \frac{1}{2} [(x_{i+1, j} - x_{i, j})(y_{i, j+1} - y_{i, j}) - (x_{i, j+1} - x_{i, j})(y_{i+1, j} - y_{i, j})]$$

そして、質量  $Mc$  は、

$$Mc_{i+1/2, j+1/2} = \rho_{i+1/2, j+1/2} V_{i+1/2, j+1/2} \text{ で定義される。}$$

格子点の質量は、その周りの 4 つのセルに対する質量がそれぞれ 4 分割されると仮定した次式を用いる。

$$Mc_{i, j} = \frac{1}{4} (Mc_{i+1/2, j+1/2} + Mc_{i-1/2, j+1/2} + Mc_{i-1/2, j-1/2} + Mc_{i+1/2, j-1/2})$$

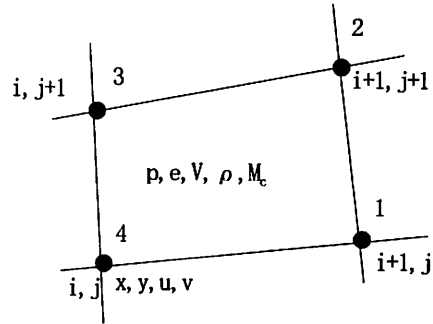


図-1 計算格子と変数の対応

ALE 差分法は次の三段階により構成されている。

### (a) 第一段階の計算

第一段階は時間的に  $\Delta t$  進んだ速度を Lagrange の方法で陽的に計算する。この段階の時間的に進んだ計算から得られる速度を ( $u_p, v_p$ ) とする。第一段階の計算は人工粘性と圧力による力が流体粒子に働くと考えることにより次のようになる。

衝撃波を含む問題に対しては、人工粘性による圧力  $q$  を格子幅に対応した衝撃波を与えるために用いる。これは運動エネルギーが過度に考慮されると衝撃波近傍で解が振動するので、この振動を抑えるために人工粘性項を付加する。人工粘性項により生じる圧力  $q$  は次式で表せる。

$$q_{i, j} = \min(0, H_{i, j}) [\lambda_0 \rho_{i, j} H_{i, j} Area]$$

ここで  $\lambda_0$  は任意の定数で、過度の粘性の影響を避けるため 0.25 以下である。Area はセルの面積を表し次式で示される。

$$Area = \frac{1}{2} [(x_{i+1, j+1} - x_{i, j})(y_{i, j+1} - y_{i+1, j}) - (x_{i+1, j} - x_{i, j+1})(y_{i, j} - y_{i+1, j+1})]$$

速度散逸  $H$  は次のように表せる。

$$H = \frac{1}{r} \frac{\partial r u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}$$

そして、図-1 中 (i, j) での速度は次式で定義される。

$$u_{T, i, j} = u_{i, j} - \frac{\Delta t}{2Mc_{i, j}} r_{i, j} q_{i, j} (y_{i, j+1} - y_{i+1, j})$$

$$v_{T, i, j} = v_{i, j} + \frac{\Delta t}{4Mc_{i, j}} q_{i, j} (r_{i+1, j} + r_{i, j+1}) \times$$

$$(x_{i, j+1} - x_{i+1, j})$$

圧力の影響による速度を計算する差分近似式は格子点 (i, j) に対し次式となる。

$$u_{T_{i,j}} = u_{i,j} - \frac{\Delta t}{2Mc_{i,j}} r_{i,j} P_{i,j} (y_{i,j+1} - y_{i+1,j})$$

$$v_{T_{i,j}} = v_{i,j} + \frac{\Delta t}{4Mc_{i,j}} P_{i,j} (r_{i+1,j} + r_{i,j+1}) \times (x_{i,j+1} - x_{i+1,j})$$

### (b) 第二段階の計算

第二段階の目的は時間的に進行した圧力勾配の影響で加速される速度を得ることである。新しい圧力は陰的に定義され、Newton-Raphson の繰り返しにより求められる。繰り返し計算は速度の初期の推量値として第一段階の値を用い、時間的に進行した圧力と陰的な圧力とが収束するまで次の(1)~(5)を繰り返し行う。

(1)  $u_p, v_p$  の値を用いて、

$$\tilde{x}_{i,j} = x_{i,j} + u_{T_{i,j}} \Delta t, \quad \tilde{y}_{i,j} = y_{i,j} + v_{T_{i,j}} \Delta t \quad \text{を計}$$

算し、その値から体積を求める。

(2) 体積変化より、密度、エネルギーをそれぞれ、

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \rho_{i,j} \frac{V_{i,j}}{\tilde{V}_{i,j}}$$

$$\tilde{e}_{i,j} = e_{i,j} + P_{T_{i,j}} \frac{V_{i,j} - \tilde{V}_{i,j}}{V_{i,j} \tilde{\rho}_{i,j}}$$

により計算し、時間的に進んだ圧力は状態方程式  $f(\rho, e)$  により求められる。すなわち、 $P_{i,j} = f(\tilde{\rho}_{i,j}, \tilde{e}_{i,j})$  である。

(3) 陰的な圧力の修正量  $\delta P$  は次式により求める。

$$\delta P_{i,j} = \frac{\tilde{P}_{i,j} - P_{T_{i,j}}}{S}$$

ここで、 $S$  は relaxation 因子で次式となる。

$$S_{i,j} = \frac{f(\rho_{i,j}, e_{i,j})^{m+1} - f(\rho_{i,j}, e_{i,j})^m + \Delta P}{\Delta P}$$

ただし、 $m$  は繰り返しの step を示している。

(4)  $P_T$  に  $\delta P$  を加えることにより陰的な圧力  $P_T$  を変化させる。

$$P_{T_{i,j}} = P_{T_{i,j}} + \delta P_{i,j}$$

(5) この圧力変化の影響による速度を次式により求める。

$$u_{T_{i,j}} = u_{i,j} - \frac{\Delta t}{2Mc_{i,j}} r_{i,j} \delta P_{i,j} (y_{i,j+1} - y_{i+1,j})$$

$$v_{T_{i,j}} = v_{i,j} + \frac{\Delta t}{4Mc_{i,j}} \delta P_{i,j} (r_{i+1,j} + r_{i,j+1}) \times (x_{i,j+1} - x_{i+1,j})$$

上述の(1)から(5)までの計算を以下の不等式を満たすまで繰り返す。

$$\frac{|\delta P_{i,j}|}{|P_{\max}|} \leq \varepsilon$$

ここで、 $\varepsilon$  は収束判定値を示し、 $P_{\max}$  は各計算時間における最大圧力値である。第二段階は計算の問題に応じて計算される。第一段階の陽的な Lagrange 計算で十分な場合もある。しかしながら、本研究が対象とするような衝撃波を含むような問題では時間刻みを小さくとり陽的に解くよりも、Newton-Raphson 法を計算に取り入れ陰的に解いた方が有利である。

### (c) 第三段階の計算

爆轟現象を含むような計算場では流体粒子に大きな動きが生じるために Lagrange の方法だけでは、しばしば解が破壊してしまう。格子の構成を維持するように、流体に対して格子点を動かすことにより歪んだ格子を修正することが可能である。格子点を流体に対して移動させるとき、周囲のセルの間に物理量の変化がなければならぬ。この物理量の変化を対流流束として扱うことで格子の再区分を可能にする。

格子の破壊が回避できるような再区分の相対速度 ( $u_p, v_p$ ) を格子点に定義する。格子点をこの速度で新しい位置に移動させると再区分後の座標は  $(n+1)$  を付して次式から得られる。

$$x_{i,j}^{n+1} = x_{i,j}^n + \Delta t \cdot u_{R_{i,j}}$$

$$y_{i,j}^{n+1} = y_{i,j}^n + \Delta t \cdot v_{R_{i,j}}$$

つぎに、図-1 に対し、例えば頂点4が右に動く場合、線分3, 4で隣接するセルに対し、体積変化  $\delta V$  は次式で表される。

$$\delta V = \frac{\Delta t}{3} (2r_{i,j} + r_{i,j+1}) [u_{R_{i,j}} (y_{i,j+1} - y_{i,j}) + v_{R_{i,j}} (x_{i,j} - x_{i,j+1})]$$

そして、隣接するセル間の質量の流束  $\delta Mc$  は次式で示される。

$$\delta Mc = \frac{1}{2} (\delta V + \alpha |\delta V|) \frac{Mc_{i+1/2, j+1/2}}{V_{i+1/2, j+1/2}} + \frac{1}{2} (\delta V - \alpha |\delta V|) \frac{Mc_{i-1/2, j+1/2}}{V_{i-1/2, j+1/2}}$$

これらは中心差分により計算されるが、そのままでは数値的不安定を引き起こす。この不安定を防ぐため、その量がより上流へ流出するように重みをつける。上式の  $\alpha$  はその重み係数を示している。

同様に、全エネルギーEの流束は次式で表される。

$$\delta(Mc \cdot E) = \frac{1}{2}(\delta V + \alpha|\delta V|) \frac{Mc_{i+1/2, j+1/2} \cdot E_{i+1/2, j+1/2}}{V_{i+1/2, j+1/2}} + \frac{1}{2}(\delta V - \alpha|\delta V|) \frac{Mc_{i-1/2, j+1/2} \cdot E_{i-1/2, j+1/2}}{V_{i-1/2, j+1/2}}$$

つぎに、運動量の対流流束は図-1のセルに対し、頂点4が動く場合、線分4, 2の表面に対する体積変化量 $\delta V$ は次式で表される。

$$\delta V = \frac{\Delta t}{3} (2r_{i,j} + r_{i+1, j+1}) \left[ u_{R_{i,j}} (y_{i+1, j+1} - y_{i,j}) + v_{R_{i,j}} (x_{i,j} - x_{i+1, j+1}) \right]$$

この体積内の質量は $(Mc_{i+1/2, j+1/2} / V_{i+1/2, j+1/2})\delta V$ であり、速度uに対する運動量の対流流束は次式で示される。

$$\delta(Mc \cdot u) = \frac{1}{2} \frac{Mc_{i+1/2, j+1/2}}{V_{i+1/2, j+1/2}} \left[ (\delta V - \alpha|\delta V|) u_{i,j+1} + (\delta V + \alpha|\delta V|) u_{i+1, j} \right]$$

本研究では、異種媒体を含む流れ場での強い衝撃波を取り扱い、境界の議論も行うために異種媒体間の境界の履歴が必要となる。また、計算に爆轟現象を取り入れる際に格子の再区分が必要となる。このような理由で爆轟現象を含む場合にはALE差分法で数値解析する。

### (3) TVD 差分法

Hartenが提案したTVD条件のもとでは、最大値の増加、最小値の減少、新たな極値発生は許されず、初期値問題の解の単調性が保たれる。総変化量TVはスカラー量 $u(t, x)$ の方程式 $u_t + f_x = 0$ の離散化に対し次式で示される。

$$TV \equiv \sum_j |u_{j+1} - u_j|$$

TVが時間とともに増加しないTVD条件は次のようになる。

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$$

ただし、

$$u_j^n = u(x_j, t^n) \text{を意味する。}$$

一次上流差分はTVD安定であり、二次以上の差分スキームは非線形の制限関数を導入することによってTVD安定化が計れる。つまり、制限関数によって、衝撃波では一次上流差分スキームを用い、他の領域では高次精度のTVD差分スキームに切り替えることによって、衝撃波では解の振動をなくすことができ、その他の領域では高精度の解を得ることができる。

非定常、二次元、非粘性流れを支配する基礎方程式は保存形で次のように表すことができる。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

Q, F, Gは以下に示すベクトルである。

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ u(E + P) \end{bmatrix}$$

$$G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ v(E + P) \end{bmatrix}$$

$$E = \rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2)$$

ここで、 $\rho$ は密度、 $u, v$ はx, y方向のそれぞれの速度、Eは全エネルギー、eは比内部エネルギー、pは圧力である。つぎに式(1)のx方向成分を離散化する。

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\hat{F}_{i+1/2}^n - \hat{F}_{i-1/2}^n) \quad (2)$$

nは時間ステップ、iは空間格子、 $\Delta x$ はX方向の格子幅、 $\Delta t$ は時間刻みを示す。式(2)の数値流束関数はChakrvarthy-Osher形式スキーム<sup>(10)</sup>を用いると次のようになる。

$$\hat{F}_{i+1/2}^n = h_{i+1/2} - \frac{(1-\phi)}{4} [d\tilde{F}_{i+3/2}^-] - \frac{(1+\phi)}{4} [d\tilde{F}_{i+1/2}^-] + \frac{(1+\phi)}{4} [d\tilde{F}_{i+1/2}^+] - \frac{(1-\phi)}{4} [d\tilde{F}_{i-1/2}^+] \quad (3)$$

式(3)の $h_{i+1/2}$ は一次上流差分の数値流束で、次式で示される。

$$h_{i+1/2} = \frac{1}{2} [F(Q_{i+1}) + F(Q_i)] - \frac{1}{2} \left[ \sum_{t=1}^4 \Delta F_{i+1/2}^{t+} - \sum_{t=1}^4 \Delta F_{i+1/2}^{t-} \right]$$

$\Delta F$ は流束差である。式(3)の[ ]内はminmod制限関数で大きさが制限される流束差で、二次・三次精度に対して次のように表される。

$$d\tilde{F}_{i+1/2}^{\pm} = \min \text{mod} [\Delta F_{i+1/2}^{\pm}, \beta \Delta F_{i-1/2}^{\pm}]$$

$$d\tilde{F}_{i-1/2}^{\pm} = \min \text{mod} [\Delta F_{i-1/2}^{\pm}, \beta \Delta F_{i+1/2}^{\pm}]$$

ここで、

$$\min \text{mod}(x, y) = \tilde{S} \cdot \max[0, \min\{x, \tilde{S}y\}]$$

$$\tilde{S} = \text{sign}(x)$$

また  $\beta$  は TVD スキームになるための定数で次のように制限されている。

$$1 < \beta \leq \frac{3-\phi}{1-\phi}$$

$\phi = 1/3$  は三次精度 TVD スキームとなり、 $\phi = -1$  は二次精度で Fully Upwind となる。さらに高次精度の Chakrvarthy-Osher 形スキームを次に示す。数値流束の勾配に 2 段階の minmod 制限関数を用いて、四次精度、五次精度の TVD スキームを得ることができる。式(3)の [ ] 内に対する 2 段階 minmod 制限関数は次のようになる。

$$\Delta \bar{F}_{i+1/2} = \min \text{mod}(\Delta F_{i+1/2}, \beta_1 \Delta F_{i+3/2}, \beta_1 \Delta F_{i-1/2})$$

$$\Delta \bar{F}_{i-1/2} = \min \text{mod}(\Delta F_{i-1/2}, \beta_1 \Delta F_{i+1/2}, \beta_1 \Delta F_{i+3/2})$$

$$\Delta \bar{F}_{i+3/2} = \min \text{mod}(\Delta F_{i+3/2}, \beta_1 \Delta F_{i-1/2}, \beta_1 \Delta F_{i+1/2})$$

$$\Delta^3 \bar{F}_{i+1/2} = \Delta \bar{F}_{i-1/2} - 2\Delta \bar{F}_{i+1/2} + \Delta \bar{F}_{i+3/2}$$

$$dF_{i-1/2}^+ = \Delta F_{i-1/2}^+ - \frac{(1-k)}{4} \Delta^3 \bar{F}_{i-1/2}^+$$

$$dF_{i+1/2}^+ = \Delta F_{i+1/2}^+ - \frac{(1+k)}{8} \Delta^3 \bar{F}_{i+1/2}^+$$

$$dF_{i+3/2}^- = \Delta F_{i+3/2}^- - \frac{(1-k)}{4} \Delta^3 \bar{F}_{i+3/2}^-$$

$$d\bar{F}_{i+1/2}^{\pm} = \min \text{mod}[dF_{i+1/2}^{\pm}, \beta_2 dF_{i-1/2}^{\pm}]$$

$$\tilde{d}\bar{F}_{i-1/2}^{\pm} = \min \text{mod}[dF_{i-1/2}^{\pm}, \beta_2 dF_{i+1/2}^{\pm}]$$

$$\min \text{mod}(x, y, z) = \bar{S} \cdot \max[0, \min(|x|, \bar{S}y, \bar{S}z)]$$

$$\bar{S} = \text{sign}(x)$$

この場合式(3)の  $\phi$  は 1/3 を用い、minmod 関数の  $\beta_1$ 、 $\beta_2$  は  $\beta_1 = 2$ 、 $1 < \beta_2 \leq 4$  に制限される。

また 3 階差分  $\Delta^3 F$  の係数に対し、 $k$  が 1/5 の時五次精度相当の結果が得られる。上記の数値流束関数を用いた TVD 差分近似計算は次に示す Strang type の次元分割法で行う。

$$Q^{n+1} = \left\{ Lx \left( \frac{\Delta t}{m} \right) Ly \left( \frac{\Delta t}{m} \right) Ly \left( \frac{\Delta t}{m} \right) Lx \left( \frac{\Delta t}{m} \right) \dots \right\}$$

ここで、 $Lx$ 、 $Ly$  はそれぞれ  $x$  方向、 $y$  方向の差分演算子を表し、 $\Delta t$  は時間を示している。また  $m$  は計算の繰返し数を示し、CFL 安定条件を満足するように定める。

#### (4) 状態方程式

本研究のような凝縮媒体中の爆轟を数値解析する場合、爆ごうガス、PMMA、水を含む計算場を取り扱わなければならない。そのために、それぞれの物質に応じた状態方程式が必要となる。一般に固体は流体とは異なり、静水圧成分以外の応力成分を考えなければならない。しかしながら、本研究の対象となるような爆薬の爆轟を伴う非常に強い衝撃波を含む現象においては、偏差応力が無視

でき、固体は流体的な振る舞いをする。このような場合、状態方程式における圧力  $P$  は静水圧成分が用いられる。圧力と比内部エネルギーについて、絶対零度で熱エネルギーが全く無視できる状態 ( $P_c$ ; cold pressure,  $e_c$ ; cold energy) と原子の熱エネルギーにもとづく状態 ( $P_T$ ; thermal pressure,  $e_T$ ; thermal energy) に分けて考える。圧力とエネルギーはそれぞれ、

$$P = P_c + P_T \quad (4)$$

$$e = e_c + e_T \quad (5)$$

で表せる。固体に対する熱エネルギー  $e_T$  は格子振動エネルギーと電子励起エネルギーからなると考えられる。 $v$  を比体積とすると、熱力学第一法則から熱量  $dq$ 、比内部エネルギー、仕事  $pdv$  の関係は、

$$dq = de + pdv$$

で示される。絶対零度で等温圧縮した場合、 $P_c(v)$  に対し上式から次式が成り立つ。

$$P_c(v) = - \left( \frac{\partial e}{\partial v} \right)_T = - \frac{de_c(v)}{dv} \quad (6)$$

完全気体の場合は  $\left( \frac{\partial e}{\partial v} \right)_T = 0$  となる。これは完全気体の比内部エネルギーが温度のみの関数であることを示す。

比体積に依存する  $P_c(v)$  に対し式(4)から次式が成り立つ。

$$p - p_c(v) = P_T = T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \quad (7)$$

ここで、熱力学的 Grüneisen 係数  $\Gamma$  を導入する。Grüneisen 係数  $\Gamma$  は一般に温度にも弱い依存性を持つことが知られているが、ほぼ体積のみで定まる量である。したがって、等容積変化に対し次式で与えられる。

$$\left( \frac{\partial P}{\partial e} \right)_v = \frac{\Gamma}{v}, \quad v = \frac{1}{\rho} \quad (8)$$

定容比熱  $C_v$  は次式で定義される。

$$C_v = \left( \frac{\partial e}{\partial T} \right)_v$$

$$\left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_v = \left( \frac{\partial P}{\partial e} \right)_v \left( \frac{\partial e}{\partial T} \right)_v$$

上式と式(8)を式(7)に代入すると次式が得られる。

$$p - p_c(v) = \frac{\Gamma}{v} C_v T \quad (9)$$

一方、式(5)に対し、

$$e - e_c = C_v T$$

を仮定すると、式(9)は

$$p - p_c(v) = \frac{\Gamma}{v}(e - e_c) \quad \text{となる。}$$

状態方程式における圧力  $P$  に静水圧成分のみを考慮すればよい場合、流体の衝撃波面前後で成り立つ Rankine-Hugoniot の関係式が適用できる。Grüneisen 係数  $\Gamma$  は体積にのみ依存するので、式(8)の左辺を等容積に対する Hugoniot 曲線からの「変化量」と解釈しても式(8)は成り立つ。したがって、衝撃圧縮による圧力と比内部エネルギーをそれぞれ  $P_H$ ,  $e_H$  とし、 $P_c$ ,  $e_c$  に置き換えると、

$$p = p_H + \frac{\Gamma}{v}(e - e_H) \quad (10)$$

が成り立つ。式(9)や式(10)を Mie-Grüneisen 式<sup>(11),(12)</sup>と呼ぶ。Mie-Grüneisen 係数  $\Gamma$  は本来原子の調和振動子系のエネルギー、あるいは固有振動数から求められるものである。そして、しばしば

$$\frac{\Gamma}{v} \cong \frac{\Gamma_0}{v_0}$$

と仮定されることが多い。これは  $\Gamma(v)$  が体積のみの関数で体積の減少とともに減少することによる。

#### (a) 水および PMMA の Mie-Grüneisen 状態方程式

流体の問題を数値解析する場合、質量、運動量、エネルギー保存式に状態方程式を組み合わせて計算を行う。媒質が気体の圧縮性流体に対しては一般的に理想気体の状態方程式が用いられる。また媒質が液体の場合は圧力と密度の経験的な状態方程式 Tait の式があるが、内部エネルギーが含まれていないため高い圧力では解の信頼性に欠ける。本解析の対象となる物理場は爆薬の爆轟を伴い、それぞれの媒質で発生する圧力は数(GPa)から数十(GPa)と非常に高い。そのため数値解析に用いる状態方程式は Mie-Grüneisen 状態方程式が適当であると考え採用している。Mie-Grüneisen 状態方程式は次のように導かれる。衝撃波の法線方向の速度  $U_s$  と衝撃波背後の流体粒子速度  $u_p$  に前述の経験的な線形関係を用いる。

$$U_s = C_0 + s u_p$$

衝撃波背後の圧力  $P_H$  は衝撃波前後の質量および運動量の保存式から得られる。

$$\text{質量の式: } \rho_0 U_s = \rho(U_s - u_p)$$

$$\text{運動量の式: } P_H - p_0 = \rho_0 U_s \times u_p$$

両式から、次式が得られる。

$$P_H = p_0 + \frac{C_0^2(v_0 - v)}{\{v_0 - S(v_0 - v)\}^2} \quad (11)$$

ここで、

$$v = \frac{1}{\rho}$$

である。また、エネルギー保存式は比内部エネルギー  $e$  を用いて、

$$e_H - e_0 = \frac{1}{2}(v_0 - v)(P_H + P_0) \quad \text{で示される。}$$

ここで、

$$e_H \gg e_0, \quad P_H \gg P_0$$

とすると次式を得る。

$$e_H = \frac{1}{2}(v_0 - v)P_H \quad (12)$$

となる。式(11), (12)を式(10)に代入し、整理すると、Mie-Grüneisen 状態方程式は、

$$P = \frac{\rho_0 C_0^2 \eta}{(1 - S\eta)^2} \left[ 1 - \frac{\gamma}{2\rho_0} \eta \right] + p_0 \quad (13)$$

のように表せる。ここで、

$$\eta = 1 - \frac{\rho_0}{\rho}$$

$$\gamma = \Gamma \rho_0$$

である。

#### (b) 爆薬の爆轟生成ガスの JWL 状態方程式

爆薬の爆轟生成ガスの状態方程式については、木原・疋田・田中の提案による KHT 状態方程式<sup>(13)~(16)</sup>、Becker-Kistiakowsky-Wilson (BKW) 状態方程式<sup>(17)</sup>、Lennard-Jones-Devonshire (LJD) 状態方程式<sup>(18)</sup>、ならびに Jones-Wilkins-Lee (JWL) 状態方程式<sup>(19)</sup>などによって与えられる場合も多い。特に KHT 状態方程式は精度が高く、また解析コードがすでに市販されており、利用するには非常に簡便である。しかし、これらの状態方程式を採用する場合、爆薬の組成が知られていなければならない。近年開発中の爆薬についてはその組成が明確にされていないものも多く、これらに対しては組成、初期密度、爆轟波の速度などが似通った爆薬の状態方程式を利用して数値解析しなければならず、解の精度に欠ける。JWL 状態方程式は Lawrence Livermore National Laboratory で各種の爆薬に対して、シリンダー膨張試験が行なわれ、試行錯誤計算でそのパラメータが得られている<sup>(20)</sup>。KHT 状態方程式などが爆発性物質およびその爆轟生成物の初期状態と熱力学データを必要とするのに対して、JWL 状態方程式は実験にもとづいた状態式であるためそれらの情報を必要としない。したがって、パラメータを求める手法を確立すれば様々な爆薬に対して容易に応用できるようになる。このような利点を考えて、本研究では爆轟生成ガスの状態方程式に JWL 状態方程式を採用している。均質な爆薬中を伝播するデトネーション波背後の爆轟生成ガスの膨張を等エントロピーと仮定すると次式が示される<sup>(19)</sup>。

$$P_S(V) = Ae^{-R_1 V} + Be^{-R_2 V} + CV^{-\omega-1} \quad (14)$$

ただし、 $V = \frac{\rho_e}{\rho}$  である。

式(14)の右辺第1項と第2項は分子の引斥と振動による干渉効果を表す。また、第3項の $\omega$ の範囲は $0.2 \leq \omega \leq 0.4$ である<sup>(2)</sup>。この第3項は $\omega=0.4$ の場合、

完全気体の等エントロピー過程の関係式に相当する。次に式(14)を用いてエネルギーならびに断熱指数 $\gamma(V)$ は次式で示される。

$$Es(V) = - \int P_S dV = \frac{A}{R_1} e^{-R_1 V} + \frac{B}{R_2} e^{-R_2 V} + \frac{C}{\omega} V^{-\omega} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \gamma(V) &= - \frac{d \ln P_S}{d \ln V} = - \frac{V}{P_S} \frac{dP_S}{dV} \\ &= \frac{V}{P_S} (AR_1 e^{-R_1 V} + BR_2 e^{-R_2 V} + C(\omega+1)V^{-\omega-2}) \end{aligned} \quad (16)$$

式(14)および式(15)を式(10)に代入するとJWL状態方程式は次式のように表せる。

$$p = A \left( 1 - \frac{\omega}{R_1 V} \right) e^{-R_1 V} + B \left( 1 - \frac{\omega}{R_2 V} \right) e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V} \quad (17)$$

### (c) 理論解析に用いる音速の式

媒質が完全気体に対する音速の式は熱力学的関係から容易に得られる。また、凝縮系媒質に対しても状態方程式が分かれば音速の式を得ることができる。本研究の数値解析に用いる状態方程式は媒質が水、PMMA、爆轟生成ガスのいずれに対しても、Mie-Grüneisenの状態方程式に基づいている。そこで、媒質が水ならびにPMMAに対して、理論解析に用いる音速の式はこのMie-Grüneisenの状態方程式に基づく式<sup>(2)</sup>を採用する。

音速を $C$ とすると、質量、運動量の式は次式で示される。

$$\text{質量の式: } \frac{d\rho}{\rho} = \frac{dV}{C}$$

$$\text{運動量の式: } dP = \rho C dV$$

上の2つの式から

$$C^2 = \frac{dP}{d\rho}$$

音波の通過によって生じる流体の状態変化は、等エントロピー変化とみなしてよいことが知られている。したがって、

$$C = \sqrt{\left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S}$$

完全気体の等エントロピー変化では、次式が成り立つ。

$$C = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}} \quad (18)$$

一方、媒質が凝縮媒体の場合次式となる。

熱力学第二の法則に対し、等エントロピーの場合次式が成り立つ。

$$\left( \frac{de}{dv} \right)_T = -P$$

今、上式の比内部エネルギー $e$ にMie-Grüneisenの状態方程式(10)を適用する。すなわち、

$$e = e_H + \frac{v}{\Gamma} (P - P_H)$$

となる。ここで、下添字HはHugoniotの値である。そして、上式から次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{de}{dv} &= -P = \frac{de_H}{dv} + (P - P_H) \frac{d}{dv} \left( \frac{v}{\Gamma} \right) + \frac{v}{\Gamma} \frac{dP}{dv} \\ &\quad - \frac{v}{\Gamma} \frac{dP_H}{dv} \end{aligned}$$

音速 $C$ を次式で整理する。

$$C^2 = \frac{dP}{d\rho} = \frac{dP}{dv} \frac{dv}{d\rho} = -v^2 \frac{dP}{dv}$$

$$\text{ここで、 } v = \frac{1}{\rho}$$

であり、 $e_H$ に式(12)を用いて次式が得られる。

$$C = \left[ -v^2 \frac{dP_H}{dv} \left\{ 1 - \frac{\Gamma(v_0 - v)}{v} \right\} + v^2 \frac{\Gamma P_H}{v} + v^2 (P - P_H) \left\{ \frac{\Gamma}{v} + \frac{d}{dv} \left( \frac{v}{\Gamma} \right) \right\} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

式(19)の[ ]内の第1項ならびに第2項はHugoniot曲線上の $P_H$ に従う項であり、第3項は $P_H$ からの圧力差に依存する項である。

式(19)に対し次式を用いて表示する。

$$P_H = \frac{C_0^2 (v_0 - v)}{[v_0 - S(v_0 - v)]^2} = \frac{C_0^2 \eta}{v_0 [1 - S\eta]^2}$$

$$v^2 \frac{dP_H}{dv} = - \frac{C_0^2 (1 - \eta)^2 (1 + S\eta)}{[1 - S\eta]^3}$$

$$\frac{\Gamma}{v} \cong \frac{\Gamma_0}{v_0}$$

ここで、 $\eta = \frac{v_0 - v}{v_0} = 1 - \frac{\rho_0}{\rho}$  である。したがって、音

速の式(19)は次のように整理される。

$$C = \left[ \frac{C_0^2(1-\eta)^2}{\{1-S\eta\}^3} \{1+\eta(S-\Gamma_0)\} + \Gamma_0(1-\eta)^2 \frac{P}{\rho_0} \right]^{1/2} \quad (20)$$

式(20)の P に  $P_H$  を適用すると  $P_H$  に依存する音速の式が得られる<sup>(19)</sup>。

$$C_H = \frac{C_0(1-\eta)[1+S\eta(1-\Gamma_0\eta)]^{1/2}}{[1-S\eta]^{3/2}} \quad (21)$$

前述のように、水ならびに PMMA 中の爆ごう現象の数値シミュレーションに適用する状態方程式は爆轟生成ガス、水ならびに PMMA に対し、Mie-Grüneisen の状態方程式を基本としている。したがって、理論計算に適用する音速の式はこの Mie-Grüneisen の状態方程式から求めた式(20)、(21)が採用できる。ただし、式(21)の適用は衝撃波近傍に限定される。

### 3. まとめ

この報告書では凝縮系媒質中の爆轟現象ならびに爆薬の爆轟によって水、PMMA 中に発生した衝撃波の反射現象を数値解析する場合に必要な基礎式を述べた。凝縮媒体中の衝撃波の反射現象を数値シミュレーションするための方法として水ならびに PMMA 中の爆轟現象に用いた ALE 差分法と一様な強さの平面衝撃波が斜衝突する場合などに使用した TVD 差分法について記述した。さらに、数値解析に必要な状態方程式として、水、PMMA に対しては Mie-Grüneisen の状態方程式、爆轟生成ガスには JWL 状態方程式を示した。また理論解析に必要な音速の式も記述した。音速の式は Mie-Grüneisen の状態方程式から得られる式を採用している。数値シミュレーション結果は次報で述べる。

#### 参考文献

- (1) 伊東繁, 灘光陽, 吉良章夫, 長野司郎, 藤田昌大, 本田隆志, 機論, 62-601, B(1996), 50-55.

- (2) 灘光陽, 藤田昌大, 伊東繁, 機論, 64-621, B(1998), 95-100.  
 (3) 灘光陽, 藤田昌大, 伊東繁, 火薬学会誌, 59-6, (1998), 302-309.  
 (4) Hirt, C. W., Amsden, A. A., Cook, J. L., J. Comput. Phys. 14, (1974), 227-253.  
 (5) Harlow, F. H., Amsden, A. A., J. Comput. Phys. 8. (1971), 197-213.  
 (6) Amsden, A. A., Ruppel, H. M., Hirt, C. W., LA-8095, UC-32(1980).  
 (7) Harten, A., J. Comput. Phys, 49, (1983), 357-393.  
 (8) Yee, H. C., Warming, R. F., Harten, A., J. Comput. Phys, 57, (1985), 327-360.  
 (9) Yee, H. C. and Harten, A. AIAA J. 25(1987), 266-274.  
 (10) Chakravarthy. S. R., Osher, S., AIAA paper 85-0363, (1985).  
 (11) 高山和喜編, 衝撃波ハンドブック、シュプリンガー・フェアラーク東京(1995).  
 (12) 田中克巳, 工業火薬, 37, 5, (1976), 222-232.  
 (13) 田中克巳, 「爆薬の爆轟特性解析」, 科学技術研究所報告(1983).  
 (14) 田中克巳, 工業火薬, 43, 4, (1982), 239-248.  
 (15) 田中克巳, 工業火薬, 43, 5, (1982), 335-343.  
 (16) 田中克巳, 工業火薬, 43, 5, (1983), 36-42.  
 (17) Mader, C. L., Detonation Properties of Equation of State of Becker-Kistiakowsky-Wilson, University of California press, (1979), 412-448.  
 (18) Mader, C. L., Numerical Modeling of Detonation, University of California press, (1979).  
 (19) Lee, E. L., Hornig, H. C. and Kury, J. W., UCRL-50422(1968).  
 (20) Lee, E., Finger, M. and Collins, W., Rept-UCID-16189(1973).  
 (21) Hornberg, Propell., Explos., Pyrotech., 11(1986), 23-31.  
 (22) 田中克巳, 工業火薬, 37, 6, (1976), 277-290.

## STUDIES ON THE REFLECTION OF SHOCK WAVES IN CONDENSED MATTER (THE NUMERICAL METHOD FOR ANALYZING THE REFLECTION PHENOMENA)

Yo NADAMITSU and Takashi HONDA

In the field of various metalworking processing that utilize the underwater shock wave generated by underwater explosion of high explosives, in order to make it used effectively, it is necessary that the underwater shock wave should be controlled most suitable to meet the demands of different processing technology. Therefore, it asks a thorough understanding of the process of underwater detonation as well as the pertinent phenomena of the propagation, transmission, refraction, reflection,



diffraction and convergence of underwater shock wave. In this thesis, the our studies on the shock waves phenomena arising from underwater detonation of high explosives in condensed matter of water and PMMA, were quantitatively conducted by means of photographic observation experiment, numerical simulation and theoretical analysis on the past. The numerical method for analyzing the detonation phenomenon of the explosives is an ALE computer code, which is suitable to the physical problem containing the different media. In this report, we describe the numerical analysis technique for analyzing the reflection phenomena on the detonation of high explosive.