Date: 2000. 5. 17.

タイトル TITLE	反応拡散系に現れる螺旋進行波について		
講演者 NAME	長山 雅晴	所属 INSTITUTION	京大・数理研

燃焼合成法 (SHS) は，元素粉末混合体の一端を熱することによって誘導される自己発熱伝播反応を用いて，高温セラミックス，金属間化合物，複合材料等の材料を生成する方法である． SHS では，進行波 (燃焼波) の定常伝播性を利用して均一な材料を生成するが，実験条件を変えると進行波の定常伝播性が失われ，不均一材料を生成することが知られている．このとき，進行波が振動しながら進行する現象 (脈動進行波) や，圧粉体の表面を進行波が螺旋状に進行する現象 (螺旋進行波) が報告されている．このような現象の数理的解析として，脈動進行波は定常進行波からの Hopf 分岐現象によって出現することが示されている．一方，螺旋進行波に対する発生機構の本質は明確となっていない．また，螺旋進行波が伝播するときの圧粉体内部の伝播形態もわかっていない．我々は，螺旋進行波の発生機構および伝播形態を理解するために，燃焼合成を記述するモデル方程式を用いて，円柱領域での進行波の様相が物理パラメータによってどのように変化するかを数値実験によって調べた．その結果，熱損失のない場合でも脈動進行波の進行波面は不安定化し，螺旋進行波が出現することがわかった．また，螺旋進行波の伝播形態は円柱側面付近では螺旋運動をしているが，中心付近は 1 次元脈動進行波的に伝播していることがわかった.

本研究では，温度 $T(t,\boldsymbol{x})$ と合成転換率 $\eta(t,\boldsymbol{x})$ によって記述される次の燃焼合成モデル方程式 (反応拡散方程式系) を用いた：

$$\begin{cases} C_p\rho\dfrac{\partial T}{\partial t} &= C_p\rho\ \alpha\Delta T + Q\Phi(T,\eta), \\ \dfrac{\partial \eta}{\partial t} &= \Phi(T,\eta), \end{cases} \qquad \text{in } \Omega,\ t>0. \tag{1}$$

ここで $\Phi(T,\eta)$ はアレニウス則を用いて次のように記述される：

$$\Phi(T,\eta) = \begin{cases} K_0\,(1-\eta)^N \exp(-\frac{E}{RT}) & T \geq T_{ig}, \\ 0 & T < T_{ig}. \end{cases} \tag{2}$$

ただし，C_p, Q, ρ, α, E, R, T_{ig}, K_0, N はそれぞれ，定圧比熱，反応熱，圧粉体密度，拡散係数，活性化エネルギー，気体定数，燃焼開始温度，反応速度，反応次数を表す定数である．方程式 (1) に含まれるパラメータについては，E のみを自由パラメータとし，他のパラメータは Ti-C 反応系の実験によって得られた値に固定した．
断熱境界条件を採用した数値計算の結果，次のことがわかった．
(I：1 次元定常進行波が安定な場合) 円柱領域 ($\Omega = \{(r,\theta,z) \mid 0 < r < R_0,\ 0 \leq \theta < 2\pi,\ 0 < z < Z_0\}$) における問題についても，進行波面は安定であり、定常進行波が現れる．
(II：1 次元脈動進行波が安定な場合) 円柱半径が小さいとき，進行波面は安定であり，脈動進行波が現れる．徐々に半径を大きくすると，進行波面が不安定化を起こし，円柱側面を進行波が螺旋状に進行する螺旋進行波が出現する．また，初期値の違いのみによって 2 重螺旋進行波も出現する．更に，これら螺旋進行波の角速度は一定ではなく，周期的に振動していることがわかった．
(III：熱損失効果を導入した場合) 断熱境界条件の下で数値計算を行った上記の (II) の場合には，反応後に螺旋模様は残らなかった．そこで，熱損失効果を導入することによって，反応が完全に終了した時点における螺旋模様の再現に成功した．
計算結果から，螺旋進行波の出現には進行波の非定常伝播性が重要であり，脈動進行波との相違は円柱半径の大きさであることがわかった．また，熱損失効果は反応終了後に現れる螺旋模様の再現に必要であることがわかった．この結果から，燃焼合成モデルに限らず 1 次元進行波が Hopf 分岐を起こし脈動進行波解が出現する方程式系ならば、円柱領域において螺旋進行波が形成されるのではいかと予想される．そこで脈

動進行波が出現する自己触媒モデル:

$$\begin{cases} u_t &= \Delta u + vu^m, \\ \\ v_t &= d\Delta v - vu^m, \end{cases} \quad \text{in } \Omega, \ t > 0. \tag{3}$$

を例にとり，数値実験を行った結果 (3)においても円柱領域上で螺旋進行波が出現することがわかった.