三次元デトネーションの管幅依存性に関する数値解析*

横江 博樹^{*1}, 杉村 忠良^{*2}Numerical Analysis on the Dependence on the Tube Width of
Three-Dimensional DetonationHiroki YOKOE^{*1} and Tadayoshi SUGIMURA^{*1} Department of Vehicle and Transport Machine Engineering, Meijo University,
1-501 Shiogamaguchi, Tenpaku-ku, Nagoya-shi, Aichi, 468-8502 Japan

This study is a numerical analysis on propagation behavior of a three dimensional detonation in a square tube and, influence on motion trajectories of high pressure region (shock triple points) due to the change of tube width was solved by a finite difference method which consists of the semi-implicit MacCormack method and TVD scheme in order to prevent numerical stiffness and Gibb's phenomena. Gas utilized in this computational study is the stoichiometric hydrogen and oxygen gas mixture composing 19 elementary reactions with 8 chemical species. It was found from numerical results that the behavior of shock triple points was classified in three kind of modes. Furthermore, it was seen that the aspect ratio of the detonation cell became nearly constant value for each mode.

Key Words : Numerical Simulation, Three-Dimensional Detonation, Aspect Ratio, Internal Structure, Detonation Cell

1. 緒 言

先行する衝撃波とその衝撃波により誘起された化学反応領域からなるデトネーションは、静止した反応性混合気中を超音速で伝播する燃焼波である。従来デトネーション研究は、大気に漏洩した可燃性混合気の引火・爆発による壊滅的な被害を防止するという安全工学上の面から推し進められてきた。近年、デトネーションのもつ極めて高いエネルギーを推進や発電に有効利用することが期待されてきており、その例としてパルスデトネーションエンジン(PDE)への応用研究⁽¹⁾⁻⁽⁴⁾などが行われてきている。しかしながら、デトネーションの詳細な伝播機構は解明されつつある段階であるものの、デフラグレーションからデトネーションへの遷移過程(DDT)⁽⁵⁾⁽⁶⁾や輸送効果の影響⁽⁷⁾、化学種の分布挙動、三次元デトネーションの伝播挙動など基礎現象のさらなる詳細な解明が待たれている。これらの基礎現象の内、特に奥行き方向の現象を含めた内部挙動の解明については、デトネーションの持つ高速性や非定常性、多次元性により実験的測定は困難を伴う。一方、最近の計算機の発展に伴って、数値解析的研究が盛んになってきている。

本論文が対象とする三次元デトネーションに関連した研究には、Strehlow⁽⁸⁾や Hanana et al.⁽⁹⁾がデトネーション伝播の内部挙動を実験から考察した例がある。Hanana et al.は管壁と管端の反射板に現れる鱗状および筋状すず膜模様から管内の衝撃波三重点の挙動と鱗状(セル)模様の形成機構を推定し、主に3つのパターンが存在することを示した。このようにしばしば実験的研究の対象となるセル形成機構に関連して、セル数やセル縦横比は使用混合気の反応特性を代表し、かつ臨界伝播直径に関連する重要な値であると言われている⁽¹⁰⁾。これらの値の変化についての数値的な二次元解析が多く示されている⁽¹¹⁾。また、三次元解析では、Washizu et al.の同軸円管内のデトネーション伝播解析⁽¹²⁾にはじまり、Oran et al.は1段階反応モデルを用いて矩形管内を伝播するChapman-Jouguet(C-J)デトネーションの解析⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾を行なった。Tsuboi et al.は詳細反応モデルを用いて、コーンスターチと酸

* 原稿受付 2013 年 2 月 14 日

^{*1} 名城大学大学院理工学研究科 (〒468-8502 愛知県名古屋市天白区塩釜口 1-501)^{*2} 正員, 名城大学理工学部

E-mail: sugimura@meijo-u.ac.jp

素の混合気中のデトネーション伝播の解析⁽¹⁵⁾や、矩形管や円管内を伝播するデトネーションについての化学種分布を含めた詳細な解析⁽¹⁶⁾⁻⁽²¹⁾を行なった。このように、デトネーションの本質である三次元性を解明するための研究は数多く行われてきている。これら三次元解析の多くは、初期条件を変化させることによって選択的に伝播挙動を得ている例が多いようである。本論文は、初期条件を変化させることなく、幾何学的条件である管幅のみを変化させることによって、実験的測定が困難な管内部の伝播挙動と関連付けて、伝播挙動の管幅に対する依存性を考察したものである。低圧下で行われる実験的研究に対応した議論も必要であるので、本研究では 0.1 気圧下を想定した解析が行われた。

2. 気体力学基礎方程式および数値計算法

2・1 基礎方程式

本研究では次のような仮定をする。流れは三次元非定常化学反応流で、気体は水素と酸素のモル比が 2:1 の化学量論混合気である。混合気は熱的状态方程式に従い、比熱は温度の多項式により与えられる。さらに、化学種としては H_2 , O_2 , O , H , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O の 8 種類を考慮し、表 1 に示される 19 組の素反応式が用いられる⁽²²⁾。輸送効果の粘性、拡散、熱伝導を考慮しないものとする。ただし、チャンネル幅が小さくなる程、粘性効果は顕著となり、デトネーションの伝播速度は低下する。実験においても伝播速度は低下していくことが知られている。デトネーション伝播に対する管幅の依存性は非粘性の場合に比べて大きくなるものと考えられるが、ここでは、管幅によってどのような伝播挙動モードが得られるかを調べたものである。粘性効果等を考慮した検討については今後の問題としたい。

以上の仮定に基づく気体力学方程式は以下のように保存形ベクトル表示で示すことができる。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial z} = \mathbf{S} \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{U}$ は保存変数ベクトル、 $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$, $\mathbf{G}$ はそれぞれ x, y, z 方向の流束ベクトル、 $\mathbf{S}$ は生成項である。

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \\ \rho_i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (E + p)u \\ \rho_i u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (E + p)v \\ \rho_i v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (E + p)w \\ \rho_i w \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_i \end{bmatrix}$$

ρ は密度、 u, v, w はそれぞれ x, y, z 方向の速度成分、 p は圧力、 ρ_i は化学種 i の密度、 ω_i は化学種 i の反応生成率である。ただし、多成分混合気における状態方程式および単位体積あたりの全エネルギー E は、それぞれ次式で示される。

$$p = \rho \left(\sum_{i=1}^N Y_i R_i \right) T \quad (2)$$

$$E = \rho H - p = \rho \left(\sum_{i=1}^N h_i Y_i \right) - p + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2 + w^2) \quad (3)$$

$$h_i = \Delta h_{f,i}^\circ + \int_{T^\circ}^T C_{p,i} dT \quad (4)$$

R_i , Y_i , h_i , $C_{p,i}$ および H はそれぞれ化学種 i の気体定数、質量分率、比エンタルピー、定圧比熱および全エンタルピーである。

2・2 化学反応モデル

表 1 には林らによって開発された酸素-水素反応機構⁽²²⁾を示す。著者らはこれまで、林らのモデル⁽²²⁾, Modified

Jachimowski model⁽²³⁾, Petersen and Hanson model⁽²⁴⁾を取り扱ってきた。これらのモデルの中で温度(1000/T)に対する着火遅れの挙動について, Ar で希釈された場合を含めた実験結果に最もよく対応する傾向を示すのは林らのモデルおよび Modified Jachimowski model であった。安全工学として, デトネーション発生に関連した広域問題においてはこれらのモデルが適していると考えられる。さらに, 三体反応の取り扱いが簡便であり, これまでも林らのモデルを使用してきたので, 本解析にもこれを適用している。

Table1 Elementary reactions and parameters

(Unit : cm ³ -mole-sec-kcal)				
(k)	Chemical reaction	A _k	σ _k	E _{ak}
(1)	H+O ₂ =O+OH	6.00E14	0.00	16.790
(2)	O+H ₂ =H+OH	1.07E04	2.80	5.921
(3)	OH+H ₂ =H+H ₂ O	7.00E12	0.00	4.400
(4)	O+H ₂ O=OH+OH	1.50E10	1.14	17.190
(5)	H ₂ +M=H+H+M	2.90E18	-1.00	104.330
(6)	O+O+M=O ₂ +M	6.17E15	-0.50	0.0
(7)	O+H+M=OH+M	1.00E15	0.00	-0.497
(8)	H+OH+M=H ₂ O+M	8.80E21	-2.00	0.0
(9)	H+O ₂ +M=HO ₂ +M	6.76E19	-1.42	0.0
(10)	HO ₂ +H=H ₂ +O ₂	2.50E13	0.00	0.693
(11)	HO ₂ +H=OH+OH	2.51E13	0.00	1.910
(12)	HO ₂ +O=OH+O ₂	2.00E13	0.00	0.0
(13)	HO ₂ +OH=H ₂ O+O ₂	1.20E13	0.00	0.0
(14)	HO ₂ +HO ₂ =H ₂ O ₂ +O ₂	1.82E12	0.00	0.0
(15)	H ₂ O ₂ +M=OH+OH+M	3.19E17	0.00	47.100
(16)	H ₂ O ₂ +H=H ₂ O+OH	3.20E14	0.00	9.000
(17)	H ₂ O ₂ +H=H ₂ +HO ₂	4.79E13	0.00	7.950
(18)	H ₂ O ₂ +O=OH+HO ₂	9.54E06	2.00	3.970
(19)	H ₂ O ₂ +OH=H ₂ O+HO ₂	1.00E13	0.00	1.800

(M : third body)

化学種の生成率 ω_i は, 表 1 に示される素反応式とパラメータを用いて式(5)(6)によって求められる。

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{19} (v''_{ik} - v'_{ik}) \left(k_{fk} \prod_{j=1}^N C_{M_j}^{v'_{jk}} - k_{bk} \prod_{j=1}^N C_{M_j}^{v''_{jk}} \right) \quad (5)$$

$$k_{fk} = A_k T^{\sigma_k} \exp\left(-\frac{E_{ak}}{R_u T}\right), \quad k_{bk} = k_{fk}/K_c \quad (6)$$

ここで, W_i および ω_i は, それぞれ化学種 i の分子量および反応生成率を表す。反応生成率を求める式(5)中の, v'_{ik}, v''_{ik} は反応物質および反応生成物の化学量論係数を示す。 C_{M_j} は化学種 j のモル濃度である。さらに, 前進および後退反応速度定数 k_{fk} と k_{bk} は, それぞれ式(6)で示される修正 Arrhenius 型関係式と濃度平衡定数 K_c により求められる。 R_u は一般ガス定数である。

2・3 計算スキーム

偏微分方程式(1)は二次精度を持つ MacCormack 法により差分近似された。ただし, 数値計算における硬直性を回避するために, 化学反応項のみを陰解法によって解く半陰解法が用いられた⁽²⁵⁾。

$$\mathbf{D}_{i,j,k}^n \Delta \mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} = -\frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{E}_{i+1,j,k}^n - \mathbf{E}_{i,j,k}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (\mathbf{F}_{i,j,k+1}^n - \mathbf{F}_{i,j,k}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta z} (\mathbf{G}_{i,j,k+1}^n - \mathbf{G}_{i,j,k}^n) + \Delta t \mathbf{S}_{i,j,k}^n \quad (7)$$

$$\mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} = \mathbf{U}_{i,j,k}^n + \Delta \mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} \quad (8)$$

$$\mathbf{D}_{i,j,k}^n \equiv \left\{ \mathbf{I} - \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{S}_{i,j,k}}{\partial \mathbf{U}_{i,j,k}} \right)^n \right\} \quad (9)$$

$$\mathbf{D}_{i,j,k}^{(1)} \Delta \mathbf{U}_{i,j,k}^{(2)} = \frac{1}{2} \left\{ -\Delta \mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{E}_{i,j,k}^{(1)} - \mathbf{E}_{i-1,j,k}^{(1)}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (\mathbf{F}_{i,j,k}^{(1)} - \mathbf{F}_{i,j-1,k}^{(1)}) - \frac{\Delta t}{\Delta z} (\mathbf{G}_{i,j,k}^{(1)} - \mathbf{G}_{i,j,k-1}^{(1)}) + \Delta t \mathbf{S}_{i,j,k}^{(1)} \right\} \quad (10)$$

$$\mathbf{U}_{i,j,k}^{(2)} = \mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} + \Delta \mathbf{U}_{i,j,k}^{(2)} \quad (11)$$

$$\mathbf{D}_{i,j,k}^{(1)} \equiv \left\{ \mathbf{I} - \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{S}_{i,j,k}}{\partial \mathbf{U}_{i,j,k}} \right)^{(1)} \right\} \quad (12)$$

式(7)～(12)は偏微分方程式(1)が離散化された差分方程式である。ここで、 n はタイムステップ数であり、添え字 i, j, k は x, y, z 方向における格子点座標である。また、 $\mathbf{D}$ は半陰解法を導入するにあたり、反応と流れのタイムスケールを同じオーダーにする役割を持つ Preconditioning Matrix である。

さらに、不連続面での数値的振動を抑えることを目的とする人工粘性項として、Harten-Yee 型の TVD スキームが用いられた。

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{i,j,k}^{n+1} = \mathbf{U}_{i,j,k}^{(2)} &+ \left[\mathbf{R}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{(2)} \Phi_{i+\frac{1}{2},j,k}^{(2)} - \mathbf{R}_{i-\frac{1}{2},j,k}^{(2)} \Phi_{i-\frac{1}{2},j,k}^{(2)} \right] + \left[\mathbf{R}_{i,j+\frac{1}{2},k}^{(2)} \Phi_{i,j+\frac{1}{2},k}^{(2)} - \mathbf{R}_{i,j-\frac{1}{2},k}^{(2)} \Phi_{i,j-\frac{1}{2},k}^{(2)} \right] \\ &+ \left[\mathbf{R}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{(2)} \Phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{(2)} - \mathbf{R}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{(2)} \Phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{(2)} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

また、 Δt は次式で示される CFL 条件により決定された。 C_f はクーラン数であり、ここでは 0.5 とした。

$$\Delta t = C_f \cdot \min \left\{ \frac{\Delta x}{(|u| + a)_{\max}}, \frac{\Delta y}{(|v| + a)_{\max}}, \frac{\Delta z}{(|w| + a)_{\max}} \right\} \quad (14)$$

3. 計算領域および初期条件

計算領域の概略図を図 1 に示す。計算の初期条件として、一次元定常デトネーションの解が計算領域のチャンネル幅方向に一様に配置された。この ZND 構造をもった一次元 Chapman-Jouguet (C-J) デトネーションは、次のようにして求められた。仮定した伝播速度 u と初期状態値から、衝撃波波面直後の状態を求める。これを出発点として、反応項を含む 1 次元基礎方程式を 4 段階 Runge-Kutta 法を用いて積分し、 $u=a$ となる C-J 状態を得るまで計算を繰り返し、C-J 速度 u_{CJ} を求める。詳細は文献 26 に示されている。得られた圧力と温度分布を図 2 に示す。図 2 中の L は三次元計算を行う領域の管の長さであり、図 1 中の $4a$ に相当する。一次元計算では、格子幅を $1\mu\text{m}$ として計算を行った。一次元定常デトネーションの前方には未燃混合気として圧力 $10.1\text{kPa}(0.1\text{atm})$ 、温度 298.15K の水素酸素化学量論混合気を配置した。一次元定常デトネーション波面のすぐ後方に擾乱を与えることにより、衝撃波三重点を有する三次元波面構造を数値的に得た。擾乱を与える方法には様々な方法があるが、ここでは、未燃混合気のスポットを波面後方に挿入することで横波を発生させる方法を用いた。衝撃波の後方に与えるスポットは、定常状態になるまでの時間を少なくするためにできるだけ小さ

Fig.1 Computational domain (● : Virtual grid points ,
● : Wall grid points , ● : Inner grid points)

Fig.2 Initial distribution of one-dimensional
ZND C-J Detonation

Table2 Comparison of Velocity, Pressure and Temperature of C-J detonation

	This study	AISTJAN	(difference)
Detonation Velocity [m/s]	2715.2	2715.4	(0.008%)
Pressure [kPa]	183.72	175.80	(4.50%)
Temperature [K]	3280.0	3277.4	(0.080%)

なサイズを与えることが望まれる。また、本研究は管幅依存性について検討するものであり、擾乱による影響を最小限に抑える必要がある。よって、初期の空間分布は図1のように擾乱を $1 \times 1 \times 20$ グリッドで固定として管の中央に配置し、管幅依存性を検討するために、管幅を変化させても初期条件は変化しないものとした。

境界条件としては、流入条件側の仮想格子点、壁面格子点、内部格子点の3点には未燃混合気に対応する物理量の初期値が与えられ、上流から波面速度で未燃混合気が入る移動座標系で解いた。すなわち、波面が一定箇所に存在し続けるような、波面座標系によって解かれた。流出条件である管端の仮想格子点には1次の外挿が用いられた。外挿による擾乱がデトネーションの波面と干渉することを防ぐため、管の長さは管幅の4倍にとられた。また、管の壁面には鏡面反射条件が適用された。

表2はC-Jデトネーションの伝播速度、圧力および温度について、著者の解析によって算出された値と化学平衡計算(AISTJAN)⁽²⁷⁾により求められた値とを比較したものである。伝播速度と温度についてはほぼ一致している。圧力についても数%以内で一致しており、この差は非定常解析に影響を与えるものではないと考えられるので、この一次元ZND構造をもつC-Jデトネーションの解を初期条件として配置した。

本解析の初期圧力は10.1kPaであり、使用した反応モデルにおける燃料に対する半反応距離 $l_{1/2}$ は0.478mmである。設定された格子点間隔は、 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.09\text{mm}$ であり、半反応距離の中に格子点が5点存在する。初期圧力が高い時に比べて低い時には格子幅を大きくとることができ、本研究では初期圧力が低いので、計算コストを抑えることができた。また、格子の形状による誤差を防ぐために、流れ場全体にわたって均一なグリッドシステムが配置された⁽⁷⁾。

4. 解析結果ならびに考察

4.1 伝播挙動モードの断面依存性

定常伝播となったデトネーション波面に存在する衝撃波三重点の挙動が管の管幅に対してどのような依存性を持つかについて明らかにした。そこで、縦横比を1に固定し、管幅を0.99~4.95mmの範囲内で数値解析を実行した。また、本研究では半反応距離(燃料である水素の質量分率が平衡値に対して半分になる距離) $l_{1/2}$ で割った無次元の管幅 $a/l_{1/2}$ で議論することとした。

Table3 Classification of propagation behavior due to the change of cross section

Grid number	Tube wide a [mm]	$a/l_{1/2}$	Behavior	
12 ~ 18	0.99 ~ 1.53	2.35 ~ 3.63	(a)	Corresponding to Figs.3 and 4
19 ~ 21	1.62 ~ 1.80	3.85 ~ 4.28	(b)	
22 ~ 25	1.89 ~ 2.16	4.49 ~ 5.13	(c)	
26 ~ 33	2.25 ~ 2.88	5.34 ~ 6.84	(d)	
34 ~ 40	2.97 ~ 3.51	7.05 ~ 8.34	(e)	Corresponding to Figs.5 and 6
41 ~ 56	3.60 ~ 4.95	8.55 ~ 11.76	(f)	

表3は管幅の変化に、衝撃波三重点の挙動モードの変化を対応させたものである。計算結果より、管幅が $a=2.35 \sim 11.76 l_{1/2}$ 範囲内において、6つの挙動モードを示している。これらの挙動モードは管幅を拡大するにつれて変化していくが、各モードの存在し得る管幅には許容範囲が存在することが分かった。

Fig.3 Trajectory of triple points in cross sections of $a=2.35\sim 5.13 l_{1/2}$

Fig.4 Behavior of triple points moving through the inside of tube (Density distribution)

図3は、壁面にできた煤膜を再現したもの（左側）と管内における高圧部の軌跡（右側）である。これらは、三重点に相当する高圧領域の軌跡である。すなわち、各格子点で初期圧力により無次元化された圧力値の最大値を記録することにより求められた。

図3(a)に示すのは衝撃波三重点が管内をスピしながら伝播するモードである。最も低次であり、デトネーションを維持する上での臨界モードである。このモードは管幅が $a=2.35\sim 3.63 l_{1/2}$ の範囲で現れた。衝撃波三重

点は1つのみであり、管内を波面後方から見て反時計回りにおよそ45度の角度でスパイラル状に伝播している。また、図3(a)右図から壁面中央の圧力が最も高くなっていることが分かる。これより、矩形管においては三重点の挙動は壁面の中央を行き交うような、図4(a)の実線矢印で示される挙動であると考えられ、壁面内側に沿うように移動する円管内をスピニングして伝播する場合とは差異がある。なお、図4は解析結果から得られた波面上の動画を観察することにより、衝撃波三重点の動きを分析したものである。

図3(b)に示すのは、挙動(a)の次に低いモードであり、管幅に対して半分幅のセルが現れるモードである。ただし、セルの中央の管壁面には筋状の高圧部軌跡 (slapping wave) が存在している。このモードは、 $a=3.85\sim4.28\ l_{1/2}$ の範囲で現れた。衝撃波三重点は1つであり、管の対角線上を往復運動しながら伝播する。マッハシステムと入射衝撃波との交差線の挙動について、上下方向と左右方向に運動するそれぞれの交差線の位置関係が管の対角線を軸として線対称であることが分かる。衝撃波三重点が管の角に到達したとき、この交差線は管壁に衝突し slapping wave として現れるものと考えられる。

図3(c)に示すのは、挙動(b)の次に低いモードであるが、壁面上のすす膜模様から判断すると、(b)と同じく管幅に対して半分幅のセルが現れるモードである。ただし、(c)では slapping wave が出現しないことや、セルの長さが(b)と比べて短いなどの差異が認められた。図3(c)右図より、三重点は4つであり、壁面を伝って運動し、対角線上の管の角で衝突することが分かる。この三重点の挙動から、図4(c)のように交差線が対角方向に動くと考えられる。三重点が管の角に到達したとき、交差線は管の対角線上に位置するから、管の壁面に slapping wave が現れない。

管断面積の大きさによる挙動モードの変化について考える。デトネーションが残すセルサイズは混合気の初期圧力、初期温度、混合気の種類と当量比などに依存する1つの物性値と考えることができる。本解析では、管の断面積を変化させること以外には初期条件は同一であるから、形成されるセルサイズも同一となる。挙動(c)の時、セルは管の壁面上における角と角の間の三重点往復運動軌跡により形成される。しかし、管幅を狭くしていくと、断面積が小さくなるにもかかわらず、セルサイズは同一であるから三重点はそのセルサイズを満たすべく運動距離を維持しようとして、対角線上を運動するようになると考えられる。その結果が挙動(b)である。さらに断面積が小さくなると、同じサイズのセルを形成しうだけの三重点の直線的な運動距離が存在しなくなる。ここで、三重点があるポイントから運動して同じポイントに戻ってくるまでを1サイクル

(d) Four spins in a tube

(e) One cell with slap pattern in tube width

(f) One cell in tube width

Fig.5 Trajectory of triple points in cross sections of $a=5.34\sim 11.76 l_{1/2}$

(d) Four spins in a tube

(e) One cell with slap pattern in tube width

(f) One cell in tube width

Fig.6 Behavior of triple points moving through the inside of tube (Density distribution)

として、その軌跡が半セルだとすると、スパイラルを描いて三重点が一周するという1サイクルが、直線的に運動し得なくなった運動距離を満たすものと思われる。それが、挙動(a)であり、幾何学的に、直線のおよび曲線的にもこれ以上の運動距離を得ることができないから、このモードが臨界モードであると解釈できる。

図5(d)に示すのは管内で4つの衝撃波三重点がスパインしながら伝播していくモードである。この挙動(d)は管幅に対して半分幅のセルから1つのセルへと成長する遷移過程であると思われる。このモードは断面積が $a=5.34\sim 6.84 l_{1/2}$ の範囲で得られた。図5(d)右図より、4つの衝撃波三重点がスパイラルを描きながら伝播しており、波面上の動画を分析することによって、図6(d)のような挙動を示すことが分かった。

図5(e)に示すのは、挙動(b)のセル模様が管幅に対して半分から1つになったモードである。挙動(b)と同様にセルの中央の管壁面にはslapping waveが存在している。このモードは、 $a=7.05\sim 6.84 l_{1/2}$ の範囲で現れた。図5(e)右図より、三重点および交差線の挙動は図6(e)のようになることは、幾何学的考察より明らかである。衝撃波三重点は4個存在し、管中心と管の角を往復運動するものが存在する。このとき、交差線が壁面と接触し、筋状のすす膜を描かせていると考えられる。交差線の挙動について、上下方向と左右方向に運動する交差線の位置関係および移動速度が同じであることが分かる。

図5(f)に示すのは、挙動(c)のセル模様が管幅に対して半分から1つになったモードであり、すす膜の様子は挙動(e)と同様である。ただし、(f)ではslapping waveが出現しないことや、セル模様の長さが(e)と比べて短いなどの差異が認められる。このことは、挙動(b)から(c)への変化と同じ性質を持つ。さらに、中心方向に向かう三重点の動き方も(e)と(f)では違うことが分かった。図5(f)右の図より、三重点は12個であり、壁面を伝って管の角と管壁中央を往復するものと、管中心と管壁中央を往復するものがあることが分かる。この三重点の

挙動から、図 6(f)のように交差線が対角方向に動くと考えられる。三重点が管の角に到達したとき、交差線は管の対角線上に位置するから、管の壁面に *slapping wave* が現れない。

ここまで 6 パターンの三重点挙動モードを示したが、挙動(a)と(d)は上下方向と左右方向の交差線の動きが同期していないという点で共通しており、Hanana et al.⁽⁸⁾が示す *rectangular out of phase(Rb) mode* の性質に類似している。また、挙動(b)と(e)は交差線の動きが上下方向と左右方向で同期し、対角線上を往復運動する三重点が存在する。挙動(e)は(b)の三重点挙動を上下方向と左右方向にそれぞれ 2 倍に反転させたものに相当すると考えることができる。さらに、挙動(c)と(f)は交差線が対角上を往復しており、壁面上の三重点挙動に着目すると、挙動(f)は(c)の挙動を 2 倍に反転したものであることが分かる。これらについて、挙動(b),(e)と挙動(c),(f)はそれぞれ Hanana et al.⁽⁸⁾が示す *rectangular in phase(Ra) mode* と *Diagonal (D) mode* の挙動に一致している。このことから、三重点挙動の性質は 3 つのパターンに収まると考えられ、チャンネル幅の拡大によって衝撃波三重点の数は増大し、セルや三重点の挙動が反転する性質から、チャンネル幅の拡大に応じて三重点挙動モードは遷移していくが、この 3 パターンを繰り返すものと考えられる。

衝撃波三重点の挙動および伝播速度、最大圧力の振幅が規則的になるところをもって定常状態と判断し、定常状態となったデトネーションの伝播速度を C-J 速度で割った無次元量で表した履歴を図 7 に、最大圧力履歴を図 8 に示す。P_Nは初期条件として配置された 1 次元 C-J デトネーションにおける von Neumann spike の値 (305.7kPa)である。伝播速度は C-J 速度の 1.03 倍ほどであり、C-J 速度に近い値を示すことが分かる。最大圧力履歴の振幅は、挙動(b),(e)と(f)で大きく現れている。(b)と(e)は交差線が管壁と衝突することによるもの、(f)は 1 箇所衝突する三重点の数が増加したことによるものと考えられる。

Fig.7 Fluctuation of detonation velocity

Fig.8 Fluctuation of maximum pressure at the shock front

4.2 セル構造の断面依存性

図 9 は、チャンネル幅に対するセルの縦横比 ($\lambda=L/a$) である(図 12(i)). ここでは、*slapping wave* を伴う cell mode である挙動(b)と(e)および、*slapping wave* を伴わない挙動(c)と(f)について管壁に現れるセルの縦横比が示されている。*slapping wave* を伴わない cell mode(c)と(f)では、セルの縦横比が 1.6 程の値であった。Strehlow⁽²⁸⁾は実験から、セルの縦横比は 1.67 前後の値を与えることを示している。本結果は、この Strehlow の実験値とよい一致を示している。一方、*slapping wave* を伴う cell mode のセルの縦横比は 2.2 程の一定値をとる。この値は 1.67 なる値と離れるが、前述したように、*slapping wave* を伴う場合には内部挙動に関して対角線上を往復運動する衝撃波三重点を有することを考慮しなければならない。図 10 では、*slapping wave* を伴う場合のみセル幅を対角線長さとした場合のセルの縦横比 ($\tilde{\lambda}=L/\tilde{a}=L/\sqrt{2}a$) が示されている(図 12(ii)). この場合、セルの縦横比は *slapping wave* の有無に関わらず 1.6 程の値である。これはチャンネル幅に依らず Strehlow の実験値とよい一致を

Fig.9 The aspect ratio of the cell drawn on the wall surface of tube

Fig.10 The aspect ratio of the cell drawn on the wall surface of tube

Fig.11 Cell length of the cell to tube width

Fig.12 Schematic diagram of aspect ratio

示しており, slapping wave を有する場合には対角線上を往復する三重点がセル幅を決定することが, セルの縦横比という観点からいえる. さらに, このことは図9においてセルの縦横比が異なることについても幾何学的に正しいことを証明する. 以上のことから, 実験的研究において, slapping wave を観測することのできない開放写真を用いる場合でも, そのセルの縦横比から内部挙動を推定することが可能であると考えられる.

図11にはチャンネル幅に対する, セルサイズと長さが示されている. チャンネル幅に依らずセルサイズは4mm程, セルの長さは7mm前後に分布した. Lee⁽¹⁰⁾は, デトネーションに関連するパラメータを, 化学的平衡な状態量である Static Parameter と, 化学反応速度に依存する Dynamic Parameter に分類した. Dynamic Parameter であるセルサイズは, 混合気の燃料当量比, 初期圧力, 初期温度などに依存することはデトネーション研究の初期から認識されていた. 初期条件を変更せずに行われた本解析においては, 図11のようにセルサイズがほぼ一定となることは, この傾向に一致する. このことに加えて, セルの形成パターンに関する Hanana et al.の実験結果やセルの縦横比に関する Strehlow の実験結果との比較から, 管の拡大に伴う管壁に現れるセル模様および管内部の衝撃波三重点挙動の変化は, 妥当な結果であると考えられる.

しかし, 10kPa の初期圧力で行われた実験で得られるセルサイズは13.5mm程であることが報告⁽²⁹⁾されており, 本解析のセルサイズは実験値に比し30%程度という小さい値をとる. 詳細化学反応モデルの種類がセルサ

イズに影響を与えることが報告⁽³⁰⁾されており、本結果も反応モデルの圧力依存性が影響して、セルサイズが実験値よりも小さく現れていると考えられ、今後の課題としたい。

5. 結 言

本論文では、正方断面管の管幅の変化に伴う衝撃波三重点の内部挙動の変化とセルの関係を、数値解析的研究の立場から考察した。その結果のまとめを以下に示す。

- 1) 初期条件を固定した条件で管幅の拡大を拡大していくと、衝撃波三重点の挙動モードは変化するが、各モードの存在し得る断面積には許容範囲が存在することが分かった。
- 2) 衝撃波三重点は、物性値であるセルサイズに対応する往復運動距離を維持するために、管幅の拡大に伴い、その管断面における最適距離を選択する。それにより衝撃波三重点の挙動パターンは変化する。
- 3) *slapping wave* を観測することのできない開放写真を用いた実験的研究において、管壁のセルの縦横比から管内部の衝撃波三重点挙動を推定できることを示した。
- 4) セルの縦横比は、セル幅について衝撃波三重点の往復運動する位置を考慮した場合、管幅の変化に依らず1.6程度の一定値であり、実験値と定量的によく一致した。

文 献

- (1) Kailasanath, K., "Review of Propulsion Applications of Detonation Waves", *AIAA Journal*, Vol. 38, No. 9 (2000), pp. 1698-1708.
- (2) E.Wintenberger, J.E.Shepherd, "Introduction to "To the Question of Energy Use of Detonation Combustion" by Ya. B. Zel'dovich", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 22, No. 3 (2006), pp. 588-592.
- (3) Heiser, W.H., Pratt, D.T., "Thermodynamic Cycle Analysis of Pulse Detonation Engines", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 18, No. 1 (2002), pp. 68-76.
- (4) Wu, Y., Ma, F., and Yang, V., "System Performance and Thermodynamic Cycle Analysis of Airbreathing Pulse Detonation Engines", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 19, No. 4 (2003), pp. 556-567.
- (5) Oran, E.S., Gamezo, V.N., "Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion", *Combustion and Flame*, Vol. 148 (2007), pp.4-47.
- (6) Frolov, S.M., "DETONATION INITIATION AND DDT: EXPERIMENTS AND NUMERICAL SIMULATIONS", *Proceedings of the 5th International Seminar on Fire and Explosion Hazards*, (2007), pp. 7-15.
- (7) 竹川国之, 小長野源蔵, 杉村忠良, "数値計算による爆ごう波形成に関する一提案", 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 68, No. 669 (2002), pp. 255-261.
- (8) Strehlow, R.A., "Multi-Dimensional Detonation Wave Structure", *Astronautica Acta*, Vol. 15 (1970), pp. 345-357.
- (9) Hanana, M., Lefebvre, M.H., and Van Tiggelen, P.J., "Pressure profiles in detonation cells with rectangular and diagonal structures", *Shock Waves*, Vol. 11 (2001), pp. 77-88.
- (10) John.H.S.Lee, "DYNAMIC PARAMETERS OF GASEOUS DETONATIONS", *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 16 (1984), pp. 311-336
- (11) 杉村忠良, 鷲頭忠生, "二次元非定常デトネーションとセル構造", 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 61, No. 590 (1995), pp. 386-392.
- (12) T.Washizu, T.Fujiwara, "A Numerical Study of the Behaviors of Spinning Detonation", *14th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, (1993), D1-9.
- (13) D.N.Williams, L.Bauwns, E.S.Oran, "Detailed Structure and Propagation of Three-Dimensional Detonations", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 26 (1996), pp. 2991-2998.
- (14) D.N.Williams, L.Bauwns, E.S.Oran, "The Effects of Aspect Ratio on Detonation Structure in Rectangular Ducts", *16th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive System*, (1997), pp. 374-376.

- (15) N.Tsuboi, A.K.Hayashi, Y.Matsumoto, "Three-dimensional parallel simulation of cornstarch-oxygen two-phase detonation", *Shock Waves*, Vol. 10 (2000), pp. 277-285.
- (16) N.Tsuboi, S.Katoh, A.K.Hayashi, "Three-Dimensional Numerical Simulation for Hydrogen/Air Detonation: Rectangular and Diagonal Structures", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 29 (2002), pp. 2783-2788.
- (17) K.Eto, N.Tsuboi, A.K.Hayashi, "Numerical Study on Three-Dimensional C-J Detonation Waves: Detailed Propagating Mechanism and Existence of OH Radical", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30 (2005), pp. 1907-1913.
- (18) N.Tsuboi, A.K.Hayashi, "Numerical Study on Spinning Detonations", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31 (2007), pp. 2389-2396.
- (19) N.Tsuboi, K.Eto, A.K.Hayashi, "Detailed structure of spinning detonation in a circular tube", *Combustion and Flame*, Vol. 149 (2007), pp. 144-161.
- (20) N.Tsuboi, M.Asahara, K.Eto, A.K.Hayashi, "Numerical simulation of spinning detonation in square tube", *Shock Waves*, Vol. 18 (2008), pp. 329-344.
- (21) N.Tsuboi, Y.Daimon, A.K.Hayashi, "Three-dimensional numerical simulation of detonations in coaxial tubes", *Shock Waves*, Vol. 18 (2008), pp. 379-392.
- (22) 林光一, 高橋政浩, 菱田学, 坪井伸幸, "熱流体力学を数值的に解くプログラム (2)", 名古屋大学大型計算機ニュース, Vol. 22, No. 4 (1991), pp. 380-395.
- (23) J.Jachimowski, "An Analytical Study of the Hydrogen-Air Reaction Mechanism With Application to Scramjet Combustion", NASA TP2791, (1988).
- (24) Eric L. Petersen and Ronald K. Hanson, "Reduced Kinetics Mechanisms for Ram Accelerator Combustion", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 15, No.4 (1999), pp. 591-600.
- (25) H.C.Yee, "Upwind Symmetric Shock-Capturing Schemes", NASA TM89464, (1987).
- (26) T.Sugimura, K.Takegawa, S.Yamaguchi, "Numerical Analysis of a Cellular Detonation", *Proc. 5th Asian Symp. Visuliz.*, (1998), pp. 164-169.
- (27) Tanaka, K., "The AISTJAN Detonation Properties Computer Program", AIST, <http://www.aist.go.jp/RIODB/ChemTherm/index-E.html>, (accessed 2012-2-1)
- (28) Strehlow, R.A., "GAS PHASE DETONATIONS: RECENT DEVELOPMENTS", *154th Meeting of the American Chemical Society*, (1967), pp.81-98.
- (29) Michael Kaneshige, Joseph E. Shepherd, "Detonation Database", *Graduate Aeronautical Laboratories California Institute of Technology Pasadena Explosion Dynamics Laboratory Report FM97-8*, (1999), pp.18-19.
- (30) 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モデルが与える影響", 第14回数値流体力学シンポジウム, (2000), A04-4.