

# 水素-空気 detonation の三次元数値シミュレーション

## Three-dimension numerical simulation of the H<sub>2</sub>-Air detonation

加藤誠司 (青学大) 〒157-8572 東京都世田谷区千歳台 6-16-1 青山学院大学 大学院理工学研究科

坪井伸幸 (宇宙研) 〒229-8510 神奈川県相模原市由野台 3-1-1 宇宙科学研究所

林光一 (青学大) 〒157-8572 東京都世田谷区千歳台 6-16-1 青山学院大学 大学院理工学研究科

Seiji KATOH Department of Mechanical Engineering, Aoyama Gakuin University Setagaya-ku, Tokyo 157-8572, Japan

Nobuyuki TSUBOI Institute of Space and Astronautical Science, 3-1-1, Yoshinodai, Sagami-hara, Kanagawa 229-8510, Japan

A. Koichi HAYASHI Department of Mechanical Engineering, Aoyama Gakuin University Setagaya-ku, Tokyo 157-8572, Japan

Three-dimensional numerical simulation is performed to solve the behavior of a hydrogen-air detonation in a rectangular tube. The numerical method is a second-order modified Harten-Yee TVD upwind scheme for convective term and a fractional step method for time integration. A detailed reaction model is applied for the reaction of hydrogen-air. The results show that a typical geometric shape for the detonation front is obtained at various time steps and that it is significantly dependent on the shape of unreacted gas pocket behind the detonation front.

### 1. 序論

detonation (爆轟波)とは、衝撃波が先行し、衝撃波に誘起された燃焼波が反応性混合気体中を伝播する現象である。このdetonationに関する研究は、約120年も前から行われてきた。そして現在、detonation研究の方向性として、大きく二つに分けることができる。一つめは、detonationの基本特性に関するより詳細なメカニズムの解明、特に、まだ明確な説明のなされていない自走detonationの詳細な伝播機構、deflagration (亜音速で伝播する燃焼波)からdetonationへの遷移、セル構造の不規則性発生要因といった問題が挙げられる。二つめは、超音速飛行物体の推進源 (パルสดetonationエンジン (PDE)) にdetonationを応用する研究である<sup>(1)</sup>。これらのアプリケーションに主に使用されると考えられている燃料の一つは、反応速度の速い水素である。それらのモデル化の際に、水素-空気detonationの基本特性評価は非常に重要な要素である。

detonationに関する研究は、その現象の高速性や多次元性によって、実験による計測に限界が生じているため、近年では、計算機性能の向上に伴い、数値解析による研究が盛んになっている<sup>(2)(3)</sup>。窒素希釈を受ける水素/空気混合気の詳細化学反応モデルは、様々な研究者により提案されている。その一例を挙げると、Baulch<sup>(4)</sup>、Petersen<sup>(5)</sup>、Hishida<sup>(6)</sup>、などがある。しかし、詳細化学反応モデルを数値流体解析に適用した場合、detonationのセルサイズが小さくなってしまふという問題点がある。三次元構造に着目した研究としては、今までにStrehlow<sup>(7)</sup>、Takai<sup>(8)</sup>、Hanana<sup>(9)</sup>、Williams<sup>(10)</sup>、Tsuboi<sup>(11)</sup>が挙げられる。矩形管内のdetonationに関しては、大きく二つのdetonation伝播機構が存在することが実験的に明らかになりつつある。しかし、その詳細な構造はまだ十分に明らかになっておらず、実験でこれを解明することは困難である。

本研究では、菱田と林<sup>(6)</sup>により構築された9化学種19素反応モデル (Nagoya model) を使用した矩形管内のdetonationの三次元数値シミュレーションを行い、同モデルを用いた二次元数値シミュレーションの結果と比較し、伝播構造の差異について検討した。

### 2. 支配方程式及び数値計算法

本解析で用いた支配方程式は、三次元圧縮性オイラー方程式と各化学種の質量保存式であり、以下の簡略化を行った；1) 考慮する化学種は、反応種として H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, O, H, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, 不活性種として N<sub>2</sub> の計9種である；2) 各化学種

の定圧比熱は温度の関数であり、各化学種は理想気体の状態方程式に従う；3) 体積粘性, Soret 効果, Dufour 効果, 及び

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} = \frac{\partial E_d}{\partial x} + \frac{\partial F_d}{\partial y} + \frac{\partial G_d}{\partial z} + S,$$

圧力勾配拡散は無視される。さらに、特定の化学種だけに誤差が集中されるのを避ける為に全体の質量保存式と各化学種の保存式を合わせて解く。以上より導出される支配方程式は以下の形式で表される。

ここで、保存量ベクトル  $U$ , 対流項  $E, F, G$ , 拡散項  $E_b, F_d, G_d$ , 生成項  $S$  は以下のように表される。

$$U = \begin{pmatrix} r \\ ru \\ rv \\ rw \\ E \\ r_i \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} ru \\ ru^2 + p \\ ruv \\ ruw \\ (E+p)u \\ r_i u \end{pmatrix}, E = \begin{pmatrix} rv \\ ruv \\ rv^2 + p \\ rvw \\ (E+p)v \\ r_i v \end{pmatrix},$$

$$G = \begin{pmatrix} rw \\ ruw \\ rvw \\ rw^2 + p \\ (E+p)w \\ r_i w \end{pmatrix}, E_d = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -q_x \\ rD_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \end{pmatrix}, F_d = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -q_y \\ rD_i \frac{\partial Y_i}{\partial y} \end{pmatrix},$$

$$G_d = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -q_z \\ rD_i \frac{\partial Y_i}{\partial z} \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_i \end{pmatrix}$$

化学反応には、9化学種19段階の前進・後退、反応からなる詳細化学反応モデル (Nagoya model) を用い前進反応速度定数は修正 Arrhenius 式から求められ、後退反応速度定数は前進反応速度定数と JANAF table から得られる濃度平衡定数から

ら計算される。また、この Nagoya model の特徴として、1000K 付近の中温度領域を含む 900K ~ 2500K の温度領域で有効であることや、着火遅れ時間の決定に重要な反応である  $H + O_2 = O + OH$  の反応速度が、他のモデルより速いなどの特徴がある。各項の離散化については、対流項には Harten-Yee non-MUSCL modified-flux TVD-upwind scheme、時間積分には二次元精度の時間分割法、生成項には Point Implicit Method を用いた。初期条件としてまず図 1 に示すような高温・高圧の駆動気体と低温・定圧の試験気体の領域に分け、仮定の隔膜を形成した状態で次元計算を行う。この事は、ランキン・ユゴニオを用いた初期条件の与え方に比べ、波面前後での比熱比を別々に扱うため、衝撃波背後でのエネルギー状態をより実現象に近い形で与えられる。つまり、波面後方でエネルギーの過剰な投与を防ぎ、デトネーション波がオーバードライブになる現象を押さえる。

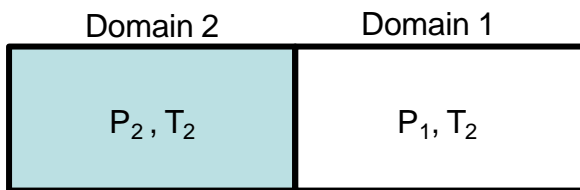


Fig.1 Initial condition in the one-dimensional simulation.

平面波に内部構造（三次元構造）を持たせるための初期擾乱の与え方として、波面背後に未燃領域を与え、初期状態を形成し、次元の結果を用いて長方形管内の三次元計算を行った。未燃領域の与え方は、図 2 に示すように波面背後に正方形で与える方法や、管の伝播方向に対して、対角線上に与える方法など、いろいろ与え方を変えて数値解析を行った。下記の図は共に伝播方向からみた図となっており、伝播方向に格子点数 10 点の幅を持っている。赤い部分が未燃領域となっています。

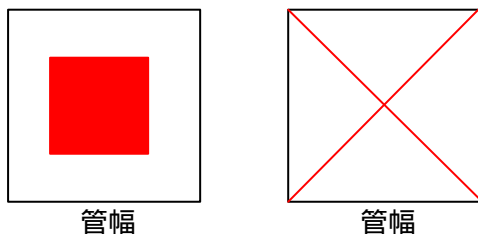


Fig.2 Unburned gas pocket image in the three-dimensional simulation.

計算格子は等間隔直線直交格子を用い、格子幅は、 $5\mu m$  とし  $H_2$  の半反応距離 ( $167.3\mu m$ ) の約  $1/33$  とした。格子点数は  $401 \times 101 \times 101$  であり、管の断面は  $0.5mm \times 0.5mm$  である。境界条件として壁面を断熱、滑り、非触媒性壁とし、伝播方向の境界にデトネーション波が達したところでデトネーション波面より前に格子を再形成して計算を再び開始する方法を用いた。また、全ての初期条件は、圧力 1atm、温度 298.15K、当量比 1.0 の水素 空気混合気を用いる。

### 3. 結果ならびに考察

図 3 に未燃領域を正方形で与えた、短形管内の圧力分布の一例を示す。図中、灰色の面はデトネーションの波面を示す。 $N=2140$  では、波面後方の高圧領域が上下左右方向に計 4 領域存在している。また、デトネーションの波面はほぼ球状になっている。 $N=2360$  では、デトネーションが 4 隅から中心へ収束する途中の様子であり、波面背後の高圧領域は対

角線上に 4 つ存在している。 $N=2580$  では、三重点が 4 隅に収束する直前の様子を示している。 $N=2800$  では、三重点が短形管中心に収束しつつある様子である。

図 4 に未燃領域を対角線上に与えた、短形管内の圧力分布の一例を示す。 $N=2150$  では、中心にある波面が管中央に収束しつつある様子を示している。波面の上下左右 4 箇所に高圧部が確認できる。 $N=2350$  では、波面が膨張している様子である。隣あう波面がぶつかっている部分に高圧部が存在するのがわかる。 $N=2800$  で膨張し新たな波面ができる瞬間の様子である。管中央と 4 隅に高圧部が存在している。以上の結果をみると、未燃領域を正方形で与えた場合と対角線上に与えた場合とでは、波面の伝播の形状が異なっていることがわかる。

以上のように、まだ計算結果を十分に検討する余地はあるものの、デトネーションの波面は極めて幾何的な形状を示していることが分かる。

図 5 に二次元の数値解析の結果を示す。格子幅  $5\mu m$ 、格子点数は  $401 \times 101$  である。三重点が二点確認できる。

図 6 に、未燃領域を正方形で与えた、短形管の側壁及び下面の最大圧力履歴を示す。この結果から、デトネーションのセルが管内を生成と消滅を繰り返して伝播していることが示されている。この原因としては三次元の伝播構造モードがいくつか重なっていることが考えられる。

図 7 に、未燃領域を対角線上に与えた、短形管の側壁及び下面の最大圧力履歴を示す。正方形で与えた結果とは異なり、セルの消滅は見られなかった。したがって、未燃領域の与え方により、波面の伝播の形状が異なり壁面での煤膜結果に影響がでていることがわかる。

図 8 に、格子幅  $5\mu m$ 、格子点数  $401 \times 101$  二次元数値シミュレーションの最大圧力履歴を示す。酸素混合気を用いたデトネーションに特有な不規則なセル構造が見られず、均一なセル構造になってしまっている。

図 9 に、管幅の格子幅を  $10\mu m$  にし三次元数値解析の結果を示す。従って、管の断面は  $1mm \times 1mm$  である。この結果から、水素 空気デトネーション特有の不規則な波面構造は見られず、一定の波面構造になってしまっている。しかしながら、現在では計算機の性能により管幅  $1mm$  サイズのシミュレーションしかできないが、今後計算機の性能の向上に伴い、実験と同じ管幅でシミュレーションが行われれば、非常に興味深いものになると思われる。

### 4. 結論

短形管内を伝播する水素 空気デトネーションを対象として、詳細反応モデルを使用する三次元シミュレーションを実施した。その結果、二次元の結果では平面的な結果しか得られなかったのに対し、三次元シミュレーションにより実験では得ることができない伝播時における波面の前面及び背面の詳細な構造を把握することが可能となった。またデトネーションの波面が様々な幾何的な形状をしていることが明らかになった。

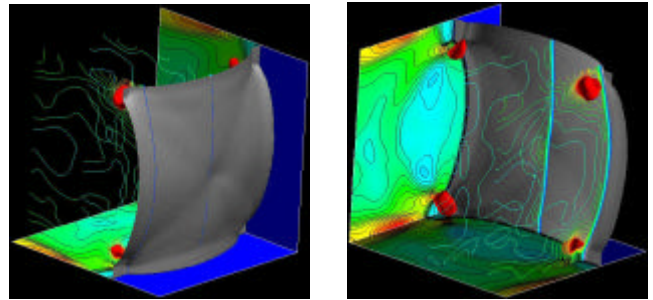
### 参考文献

- (1) K.Kailasanath, "Review of Propulsion Applications of Detonation Waves", AIAA Journal Vol.38, No.9, September 2000.
- (2) S.Taki, and T.Fujiwara, "Numerical Analysis of Two-Dimensional Nonsteady Detonations", AIAA Journal 16:73-77, 1978.
- (3) E.S.Oran, J.W.Weber, JR., E.I.Stefaniw, M.H. Lefebvre and J. D.Anderson, JR. "A Numerical Study of Two-Dimensional  $H_2-O_2-Ar$  Detonation

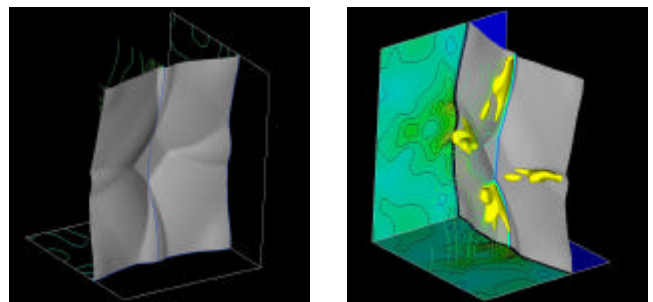
Using a Detailed Chemical Reaction Model”,  
Combustion and Flame, pp147-163, 1998.

- ( 4 ) D.L.Baulch, D.D.Drysdale, and D.G.Horne, "Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reaction, Vol.2:Homogeneous Gas Phase Reactions in the H2/Air System", Butterworths, London, 1973.
- ( 5 ) E.L.Petersen and R.K.Hanson, "Reduced Kinetics Mechanisms for Ram Accelerator Combustion", Journal of Propulsion and Power Vol.15, No.4,July-August, pp.591-600, 1999.
- ( 6 ) M.Hishida, A.K.Hayashi, "Numerical Simulation of the Interaction between a Flowfield and Exothermic Reaction on Pulsed Jet Systems", 14<sup>th</sup> International Colloquium on Dynamics of Explosions and reactive Systems, C9.3.1-10, 1993.
- ( 7 ) R.A.Strehlow, "Multi-dimensional Detonation Wave Structure", Astronautica Acta, Vol. 15, pp. 345-357, 1970.
- ( 8 ) R.Takai, K.Yoneda and T.Hikita, "Study of Detonation Wave Structure", Fifteenth Symposium (International) on Combustion, pp. 69-78, 1975.
- ( 9 ) M. Hanana, M. H. Lefebvre and P. J. Van Tiggelen, "Pressure Profiles in Detonation Cells with Rectangular and Diagonal Structure", Shock Waves, Vol. 11, No.2, pp. 77-88, 2001.
- ( 10 ) D. N. Williams, L. Bauwens, E. S. Oran, "Detailed Structure and Propagation of Three-dimensional Detonation", 26<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, pp. 2991-2998, 1996.
- ( 11 ) N.Tsuboi, A.K.Hayashi, and Y.Matsumoto, "Three-dimensional parallel simulation of corustarch-oxygen two-phase detonation", Shock Wave Vol.10, pp.277-286, 2000

N=2580



N=2800



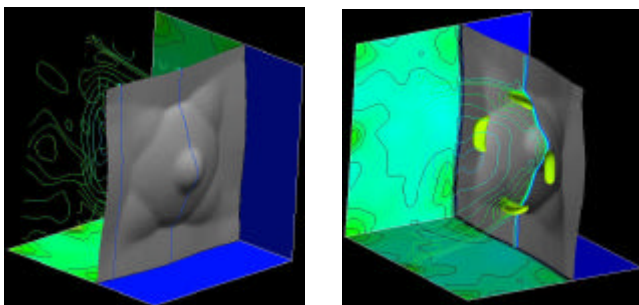
Front View

Rare view

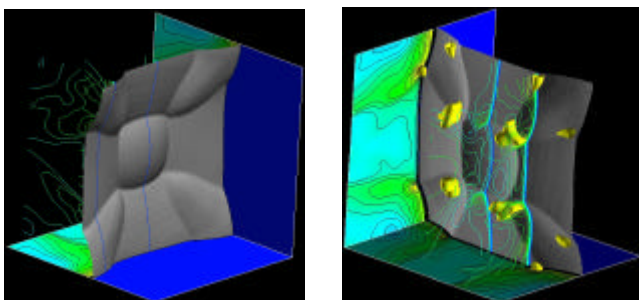


Fig.3 Pressure space isosurfaces and contours in a rectangular tube at various iterations. Unburned gas pocket is square type. The red space isosurface is pressure of 60atm, yellow of 45atm, lime green of 40atm, and grey of 3atm.

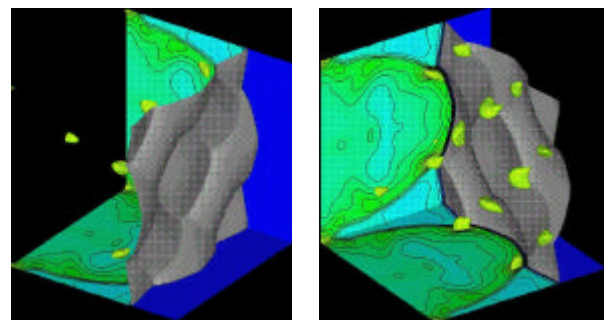
N=2140



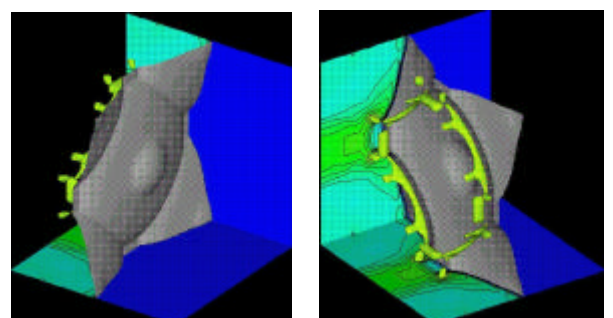
N=2360



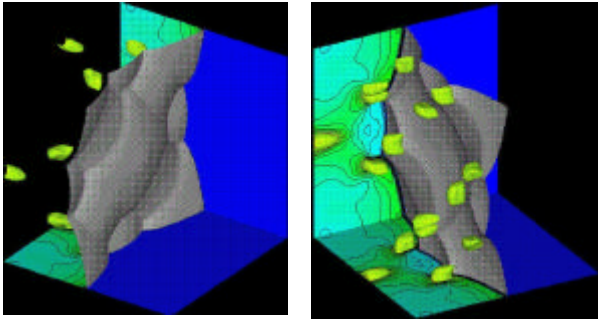
N=2150



N=2350



N=2600



N=2800

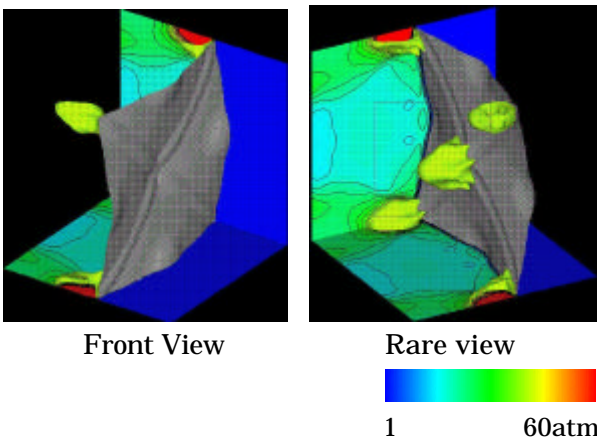


Fig.4 Pressure space isosurfaces and contours in a rectangular tube at various iterations. Unburned gas pocket is diagonal type. The red space isosurface is pressure of 60atm, yellow of 45atm, lime green of 40atm, and grey of 3atm.

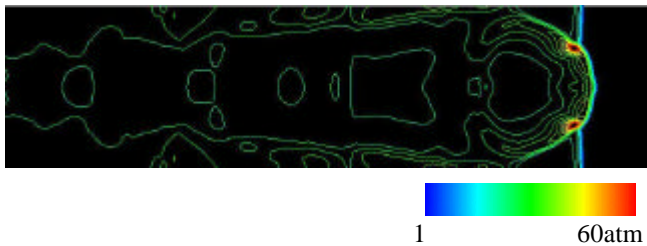


Fig.5 The pressure history in the two-dimensional simulation. Grid size is  $401 \times 101$ .

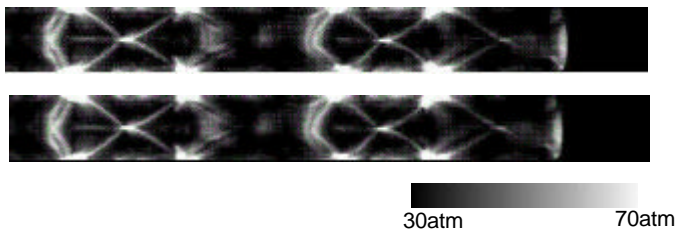


Fig.6 The maximum pressure history on the bottom wall and the sidewall in the three-dimensional simulation. Unburned gas pocket is square type.

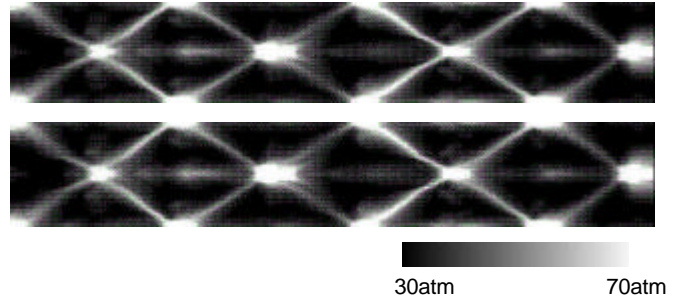


Fig.7 The maximum pressure history on the bottom wall and the sidewall in the three-dimensional simulation. Unburned gas pocket is diagonal type.

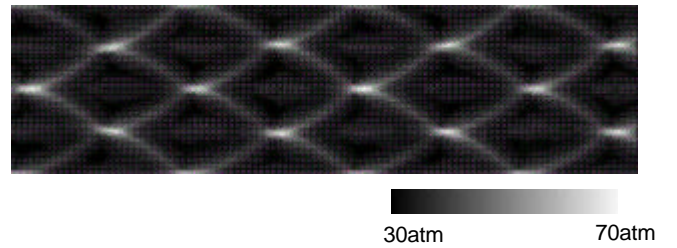


Fig.8 The maximum pressure history in the two-dimensional simulation.

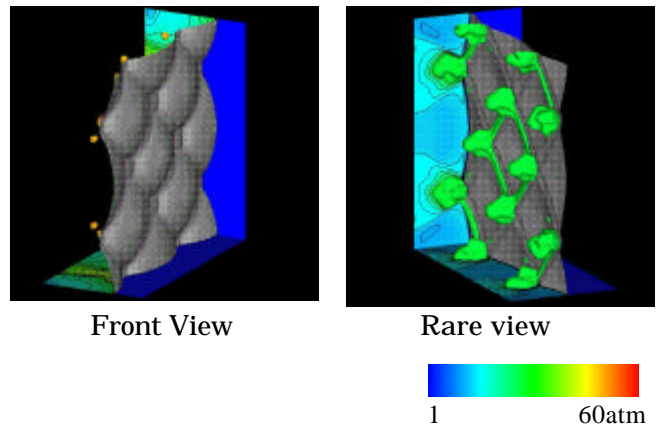


Fig.9 Pressure space isosurfaces and contours in a rectangular tube at various iterations. Unburned gas pocket is diagonal type. The lime green space isosurface is pressure of 40atm, and grey of 3atm.

