

## 酸素希釈二次元爆轟波の横波構造と第二燃焼限界

因幡和晃\*, 松尾亜紀子\*\*, 田中克己\*\*\*

窒素およびアルゴン希釈の酸素水素デトネーション( $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3.76\text{N}_2/\text{Ar}$ )の二次元伝播挙動を素反応モデルを用い数値的に再現した。初期圧力1.000, 0.421, 0.132atmの混合気に関してデトネーションの伝播に重要な役割を果たす横波を評価するため、反射衝撃波前後の圧力比で定義した横波強さとチャンネル幅との関係を調べた。横波が一個観察されるチャンネル内では、チャンネル幅が狭いと横波強さは小さく、流れ場で観察される衝撃波構造は、単一および二重マッハ軸構造が観察された。チャンネル幅の増加に伴い横波強さは増加し、衝撃波構造もアルゴン希釈混合気の初期圧力0.132atmを除き単一、二重マッハ軸構造から、複雑マッハ軸構造へと発展した。チャンネル内に横波が一個発生する最大のチャンネル幅において実験結果とよく一致するセル幅が得られた。この最大チャンネル幅で初期圧力1.000と0.421atmの窒素希釈混合気では、強いTransverse Detonationが観察された。その発生要因としては、衝撃波背後の気体条件が第二燃焼限界線の低温・高圧側に移行し、入射衝撃波後方の反応誘起距離が増加することが挙げられた。また、強いTransverse Detonationの発生と、窒素希釈混合気特有のセル構造の不規則性との関連が示唆された。

### 1. 緒言

将来型の宇宙機用エンジンとして研究開発が進められているエンジンにパルス・デトネーション・エンジン(PDE)<sup>1)</sup>がある。PDEでは、気体の燃焼前の圧縮をデトネーション波が行うため、従来のエンジンで必要なターボポンプ等の機械的な圧縮機構を必要とせず構造を簡略化できる。また、定積燃焼であるため高い熱効率が期待でき、作動サイクルの周波数を変化させることにより比較的容易に推力の制御ができる利点がある。この推進装置の実現に向けて、デトネーションを抑制および有効利用するには、その特性を知ることが必要不可欠である。

一般に矩形管内で観察されるデトネーションはOrdinary Detonationと呼ばれ、その先頭衝撃波構造は、反射衝撃波のみから成る弱い横波構造(Fig. 1 a,

単一マッハ軸構造)で形成される<sup>2)</sup>。また、爆轟限界近傍で観察されるデトネーションはMarginal Detonationと呼ばれ、そのセル幅はOrdinary Detonationより大きく、煤膜模様にはセルの内側にも三重点による軌跡が残ることが報告されている<sup>3)</sup>。これはMarginal Detonationの波面構造が、弱い横波構造の他に、横波構造自身にTransverse Detonationが存在する強い横波構造(Fig. 1 c, 複雑マッハ軸構造)により形成されるためである。デトネーションの伝播およびセル構造に重要な役割を果たす横波を定量的に評価するため、StrehlowとBiller<sup>4)</sup>は横波強さ $S$ を、Fig. 1に示される入射衝撃波後方の圧力 $P_1$ と反射衝撃波後方の圧力 $P_3$ を用いて、 $S = P_3/P_1 - 1$ として定義した。この定義では、横波が単なる音波であるとき $S = 0$ となる。煤膜模様に残された三重点軌跡の交差角から、横波強さ $S$ はOrdinary Detonationで0.5, Marginal Detonationで1.5となることが報告されている<sup>2)~5)</sup>。過去行われた実験<sup>2)6)~8)</sup>において、酸素水素混合気を窒素で希釈するとデトネーションのセル構造が不規則になり、アルゴン希釈を用いるとセル構造が規則的になることが報告されている。

本研究では以上に述べたデトネーションの基本特性をふまえ、詳細反応モデルを用いて水素-空気およびアルゴン希釈酸素-水素デトネーションの伝播挙動における二次元数値解析を行う。伝播チャンネル幅に応

2001年11月2日受付

2001年11月12日受理

\*慶應義塾大学大学院理工学研究科開放環境科学専攻

\*\*慶應義塾大学理工学部機械工学科

〒223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉3-14-1

TEL 045-563-1141

FAX 045-566-1495

\*E-mail m991809@msr.st.keio.ac.jp

\*\*E-mail matsuo@mech.keio.ac.jp

\*\*\*産業技術総合研究所

〒305-8565 茨城県つくば市東1-1-1 中央第5

TEL/FAX 0298-61-4697

E-mail tanaka-katsumi@aist.go.jp

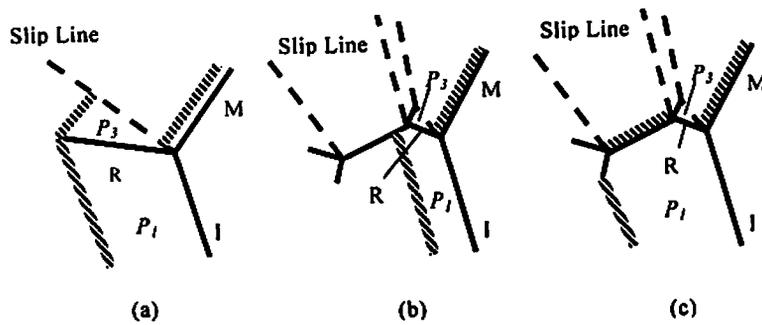


Fig. 1 Schematic diagrams around shock configurations (M, Mach Stem; I, Incident Shock; R, Reflected Shock).  
 (a) Single Mach structure, (b) Double Mach structure,  
 (c) Complex Mach structure

Table 1 Initial mixture conditions

Case	$P_0$ (atm)	$T_0$ (K)	Diluent	$D_{CJ}$ ( $m \cdot s^{-1}$ )	$L_{1/2}$ ( $\mu m$ )
a	1.000	293	N <sub>2</sub>	1979.5	167.3
b	0.421	293	N <sub>2</sub>	1958.4	380.0
c	0.132	293	N <sub>2</sub>	1931.7	1177
d	1.000	293	Ar	1862.1	41.47
e	0.132	293	Ar	1790.6	394.5

$P_0$  (initial pressure),  $T_0$  (initial temperature),  $D_{CJ}$  (C-J velocity),  $L_{1/2}$  (half reaction length).

じて形成されるデトネーションのセル構造を観察し、先頭衝撃波と反応面の干渉形態を明らかにする。また、各チャンネル幅における横波強さを定量的に求め、希釈気体の影響により異なる衝撃波後方の気体条件と、第二燃焼限界との関係を検討する。さらに、窒素希釈混合気体で実験的に観察されるセル構造の不規則性に関して考察を行う。

## 2. 数値解析

本研究では以下の仮定を用いる。1) 初期混合気体は  $2H_2 + O_2 + 3.76N_2/3.76Ar$  で、考慮する化学種は、反応種として  $H_2, O_2, O, H, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O$  の8種<sup>9)</sup>、不活性種として  $N_2$  もしくは  $Ar$  の計9種類とし、反応定数は希釈気体に因らず一定とする。2) 混合気体は熱的平衡。3) 気体は、粘性、熱伝導および拡散の輸送現象を無視。以上の仮定より、基礎方程式には、二次元圧縮性オイラー方程式および化学種の質量保存式を用い、これらの式の解析には時間-空間二次精度の Yee's non-MUSCL type TVD-upwind scheme<sup>10)</sup> を用い、時間積分は生成項を陰的に扱い、残りの項を陽的に扱う Point-Implicit法で行う。

計算に用いた初期条件を Table 1 に示す。本研究では Case a-e において、デトネーションが伝播するチャ

ンネル幅を  $2.5-25L_{1/2}$  の範囲で変化させて計算を行う。ここで、 $L_{1/2}$  は半反応距離で、水素の質量分率が平衡値に対し半分まで消費される距離で定義される代表長である。格子解像度は半反応距離  $L_{1/2}$  に対し x 軸方向に 20 点、y 軸方向に 13 点用意する。デトネーション静止座標系で、上流側境界には C-J 速度で可燃性混合気体が入り込むよう設定し、上下の境界面には鏡面反射条件を用いる。初期条件として一次元定常解を二次元座標に配置し衝撃波背後に上流側の値を一箇所擾乱として与え横波を発生させる。初期誤差が散逸した後、横波構造は安定に存在するようになる。

## 3. 結果および考察

Case a-e において各チャンネル幅における三重点同士の衝突直前の圧力分布より、Fig. 1 の  $P_1$  と  $P_3$  に相当する圧力を測定し、各チャンネル幅に対する横波強さ  $S$  を Fig. 2 に示す。チャンネル幅の増加に対し、Case a, b では横波強さ  $S$  は 1.5 まで増加するが、残りの Case c-e では横波強さ  $S$  は 0.85 以下に留まっている。また、横波が一個観察される最大のチャンネル幅  $W_{MAX}$  は、Case a, b で  $20L_{1/2}$ 、他の Case では  $10L_{1/2}$  以下となっている。(ただし、Case a においてのみ  $15L_{1/2}$  で一度横波が二個観察された後、再び  $20L_{1/2}$  で

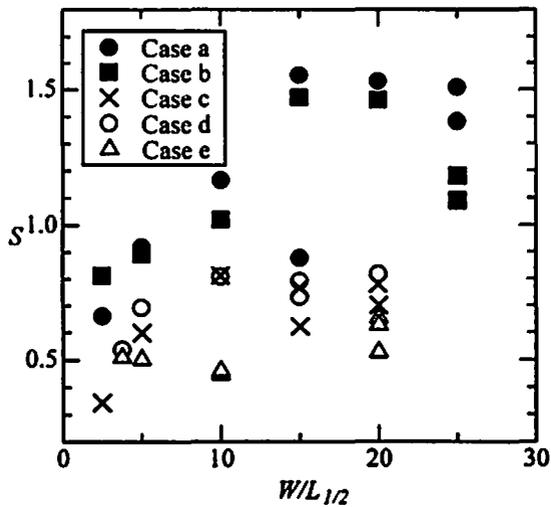


Fig. 2 Transverse wave strength  $S$  vs. channel width  $W/L_{1/2}$

横波が一個観察されている。) 流れ場で観察された衝撃波構造は大きく分けて三つの衝撃波構造に分類できる。Fig. 1 の模式図にある (a) 単一マッハ軸構造, (b) 二重マッハ軸構造, そして (c) 複雑マッハ軸構造である<sup>(11)(12)</sup>。チャンネル内に横波が一個観察される間, セルの最終段階すなわち横波衝突直前の流れ場において観察される衝撃波構造は, Table 2 に示すように,

チャンネル幅が大きいほど横波構造が発展する。その結果, チャンネル幅に依存して二重, もしくは複雑マッハ軸構造の二種類の衝撃波構造が観察されている。

チャンネル内に横波が一個発生するチャンネル幅において, チャンネルが狭いときには横波構造は十分発達せず, 初期条件および希釈気体に関係なくセルの最終段階の流れ場において二重マッハ軸構造が観察される。Case a のチャンネル幅  $W$  が  $2.5L_{1/2}$  (4.2mm) の場合における流れ場を, 12,400 ステップから 13,200 ステップまで 200 ステップごとの連続密度分布を Fig. 3 に示す。観察される衝撃波構造は, 横波同士の衝突から間もない 12,400 ステップ付近における単一マッハ軸構造 (Fig. 1 a) と, 12,600 ステップから 13,000 ステップ付近における二重マッハ軸構造 (Fig. 1 b) である。横波同士が衝突する際, 先頭の三重点が入射衝撃波後方の未燃領域を切り取り Unreacted Pocket と呼ばれる領域が衝撃波後方に残り残される。しかし, Unreacted Pocket 内部の温度は約 1300K と高温であり, 内部の水素は横波衝突後瞬く間に消費されていく。従来 Unreacted Pocket はデトネーションの伝播チャンネル幅が狭い場合に発生する数値解析特有の現象で, 実験的には観察されない現象であると考えられ

Table 2 Shock configurations near transverse collisions

Case- $W/L_{1/2}$	2.5	3.75	5.0	10.0	15.0	20.0	25.0
a	b	-	c	c	-	g	c
b	b	-	c	c	c	g	c
c	b	-	b	g	c	c	-
d	-	b	b	g	c	c	-
e	-	b	b	b	-	b	-

b (Double Mach configuration), c (Complex Mach configuration), - ( $W_{MAX}$  - Maximum channel width in which single transverse wave appears).

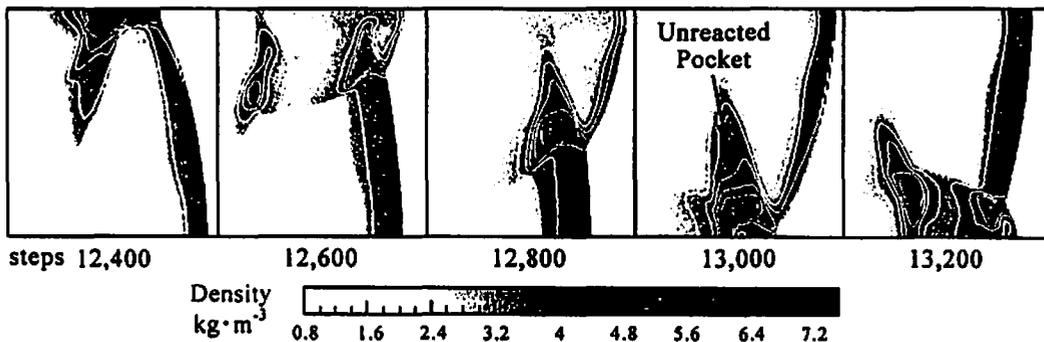


Fig. 3 Sequence of density distributions from timestep 12,400 to 13,000 for narrow channel  $2.5L_{1/2}$  of Case a.

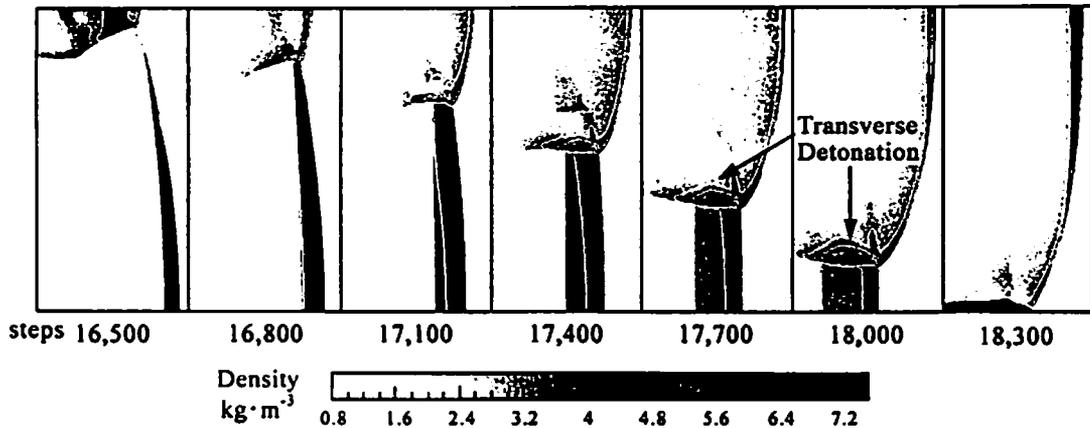


Fig. 4 Sequence of density distributions from timestep 16, 500 to 18, 300 for wide channel  $20L_{1/2}$  of Case a.

ていた。近年Gamezo et al.<sup>13)14)</sup>は数値解析結果と実験による煤膜模様がほぼ一致することを報告しており、現在ではUnreacted PocketはOrdinary Detonationにおいて一般的に発生すると考えられている。ここで観察されたデトネーションはOrdinary Detonationと良く似た衝撃波構造を有している。

チャンネル幅が広がると、Case eを除く全ての場合で横波構造は複雑マッハ軸構造まで発達する。Fig. 4はCase aにおけるチャンネル幅 $20L_{1/2}$  (3.35mm)の連続密度分布を示しており、ここでは16,500ステップから18,300ステップまでの衝撃波構造を示している。Fig. 4の連続密度分布ではデトネーション波面におけるマッハ軸構造が横波同士の衝突から次の衝突までの間に、横波の伝播に伴い次第に発達していく様子が観察できる。横波同士の衝突から間もない16,500ステップ付近では衝撃波構造は単一マッハ軸構造 (Fig. 1 a) である。その後横波が下方へ伝播することで、16,800ステップ付近では二重マッハ軸構造 (Fig. 1 b) へと発展する。広いチャンネル幅では横波が長く伝播することで、入射衝撃波後方の反応面は衝撃波から次第に後退し、最終的に17,100ステップから18,000ステップにおいて複雑マッハ軸構造と呼ばれるFig. 1 cの形態をとる。Transverse Detonationにより入射衝撃波背後の未燃領域は全て消費され、チャンネル幅が狭い時に観察されたUnreacted Pocketは生成されないことが分かった。複雑マッハ軸構造はMarginal Detonation特有の波面構造であり、横波強さも実験値1.5とよく一致していることから、ここで発生しているデトネーションはMarginal Detonationと良く似た挙動を示している。

以上述べたようにCase aの衝撃波構造はチャンネル幅に依存し、その挙動が異なる。Case eを除いたCase b-dでも、チャンネル幅の増加に対し衝撃波構造

はCase aと同様、複雑マッハ軸構造まで発達する。そこで、チャンネル幅に依存して衝撃波構造の変化するCase a-eを比較するため、チャンネル内に横波が一個観察される最大のチャンネル幅 $W_{MAX}$ における流れ場を比較する。各混合気条件下における $W_{MAX}$ はStrehlow et al.<sup>6)7)</sup>, Bull et al.<sup>15)</sup>, Stamps and Tieszen<sup>16)</sup>の実験から得られたセル幅 $b$ およびセル長さ $a$ とセル幅 $b$ のアスペクト比 $a/b$ と良い一致を示しており、各混合気条件下で発生するデトネーションを比較的良く再現しているものと考えられる。

Fig. 5にCase a-eにおいてチャンネル幅が $W_{MAX}$ の場合の三重点衝突前の流れ場の等圧力線図ならびにその背景に水素のモル濃度分布を示す。Fig. 5 a-dでは複雑マッハ軸構造が観察され、Fig. 5 eのみ二重マッハ軸構造が観察されている。Fig. 5 a, bのTransverse Detonation (TD)はTransverse Shock (TS)に対し先行しているが、Fig. 5 c, dではTSがTDに先行している。これよりCase a, bにおいて強いTransverse Detonationが発生していることが分かる。Case d, eのアルゴン希釈混合気では、実際の半反応距離 $L_{1/2}$ は窒素希釈混合気よりも短い、半反応距離 $L_{1/2}$ で無次元化したスケールで流れ場を比較すると、窒素希釈混合気の場合 (Case a-c) と比べ、マッハ衝撃波および横波の背後において水素が緩やかに消費されている。また、これに伴い横波構造における圧力上昇は窒素希釈混合気では急激に生じているのに対し、アルゴン希釈混合気では緩やかに起こっている。反応が緩やかに起こるアルゴン希釈混合気では横波が伝播する際未燃部分が横波背後の領域に存在し、特にCase eでは広いチャンネル幅でも、未燃部分が衝撃波後方に取り込まれUnreacted Pocketが形成されている。窒素希釈混合気における急激な反応は、アルゴン希釈混合気との比熱の差が主に原因として考えられ、特にマッハ衝撃波

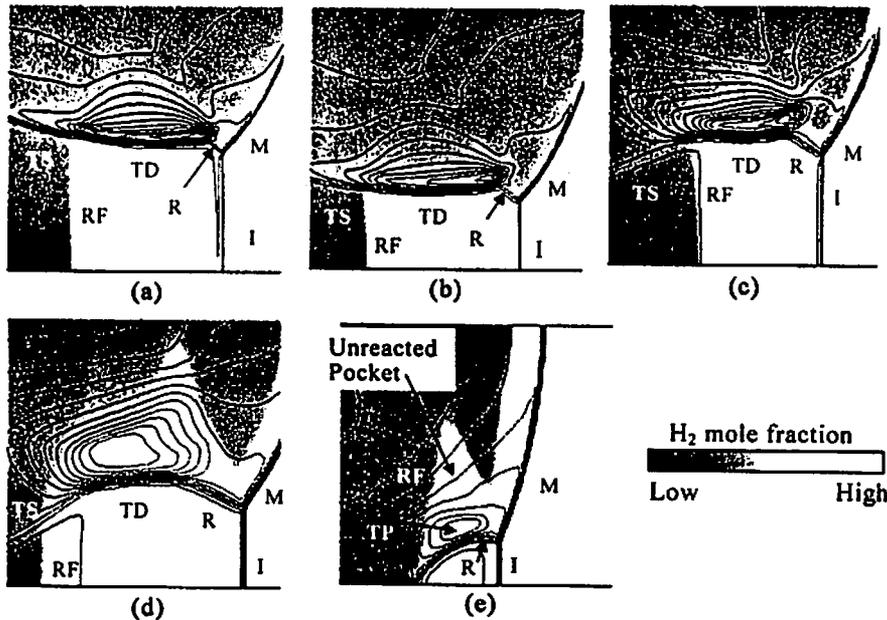


Fig. 5 Pressure contours near transverse collisions and  $H_2$  mole fraction on the background (M: Mach stem, I: Incident shock, R: Reflected shock, TD: Transverse Detonation, TS: Transverse Shock, RF: Reaction Front, TP: Triple Point). (a) Case a, (b) Case b, (c) Case c, (d) Case d, (e) Case e

と反応面が近い位置に存在することで、外部からの擾乱に対する応答性は高くなる。この性質により、窒素希釈混合気においてよりセル構造の不規則性が強くなると予想される。

Case a, bでは横波が十分に発達すると、強いTransverse Detonationが発生しチャンネル幅が $20L_{1/2}$ までは横波が一個観察される。しかし、Case aのチャンネル幅 $15L_{1/2}$ では、横波が十分発達する前に新たに横波と衝突することで、弱いTransverse Detonationのまま反射する場合がある。このように窒素希釈混合気では、横波が衝突するタイミングにより選択的に強いTransverse Detonationと弱いTransverse Detonationのいずれかの形態をとり反射し、セル幅が急激に変動することがある。窒素希釈混合気の煤膜模様の不規則性は、横波構造の発展形態として窒素希釈混合気において強いTransverse Detonationが発生することも、一つの要因として挙げられる。

不規則性の要因として挙げた強いTransverse DetonationがCase a, bのみにおいて観察された原因を検討する。三重点衝突後セルの中心軸上における入射衝撃波背後の温度と圧力で最も低温・低圧となるときの気体条件と、C-J状態における一次元定常解の衝撃波後方における気体条件を直線で結んでFig. 6に示す。Fig. 6には第二燃焼限界を延長した線も併せて示して

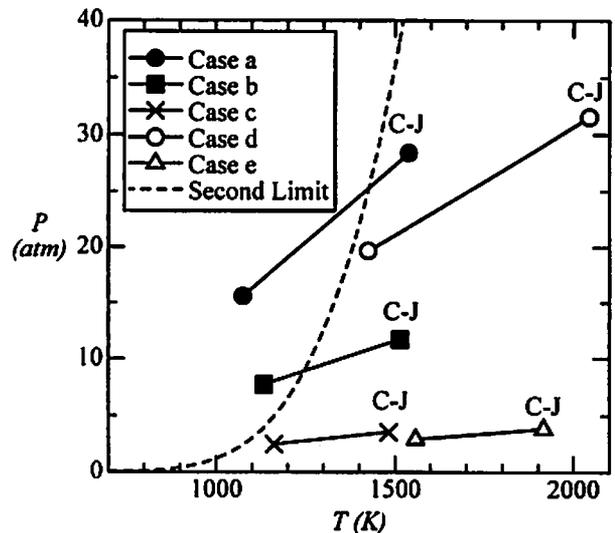


Fig. 6 T-P diagram showing the second explosion limit and the lowest conditions behind incident shocks and the C-J conditions.

ある。高温・高圧下における第二燃焼限界線は第三燃焼限界よりも高温側に位置し、消炎ではなく緩やかな着火を意味する<sup>8)17)</sup>。Fig. 6においてC-J状態は全て第二燃焼限界の高温・低圧側であるが、入射衝撃波の遅れにより衝撃波背後の温度と圧力は定常解から下降する。その結果、気体条件が第二燃焼限界を越えて移行する可能性がある。ここでCase a, bの衝撃波後

方の気体条件は第二燃焼限界線の低温・高圧側へ移行しているが、他のCase c-eでは第二燃焼限界線の手前まで減少するに留まっている。従って、強いTransverse Detonationが発生する条件には、衝撃波後方の気体条件が第二燃焼限界の高圧側へと移行することが関連していると考えられる。衝撃波後方の気体条件が第二燃焼限界線を越えて変化すると、入射衝撃波後方の気体において反応誘起距離が急激に増加し、反応面は衝撃波から後退する。この結果Transverse Detonationが伝播する未燃領域の幅が増加し、デトネーション波面による全発熱量に対するTransverse Detonationの発熱量は増加する。また、横波伝播速度は上昇し、それに起因してセル幅の増加が起こると考えられる。これは初期条件が高圧ほど強いTransverse Detonationが発生し、セルの大きさが変動し易い状態にあることを示唆している。ここで得られた傾向は、実験において初期圧力が高い場合不規則的な煤膜模様が観察される傾向と一致している。

#### 4. 結 論

窒素およびアルゴン希釈酸素二次元デトネーションの伝播挙動を素反応モデルを用い数値的に再現した。チャンネル幅に単一セルが観察される間、チャンネル幅の増加に伴い横波強さは増加し、それに伴い横波構造も単一、二重、複雑マッハ軸構造へと発達した。窒素希釈混合気において初期圧力1.000, 0.421 atmのとき半反応距離の20倍のチャンネル幅において強いTransverse Detonationが発生した。この要因として、入射衝撃波背後の気体条件が第二燃焼限界の低温・高圧側へと移行し、衝撃波後方において反応誘起時間の急激な増加が起こることが挙げられた。一方、アルゴン希釈混合気および0.132atmの窒素希釈混合気では、気体条件は第二燃焼限界と交差せず、半反応距離の10倍まで横波が一個観察されるに留まり、強いTransverse Detonationも観察されなかった。また、強いTransverse Detonationの発生により、窒素希釈混合気ではセル幅が急激に変化する現象が観察され、セル構造の不規則性との関連性が示唆された。

#### 謝 辞

本研究は、日本学術振興会科学研究費補助金および

服部報公会工学研究奨励援助金により行なわれました。ここに記して感謝の意を表します。

#### 文 献

- 1) T. Bussing, and G. Pappas, AIAA-94-0263 (1994).
- 2) W. Fickett, and W. C. Davis, "Detonation", Chap. 7, (1979), University of California Press, Berkeley.
- 3) R. A. Strehlow, and A. J. Crooker, Acta. Astronautica, 1, pp. 305-315 (1974).
- 4) R. A. Strehlow, and J. R. Biller, Combust. Flame, 13, pp. 577-582 (1969).
- 5) D. H. Edwards, G. Hooper, E. M. Job, and D. J. Parry, Astronaut. Acta, 15, pp. 323-333 (1970).
- 6) R. A. Strehlow, R. E. Maurer, and S. Rajan, AIAA J., 7, pp. 323-328 (1969).
- 7) R. A. Strehlow, and C. D. Engel, AIAA J., 7, pp. 492-496 (1969).
- 8) R. Takai, K. Yoneda, and T. Hikita, Fifteenth Symposium on Combustion, pp. 69-78 (1974), The Combustion Institute, Pittsburgh.
- 9) G. J. Wilson, and R. W. MacCormack, AIAA-90-2307 (1990).
- 10) H. C. Yee, NASA TM 89464, (1987).
- 11) M. H. Lefebvre, and E. S. Oran, Shock Waves, 4, pp. 277-283 (1995).
- 12) E. S. Oran, J. W. Weber, JR., E. I. Stefaniw, M. H. Lefebvre, J. D. Anderson, JR., Combust. Flame, 113, pp. 147-163 (1998).
- 13) V. N. Gamezo, D. Desbordes, and E. S. Oran, Combust. Flame, 116, pp. 154-165 (1999).
- 14) V. N. Gamezo, D. Desbordes, and E. S. Oran, Shock Waves, 9, pp. 11-17 (1999).
- 15) D. C. Bull, J. E. Elsworth, and P. J. Shuff, Combust. Flame, 45, pp. 7-22 (1982).
- 16) D. W. Stamps, and S. R. Tieszen, Combust. Flame, 83, pp. 353-364 (1991).
- 17) V. V. Voevodsky, and R. I. Soloukhin, Tenth Symposium on Combustion, pp. 279-283 (1965), The Combustion Institute, Pittsburgh.

# Transverse wave structures of H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>-diluent two-dimensional detonations and the relation to the second explosion limit

Kazuaki INABA\*, Akiko MATSUO\*\*, and Katsumi TANAKA\*\*\*

Two-dimensional computations of the propagating detonations in a stoichiometric hydrogen-oxygen diluted with nitrogen or argon mixture ( $2\text{H}_2+\text{O}_2+3.76\text{N}_2/3.76\text{Ar}$ ) were performed using a detailed chemical reaction mechanism. The transverse wave strength was defined as the dimensionless pressure increase across the reflect shock and was determined for the different channel widths at initial pressures 1.000, 0.421, and 0.132 atm. The shock structure of the detonation propagating through a narrow channel evolved just from a single Mach structure to a double Mach structure. Unreacted pockets were cut off by the transverse wave collisions, but they immediately burned. When a detonation propagated through a wide channel, the shock structure evolved continuously from a single Mach structure to a complex Mach structure, except for the hydrogen-oxygen mixture diluted with argon at 0.132 atm. The channel width,  $W_{\text{MAX}}$ , was the widest one in which a single transverse wave appeared, and showed good agreement with the cell width of the previous experimental cell widths. In the hydrogen-air mixture at initial pressure 1.000 and 0.421 atm, the transverse wave strength increased up to 1.50 with increasing the channel width, and the strong transverse detonation occurred. There was a close relation between the second explosion limit and the occurrence of the strong transverse detonation observed in hydrogen-air mixture at 1.000 and 0.421 atm. Since the frontal shock oscillated, the post-shock condition varied across the second explosion limit. Steep increasing of the induction length might cause the onset of the strong transverse detonation. We suggested that the irregularity of the H<sub>2</sub>-Air detonation was connected with the occurrence of the strong transverse detonations.

(\*Graduate School of Science for Open and Environmental Systems, Keio University

\*\*Department of Mechanical Engineering, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522, JAPAN

\*\*\*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST Tsukuba Central 5, Tsukuba, Ibaraki 305-8565, JAPAN)