

気体デトネーション開始過程の数値シミュレーション*

大八木 重治**, 吉橋 照夫***, 針谷 安男**

Numerical Simulation of Detonation Initiation of Combustible Gases

Shigeharu OHYAGI, Teruo YOSHIHASHI, and Yasuo HARIGAYA

A numerical simulation of the initiation processes of gaseous detonation waves was performed by the Random-Choice Method (RCM) developed by Chorin. The initiator was high-pressure and high-temperature gas which was chemically inert. The chemical reaction was assumed to be a one-step irreversible reaction with its rate described the Arrhenius law. It was found that the initiation processes were strongly dependent on the total energy contained in the initiator gas. Local explosions were observed in the initiation processes and were found to be most essential in these processes.

Key Words: Compressible Flow, Unsteady Flow, Combustion, Numerical Analysis, Safety Engineering

1. はじめに

デトネーション波は、燃焼波の一つのモードであり、超音速で媒質中を伝ばする波である。したがって、非常に短い時間で燃焼が完了し、しかも、強い圧力パルスが得られることから、なんらかの高負荷燃焼機関などへの応用も考えられるが、現在のところそのような提案はなされておらず、デトネーションに関する研究は、可燃物の取扱い上の安全という立場からの研究が大半を占めている。

デトネーション波を開始させる方法としては、実験的に次の二つの方法が用いられている。一つは、通常の火炎波(デフラグレーション波)からの転移によるものであり、他は、爆薬など、強力な衝撃波を発生させる開始源によってなされるものである。後者は、直接開始と呼ばれ、その開始限界に対応する開始源エネルギー(臨界エネルギー)は、可燃性気体の危険度を測る重要な指標の一つである。Matsuiら⁽¹⁾に代表されるような、種々の可燃性気体について臨界エネルギー値を求める研究が盛んになされてきた。著者ら⁽²⁾⁻⁽⁴⁾は、円形断

面の直管中におけるデトネーション開始過程について、同径の管中に形成された気体デトネーションを開始源として、直接開始時の開始過程と開始エネルギーとの関係、局所的爆発による圧力波の形態などについて明らかにしてきた。本報では、実験結果をサポートする目的で、ランダム・チョイス法(RCM)による数値シミュレーションを行い開始源エネルギーの開始過程に対する影響について考察する。ランダム・チョイス法は、準線形双曲形偏微分方程式を効率的に解く方法として、Glimm⁽⁵⁾の存在定理に基づき、Chorin⁽⁶⁾によって開発された。この手法は、局所相似解をランダム・サンプリングにより重ね合せて全体的な解を構成するもので、個々のメッシュについての計算には、時間を要するが、厳密解に基礎づけられているため全体的な効率に優れている。この方法は、圧縮性非粘性流の非定常次元問題に適用され⁽⁷⁾⁽⁸⁾、特に衝撃波を含む流れでは、他の多くの差分法のような数値的拡散や振動の影響がなく、理想的な不連続面を再現することができる。Chorin⁽⁹⁾は、この手法を化学反応性流れに拡張し、局所解として、CJ-デトネーションと強いデトネーションの解を加え、化学反応については単純な着火温度モデルを仮定することによりデトネーション波の挙動をシミュレートした。高野ら⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾は、時間分割法によ

* 昭和61年8月19日 第937回講演会において講演、原稿受付 昭和61年2月25日。

** 正員、埼玉大学工学部(〒338 浦和市下大久保255)。

*** 埼玉大学工学部。

り、化学反応速度方程式を重ねて解くことにより衝撃波を含む反応性流れをランダム・チョイス法により解き、detonation 構造を持つ波の再現に成功している。Taki⁽¹²⁾は、MacCormack-FCT 法を用い detonation 波開始時の一つの様相を捉えている。本報では、RCM を用い開始過程に対する開始源エネルギーの影響について考察することにする。

2. 問題の定式化

detonation 波は、本来三次元的な波面構造を持つ波であり開始過程に対しても波面に垂直な方向に伝ばする横波の影響が大ききことは明らかである。しかしながら、開始エネルギーとの関係というような問題については、第一義的には次元の問題と考えて全体的な様相について考察することが効率的であろうと考える。Taki⁽¹²⁾は、二次元的なシミュレーションによって三重点を持つ波面構造について詳細に検討しているが、同時に次元計算によりある程度開始過程をシミュレートすることができることを示している。ここでは、第一段階として空間的に次元のシミュレーションに限るものとする。粘性、熱伝導、拡散のない非定常次元流れの基礎方程式は、

$$V_t + F(V)_x = S(V) \dots\dots\dots (1)$$

ただし、

$$V = \begin{pmatrix} \rho \\ m \\ e \\ Z \end{pmatrix}, F(V) = \begin{pmatrix} m \\ m^2/\rho + p \\ m(e+p)/\rho \\ mZ/\rho \end{pmatrix}$$

$$S(V) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ wQ \\ -w \end{pmatrix} \dots\dots\dots (2)$$

ここで、 ρ, m, p は密度、運動量、圧力であり、 e は、単位体積当たりの内部エネルギーと運動エネルギーの和であり、 u を速度、 γ を比熱比とすると、完全気体を仮定して、

$$e = p/(\gamma - 1) + (1/2)\rho u^2 \dots\dots\dots (3)$$

と表される。 Z は、反応物の密度であり、 w は、その質量消滅速度、 Q は、単位質量当たりの反応熱である。化学反応を最も単純な、反応物→生成物 なる単段階不可逆反応と仮定し、アレニウス則が成り立つものとする、 w は、

$$w = BZ \exp(-E/R^0 T) \dots\dots\dots (4)$$

と書ける。ここで、 B は頻度因子、 E は活性化エネルギー、 R^0 は普遍気体定数である。また、ここでは、反応

により、気体の比熱比および分子量は変化しないものと仮定する。計算の初期条件は、著者ら⁽²⁾⁻⁽⁴⁾の実験を模擬する目的で、高温の駆動気体によって入射衝撃波を形成させる形のものをを用いた。すなわち、 $t=0$ において、

$$\left. \begin{aligned} 0 < x < x_a : p = p_1, \rho = \rho_1, \\ & u = 0, Z = 0 \\ x_a < x : p = p_0, \rho = \rho_0, \\ & u = 0, Z = Z_0 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5)$$

ここで、 x は駆動管閉端からの距離、 x_a は駆動管と被駆動管の境界の位置、添字 1 は、駆動部の初期状態、0 は被駆動部の初期状態を示す。また、駆動気体は、被駆動気体の燃焼生成物であるとする。

実際の計算においては、諸量を無次元化したほうが便利である。ここでは、以下のような無次元変数を用いる。

$$\begin{aligned} \bar{x} &= x/x_e, \quad \bar{t} = tc_0/x_e, \\ \bar{p} &= p/p_0, \quad \bar{\rho} = \rho/\rho_0, \quad \bar{u} = u/c_0 \end{aligned} \dots\dots\dots (6)$$

ただし、 x_e は任意の参照距離であり、また、 c_0 は等温音速で、次のように定義される。

$$c_0 = \sqrt{(p_0/\rho_0)} \dots\dots\dots (7)$$

3. 計算方法

ランダム・チョイス法では、齊次方程式

$$V_t + F(V)_x = 0 \dots\dots\dots (8)$$

を、 $t = n\Delta t$ における初期データ、

$$V(x, n\Delta t) = \begin{cases} V^{n+1/2} & x > (i+1/2)\Delta x \\ V^n & x < (i+1/2)\Delta x \end{cases} \dots\dots\dots (9)$$

に対して解を構成し (Riemann 問題)、ランダム・サンプリングにより重ね合わせて全体の解を構築する。つまり、Riemann 問題の解 $V[x, (n+1/2)\Delta t]$ が求められると、 $[-1/2, 1/2]$ の一様乱数 θn を用いて、

$$V^{n+1/2, i+1/2} = V\{(+1/2 + \theta n)\Delta x, (n+1/2)\Delta t\} \dots\dots (10)$$

とすることにより、解を進めていく。Riemann 問題の解は、Godunov の方法によって求めた。 Z については、接触面を境にして不連続的に値が変化する解を与えた。式(1)により、 V の時間的増分は、 $-F(V)_x$ によるものと、 $S(V)$ によるものの和であるから、式(10)により、半時間ステップ進んだ後に、

$$V_i = S(V) \dots\dots\dots (11)$$

なる常微分方程式の解を加えて半時間ステップ進めば非齊次式(1)の解が得られる (Sod⁽¹³⁾)。

4. 結果および考察

今回の計算に用いた諸パラメータの値を表1に記す。無次元化は以下のようにしてなされている。

$$\begin{aligned} \tilde{B} &= Bx_e/c_0, & \tilde{Q} &= Q/c_0^2, \\ \tilde{E} &= E/(Mc_0^2) \\ \tilde{p}_1 &= p_1/p_0, & \tilde{T}_1 &= T_1/T_0 \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (12)$$

Mは、気体の分子量、Tは、絶対温度である。空間ステップΔxは、0.005x_e、クラン数は、0.5とした。

図1は、先頭衝撃波の軌跡を描いたものである。駆動気体温度を一定にして圧力を変化させることにより、単位質量当たりのエネルギーを変えずに単位体積当たりのエネルギーを変化させた。駆動気体圧力の増加に伴い先頭波面の加速が速まっていることがわかる。無

表1 計算条件

Specific Heat Ratio	γ	1.4
Frequency Factor	\tilde{B}	1000
Activation Energy	\tilde{E}	10
Heat of Combustion	\tilde{Q}	40
Driver Length	\tilde{x}_d	0.08
Driver Pressure	\tilde{p}_1	2, 5, 10, 20
Driver Temperature	\tilde{T}_1	10

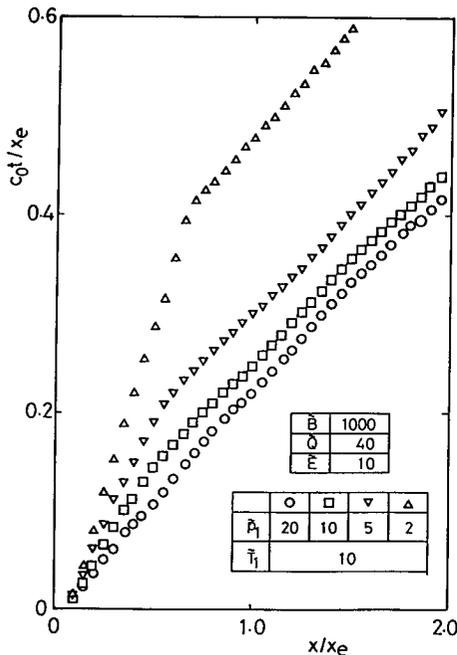


図1 先頭衝撃波の軌跡

次元距離 $x/x_e (= \tilde{x})$ が1以上では、すべての場合についてほぼ等しい傾きを持つ。これがこの気体のデトネーションの定常伝ば速度である。Chapman-Jouguet理論によれば、比熱比 γ 、無次元発熱量 \tilde{Q} の気体のデトネーション定常伝ばマッハ数は、次式で与えられる。

$$M = \{1 + \tilde{Q}(\gamma^2 - 1)/(2\gamma)^{1/2} + \{\tilde{Q}(\gamma^2 - 1)/(2\gamma)\}^{1/2} \dots\dots\dots (13)$$

これに本計算条件を代入すると約7.54となるが、図1より計算したMは、約4.22であり、相当理論値よりかけ離れている。また、この状態でもまだ完全には定常とはいえず波長が \tilde{x} にして約1程度の緩やかな変動が見られる。これは、得られたデトネーション波の反応帯の厚みが、系の代表長さに比べて無視できず、Chapman-Jouguet理論が全発熱量 \tilde{Q} が波面で発生されるという仮定で立てられているのに対し、そうなのではないことによる。反応帯の厚みは、 \tilde{B} に反比例するので本計算における1000という値は実際の反応に比べ小さすぎるものと思われる。計算上は、 \tilde{B} を大きくするとそれだけ時間ステップも小さくしなければならず計算時間の上で問題が出てくる。本報では定常デトネーションをシミュレートすることが主目的ではないので \tilde{B} の値はこのままにしておく。しかしながら、定性的には、開始過程について駆動気体の開始エネルギーによる影響がはっきりと示されている。つまり、駆動気体が $t=0$ に持っているエネルギー E_0 は、

$$E_0 = p_1 x_d / (\gamma - 1) \dots\dots\dots (14)$$

で表され、 p_1 に比例する。例えば、 $p_0 = 101.3 \text{ kPa}$ 、 $x_d = 0.6 \text{ m}$ の時、 $\tilde{p}_1 = 10$ は、 $E_0 = 1.52 \text{ MJ/m}^2$ に対応する。また、 E_0 を平面的爆風の開始エネルギーと見た場合の爆風特性距離 R_0 は、

$$R_0 = E_0 / (2\gamma p_0) \dots\dots\dots (15)$$

と定義されるが、上記の数値に対し、 $R_0 = 5.36 \text{ m}$ となり、この場合、 $x_e = 7.5 \text{ m}$ であるので無次元距離 R_0/x_e にすると約0.71である。したがって、駆動気体の影響は、 $\tilde{p}_1 = 10$ の場合 $x/x_e = 0.7$ 付近まで及んでいることとなる。この R_0 より短い距離でデトネーション波が形成されている場合は、駆動気体の持つエネルギーによって直接開始したと考えてよい。 $\tilde{p}_1 = 5$ は、その限界に近いところであろう。 $\tilde{p}_1 = 2$ の場合 $R_0 = 0.14 x_e$ であるのに $x/x_e = 0.8$ 付近でデトネーションが形成されている。それ以前の衝撃波はほとんど音波に近くまで減衰しており、デフラグレーションからの転移によって開始したとってよいほどである。これは、採用した反応モデルが誘導反応のないものであることによると思われる。したがって、このシミュレーショ

ンからは、臨界エネルギーは得られなかった。図2に、著者らの実験結果⁽⁴⁾の一例を示す。本計算結果は、このような開始過程における開始エネルギーの影響を、よく表現している。

図3から図4に、 $\bar{\nu}_1=5$ の場合の代表的な時刻における、諸量の空間分布を示す。図3(a)は、無次元時間 $\bar{t}(=c_0 t/x_e)=0.1221$ における無次元速度、温度、圧力の空間分布である。また、図3(b)は、同時刻における無次元反応速度、および反応物濃度の分布を示す。

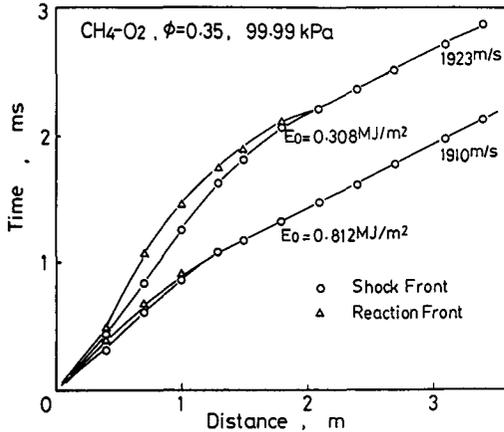
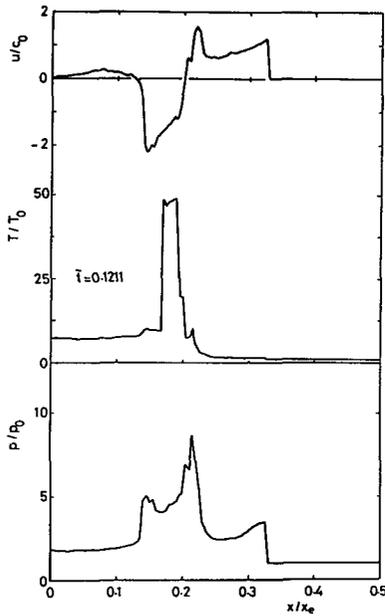
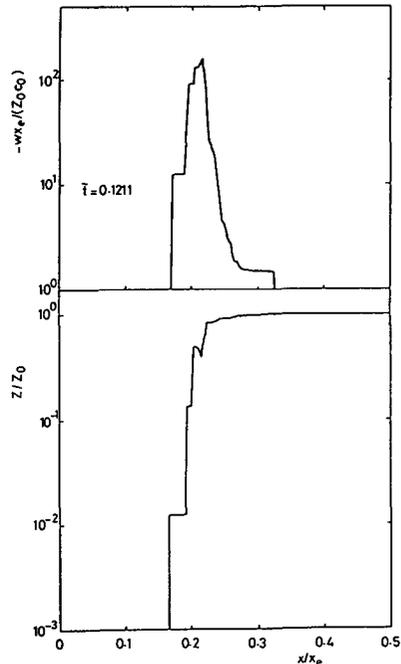


図2 実験結果の例⁽⁴⁾

無次元距離 $\bar{x}(=x/x_e)=0.17\sim 0.19$ の間に \bar{T} が50に近い高温領域が出現し、その後方にそれぞれ前方と後方に向かう二つの圧力波が見られる。これは、 $\bar{t}=0.1$ 付近で先頭衝撃波と接触面の間でいわゆる局所爆発(Local Explosion)が起こったことを示している。この局所爆発は、デフラグレーションからの転移の研究において、Oppenheimら⁽¹⁴⁾により観察されたものであり、のちに、Edwardsら⁽¹⁵⁾は、入射衝撃波によるデトネーション開始時においてこれを見出している。また、著者ら⁽²⁾⁻⁽⁴⁾の実験においても観察されている。Takiら⁽¹²⁾の一次元シミュレーションでも同様の現象が観察されており、このような簡単な反応モデルでもシミュレートできることは興味深い。前方へ進む圧力波は、反応を伴っておりやがてこれはデトネーション波へと成長する。後方へ伝ばする波は、燃焼ガス中へ伝ばし、反応を伴わない、いわゆるレトネーション波である。誘導反応を持たない反応モデルを用いているため、先頭衝撃波の近くでも反応は起こっているはずであるが、高温の駆動気体との接触面付近で局所爆発が生じていることは興味深い。図4は、 $\bar{t}=0.2737$ の時刻のものであり、ほぼ定常なデトネーションが形成されている場合のものである(縦軸、横軸のスケール



(a) 速度、温度、圧力のプロファイル (無次元時間 0.1211)



(b) 反応速度、反応物濃度のプロファイル (無次元時間 0.1211)

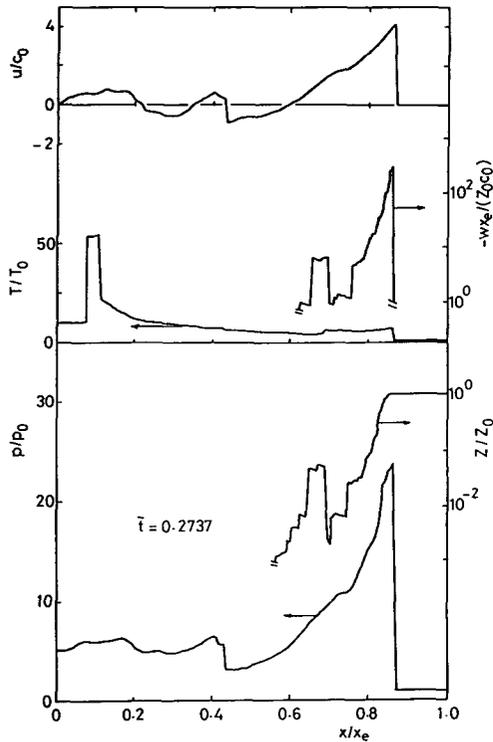


図4 諸量のプロファイル
(無次元時間0.2737)

が図3と異なることに注意)。局所爆発で生じた前方へ進む反応性衝撃波が先頭衝撃波と合体しさらに強い反応を促進した結果このような高圧の先頭波面を形成している。圧力波形に見られる第2のピークは、レトネーション波が管端で反射して作られたものである。反応速度は、先頭波面上に最大値を持ち、反応物密度も先頭波面通過直後から急激に減少する。圧力波形も通常実験室で得られる希薄波を伴った形であり、この状態は、いわゆるデトネーション波といってよいと思われる。しかし、反応帯の厚みを、 \bar{Z} が0.1以上の領域の厚みと定義すれば、無次元距離で0.04であり決して無視できる大きさではなく、しかもその後方でも反応速度が増加していることを考えれば、この状態は準定常的なデトネーションというべきであろう。前述のように、この準定常伝ば状態は、駆動気体の初期圧 p_1 によらず、ほぼ同一の平均伝ば速度を持つ。すなわち、この状態は、被駆動気体パラメータ、 \bar{B} , \bar{Q} , \bar{E} , だけで決定されている。駆動気体初期圧、すなわち、開始エネルギーの影響は、開始過程に現れるが、特に、局所爆発の出現に対して顕著に現れる。 $\bar{p}_1=5$ の場合は、非常に強い局所爆発が現れ、図3, 4に示したように、爆発の核になる部分の温度は、被駆動気体初期温度の50倍

近くになっている。もちろん、現実的には、分子の内部構造の影響でこれほどの温度にはならないが、これは、局所爆発の強さを表している。この爆発核の温度は、開始エネルギーの増加により減少する。すなわち、 $\bar{p}_1=2$ で最大55、 $\bar{p}_1=10$ で最大10、 $\bar{p}_1=20$ では核と呼べるほどはつきりとはしていないが約7程度である。これらのことは、開始エネルギーが大きくて、入射衝撃波が強い時は、衝撃波直後からかなり反応が進行し、反応物が徐々に消費されるため、強い爆発が起こらないことを示している。開始エネルギーが小さいときは、衝撃波と接触面の間に多くの未燃ガスが溜まってから急激な反応が開始するため強い爆発となるものと考えられる。

5. おわりに

高温高圧の不活性ガスを開始源とする気体デトネーションの開始過程について、ランダム・チョイス法を用いた数値シミュレーションを行い以下の知見を得た。

(1) 駆動気体の持つ全エネルギーを開始エネルギーと考え、開始エネルギーの小さいほど衝撃波の加速が遅れる。

(2) 得られたデトネーション波は、準定常な伝ば速度を持ち、その速度は、開始エネルギーに無関係である。また、この速度は、Chapmann-Jouguet デトネーション速度に比べて小さいが、これは、計算に用いた頻度因子の値に関係する。

(3) 開始エネルギーに依存するが、開始過程において、非常に強い局所爆発が生じる場合が存在する。この爆発によりデトネーションが開始し、レトネーション波が生じる。局所爆発の強さは、開始エネルギーが小さいほど強い。

(4) 本計算では、誘導反応のない単段階反応モデルを用いたため、開始エネルギーによるデトネーション限界は現れなかった。

終わりに、本計算は、東京大学大型計算機センターM-280Hを用いてなされたことを記す。

文 献

- (1) Matsui, H. and Lee, J. H., *Proc. 17th Symp. (Int.) Combust.*, (1979), 1269, The Combustion Institute.
- (2) 大八木・ほか2名, 第21回燃焼シンポジウム前刷り, (昭59-11), 224.
- (3) Ohyaigi, S., ほか2名, *Progress in Astro. Aero.*, 94 (1984), 3, AIAA.
- (4) 大八木・ほか2名, 第23回燃焼シンポジウム前刷り, (昭61-12), 286.
- (5) Glimm, J., *Comm. Pure Appl. Math.*, 18 (1965), 697.

- (6) Chorin, A. J., *J. Comp. Phys.*, **22** (1976), 517.
- (7) Saitoh, T. and Glass, I. I., *UTIAS Report*, No. 240 (1979).
- (8) 大八木・高橋, 空気力学における数値シミュレーション・シンポジウム前刷り, (昭60-2), 147.
- (9) Chorin, A. J., *J. Comp. Phys.*, **25** (1977), 253.
- (10) 高野・赤松, 衝撃工学シンポジウム前刷り, (昭57-9), 28.
- (11) Takano, Y. and Akamatsu, T., *J. Fluid Mech.*, **160** (1985), 29.
- (12) Taki, S. and Fujiwara, T., *Progress in Astro. Aero.*, **94** (1984), 186, AIAA.
- (13) Sod, G. A., *J. Fluid Mech.*, **83-4** (1977), 785.
- (14) Urtiew, P. A. and Oppenheim, A. K., *Proc. R. Soc. Ser. A*, **304** (1968), 379.
- (15) Edwards, D. H., ほか2名, *Combust. Flame*, **43** (1981), 187.
-