

■原著論文／ORIGINAL PAPER■

デトネーションの数値解析のための熱化学モデルの提案

A New Thermochemical Model for Numerical Simulation of Detonation

渡邊 和也¹・松尾 亜紀子^{2*}WATANABE, Kazuya¹, and MATSUO, Akiko^{2*}¹ 慶應義塾大学大学院理工学研究科 〒223-8522 横浜市港北区日吉3-14-1
Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223-8522, Japan² 慶應義塾大学理工学部機械工学科 〒223-8522 横浜市港北区日吉3-14-1
Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223-8522, Japan

2006年3月28日受付; 2006年6月24日受理 / Received 28 March, 2006; Accepted 24 June, 2006

Abstract : A thermochemical model was newly proposed in the present study. The proposed model was developed to maintain an accuracy for detonation simulations with the detailed chemical reaction model under thermally perfect gas condition and to reduce computational load. The proposed model consists of three gas components, which are premixed detonable gas, burnt gas and inert gas. For chemical reactions, it is considered that premixed detonable gas reacts to burnt gas under the one-step irreversible chemical reactions. The thermodynamic data for premixed detonable gas and inert gas follow the enthalpy changes of the mixture as thermally perfect gas, and it is assumed that the burnt gas is isentropically expanded. In the present study, single-cycle and multiple-cycle operations of one-dimensional and two-dimensional single-tube Pulse Detonation Engine (PDE) were investigated with the proposed model. For one-dimensional simulations of single-tube, single-cycle PDE, advantages of the proposed model compared with some other models were shown using pressure and temperature profiles at the closed and open ends of the tube. Furthermore, two-dimensional simulations of single-tube, multiple-cycle PDE were carried out to investigate the spatial distributions and histories of the thermodynamic properties with the proposed and the detailed models. The spatial distributions and histories of the thermodynamic properties of the proposed model were in good agreement with those of the detailed model. The proposed model dramatically reduced the CPU time required for simulation to about 9 % for one-dimensional analysis and 14 % for two-dimensional analysis, compared with those of the detailed chemical reaction model.

Key Words : Detonation, Chemical reaction model, Simulation, Pulse Detonation Engine

1. 緒言

デトネーションとは、先行する衝撃波とそれに伴う燃焼波面の相互作用により維持される超音速燃焼現象である。近年、デトネーションの特性が解明されるにつれ、その爆発的なエネルギーを工学的に応用しようという考えがある。その一つの例がパルスデトネーションエンジン (以下PDE) である[1,2]。このエンジンは気体の圧縮をデトネーション波が行うため機械的な圧縮機構を必要としないことや、定積に近い燃焼形態を有するため高い熱効率が期待出来る。そのため、近年PDEを発電用ガスタービンエンジンに応用しようと言う試みがなされている[3]。PDEを工学的に応用する際には、デトネーション波を連続的に発生

させ、デトネーション管を多気筒化することが有効であると考えられている。数値解析を用いたPDEの作動解析には、過去多くの研究で一段階反応モデルが用いられてきた[4]。通常、一段階反応モデルでは単一組成の気体を熱量的に完全として扱っているため、性能予測にモデル誤差を生じる。このことよりPDEの数値解析[5]には詳細化学反応モデルも使用されているが、計算負荷が増大してしまう。本研究では、管内を伝播するデトネーションの数値解析において詳細化学反応モデルと同等の精度を維持し、計算負荷の軽減を可能とする熱化学モデルを提案することを目的とする。提案した熱化学モデルを用いて一次元単発作動と二次元連続作動の単気筒PDEの解析を行う。一次元単気筒単発作動PDEの解析では、提案モデルの優位性を検証するために他の熱化学モデルを用いた解析と比較をする。二次元連続作動PDEの解析では、提案モデルと詳細モデル

* Corresponding author. E-mail: matsuo@mech.keio.ac.jp

Table 1 Coefficients of a fifth order polynomial of temperature. a) 300 ~ 1000 K, b) 1000 ~ 4000 K

(a)	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆
detonable	3.61290E+00	-1.08950E-03	2.99770E-06	-2.26250E-09	6.24130E-13	-1.05080E+03
air	3.72110E+00	-1.75820E-03	4.35470E-06	-3.01270E-09	6.82800E-13	-1.06400E+03

(b)	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆
detonable	3.0286E+00	1.1719E-03	-3.7526E-07	6.1088E-11	-3.8343E-15	-9.2831E+02
air	3.0127E+00	1.4229E-03	-5.3879E-07	9.7464E-11	-6.6681E-15	-9.5473E+02

ルを用い熱力学特性量の空間分布とその履歴に関して検討する。また計算負荷の軽減についても評価し、提案モデルの有用性を述べる。

2. 提案する熱化学モデル

本論文で提案する熱化学モデルは、三気体種 (爆轟性未燃気体, 既燃気体, 不活性気体) によって構成されている。モデルの提案における係数や解析事例には、爆轟生未燃気体として水素空気の化学量論混合気を、不活性気体として空気を想定している。よって、平均分子量は、爆轟性未燃気体 20.91 kg/kmol, 空気 28.85 kg/kmol とした。化学反応に関しては、未燃気体が一段階不可逆反応のもとで既燃気体になると仮定する。さらに爆轟性未燃気体と不活性気体に対するエンタルピーは温度変化に従い、既燃気体は等エントロピー的に膨張するとした。各気体種に対する化学種の保存式を以下に示す。

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x_j} \begin{bmatrix} \rho_1 u_j \\ \rho_2 u_j \\ \rho_3 u_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega \\ -\omega \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

右辺の化学反応速度 ω は、以下の式で表される。

$$\omega = -K\rho_1 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.2)$$

K , E , R は、それぞれ反応頻度係数, 活性化エネルギー, 混合気体の気体定数を表している。本章におけるモデルの説明では、添字 1, 2 はそれぞれ爆轟性未燃気体と既燃気体を、添字 3 は任意の不活性気体 (空気, 窒素, アルゴン等) を表している。また、添字が無い場合は混合気体を示している。

計算を行うにあたり予め活性化エネルギー E と反応頻度係数 K を決定しておく必要がある。なお一次元解析において唯一の代表長である半反応距離 $l_{1/2}$ を用いて、活性化エネルギー E と反応頻度係数 K は式 (2.3) のように無次元化 [6,7]を行い、 K_0 と E_0 を算出する。 T_0 と R_1 は、それぞれ

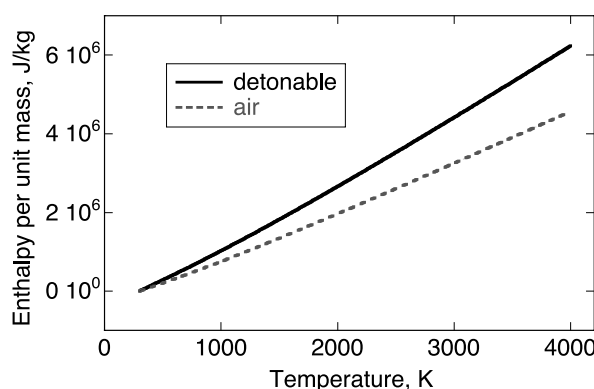


Fig.1 Relations of temperature and enthalpy.

初期温度および爆轟性未燃気体の気体定数を表している。半反応距離 $l_{1/2}$ とは、衝撃波静止座標系において衝撃波通過後の加熱領域において、反応が半分まで進行するのに掛かる距離のことをさす。 K_0 と E_0 の決定法と検証に関しては 3.2 節で述べる。

$$E_0 = \frac{E}{R_1 T_0}, \quad K_0 = \frac{K \cdot l_{1/2}}{(R_1 T_0)^{1/2}} \quad (2.3)$$

爆轟性未燃気体と不活性気体のエンタルピー h_i を式 (2.4) のように評価する。エンタルピーは、300 ~ 1000 K と 1000 ~ 4000 K の二つの領域に分けた温度の五次多項式によって表現し、表 1 に係数 $a_{j,i}$ を示す。なお、混合気体のエンタルピーは NASA Thermochemical Polynomials [8] を用いて各成分の値から求め、式 (2.4) で近似している。図 1 は本論文で用いた爆轟性未燃気体と不活性気体の温度とエンタルピーの関係を表している。

$$\frac{h_i}{R_i T} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2} T + \frac{a_{3,i}}{3} T^2 + \frac{a_{4,i}}{4} T^3 + \frac{a_{5,i}}{5} T^4 + a_{6,i} \frac{1}{T} \quad (2.4)$$

提案モデルでは、既燃気体がデトネーション波後方で等エントロピー的に膨張すると仮定し、その既燃気体の組成はその膨張とともに変化する。その膨張過程は、既燃気体のエントロピーが Chapman-Jouguet (C-J) 点のエントロピー

Table 2 Coefficients of isentropic expansion characteristic

	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5	C
pressure	-1.39020631	-2.33984953	0.234750275	-0.019778499	0.000576217	-
temperature	11.2073301	-1.43949756	0.26484092	-0.022816508	0.000678521	-
internal Energy	-13.9276089	-4.01851095	-0.518535266	-0.028534136	-0.000606435	0.0295905

Table 3 Coefficients of a fifth order polynomial of temperature for burnt gas. a) 300 ~ 1000 K, b) 1000 ~ 4000 K

(a)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
burnt	3.8449E+00	-1.5197E-03	3.8263E-06	-2.4099E-09	5.1035E-13	-1.0280E+04

(b)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
burnt	2.7836E+00	2.0655E-03	-7.0593E-07	1.1632E-10	-7.3878E-15	-1.0029E+04

で一定であるとした以下の式 (2.5) [9]で表される。係数は化学平衡計算ソフトウェア AISTJAN [10]によって得られる。

$$\begin{aligned}\ln p_s &= b_{1,p} + b_{2,p} \ln v_2 + b_{3,p} (\ln v_2)^2 + b_{4,p} (\ln v_2)^3 + b_{5,p} (\ln v_2)^4 \\ \ln T_s &= b_{1,T} + b_{2,T} \ln v_2 + b_{3,T} (\ln v_2)^2 + b_{4,T} (\ln v_2)^3 + b_{5,T} (\ln v_2)^4 \\ \ln(E_s + C) &= b_{1,E} + b_{2,E} \ln p_s + b_{3,E} (\ln p_s)^2 + b_{4,E} (\ln p_s)^3 + b_{5,E} (\ln p_s)^4\end{aligned}\quad (2.5)$$

$p_s [\times 10^{11} \text{ N/m}^2]$, $T_s [\text{K}]$, $E_s [\times 10^8 \text{ J/kg}]$ は、それぞれ既燃気体の等エントロピー膨張特性の圧力、温度、比内部エネルギーを表し、 $v_2 = 1/\rho_2 [\times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{kg}]$ は既燃気体の比体積を表している。表 2 に、本論文で用いた式 (2.5) 中の係数 b_j と C を示す。既燃気体の比熱比は式 (2.6) で示す等エントロピー断熱指数 Γ_s で表される。

$$\Gamma_s = -\left(\frac{d \ln p_s}{d \ln v_2}\right) = -(b_{2,p} + 2b_{3,p} \ln v_2 + 3b_{4,p} (\ln v_2)^2 + 4b_{5,p} (\ln v_2)^3) \quad (2.6)$$

衝撃波後方において気体の組成が未燃気体から C-J 状態の既燃気体へ滑らかに変化するように、熱力学的特性量である圧力、温度、内部エネルギー、比熱比を式 (2.7) に示す既燃気体の質量分率 Y_2 で線形内挿することで求める。式 (2.7) の添字 c は、基礎方程式を数値積分することで得られた値であり、その中で p_c , E_c , γ_c は既燃気体の値である。また、全体の圧力は式 (2.8) のように各気体種の分圧の和で表され、音速は式 (2.7), (2.8) の比熱比と圧力を用いて式 (2.9) で表される。

$$\begin{aligned}p_2 &= (1 - Y_2) \times p_c + Y_2 \times p_s \\ T &= (1 - Y_2) \times T_c + Y_2 \times T_s \\ E_2 &= (1 - Y_2) \times E_c + Y_2 \times E_s \rho_2 \\ \gamma &= (1 - Y_2) \times \gamma_c + Y_2 \times \Gamma_s\end{aligned}\quad (2.7)$$

$$p = p_1 + p_2 + p_3 \quad (2.8)$$

$$c = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}} \quad (2.9)$$

よって、基礎方程式の保存量である単位体積当たりの質量、運動量、全エネルギー (ρ , ρu , e) は、 ρ , ρu は数値積分された値が用いられるが、 e の値は上記モデルにより式 (2.10) のように修正される。

$$e = \rho_1 h_1 + \rho_3 h_3 + (E_2 + p_2) - p + \frac{1}{2} \rho u^2 \quad (2.10)$$

二次元で連続作動させる際、外部領域から管内への物理量の流入を正しく再現するために、開管端のマッハ数と圧力がそれぞれ 1.0 と 1.0 atm より低くなった際に等エントロピー膨張特性式の使用を停止している。そしてその後、再充填された爆轟性未燃気体が開管端に向かって伝播する過程で、その質量分率が 0.1 以上となった領域に対して等エントロピー膨張特性式を用い、再び開管端のマッハ数と圧力がそれぞれ 1.0 と 1.0 atm より小さくなった際には、その使用を停止するようにした。等エントロピー膨張特性式の使用を停止した際には、既燃気体は爆轟性未燃気体と不活性気体同様、そのエンタルピーは式 (2.4) で評価される。表 3 に、既燃気体の式 (2.4) 中の熱力学的関数における係数 a_{ji} を示す。その際の既燃気体の組成は、同条件における詳細化学反応モデルを用いた解析のプラトー圧での閉管端近傍の組成 (平均分子量 (24.225 kg/kmol)) である。なお、プラトー圧とはデトネーション波伝播後に閉管端において生じる静止既燃気体圧力が一定となる圧力値を指す。

3. 一次元 PDE を用いたモデルの検証

3.1. 数値計算法

解析手法として基礎方程式に一次元圧縮性 Euler 方程式を用い、積分法には Yee's Non-MUSCL type 2nd-order upwind TVD explicit scheme [11] を用いた、反応モデルには、提案した熱化学モデルとの比較のために詳細化学反応モデルと [12] 一段階反応モデル [4] を用いた。詳細化学反応モデルは 8 化学種 19 素反応の酸素水素化学反応であり、気体はエンタルピーが温度変化に従う熱的に完全な気体である。比較に用いる詳細化学反応流解析コードによる解析事例 [5] において、解析結果は実験結果と良好な一致を示している。一段階反応モデルでは、気体の比熱は一定とし反応による発熱のみを考慮し気体の組成変化は考慮していない。

本論文では片方が閉じられもう一方が大気開放された断面積変化のない円筒形のデトネーション管 (管長 0.1 m)、つまり単気筒 PDE を計算対象とする。境界条件は、閉管端では剛体壁を仮定し、開管端では超音速時に 0 次外挿、亜音速時に大気圧固定とする。初期に管内に満たされている爆轟性未燃気体と空気の条件は、298.15 K, 1.0 atm で静止しているとする。爆轟性未燃気体の充填率は、100 % と 50 % の二通りに関して解析を行う。本研究では、298.15 K, 1.0 atm の静止爆轟性未燃気体中を伝播する高圧起爆によって起爆されたデトネーション波管内伝播時の P , T , ρ , ρ_i , u , v について von Neumann Spike から C-J 状態までの分布を閉管端近傍に与える事によりデトネーションを起爆する。

一次元計算における格子解像度の影響について検証を行った。検証では、半反応距離当たりの点数を 1 点から 8 点まで変化させた。ここで式 (3.1) に示されるように、半反応距離 $l_{1/2}$ 当たりの格子点数で定義される格子解像度 g_{reso} の概念を導入する。

$$g_{reso} = \frac{l_{1/2}}{\Delta x} \quad (3.1)$$

Δx は、最小格子幅を表している。各格子解像度におけるデトネーション伝播速度は、半反応距離当たり 8, 4 点とした解析では 1970 m/s, 2 点では 1977 m/s, 1 点では 1980 m/s であった。よって、デトネーション伝播速度はどの格子解像度を用いても再現出来ることがわかった。図 2 は、各格子解像度に対する爆轟性未燃気体の充填率 50 % における閉管端圧力履歴を表す。横軸はデトネーション波が開管端に到達するまでの時間 t_{CJ} で無次元化した無次元時間を、縦軸は圧力を表す。格子解像度の違いによる履歴の差異は見られず、提案モデルの全ての履歴が詳細モデルの結果と定量的に良い一致を示している。図 3 は、伝播するデトネーション波前面が 0.042 m の位置に到達した際の圧力の管内分布を表している。横軸は閉管端からの距離を、縦軸は圧力を表している。半反応距離当たり 8, 4 点とした解析の von Neumann Spike のピーク値は詳細モデルの結果

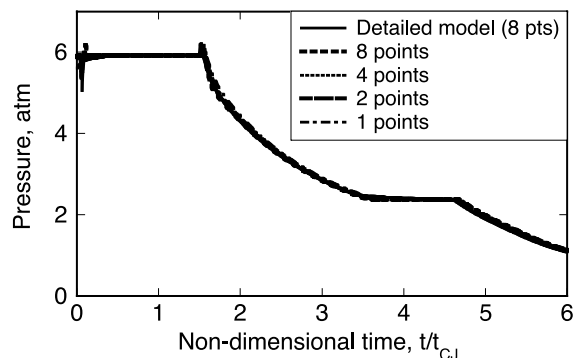


Fig.2 Pressure histories at the closed end in 50 % filling with various grid resolutions.

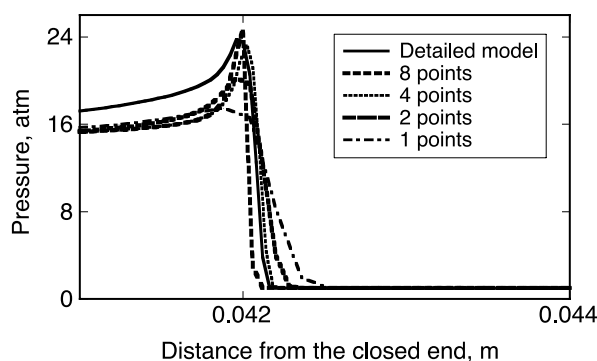


Fig.3 Pressure profiles when a detonation wave front is located at 0.042 m with various grid resolution.

と良い一致を示しているが、2, 1 点とした解析では低い値を示している。以上の結果より、提案モデルを用いて von Neumann Spike を再現するためには、最低でも半反応距離に 4 点以上配置する必要があることがわかった。よって、これ以降の解析では半反応距離に 4 点を配置する。詳細化学反応モデルに関しては、半反応距離に 8 点で固定とする。

3.2. モデルの検証

3.2.1. 無次元モデル定数による影響

提案モデルは二つの無次元モデル定数 (無次元活性化エネルギー E_0 と無次元反応頻度係数 K_0) を持つ。提案モデルの無次元モデル定数の違いによる影響を調べるため、無次元活性化エネルギーに $E_0 = 38$ と 50 の二つを用いて検証を行う。 $E_0 = 38$ は過去の報告 [6] を参考に、同条件の詳細化学反応モデルを用いた計算の反応物質質量分率の傾きから決定し、 $E_0 = 50$ は一段階反応モデルを用いた過去の論文 [7] を参考に決定した。図 4 は、定常一次元解析によって得られたデトネーション波内部での反応物質質量分率の変化を表している。横軸は反応開始点からの距離を、縦軸は反応物質質量分率を表している。提案モデルでは反応頻度係数 K は任意の定数であるため、本論文では例として図 4 に示すように詳細モデルによって得られた半反応距離を再現出来

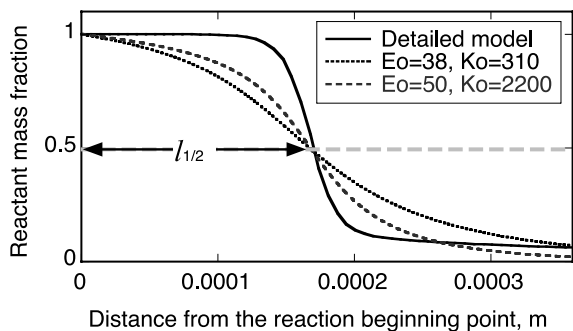


Fig.4 Change of a reactant mass fraction in internal structure of a detonation wave.

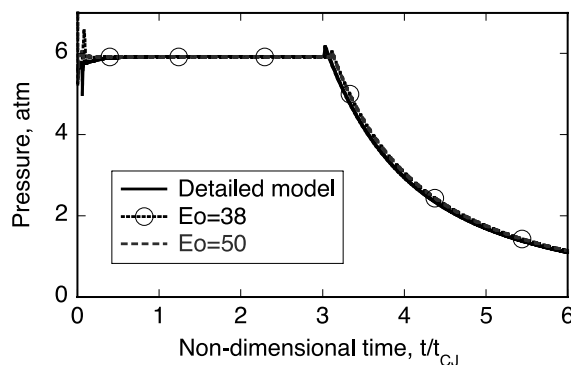


Fig.5 Pressure history at the closed end by difference of reaction constants.

Table 4 Coefficients of a fifth order polynomial of temperature for burnt gas. a) 300 ~ 1000 K, b) 1000 ~ 4000 K

(a)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
burnt	3.8333E+00	-1.4819E-03	3.7053E-06	-2.3228E-09	4.8959E-13	-9.4428E+03

(b)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
burnt	2.7980E+00	2.0034E-03	-6.8325E-07	1.1248E-10	-7.1360E-15	-9.1967E+03

る値を選んだ。本論文では水素空気の化学量論混合気を想定しているため半反応距離 $l_{1/2}$ の値は $167 \mu\text{m}$ [13]とし、無次元モデル定数には、 $E_0 = 38$ に対して $K_0 = 310$, $E_0 = 50$ に対して $K_0 = 2200$ の二組を用いた。

デトネーション伝播速度は、 $E_0 = 38$ とした際には 1970 m/s , $E_0 = 50$ とした際には 1962 m/s であった。一方、化学平衡計算ソフト AISTJAN [10]によって得られた速度は 1971.2 m/s , 詳細モデルを用いて得られた速度は 1962 m/s であった。よって、提案モデルでは無次元モデル定数を変化させてもデトネーション伝播速度は AISTJAN と詳細モデルを用いて得られた速度と良い一致を示し、C-J デトネーション波の伝播を再現する事が出来た。図 5 に、爆轟性未燃気体の充填率 100 % における閉管端圧力履歴を示す。提案モデルを用いて得られた履歴は詳細モデルを用いて得られた履歴と定量的に良い一致を示し、提案モデルの無次元定数の違いによる影響は見られない。よって以降の解析では、提案モデルの無次元モデル定数には $E_0 = 38$ と $K_0 = 310$ を用いた。

3.2.2. 等エントロピー膨張特性式の有効性について

提案した熱化学モデルでは、デトネーション波後方の既燃気体の組成が変化することを再現するために等エントロピー膨張特性式 (式 (2.5)) を用いている。ここでは、提案した熱化学モデルの精度と優位性を検証するために、提案した熱化学モデルにおいて既燃気体の振る舞いに等エントロピー膨張特性式を用いないモデルを用いた結果との比較を行った。提案したモデルにおいて等エントロピー膨張特

性式を用いない場合の既燃気体のエンタルピーは、等エントロピー膨張特性式の使用を停止した際と同様に式 (2.4) で評価され、その係数は表 4 で表される。既燃気体の組成は、AISTJAN によって得られる C-J 状態の組成 (平均分子量 23.90 kg/kmol) とした。デトネーション伝播速度は、等エントロピー膨張特性式を用いた場合では 1970 m/s , 用いない場合では 1995 m/s であった。比較のために、詳細化学反応モデル、一段階反応モデルにおける結果もあわせて示す。AISTJAN, 詳細化学反応モデル、一段階反応モデルの伝播速度は、それぞれ 1971 , 1962 , 1937 m/s であった。以上より、用いた全ての化学反応モデルは水素空気の化学量論混合気に対して正しい伝播速度を再現出来ている。

図 6 に、爆轟性未燃気体の充填率 100 % における閉管端と開管端の圧力と温度の時間履歴を示す。図 6(a), (c) の等エントロピー膨張特性式を用いない場合に見られる初期的な大きな振動は起爆の影響によるものである。これは、等エントロピー膨張特性式を用いない場合は用いた場合と比較し、デトネーションを発生させるためには 8 倍以上の着火エネルギーが必要となるからである。また図 6(a) の閉管端プラトー圧に関しては、等エントロピー膨張特性式を用いない場合では約 5.8 atm となり詳細モデルの結果 (5.9 atm) と比較し若干低い値を示すが、等エントロピー膨張特性式を用いた場合は正しく再現出来ている。これらの差異の原因は、既燃気体の組成を C-J 状態で凍結しているため C-J 状態以降の組成変化を正しく再現出来ていないからである。また等エントロピー膨張特性式を用いない場合では、初期的な振動以降もプラトー部分において常に振動が見ら

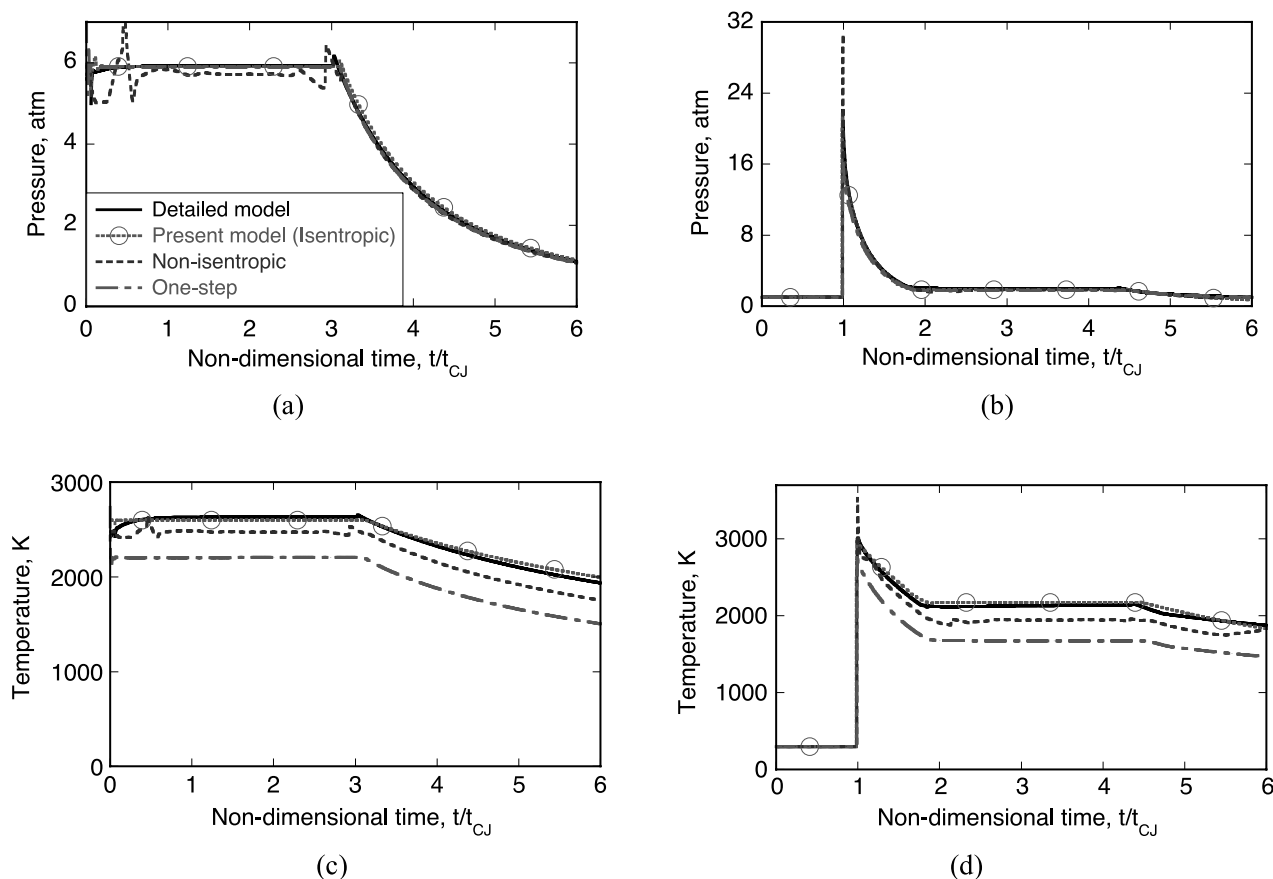


Fig.6 Histories in 100 % filling. (a) Pressure at the closed end, (b) Pressure at the open end, (c) Temperature at the closed end, (d) Temperature at the open end.

れる。これは起爆とデトネーション波面の振動により発生する擾乱の影響である。開管端からの膨張波が到達して以降の履歴は両場合とも詳細モデルの結果と良い一致を示している。図 6(b) の開管端圧力履歴では等エントロピー膨張特性式の有無による差異は見られず、詳細モデルの結果と良い一致を示している。また図 6(c), (d) の温度履歴に関しては、等エントロピー膨張特性式を用いない場合は詳細モデルの結果と比較し既燃気体の温度が約 200 K 低い、用いた場合は良い一致を示している。このことも、上述のように既燃気体の組成を C-J 状態で凍結していることによる。一段階反応モデルの結果に着目すると、図 6(a), (b) の圧力履歴は、詳細モデルの結果と定量的に良い一致を示している。しかし、図 6(c), (d) の温度履歴に関しては、一段階反応モデルの結果はデトネーション波後方の既燃気体の温度に関して詳細モデルより約 400 K 低い値を示している。その原因としては、一段階反応モデルでは混合気の組成変化を無視し、比熱比を一定として扱っているからである。

図 7 に、爆轟性未燃気体の充填率 50 % における閉管端と開管端の圧力と温度の時間履歴を示す。爆轟性未燃気体が部分充填されている場合、デトネーション波が爆轟性未燃気体と不活性気体の境界に到達した後は、衝撃波は減衰

しながら既燃気体に先行して開管端方向に伝播する。それと同時に、膨張波がその境界面から閉管端に向かって伝播する。図 7(a) の閉管端圧力履歴に関して、等エントロピー膨張特性式を用いない場合は充填率 100 % の場合にも見られたような振動が生じプラトー圧を正しく再現出来ていないが、用いた場合は詳細モデルの結果と良い一致を示している。図 7(b) の履歴に関して、先行する衝撃波による圧力上昇は両場合とも詳細モデルの結果と良い一致を示しているが、それ以降の履歴に関しては差異を生じている。図 7(c), (d) の温度履歴に関しては、充填率 100 % の場合同様、等エントロピー膨張特性式を用いた場合は詳細モデルの結果と良い一致を示しているが、用いない場合は既燃気体の温度を約 200 K 低く評価している。この原因も、既燃気体の組成を C-J 状態で凍結しているため C-J 状態以降の組成の変化を正しく再現出来ていないからであると考えられる。一段階反応モデルの結果については、図 7(a) よりその圧力履歴は境界面からの膨張波が到達して以降、詳細モデルの結果と比較し低い値を示している。これはモデルにおける既燃気体の比熱比が異なることに起因し、一段階反応モデルは他のモデルと比較し比熱比が大きいため、膨張波による減衰を大きく評価しているからである。

以上の結果より、一段階反応モデルはデトネーション伝

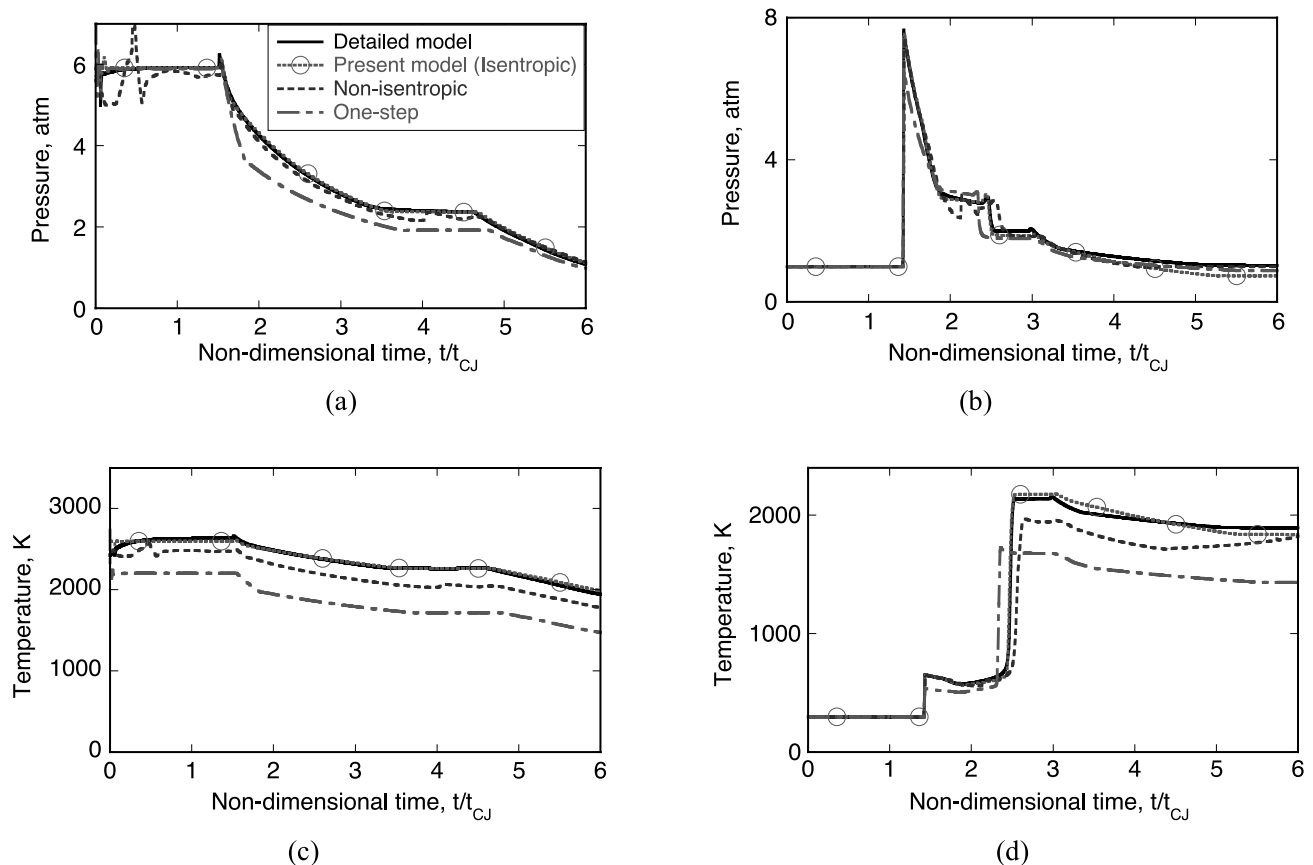


Fig.7 Histories in 50 % filling. (a) Pressure at the closed end, (b) Pressure at the open end, (c) Temperature at the closed end, (d) Temperature at the open end.

播速度と充填率 100 % の圧力履歴に関しては再現出来るが, 既燃気体の温度と部分充填効果は再現出来ないことがわかった. PDE をガスタービンエンジンへと応用するためにはデトネーション波後方の温度も正しく評価する必要がある. また過去の論文[1,13]より, 爆轟性未燃気体を部分充填させた場合の比推力とエネルギー効率が充填率 100 % の場合の効率より高くなる事が報告されており, 部分充填での性能を正しく評価出来る事は非常に重要である. 提案モデルはデトネーション伝播速度と充填率 100 % における圧力履歴だけでなく, 温度履歴さらには部分充填効果に関しても正しく再現出来たことから, 提案モデルの有用性は示された.

3.2.3. 提案熱化学モデルのスケール適応性について

提案した熱化学モデルは, 反応帯における詳細な化学反応を取り扱うことはせずに反応帯前後における熱の授受を表現することで管内を伝播するデトネーションを再現するモデルである. よって, 半反応距離を人工的に引き伸ばすことにより, 小さな計算負荷で実スケール (m オーダー) の計算に応用する事が出来る. 実スケールへ応用するためには, 式 (2.3) 中の K_0 , R_1 , T_0 と式 (3.1) の格子解像度 g_{reso} は定数であるので, 半反応距離を人工的に式 (3.3) に示す

人工の半反応距離 $l_{1/2,artifi}$ まで引き伸ばさなければならない.

$$K = K_0 \frac{(R_1 T_0)^{1/2}}{l_{1/2,artifi}}, \quad l_{1/2,artifi} = g_{reso} \cdot \Delta x \quad (3.3)$$

この節では, 実際に人工の半反応距離を $l_{1/2,artifi} = 3.2 \text{ mm}$ とした実スケール PDE の解析を行う.

図 8 は, 爆轟性未燃気体の充填率 50 % における閉管端圧力履歴である. 人工の半反応距離における結果は, 提案

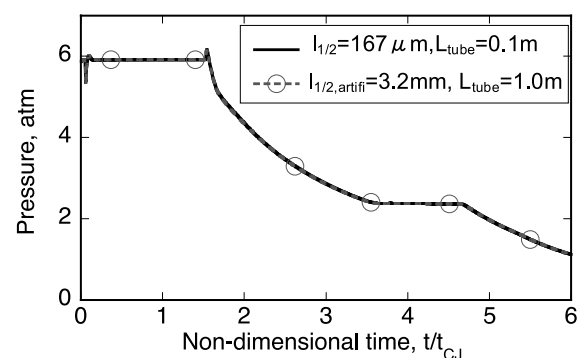


Fig.8 Pressure histories at the closed end in 50 % filling for real scale problem.

モデル(半反応距離に8点配置した解析)の結果と定量的に良い一致を示している。よって、提案モデルは適切な人工的半反応距離を設定する事により実スケールの計算に拡張する事が出来る事が確認出来た。

3.2.4 計算負荷

計算負荷の軽減に関して詳細モデルと提案モデルを用いて解析を行った。解析は、両モデルとも同一計算条件とし、計算環境は3.0 GHz, Pentium 4 processor (Northwood)を使用した。詳細モデルを用いて1000ステップ計算する為に要したCPU時間は105 secであった。一方、提案モデルを用いたCPU時間は9.68 secであり、提案モデルを用いる事により詳細モデルを用いた解析に要するCPU時間に対して一次元計算では約9%となり、大幅な計算負荷の軽減が出来た。

4. 二次元 PDE の連続作動解析への適応

4.1. 数値計算法

基礎方程式に二次元軸対称圧縮性 Euler 方程式を用い、解析手法は3章と同じである。反応モデルには、提案する熱化学モデルと詳細化学反応モデルを用いた。二次元解析では、単気筒 PDE とその外部領域を計算対象とする。初期に管内に満たされている爆轟性未燃気体と外部領域を含む大気の状態は、298.15 K, 1.0 atm で静止しているとする。爆轟性未燃気体の充填率は、100%と50%の二通りに関して解析を行う。計算境界の影響を小さくするためにデトネーション管長方向へ3.8倍、半径方向に10倍の外部領域を設けている。提案モデルの解析にはデトネーション管長と半径は2.0 mと0.16 mとし、詳細化学反応モデルの解析には20 mmと1.6 mmとして、デトネーション管内の計算格子に1001×11点の等間隔直交格子を用いた。外部領域を含む総格子点数は1401×61点である。

デトネーション管の閉管端での境界条件は、PDE の作動サイクルのシーケンスに従う。その作動シーケンスは、閉管端にあるバルブによってコントロールされ、三つの過程(バルブ閉鎖過程、パージ過程、再充填過程)からなっている。バルブの応答時間は単純化の為に無視され、バルブは常に完全に閉じているか開いているかのどちらかである。またバルブの開口部面積は、デトネーション管の断面積と同じとする。バルブ閉鎖過程(τ_{close})とは、バルブが閉じられ、管内の状況がデトネーション起爆、伝播、既燃気体の排気と進行していく過程のことである。パージ過程(τ_{purge})とは、新しい爆轟性未燃気体を閉管端から噴射した際に以前のサイクルの高温既燃気体と混合し自発着火することを避けるために、少量の冷たいパージガス(本解析では空気)を管内に噴射する過程のことである。再充填過程(τ_{refill})とは、そのパージガス噴射後、次のサイクルのデトネーションを起爆させるために爆轟性未燃気体を管内に再充填する過程のことである。これら三つの過程の総和を作動サイク

ル時間、 $\tau_{cycle} = \tau_{close} + \tau_{purge} + \tau_{refill}$ とする。本論文では作動サイクル時間 τ_{cycle} を 0.02 sec, 周波数としては 50 Hz を想定する。バルブが閉じている時の閉管端の境界条件は剛体壁と仮定し、パージ過程と再充填過程では、バルブの上流に全圧と全温がそれぞれ 4.0 atm と 298.15 K の貯気槽があるとする。そしてその貯気槽状態から等エントロピー的に膨張すると想定し、閉管端から音速で噴射する。本論文では、噴射されるパージガスと爆轟性未燃気体の質量は管内に初期に満たされている爆轟性未燃気体 (298.15 K, 1.0 atm) の質量と同量とする。そして再充填過程の二倍の時刻が経過した後に、デトネーションを起爆させる。本研究では、一次元解析同様デトネーション波管内伝播時の P , T , ρ , ρ_b , u , v について von Neumann Spike から C-J 状態までの分布を閉管端近傍に与える事によりデトネーションを起爆する。外部領域の境界条件には、Rudy and Strikwerda [14]の無反射境界条件を用いる。

4.2 結果および考察

4.2.1.1 サイクル目の解析

図9に、爆轟性未燃気体の充填率100%の場合の1サイクル目 $t/t_{CJ} = 9.1$ における温度空間分布を示す。図中の上段は提案モデルを用いた際の分布を、下段は詳細モデルの分布をそれぞれ表している。管外部の流れ場は、外部大気領域の静止空気と伝播する既燃気体との境界で生じる大きな速度差の影響により、先行する接触不連続面後方にいくつかの渦が形成され大気を巻き込み複雑な流れ場となっている。上下の比較より、提案モデルと詳細モデルで良い一致を示していることがわかる。

図10と11に、爆轟性未燃気体の充填率が100%と50%における1サイクル目の閉管端圧力履歴と開管端温度履歴を示す。両図の閉管端圧力履歴において、 $t/t_{CJ} = 0$ でデトネーション波が起爆され、プラトー圧状態が続いた後、爆轟性未燃気体と不活性気体の境界面で発生した膨張波が閉管端に到達し圧力が減衰し、その後、それぞれ $t/t_{CJ} = 14$ と 17 においてパージガスが閉管端より噴射され、 $t/t_{CJ} = 16$ と 18 において爆轟性未燃気体が再充填され始める。図10(b)に示す開管端の温度履歴に関して、 $t/t_{CJ} = 8$ 以降、詳細反応モデルの結果と異なる振る舞いを示すが、提案モデルの結果は全体的に良い一致を示している。

4.2.2. 連続作動の解析

図12に、爆轟性未燃気体の充填率100%の場合の連続作動時における開管端の全圧と質量流量の時間履歴を示す。タービン入口における全圧と質量流量の時間履歴はPDEをガスタービンエンジンに応用する際には重要な値となる。図より連続作動は3サイクル目以降ほぼ定常サイクルに達することがわかる。図13に、爆轟性未燃気体充填率100%の場合の3サイクル目 $t/t_{CJ} = 42.3$ における温度空間分布を示す。提案モデルの結果は詳細モデルの結果とほぼ一致している。デトネーション波は開管端に到達し、既

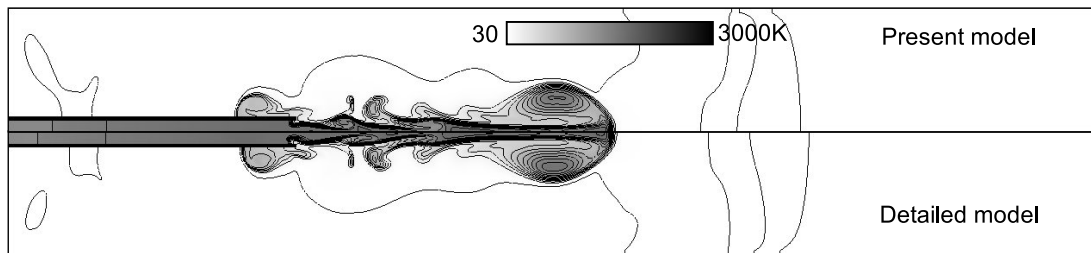
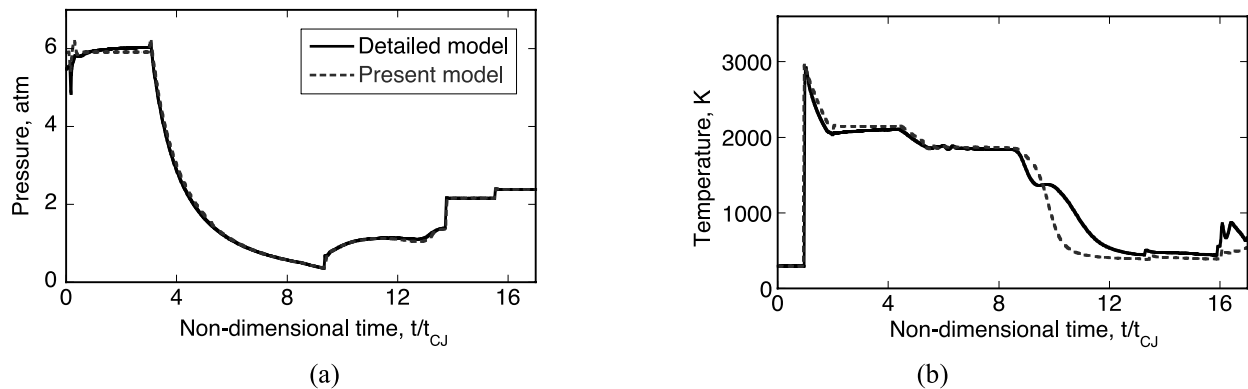
Fig.9 Temperature field of 1st-cycle operation in 100 % filling at $t/t_{CJ} = 9.1$.

Fig.10 Histories of 1st-cycle operation in 100 % filling. (a) Pressure at the closed end, (b) Temperature at the open end.

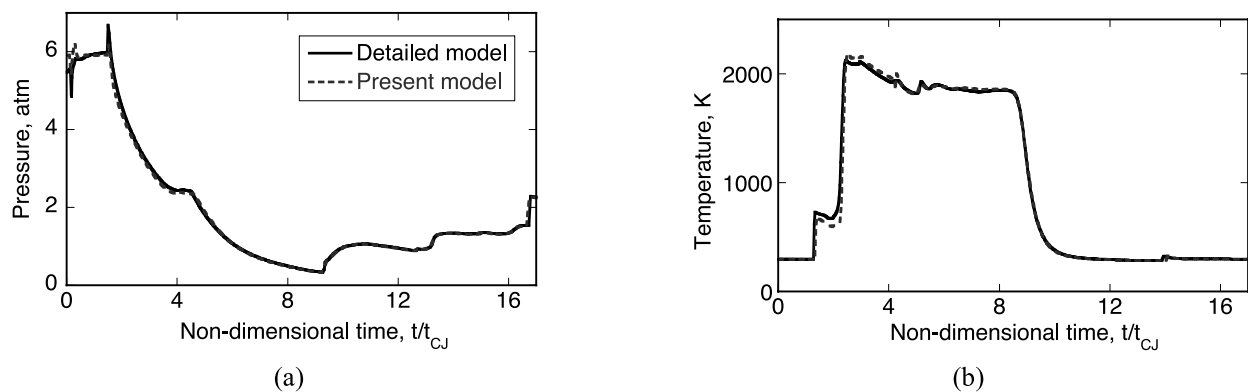


Fig.11 Histories of 1st-cycle operation in 50 % filling. (a) Pressure at the closed end, (b) Temperature at the open end.

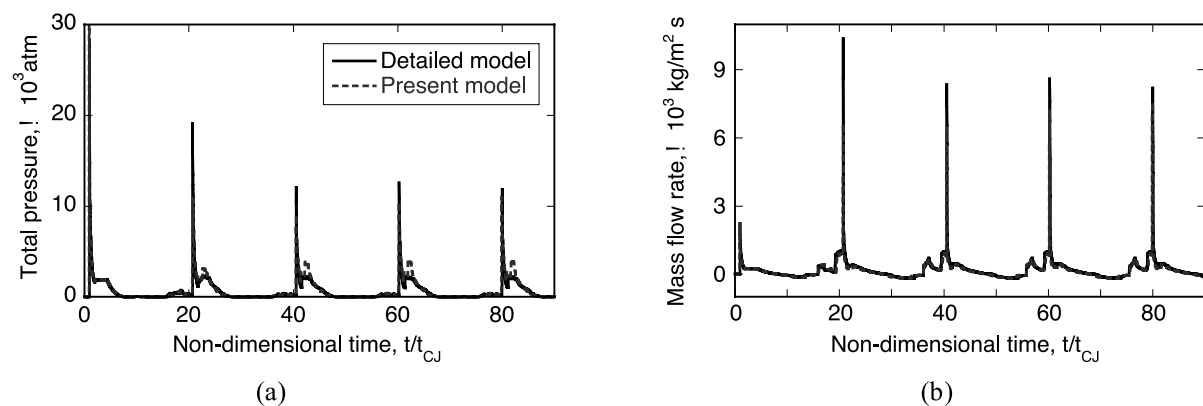


Fig.12 Histories of multiple-cycle operation at the open end in 100 % filling. (a) Total pressure, (b) Mass flow rate.

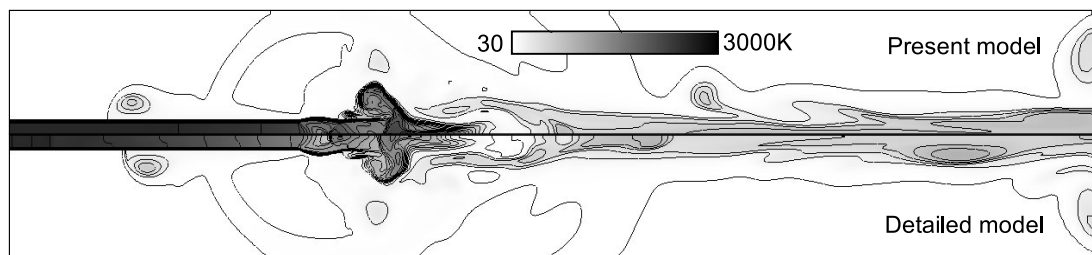
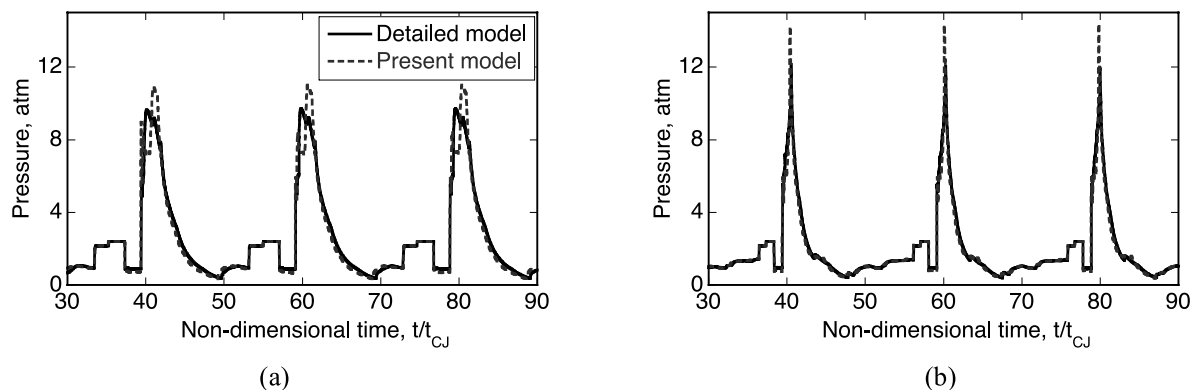
Fig.13 Temperature field of 3rd-cycle operation in 100 % filling at $t/t_{CJ} = 42.3$.

Fig.14 Pressure histories after 3rd-cycle operation at the closed end. (a) In 100 % filling, (b) In 50 % filling.

燃気体が温度を減衰させながら外部領域を伝播しているのが観察される。また高温既燃気体の分布は両モデルの結果とも同様の分布を示しているが、提案モデルの温度は詳細モデルの温度と比較し若干高くなっている。

図 14 に、爆轟性未燃気体の充填率が 100 % と 50 % における 3 サイクル目以降の閉管端圧力履歴を示す。それぞれの充填率に対し、 $t/t_{CJ} = 33$ と 37 においてパージガスが管内に噴射され、 $t/t_{CJ} = 36$ と 38 において爆轟性未燃気体が再充填され始め、充填後は両充填率ともにバルブは閉じられ、 $t/t_{CJ} = 39$ にデトネーション波は起爆されている。その後パージガスが $t/t_{CJ} = 53$ と 57 において再び噴射され、サイクルが継続していく。図 14(a) の各サイクルの圧力ピークにおいてデトネーション起爆の影響により提案モデルと詳細モデルの結果に若干の差異は見られるが、全体的には履歴に関して定量的に良い一致を示している。以上より、提案モデルはデトネーション波の連続作動時においてもインパルスや推力を精度よく予測できることがわかった。

図 15, 16 に、爆轟性未燃気体の充填率が 100 % と 50 % における 3 サイクル目以降の開管端の圧力、温度、全圧、質量流量の時間履歴を示す。温度履歴より、提案モデルの結果はパージガス前方の高温既燃気体の温度が詳細モデルの温度より高い値を示し、高温部の持続時間に関しても若干短く評価している。その原因としては、起爆による影響が考えられる。さらに圧力と全圧に関しては衝撃波と接触不連続面の到達時のピーク値に関して詳細モデルの結果と差異は見られるものの、全体としては良い一致を示してい

る。よって、提案モデルはデトネーション波の連続作動時において熱力学的特性量の予測が可能であり、PDE をガスタービンエンジンに应用するための解析などにおいて多くの利点を有すると考えられる。

4.2.3 計算負荷

二次元解析についても計算負荷の軽減について記す。計算環境は 3.2.4 と同じである。1000 ステップ計算する為に要した CPU 時間は、詳細モデルを用いて 2970 sec、提案モデルを用いて 415 sec となり、提案モデルを用いる事で、詳細モデルを用いた解析の約 14 % の負荷となり、大幅な計算負荷の軽減が出来た。

5. 結言

本研究では、管内を伝播するデトネーション波の数値解析において、詳細化学反応モデルを用いた解析で得られる流れ場の再現を低計算負荷で実現するための熱化学モデルを提案した。本論文で提案した熱化学モデルは、三気体種(爆轟性未燃気体、既燃気体、不活性気体)によって構成されている。化学反応に関しては、未燃気体が一段階不可逆反応のもとで既燃気体になると仮定した。爆轟性未燃気体と不活性気体に対するエンタルピーは温度の関数として表され、既燃気体は等エンタルピー的に膨張するとした。

提案した熱化学モデルを用いて次元単発作動と二次元連続作動の単気筒 PDE の解析を行った。次元単気筒単

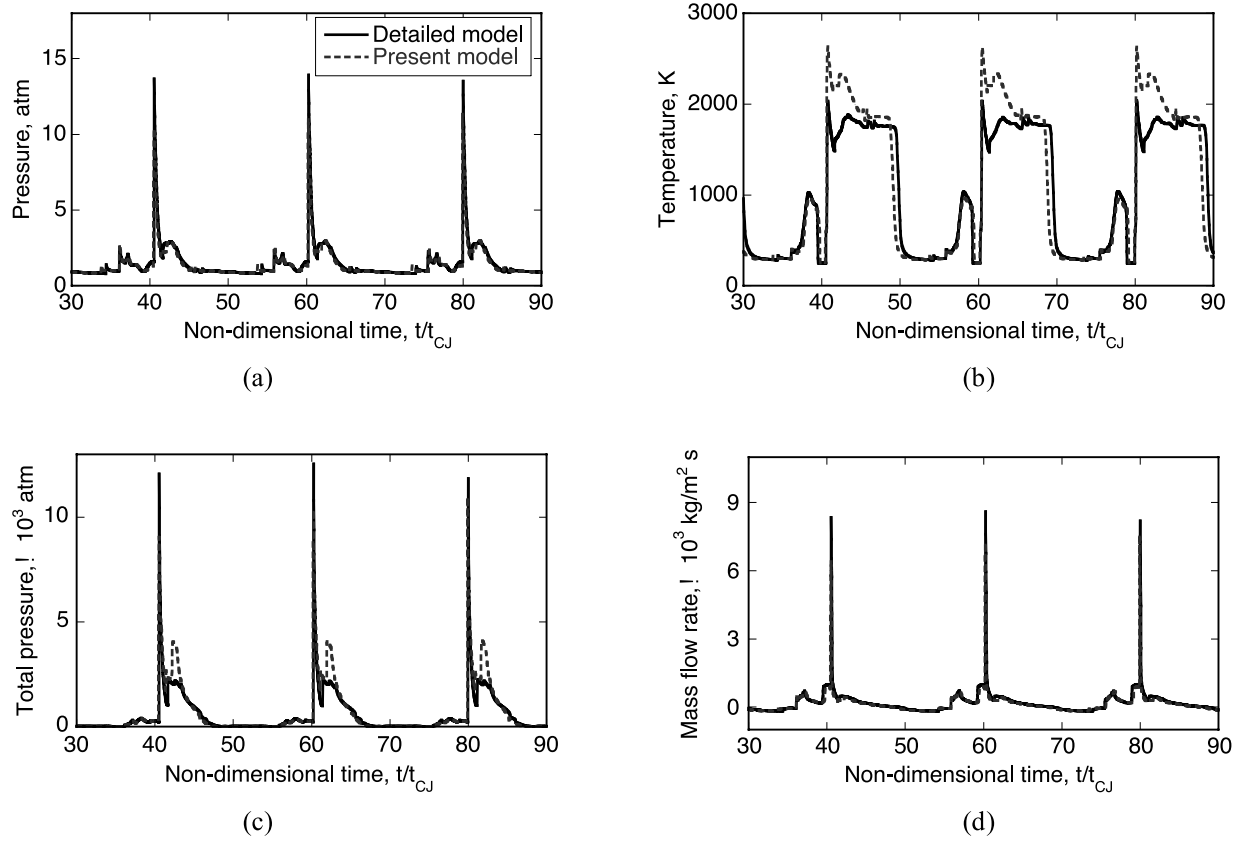


Fig.15 Histories after 3rd-cycle operation at the open end in 100 % filling. (a) Pressure, (b) Temperature, (c) Total pressure, (d) Mass flow rate.

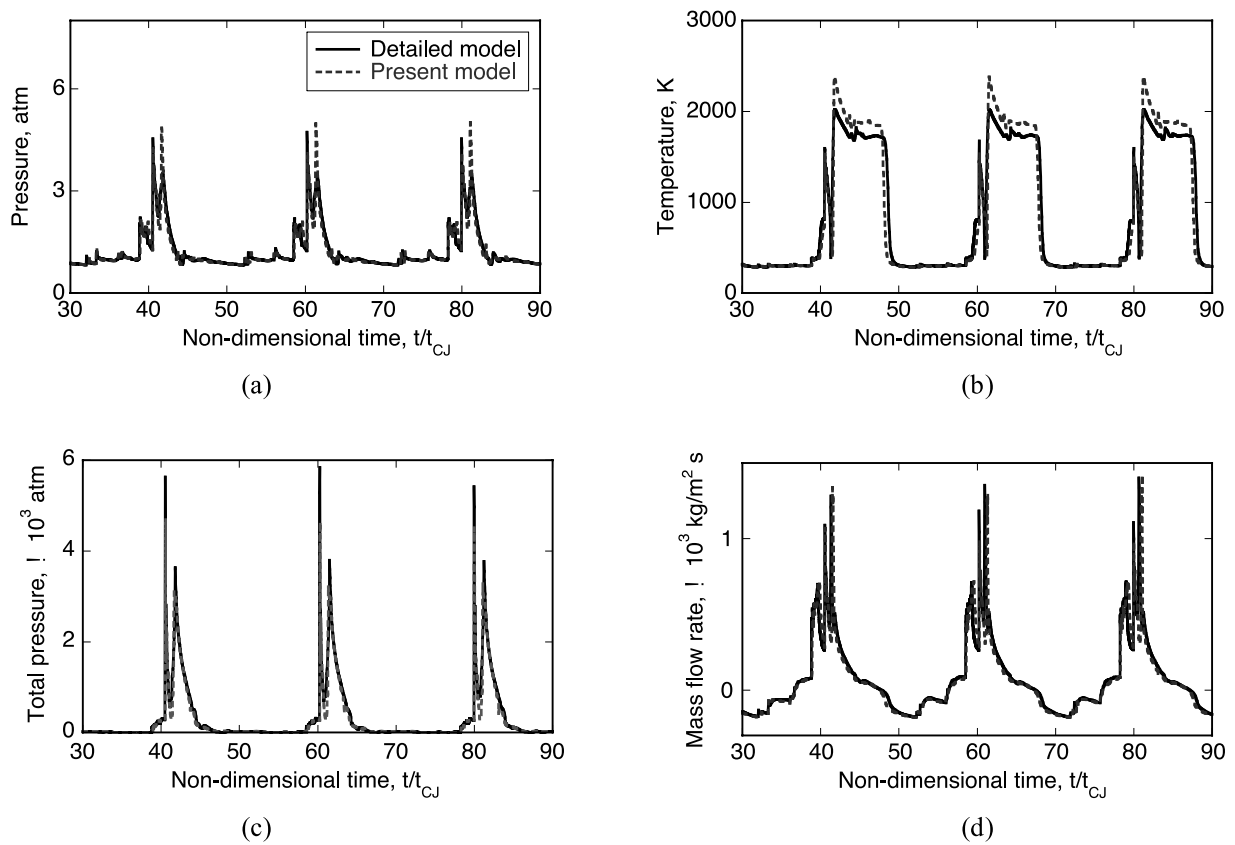


Fig.16 Histories after 3rd-cycle operation at the open end in 50 % filling. (a) Pressure, (b) Temperature, (c) Total pressure, (d) Mass flow rate.

発作動 PDE の解析では、提案モデルの精度と優位性を検証するために詳細化学反応モデルと一段階反応モデルを用いた解析と比較をした。提案モデルの結果は詳細モデルの結果と比較し、充填率 100 % と 50 % における圧力と温度の履歴に関して定量的に良い一致を示した。また提案モデルを用いる事により、一段階反応モデルでは再現出来ていなかった既燃気体の温度履歴と部分充填効果に関して、高い精度で再現する事が出来た。二次元単気筒連続作動 PDE の解析では、提案モデルと詳細化学反応モデルを用い、熱力学特性量の空間分布とその履歴に関して検討した。連続作動の解析により 3 サイクル目以降ほぼ定常サイクルとなった。提案モデルの熱力学特性量の空間分布とその履歴は詳細モデルの結果と比較し、良い一致を示した。計算負荷に関しては、提案モデルを用いる事により、詳細反応モデルを用いた解析に要する CPU 時間に対して、一次元計算では約 9 %, 二次元計算では約 14 % となり、大幅な計算負荷の軽減が出来た。以上の結果より、提案モデルを用いる事によって管内を伝播するデトネーションの数値解析に対して、高い精度を維持し、計算負荷を大幅に軽減することが可能であることがわかった。

謝辞

本研究は独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)、平成 15 - 18 年度産業技術研究助成事業の助成金により行われました。

References

1. Kailasanath, K., *AIAA Journal*, vol.38, No.9: 1698-1708 (2000).
2. Kailasanath, K., *AIAA Paper*, 2001-0474 (2001).
3. Endo, T., Yatsufusa, T., Taki, S., and Kasahara, J., *Science and Technology of Energetic Materials* (In Japanese), vol.65, No.4: 103-110 (2004).
4. Ma, F.H., Choi, J.Y., and Yang, V., *Journal of Propulsion and Power*, vol.21, No.3: 512-526 (2005).
5. Sato, S., Matsuo, A., Endo, T., Kasahara, J., *Journal of Propulsion and Power*, vol.22, No.1: 64-69 (2006).
6. Daimon, Y., Ph.D. Dissertation, School of Science for Open and Environmental Systems, Graduate School of Science and Technology, Keio Univ., Yokohama, Japan (2004).
7. Daimon, Y., and Matsuo, A., *Phys. Fluids* 15: 112 (2003).
8. Wilson, G.J., Ph. D. Dissertation, Department of Aeronautics and Astronautics, Stanford Univ., Stanford, CA, USA (1991).
9. Tanaka, K., Inaba, K., Matsuo, A., and Kasahara, J., *Shock wave symposium lecture thesis collection* (In Japanese): 141-144 (2004).
10. Tanaka, K., AISTJAN, <http://www.aist.go.jp/RIODB/ChemTherm/index-E.html>
11. Yee, H.S., "Upwind and Symmetric Shock Capturing Schemes", NASA TM 89464, 1987.
12. Matsuo, A., Fujii, K., and Fujiwara, T., *AIAA Journal*, vol.33, No.6: 1056-1063 (1995).
13. Inaba, K., Ph.D. Dissertation, School of Science for Open and Environmental Systems, Graduate School of Science and Technology, Keio Univ., Yokohama, Japan (2004).
14. Rudy, D.H., and Strikwerda, J.C., *Journal of Computational physics* 36: 55-70 (1980).