

3A07 障害物を有する管内における H_2/O_2 予混合気の爆轟遷移 に関する数値解析：水蒸気添加と3次元の影響について

○須田悠太，檜山瑞樹，伊藤拓海，坪井伸幸（九州工業大学）

林光一（青山学院大学），Dzieminska Edyta（上智大学）

大西史倫，富塚孝之，高橋淳郎，中森一郎（アドバンスソフト），小玉貴司，佐藤直弥（日本原燃）

Numerical Simulation on DDT of Premixed H_2/O_2 in a Duct with Repeated Obstacles: Effects of Steam Addition and Three-Dimensional Effects

Yuta Suda and Mizuki Hiyama and Takumi Ito and Nobuyuki Tsuboi (Kyusyu Institute of Technology)

Koichi Hayashi (Aoyama Gakuin University), Dzieminska Edyta (Sophia University)

Fumitomo Onishi and Takayuki Tomizuka and Atsuo Takahashi and Ichito Nakamori (AdvanceSoft Corporation)

Takashi Kodama and Naoya Satou (Japan Nuclear Fuel Limited)

Key Words : Numerical Analysis, Transition

Abstract

Detonation is a combustion phenomenon characterized by a shock wave propagating at approximately five times the speed of sound and sustained by combustion induced behind the shock wave. The Deflagration to Detonation Transition (DDT) is one form of detonation occurrence, however, there are many unknowns about the mechanism. In this study, DDT in a hydrogen-oxygen premixed gas was numerically investigated under variations in water vapor addition, the application of the Artificial Thickening Flame (ATF) method, and simulation dimensionality. The ATF method reproduced physically valid flame propagation behavior, confirming its effectiveness in DDT simulations. Water vapor addition had little effect on flame speed, and 3D simulations showed delayed detonation onset compared to 2D, while the detonation wave velocity remained consistent.

1. はじめに

デトネーション（爆轟）とは、音速の5倍程度で伝播する衝撃波を伴った燃焼波であり、衝撃波に誘起された燃焼波が反応性混合気中を衝撃波とともに持続的に伝播する燃焼現象である。デトネーションの研究は現在、デトネーションをPDE

（Pulse Detonation Engine）やRDE（Rotating Detonation Engine）等の推進機に応用する研究と、デトネーションの伝播機構や発生メカニズムを解明する研究の二つに大別され、本研究は後者に位置づけられる。

デトネーションの発生方法には直接開始と間接開始があるが、本研究にて解析するデフラグレーションからデトネーションへの遷移（DDT: Deflagration to Detonation Transition）は間接開始に分類される。DDTは特定の条件下で亜音速で伝播する通常の燃焼波であるデフラグレーションがデトネーションへと遷移する現象であり、非常に小さいエネルギーからでもデトネーションが発生してしまう現象として、プラントや原子力関連施設等での事故防止という安全工学の観点から多くの

研究が行われている。しかし現状として、DDTを理論的に予測するまでには至っていない。主な原因として、DDTの発生するメカニズムが多様である点が挙げられる。古典的な1966年のOppenheimらの実験[1]においても、少なくとも4つのパターンが確認されている。さらにDDTの発生メカニズムは、管内の初期温度・初期圧力のみならず、ガスの組成や管内の障害物の幾何的条件によっても大きく変化することが明らかになっている[2]。したがって、それら複数の条件に変更を加えて実験や数値解析を行うことが求められる。

また、DDTは数値解析において高い計算コストが要求される点も課題が残る。一般的にデトネーションの計算においては伝播が極めて高速であることから拡散や熱伝導、粘性の影響を無視できるためEuler方程式が用いられるが、DDTでは拡散や熱伝導、粘性の影響を強く受けるためNavier-Stokes方程式を用いる必要がある。また、DDTにおいては局所爆発での化学反応を詳細且つ正確に捉える必要があるため、燃焼モデルとして1段階反応モデルより遥かに計算コストの大きい詳細反応モデル

を用いる必要がある。さらに、デトネーションでは非常に狭い領域で短い時間で急激に物理量が変化するため、細かい計算格子を用いなければデトネーションを捉えることが困難であり、とりわけ3次元の計算では莫大な計算コストを要する。この問題を解決する一案として、ATF法（Artificial Thickening Flame Method）[3][4]と呼ばれる方法がある。

ATF法とは、支配方程式であるNavier-Stokes方程式の時間と座標にパラメータ \mathcal{F} を掛けることで、人工的に反応帯を厚くでき、比較的粗い計算格子であってもDDTを捉えることが可能である。ATF法での詳細な計算方法については次章にて説明する。

さらに、DDTは予混合気の化学組成にも大きく依存することが知られており、例えば水蒸気の添加によって層流火炎速度が低下し、デトネーション遷移距離が増加することが知られている[5]。そのため、本研究では水蒸気を添加したケースについても解析を行った。

そこで本研究では、水蒸気の添加の有無、ATF法の適用の有無、2次元と3次元での次元効果の3つに絞り、これらが火炎の伝播やDDTのメカニズムにどのような影響を与えるかを調査することを目的として数値解析を行った。

2. 数値解析手法

支配方程式は8つの化学種（ H_2 , O_2 , O , H , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O ）の質量保存を含む2次元の圧縮性Navier-Stokes方程式である。対流項の扱いはHLLC/LLFスキームを用い、制限関数にminmod limiterを用いた2次精度MUSCL法によって空間精度を向上させている。時間積分は3次精度TVD Runge-Kutta法、粘性項は2次精度中心差分法、生成項にはPoint Implicit法を用いている。反応モデルには9化学種（ H_2 , O_2 , O , H , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O , N_2 ）の21素反応を持つ詳細化学反応モデルであるUT-JAXAモデル[6]を用いた。

ATF法を適用したNavier-Stokes方程式は次のように表される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \nabla(\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + p \boldsymbol{\delta} - \mathcal{F} \boldsymbol{\tau}) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial \tau} + \nabla[(E + p) \mathbf{u} + \mathcal{F} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} + \mathcal{F} \mathbf{q}] = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial \tau} + \nabla(\rho_i \mathbf{u} - \rho \mathcal{F} D_i \nabla Y_i) = \dot{\omega}_i / \mathcal{F} \quad (4)$$

ρ : density
 t : time
 \mathbf{u} : velocity vector
 p : pressure
 Y_i : mass fraction of chemical species i
 D_i : diffusion coefficient of chemical species i
 $\dot{\omega}_i$: production rate of chemical species i
 $\boldsymbol{\delta}$: unit tensor
 E : energy
 $\boldsymbol{\tau}$: viscous stress tensor
 \mathbf{q} : heat flux vector

ここで \mathcal{F} はflame sensorと呼ばれ、火炎厚さを決定するパラメータである。 $\mathcal{F} = 1$ であれば、通常のNavier-Stokes方程式となる。 \mathcal{F} は以下の式にて計算される。

$$\mathcal{F} = \max(\alpha \mathcal{F}_1, 1) \quad (5)$$

$$\mathcal{F}_1 = 1 + (\mathcal{F}_{\max} - 1) \Omega \quad (6)$$

$$\Omega = 16[c(1 - c)]^2, c = Y_{\text{H}_2\text{O}} / Y_{\text{H}_2\text{O}}^{eq} \quad (7)$$

$$\alpha = \tanh\left(\frac{\max(h_{\text{release}}, 0)}{(h_{\text{release}, \max})}\right) \quad (8)$$

$$\mathcal{F}_{\max} = \max\left(\frac{N \Delta}{\delta_L}\right) \quad (9)$$

δ_L : laminar flame thickness
 N : number of grid points in the laminar flame thickness
 Δ : grid width

計算での火炎の加速の程度は N に大きく依存し、2021年の坪井らの計算[3]によって $N = 5, 10, 20$ での火炎伝播速度を実験の結果と比較すると、 $N = 10$ で最も火炎加速の予測が良好であったことが示されているため、本研究ではATFを用いたケースでは $N = 10$ を採用している。

3. 計算条件

本研究では、現在、Dzieminskaらの実験で用いられている形状（図1）に合わせて数値計算を行った。40×40 mmの矩形の管内に24個の厚さ2 mm、高さ20 mmの障害物を有する形状であり、障害物の管内における閉塞率を表すBR（Blockage Ratio）は0.5である。用いる計算格子を図2に示す。2次元の計算格子は4378×85の約37万点のものであり、平均格子幅は約0.5 mmとなっており、3次元の計算格子は4378×85×51の約1900万点のものである。

計算を行ったケースを表1に示す。2次元では、

ATFの適用の有無、乾燥状態か飽和状態（相対湿度100%）の組み合わせの計4ケース、3次元では、ATFの適用の有無の計2ケースについて解析を行った。いずれも、初期圧力は0.4 atm (40530 Pa)、初期温度は24 °C (297.15 K)、未燃ガスの組成は、当量比は1の化学量論的H₂/O₂予混合気である。計算に用いる燃焼前後の各化学種の質量分率と断熱火炎温度は、Canteraを用いて計算した1次元の結果を用いた。また、相対湿度を質量分率に換算する際の飽和水蒸気圧の算出には、日本機械学会の推算式[7]を用いた。

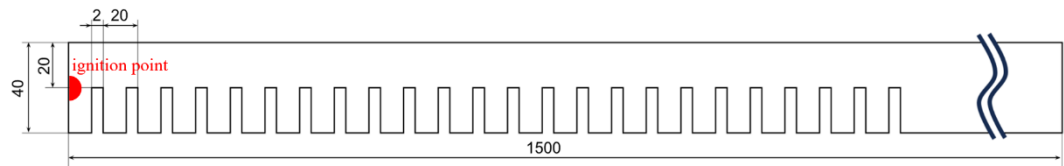


Fig. 1 Geometry of the experiment by Dzieminska et al. Unit is mm.

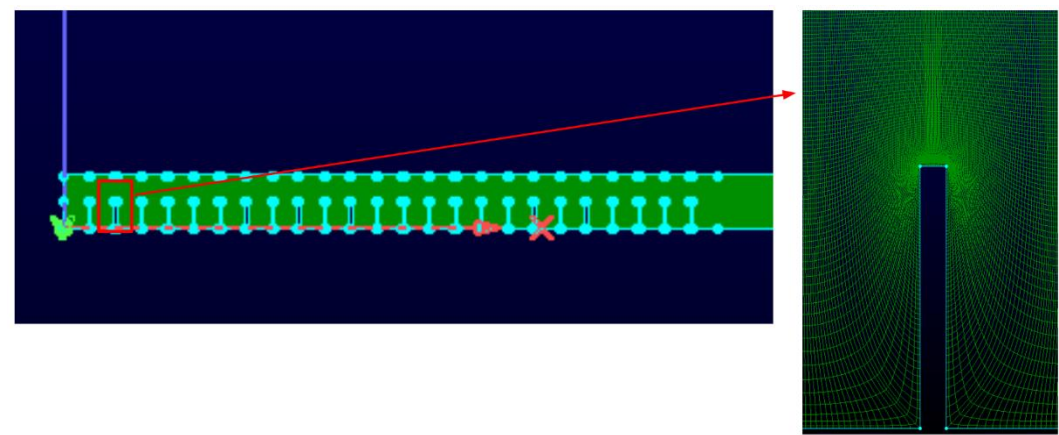


Fig. 2 Computational grid (4378×85).

Table 1 Calculation conditions.

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6
Dimension	2D				3D	
ATF parameter	w/o atf	N=10	w/o atf	N=10	w/o atf	N=10
Relative Humidity	0 %	0 %	100 %	100 %	0 %	0 %

4. 計算結果および考察

4.1 DDTのメカニズム

Case 1の数値シュリーレンを図3に示す。火炎が加速したのち、局所爆発は障害物3と4の間で発生し、デトネーションへ遷移しており、DDTの一連のプロセスを明確に捉えることができた。

火炎は障害物を通過するたびに伸長・折りたたまれ、表面積の増加に伴って火炎の加速（FA: Flame Acceleration）が生じる。このFAでは、Rayleigh-Taylor不安定性やRichtmyer-Meshkov不安定性、Kelvin-Helmholtz不安定性によって火炎の乱流化が促進される。0.293 msでは火炎前方に衝撃波が形成されている様子が確認でき、この衝撃波は0.298 msで障害物3の壁面に衝突する（図5、6）。このとき、局所的に温度や圧力が上昇し、エネルギーが集中することで局所爆発が発生し、デトネーションへと遷移したと考えられる。

局所爆発の発生した位置に差異はあるものの、類似した事象がGoodwinらの数値計算[2]での本研究と同様の高BRの計算で確認できる。Goodwinらの数値計算では本研究とは組成などの諸条件が異なるものの、DDTのメカニズムに類似点が見られることから、組成によらずDDTのメカニズムはBRへの依存性が支配的である可能性が考えられる。しかし現時点ではそれを断定するには不十分であり、異なる組成や幾何条件における更なる検討が必要である。

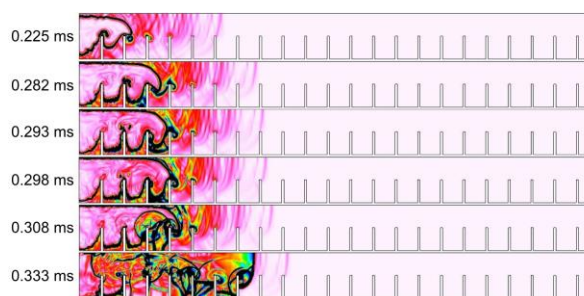


Fig. 3 Density gradient contours of Case 1.

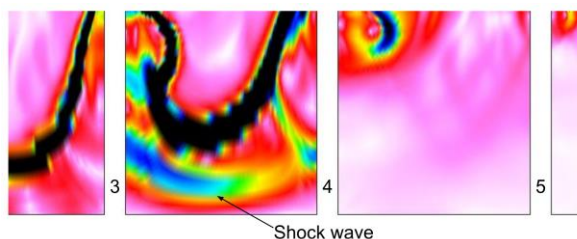


Fig. 4 Enlarged view near 3rd obstacle at t=0.293 ms.

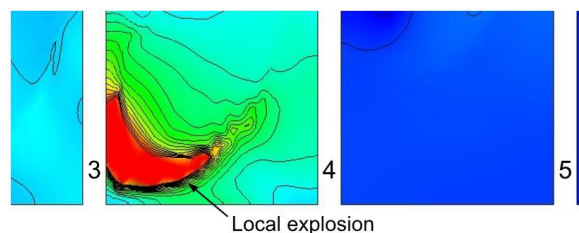


Fig. 5 Pressure contours (enlarged view near 3rd obstacle) at t=0.298 ms

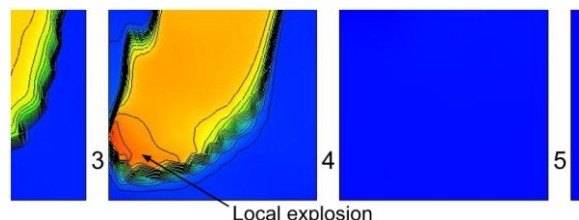


Fig. 6 Temperature contours (enlarged view near 3rd obstacle) at t=0.298 ms

4.2 ATFの適用と水蒸気添加の影響

図7に2次元のケース（Case 1~Case 4）の火炎伝播速度を示す。まず、ATFの適用の有無による比較（Case 1とCase 2）からは、両者の火炎伝播速度に顕著な差は認められなかった。この結果は、火炎厚さを人工的に拡大するATF法を用いても、物理的に妥当な火炎伝播挙動が再現されていることを示しており、ATF法が本ケースにおいても有効であることが確認された。

次に、水蒸気の添加の有無（Case 1とCase 3）の比較を行った。Case 3では水蒸気を約7.4 vol%添加したが、デトネーション遷移距離の変化や火炎伝播速度の低下はほとんど確認できなかった。その原因として、 H_2/O_2 予混合気では水素と酸素の燃焼反応が極めて強く、水蒸気添加の効果が顕在化しにくいことが考えられる。この傾向は、補足として実施したCanteraを用いて計算した1次元層流火炎伝播の計算における H_2/O_2 および H_2/Air 予混合気での水蒸気添加による火炎速度の変化（図8、9）からも裏付けられる。

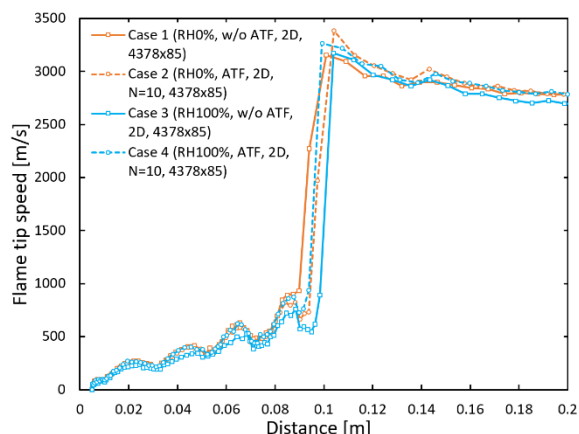


Fig. 7 Comparison of flame tip speed for Case 1 to Case 4.

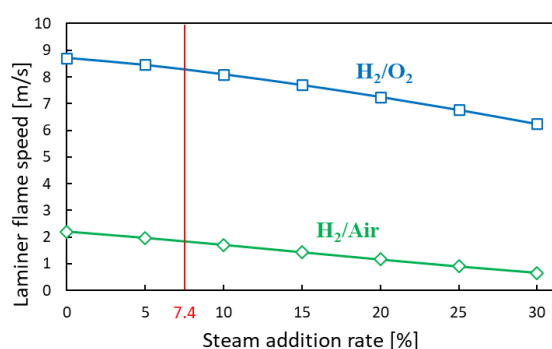


Fig. 8 Comparison of laminar flame speeds for H_2/O_2 and H_2/air with steam addition.

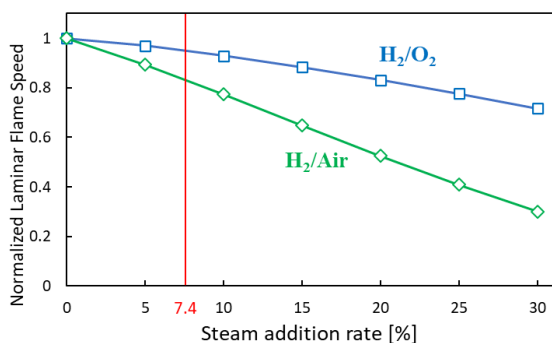


Fig. 9 Normalized comparison of laminar flame speeds for H_2/O_2 and H_2/air with respect to zero steam addition.

4.3 2次元と3次元のDDTの比較

図10にCase 1とCase 5の4点の圧力履歴を示す．各点の位置は図11に示す通りである．全ての点において，3次元計算の結果ではデトネーション波が通過した時刻が，2次元計算と比較しておよそ0.6 ms 遅いことが確認された．また，PCB1におけるデトネーション波の通過時の最大圧力を比較すると，2次元計算では3次元計算より2倍近く高い圧力を示しているが，これはデトネーション波が極めて薄い波面厚さであることに起因する時間的なサンプリング誤差によるものであると考えられる．一方

で，デトネーションの伝播速度は2次元と3次元で差異はないことが分かる．

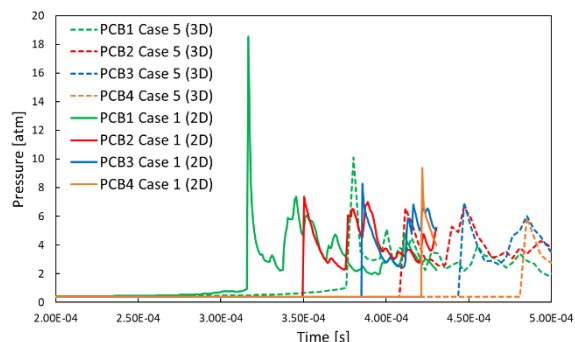


Fig. 10 Pressure history of Case 1 and Case 5.

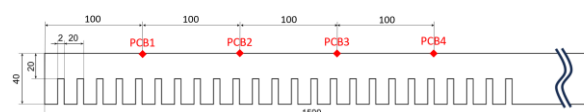


Fig. 11 Location of pressure measurement point
Unit is mm.

5. 結論

本研究では，ATF 法を用いた障害物を有する管内での水蒸気を添加した H_2/O_2 予混合気のDDTの数値解析を行い，以下の知見を得た．

- Case 1の数値シュリーレンより，DDTの一連のプロセスを明確に捉えた．障害物を通過することで火炎の乱流化が促進され火炎が加速し，火炎前方に発生した衝撃波が障害物の壁面に衝突しDDTが発生したと考えられる．
- 人工的に反応帯を厚くするATF法を適用した場合でも，火炎伝播速度や火炎伝播挙動に大きな変化は見られず，物理的に妥当な火炎伝播挙動が再現された．
- 本研究では，水蒸気添加による火炎伝播速度の低下は見られなかった．これは， H_2/O_2 予混合気では水素と酸素の燃焼反応が極めて強く，水蒸気添加の効果が顕在化しにくいためである．この傾向は H_2/O_2 および H_2/Air の1次元層流火炎伝播の計算からも裏付けられる．
- 2次元と3次元の計算結果の比較より，3次元計算ではすべての観測点においてデトネーション波の通過が約0.6 ms遅れる傾向が確認された．一方で，デトネーションの伝播速度は2次元と3次元で差異はないことが分かった．

謝辞

本研究での計算は大阪大学D3センターのSQUIDを用いた。ここに記し、感謝の意を表する。

参考文献

- [1] Urtiew, A. P., & Oppenheim, K. A. (1966). Experimental Observations of the Transition to Detonation in an Explosive Gas. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 295, No. 1440, pp.13–28.
- [2] Goodwin, G. B., Houim, R. W., & Oran, E. S. (2016). Effect of Decreasing Blockage Ratio on DDT in Small Channels with Obstacles. *Combustion and Flame*, 173, pp. 16–26.
- [3] Tsuboi, N. (2021). Numerical Simulation of the Deflagration to Detonation Transition in a Tube with Repeated Obstacles: Experimental Scale Simulation Using the Artificial Thickened Flame Method. *Transactions on Aerospace Research*, 4(265), pp. 41–52.
- [4] Yu, S., & Navarro-martinez, S. (2015). Modelling of Deflagration to Detonation Transition Using Flame Thickening. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(2), pp. 1955–1961.
- [5] Chan, C. K., W.A. Dewit & G.W. Koroll. (1995). Criteria for Transition from Deflagration to Detonation in H₂-Air-Steam Mixtures, *Heat and Mass Transfer in Severe Nuclear Reactor Accidents. Proceedings of the International Symposium*.
- [6] Shimizu, K., Hibi, A., Koshi, M., Morii, Y., & Tsuboi, N. (2011). Updated Kinetic Mechanism for High-Pressure Hydrogen Combustion. *Journal of Propulsion and Power*, vol. 27, pp. 383-395
- [7] 日本機械学会. (1999). 蒸気表: JSME Steam Tables, 日本 機械学会.