



Table 1 Elementally reactions in H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> system.

Elementary Reaction	Forward			Reverse		
	log A	n	E(kca/mol)	log A	n	E(kcal/mol)
1. H <sub>2</sub> + M = H + H + M	16.26	-1.00	106.15	9.48	0.0	0.0
2. O <sub>2</sub> + M = O + O + M	15.26	-1.00	118.0	7.27	0.0	-17.9
3. H + O <sub>2</sub> = OH + O	11.35	0.0	16.81	10.15	0.0	0.39
4. O + H <sub>2</sub> = OH + H	7.26	1.00	8.90	6.91	1.00	6.82
5. OH + H <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O + H	10.34	0.0	5.15	10.94	0.0	20.25
6. H + O <sub>2</sub> + M = HO <sub>2</sub> + M	9.18	0.0	-1.00	15.58	-1.00	47.93
7. H <sub>2</sub> O + M = H + OH + M	17.78	-1.00	121.51	10.37	0.0	0.0
8. HO <sub>2</sub> + H = OH + O <sub>2</sub>	11.40	0.0	1.90	10.26	0.0	40.93
9. HO <sub>2</sub> + H = H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	10.40	0.0	0.70	10.81	0.0	58.22
10. HO <sub>2</sub> + O = OH + O <sub>2</sub>	10.68	0.0	1.00	10.73	0.0	58.44
11. HO <sub>2</sub> + OH = H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub>	10.70	0.0	1.00	11.71	0.0	73.62

$$k = A T^n \exp(-E/RT) \quad (\text{l.mol.sec. units})$$

きの $\alpha$ の値は予混合気の組成によって異なるが、 $0 \sim 50000 (\text{s}^{-1})$ の範囲であった。

計算時の時間や位置のメッシュの幅は組成に依存するが時間メッシュが $0.012 \sim 0.06 \mu\text{s}$ 、位置のメッシュ幅が $0.04 \sim 0.12 \text{cm}$ の範囲であった。

時間メッシュ幅 $\Delta t$ や位置のメッシュ幅 $\Delta x$ のとり方で爆発誘導距離の計算結果にどの程度誤差を生ずるかを検討するため $\text{H}_2/\text{O}_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50 \text{ torr}$ , 入射衝撃波マッハ数4.45の場合について調べた。その結果、計算の収束範囲 $\Delta t = 0.012 \sim 0.018 \mu\text{s}$ ,  $\Delta x = 0.04 \text{ cm}$ において、爆発誘導距離の変動幅は4.8%以内であった。また、 $\Delta x = 0.1 \text{ cm}$ に増大させることによる爆発誘導距離の変動は10%以内であった。従って前報における計算( $\Delta x = 0.1 \text{ cm}$ )結果は妥当なものであると考えて良い。

計算の順序としては、まず最初に、対象となる組成の予混合気に対して、化学反応を凍結し、入射衝撃波速度を固定した状態で、 $\alpha$ を変えX-t線図を作成する。この図をもとに衝撃波速度の減衰率を求め、目的の減衰率を与える $\alpha$ を決める。次に求めた $\alpha$ を用いて、入射衝撃波速度を変えて化学反応を含めた計算を行い種々の入射衝撃波マッハ数に対する爆発誘導距離を求めた。このような手順で限界マッハ数の予混合気の初期圧、組成、希釈率等に対する依存性を求めた。

### 3. 計算結果及び考察

減衰衝撃波による衝撃波背後での自己加熱抑制の効果を示すため、衝撃波減衰率 $\beta$ をかえて接触面近傍の温度分布の推移を計算した結果をFig. 1に示す。計算条件は、 $\text{H}_2/\text{O}_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50 \text{ torr}$ , 入射衝撃波マッハ数3.89の場合である。図からわかるように、減衰率 $0.0, 0.025/\text{cm}$ のいずれの場合も、接触面付近の温度

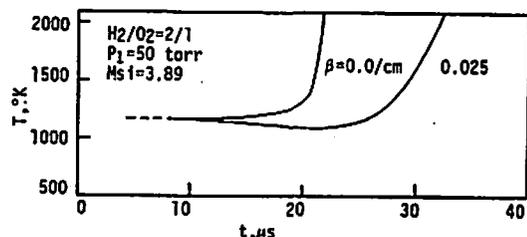


Fig. 1 Effects of decaying shock wave to the temperature change near the contact surface.  $\text{H}_2/\text{O}_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50 \text{ torr}$ , incident shock Mach number  $M_{si} = 3.89$ , Decay constant  $0.0/\text{cm}$  for non-decaying shock and  $0.025$  for decaying shock.

の変化は、 $10 \mu\text{s}$ 付近まではほぼ同様の傾向を示す。 $10 \mu\text{s}$ を過ぎると、減衰のない衝撃波の場合は、温度上昇を続け、爆発に到り、減衰衝撃波の場合は、衝撃波背後の希薄波の冷却効果により、温度が一旦低下する傾向を示す。温度の低下の程度および期間は $\beta$ の増加とともに増加する。したがって十分に爆発誘導期間が短くないと爆発は発生しない。

Fig. 2-(a)~(e)に入射された減衰衝撃波によって酸素-水素予混合気が爆発に到るまでの過程のX-t線図、および、その間の圧力、温度、発熱量とOHラジカル濃度の分布の推移の計算例を示す。計算条件は $\text{H}_2/\text{O}_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50 \text{ torr}$ , 入射衝撃波マッハ数4.45, 減衰率 $\beta = 0.025/\text{cm}$ である。なお、圧力分布と温度分布については時間の推移とともにプロファイルを上方向に一定幅ずつずらしてある。

Fig. 2-(a)のX-t線図において、SF, RF, CSは、それぞれ、衝撃波面、反応面、および接触面を表わす。

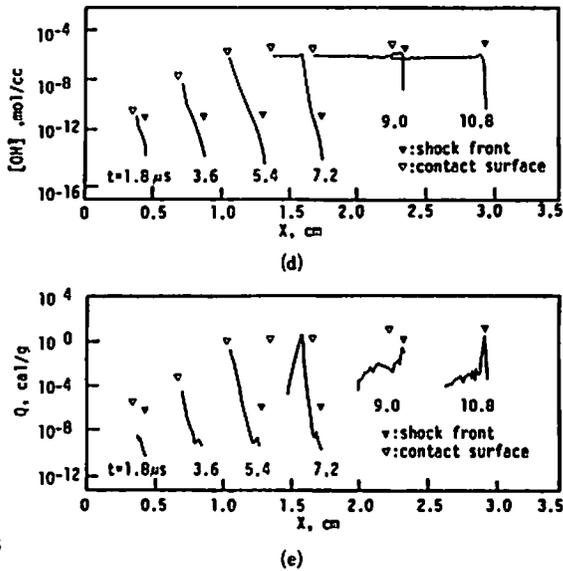
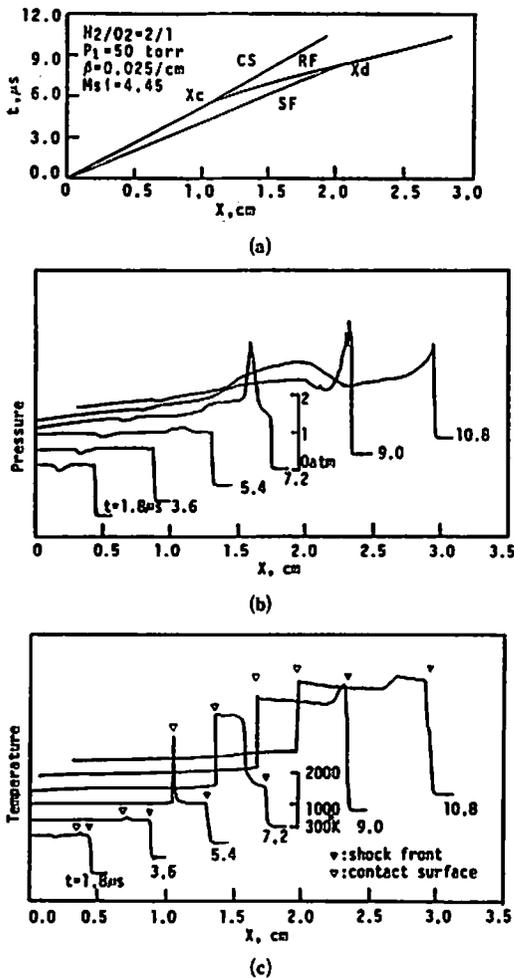


Fig. 2 Calculated example of direct initiation process of detonation in  $H_2-O_2$  mixture at  $P_1 = 50$  torr and incident shock Mach number  $M_{si} = 4.45$ . (a) Shock diagram SF, CS and RF denote shock front, contact surface and reaction front, respectively. Reaction front departs from contact surface at  $X_c$  and reaches detonation point  $X_d$ . (b) Pressure distribution, (c) Temperature distribution, (d) Heat release, (e) OH radical distribution for (a)-(e) perpendicular axis are in relative unit.

時間  $t = 0 \mu s$  で衝撃波が入射されると、およそ  $5.6 \mu s$  後に  $X_c$  で爆発を生じ、反応面が加速され、 $X_d$  点で反応面が衝撃波面に追いつき爆轟に到る。この間の Fig. 2-(b)~(e) に示す各パラメータの推移についてみると、点  $X_c$  で化学反応が激しくなり、爆発が起ると、温度、圧力の高さや発熱量、OH ラジカル濃度が急激に増大し、さらに、それまでと比べて、温度、発熱量、OH 濃度の分布が急速に広がるのがわかる。

入射衝撃波の減衰率が、爆轟に到るまでの距離にどのように影響するかを示すために、Fig. 3 に衝撃波速度の減衰率をパラメータとしたときの入射衝撃波マッハ数  $M_{si}$  と爆発誘導距離  $X_c$  との関係を示す。計算条件は  $H_2/O_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50$  torr, 入射衝撃波マッハ数 4.45 で、減衰率  $\beta$  は  $0.0 \sim 0.05/cm$  の範囲である。図からわかるように、入射衝撃波マッハ数が低下し、ある所までくると急激に爆発誘導距離が長くなり、ついには衝撃波を入射しても爆発を生じない限界のマッハ数が存在することを示している。また、爆発誘導距離の

減衰率に対する依存性は、特に、この限界のマッハ数付近で大きくなり、同一入射衝撃波マッハ数に対する爆発誘導距離は減衰率の増加とともに、急激に長くなる。このことから適当な減衰率を有する平面衝撃波を用いた実験が起爆限界条件を決定するには有利であることがわかる。

Fig. 4 に爆轟限界マッハ数の初期圧依存の計算値と実験値との比較を示す。計算条件は、組成が  $H_2/O_2 = 2/1$ , 初期圧  $25 \sim 100$  torr, 減衰率  $\beta = 0.025/cm$  である。図中、実線で示すのが計算値で○印がこの条件に対応する実験値である。但し実験では、衝撃波入射点から  $4cm$  以内で爆発する限界のマッハ数が求まっている。これに対して計算値は、爆発誘導距離を  $4, 7, 10cm$  としたときの限界マッハ数を示す。計算結果についてみると予混合気の初期圧が高くなるにつれ、発熱密度が高くなり、限界入射マッハ数が低下することがわかる。実験値の限界マッハ数は初期圧  $25, 50, 100$  torr で、それぞれ  $3.93, 3.82, 3.96$  である。限界

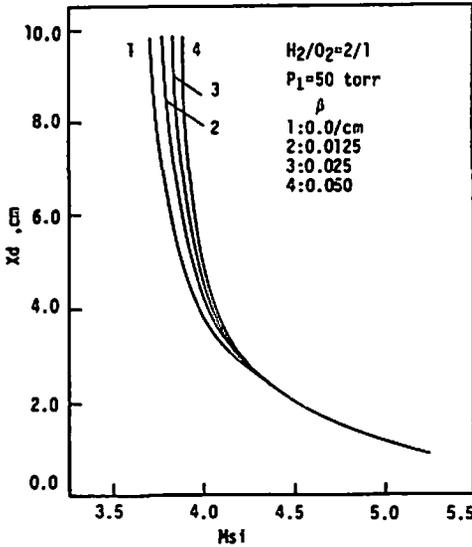


Fig. 3 Calculated induction distance for various decay constant  $\beta$  as a function of incident shock Mach number  $M_{si}$ .  $H_2/O_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50$  torr.

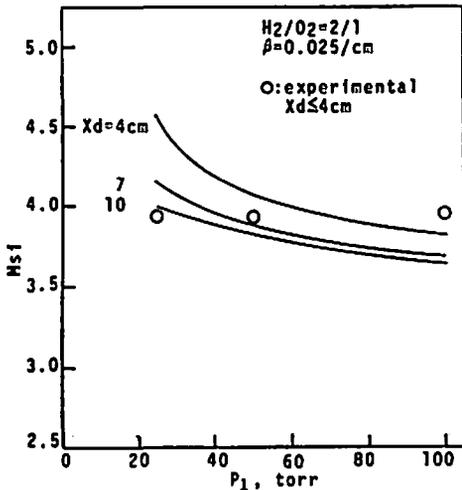


Fig. 4 Comparison of theoretical and experimental results of initial pressure dependence on critical shock Mach number.

Theoretical results are shown by solid lines for induction distance  $X_d = 4, 7$  and  $10$  cm. Experimental results are shown by circles for  $X_d \leq 4$  cm.  $H_2/O_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50$  torr, decay constant  $\beta = 0.025/cm$ .

マッハ数についてみれば、実験値と計算値は高圧側でよい一致を示しているが、初期圧の低下とともに、実験値は計算値よりもわずかに低い値を示す傾向がある。しかしながら、計算値は実験値をだいたい説明してい

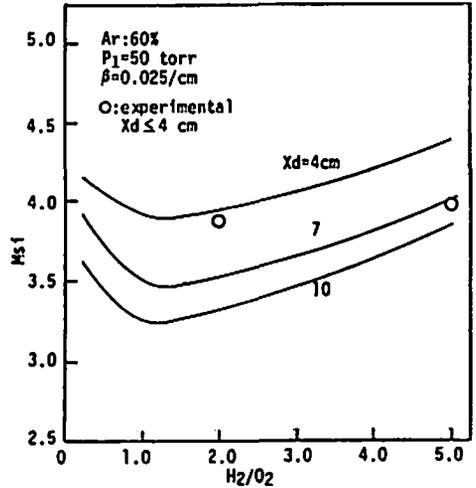


Fig. 5 Comparison of theoretical and experimental results of compositional dependence on critical shock Mach number. Theoretical results are shown by solid lines for induction distance  $X_d = 4, 7$  and  $10$  cm. Experimental results are shown by circles for  $X_d \leq 4$  cm.  $H_2/O_2$  mixtures diluted with 60% Ar,  $P_1 = 50$  torr,  $\beta = 0.025/cm$ .

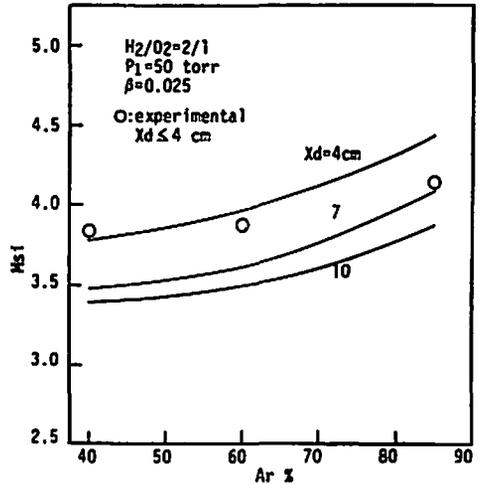


Fig. 6 Comparison of theoretical and experimental results of effects of dilution to critical shock Mach number. Theoretical results are shown by solid lines for induction distance  $X_d = 4, 7$  and  $10$  cm. Experimental results are shown by circles for  $X_d \leq 4$  cm.  $H_2/O_2 = 2/1$ ,  $P_1 = 50$  torr,  $\beta = 0.025/cm$ .

ると考えられる。

Fig. 5に爆轟限界マッハ数の組成依存の計算結果と実験値の比較を示す。計算条件は、組成範囲が $H_2/O_2$ 比で5/1から1/4までで、初期圧50torr、減衰率

0.025/cmである。爆発誘導距離を4, 7, 10cmとしたときの計算結果を図中に実線で示す。得られた曲線の傾向としては、化学量論比付近で爆発誘導距離が小さくなるのがわかる。図中、○印で示す実験値は4cm以内で爆轟するときの限界マッハ数で、 $H_2/O_2$ 比が5/1で3.98, 2/1で3.88である。限界マッハ数について計算値と比較すると、実験値は $H_2/O_2=2/1$ ではほぼ計算値と一致していると思わせるが、 $H_2/O_2=5/1$ では計算値よりも低い値となっている。

Fig. 6に爆轟限界マッハ数の希釈率依存の計算結果と実験値の比較を示す。計算値では、 $H_2/O_2$ 比を2/1に固定し、希釈気体としてのアルゴンの濃度を40~85%の範囲で変えた。また、初期圧は50torrで一定、衝撃波の減衰率は0.025/cmである。計算値は爆発誘導距離が4, 7, 10cmの場合について、図中に実線で示す。図中○印で示す実験値の爆轟限界マッハ数は、アルゴン濃度40, 60, 85%のそれぞれの場合について3.84, 3.88, 3.68である。計算値は初期圧依存の場合と同様、希釈率が大きくなり発熱密度が低下すると限界マッハ数が高くなる傾向を示している。限界マッハ数について実験値と計算値の対応をみると、反応性の高い希釈率が低い条件下では両者の一致は非常に良いが、希釈率が大きくなるに従って実験値と計算値の差異は増大することが判明した。

#### 4. 結 論

酸素-水素系の減衰衝撃波による直接起爆の条件を明らかにするために、多数の素過程を組み込んだ非定常一次元反応性流体の数値計算を行い実験値と比較した。

その結果、爆発誘導距離の初期圧、組成、希釈率等に対する依存の実験結果は、反応素過程を考慮した反応性流体の計算でだいたい説明できることがわかった。しかし、反応性が低い条件、すなわち、大希釈率、低圧、または組成が等量混合比から遠く離れるような条件では両者の一致は必ずしも満すべきものではない。このような差異を生ずる原因については実験、計算の

両面からもっと詳細に検討する必要がある。

しかし、ここで示した計算結果は酸素-水素系の爆轟の平面衝撃波による直接起爆過程が確率過程であるとする考え方<sup>10), 11)</sup>よりむしろそれに反対する実験結果<sup>9), 12)</sup>を支持すると結論して良いであろう。むしろ、このような結論は非常に活発な連鎖分枝過程と消尽の境界(爆発第2限界)が非常に広い領域にわたり明確に定められる場合、例えば酸素-水素系の起爆過程に対してのみ現在のところ適用できるものと考えている。

従って今後の課題として、より一般的な燃料として用いられる種々の炭化水素系についても、同様の結論が得られるか否かを検討する必要がある。

#### 文 献

- 1) W. E. Gordon, A. J. Mooradian and S. A. Harper, 7th Symp. on Comb. p.752(1959)
- 2) G. B. Kistiakowsky and P. H. Kydd, JCP 25, p.824(1956)
- 3) J. A. Fay, 4th Symp. on Comb. p.501(1953)
- 4) M. Steinberg and W. E. Kaskan, 5th Symp. on Comb. p.664(1955)
- 5) F. E. Belles and J. G. Ehler, ARS J. 32, p.215(1962)
- 6) T. V. Bazhenoba and R. I. Soloukhin, 7th Symp. on Comb. p.866(1959)
- 7) A. J. Laderman, AIAA J. 4, p.1784(1986)
- 8) D. H. Edwards, G. O. Thomas and T. L. Williams, Comb. and Flame 43, p.187(1981)
- 9) 南雲義郎, 米田国昭, 越 光男, 松為宏幸 工業火薬 48, 216(1987)
- 10) J. W. Meyer, P. A. Urtiew and A. K. Oppenheim, Comb. and flame, p.13(1970)
- 11) K. Terao and R. Sawada Jpn. Appl. Phys. p.1463(1979)
- 12) E. Nzeyimna, M. Vandermeiren and P. J. Tiegelen, Dynamics of Explosions, Vol.106, Ed. by J. R. Bowen et al., p.19(1986)

## Numerical Calculation on Direct Initiation Process of Detonation by Decaying Shock.

by Shinkichi TAMAKI\*, Akira MIYOSHI\*\*, Mitsuo KOSHI\*\*  
Hiroyuki MATSUI\*\* and Yoshiro NAGUMO\*\*

Numerical calculation on the direct initiation process of detonation by decaying shock wave has been made for the premixed hydrogen-oxygen gas mixtures.

The numerical model adopted in this study has been one-dimensional reacting flow system in which many elementary reactions were combined.

Initial pressure dependency, composition dependency, and dilution effect of induction distance to the detonation has been calculated varying incident shock wave speed systematically.

Comparison of calculated results with experimental ones which has been obtained by two-stage shock tube study showed good agreement.

(\*Department of Industrial Engineering, Faculty of Science and Engineering, Kinki University 3-4-1 Kowakae, Higashi-Oosaka, Oosaka 577

\*\*Department of Reaction Chemistry Faculty of Engineering, The University of Tokyo 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113)

### ニュース

|||||

#### Dynoは火薬利権を拡大する

Dyno Industrierはノールウェーの工業グループだがDu Pont50%の株を持つDu Pont Westfarmersを買収したと発表した。この会社はAustralia第2の火薬会社で買収金額は不明である。11月からDyno Westfarmersとなるであろう。市場占有率はAustraliaで45%である。DynoはICIと並んで世界の火薬メーカーのリーダーとなるであろう。総売上高は年間NKr5billion(\$759.8million)である。火薬類を生産するために使用する主原料である硝安の年間生産量は600,000トンに増加する。Du Pontは火薬事業から完全に撤退した。Australiaにおける今

回の行為は最後の動きであるとDynoは言っている。Westfarmersは50%の株を持つAustraliaの硝安メーカーである。Dynoは以前AustraliaでDyno Nobel, Nitro Nobel Johnson Bulk Explosivesを創立した。これらの会社は現在新しいDyno Westfarmersに合併されてSydneyに本社を置く。新会社は約200人の従業員がいる。Dynoの副社長Mr Arild Ingierdは今回のことはDynoにとって画期的な重要なステップであるという。

出典：Financial Times, Oct.(1988)

(木村 真)