

Spinning Detonation 파의 3차원 수치 해석

조덕래* · 최정열** · 원수희***

Three-Dimensional Numerical Analysis of Spinning Detonation Wave

Deok-Rae Cho, Jeong-Yeol Choi and Su-Hee Won

ABSTRACT

Three-dimensional numerical study was carried out for the investigation of the detonation wave structures propagating in tubes. Fluid dynamics equations and conservation equation of reaction progress variable were analyzed by a MUSCL-type TVD scheme and four stage Runge-Kutta time integration. Chemical reaction was modeled by using a simplified one-step irreversible kinetics model. The variable gas properties between unburned and burned states were considered by using variable specific heat ratio formulation. The unsteady computational results in three-dimension show the detailed mechanisms of rectangular and diagonal mode of detonation wave instabilities resulting same cell length but different cell width in smoked-foil record. The results for the small reaction constant shows the spinning mode of three-dimensional detonation wave dynamics, which was rarely observed in the previous numerical simulation of the detonation waves.

Key Words : Detonation Wave, Cell Structure, Three-dimension, Spinning Mode

1. 서 론

일반적으로 가스 상의 데토네이션 파는 세 층 격파의 상호작용으로 셀 구조를 지닌다. 데토네이션 파 전파에 대한 실험에서 이러한 형상의 흔적은 이른바 데토네이션 셀이라고 불리는 형태로 얇은 smoked foil(그을음 막)을 입힌 벽에 남겨진다. 데토네이션 파의 2차원적 형상은 수치 해석 방법에 의하여 연구되었고, 이러한 연구들로부터 많은 물리적 이해를 구할 수 있다. 본래 데토네이션 파의 형상은 3차원이나 3차원 형상에 대한 실험적 관찰은 매우 제한적이다. 그래서 3차원 데토네이션 형상에 대하여 이해하기 위한 수치적인 시도가 다소 행하여 졌다. 그러나 이러한 해는 제한된 조건을 가진 경우에 있어서 유효한 결과를 보여줄 뿐이다. 2차원 데토네이션 파에 대한 분석 연구를 확장함에 따라 이번 연구의

목적은 데토네이션 파의 3차원 묘사에 관한 이전의 결과들을 따라 감으로서 데토네이션 파 연구에 관한 3차원 계산 코드의 완성에 있다. 나아가 삼차원 데토네이션 파에 대한 유동 특성에 대하여 이해하는데 유용할 것이고 좀 더 복잡한 3차원 해석 경우에서 기초가 될 것이다.

2. 연구 내용

2.1 지배방정식

반응 과정 변수를 도입한 보존 방정식에 대한 압축성 비 점성 유동에 대한 2차원 Euler 방정식은 벡터 형태로 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} = H \quad (1)$$

* 부산대학교 대학원 항공우주공학과

** 부산대학교 대학원 항공우주공학과

† 연락처, Email: aerochoi@pusan.ac.kr

*** 서울대학교 대학원 기계항공공학부

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \\ \rho Z \end{bmatrix} \quad E = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (e+p)u \\ \rho uZ \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (e+p)v \\ \rho vZ \end{bmatrix} \quad (2a)$$

$$G = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho w \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (e+p)w \\ \rho wZ \end{bmatrix} \quad H = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{w} \end{bmatrix} \quad (2b)$$

여기서 압력은 다음과 같이 정의된다.

$$p = (\gamma - 1)\rho \left\{ e - \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2) + Zq \right\} \quad (3)$$

생성 질량 분율을 나타내는 반응 과정 변수 Z 는 0 부터 1 사이의 값을 가진다. q 는 연소에 의한 발열량이다. 미연 혼합기와 연소 생성물의 열역학적 물성은 서로 다르므로 반응 진행 변수에 대한 비열비 값은 미연 상태와 기연 상태로부터 보간법에 의하여 구하였다. 비열비는 보존 법칙과 이상기체 가정을 만족하는 식 (4)와 같은 관계식으로 표현된다.

$$\gamma(Z) = \frac{\gamma_U(\gamma_B - 1)(1 - Z) + \gamma_B(\gamma_U - 1)Z}{(\gamma_B - 1)(1 - Z) + (\gamma_U - 1)Z} \quad (4)$$

데토네이션과의 실제 반응 과정은 여러 화학성분의 열역학적 데이터와 다단계의 반응 기구를 필요로 하지만 해석이 복잡하고 많은 계산 시간을 요구하므로 열-유체역학적 특징만을 살펴보기 위해서는 간단한 1단계 비가역 Arrhenius 반응 모델을 이용하는 것이 편리하다. 이 경우 식 (1)의 반응 물질의 질량 생성율은 다음 식과 같이 정의된다.

$$\dot{w} = (1 - Z)k \exp(-E\rho/p) \quad (5)$$

2.2 열화학적 매개변수

본 연구는 데토네이션 파 연구에 있어서 3차원 수치해석 코드의 완성과 삼차원 데토네이션 파의 기본적인 성질과 형상에 대한 이해를 높이는 데 그 목적이 있다. 따라서 계산은 약한 불안정 데토네이션 영역의 경우로 제한하여 수행하였다. 수치 해석에 있어서 열화학적 매개변수들은

Austin등이 데토네이션 셀 구조에 대한 수치해석 결과로서 이전 연구에서 이용되었던 값들을 선택 사용하였다. 미연 및 기연 가스의 비열 비는 각각 $\gamma_U = 1.602$ 와 $\gamma_B = 1.288$ 이다. 무 차원화된 단위 질량당 발열량은 $q = 24.2$ 이다. von Neumann peak 온도에서 약한 불안정 데토네이션 영역의 무차원 활성화 에너지는 $\theta \equiv E/RT_{V,V} = 5.2$ 이다. Pre-exponential인자 k 는 격자 해상도와 강하게 연계되어 있다. 고정 격자계에 있어서 작은 k 값은 믿을만한 해석해와 큰 셀 사이클을 보인다. 반면에 큰 k 값에서는 더 작은 셀 사이즈와 많은 수의 데토네이션 셀 구조 결과를 보인다. 그래서 격자 해상도를 고려하여 k 값은 1000 에서 4000 사이의 값을 선택하여 사용하였다.

2.3 계산 영역과 격자 영역

3차원 데토네이션 파에 대한 계산 영역은 정사각형 단면을 가진 직각의 평행육면체이다. 전단면은 균일한 격자 해상도를 가진다. 또한 격자는 계산 영역의 후반(출구)부분을 제외하고는 길이 방향으로 균일하다. 계산 영역의 폭은 1이며 격자비가 균일한 영역의 길이는 2이다. 후반(출구) 영역은 출구 경계조건에서의 C-J 조건을 만족시키기 위한 길이 방향으로 점진적으로 격자 비를 늘린 격자 계를 가진다. 계산 영역에서 균일한 격자 계 내에서 안정적인 주기를 가진 데토네이션 파의 진동을 유지하기 위한 격자 영역의 길이를 선택하였다.

데토네이션 셀 형상 모의실험의 격자 해상도에 대한 앞선 논문에서 불안정 정도를 고려하지 않고 만약 정상 ZND 해를 포착할 수 있는 격자 공간을 가진다면 데토네이션 형상을 포착할 수 있다고 하였다. 또한 이 논문에서는 5 개 이상의 격자점이 정상 ZND 구조의 해석적 해와 데토네이션 셀 형상의 비정상 CFD 해를 포착할 수 있는 von Neumann peak 뒤의 발열 영역을 포함한다고 하였다. 데토네이션 구조의 부차적인 구조에 대한 해상도는 격자 해상도에 강하게 의존하지만 데토네이션의 주요 구조는 격자 해상도에 크게 영향을 받지 않는 것으로 나타났다. 따라서 격자 공간은 데토네이션 파의 주요 구조를 포착할 수 있는 범위에서 선택하였다. Table 1 은 본 연구에서 사용한 계산 격자계이다. 성근 격자는 작은 k 값을 가진 경우에 이용하였으며, 조밀한 격자는 큰 k 값에서 이용하였다.

Table 1. Summary of computational grids

Grid System	Minimum spacing	Domain size
122x42	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.025$	3.5x1.0
	uniform 83x42+2% stretching 39x42	
2D 302x102	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.01$	3.5x1.0
	uniform 203x102 + 2% stretching 99x102	
502x202	$\Delta x_{min} = \Delta y = 0.005$	3.5x1.0
	uniform 403x202 + 3% stretching 99x202	
122x42 x42	$\Delta x_{min} = \Delta y = \Delta z = 0.025$	3.5x1.0x1.0
	uniform 83x42x42 + 2% stretching 39x42x42	
3D 302x102 x102	$\Delta x_{min} = \Delta y = \Delta z = 0.01$	3.5x1.0x1.0
	uniform 203x102x102 + 0.74% stretching 99x102x102	

2.4 초기 조건과 경계 조건

데토네이션 파 전파에 대한 해석에서 초기 조건은 모든 격자점에 격자계의 길이 방향으로 ZND 구조의 해석해의 결과를 적용하였다. 불안정 유동으로의 빠른 유도를 위하여 초기 조건에 임의의 교란을 부여하였다. 앞선 연구들에 있어서 여러 종류의 임의의 교란들 중 간단한 특징을 가진 ZND 해를 경사지게 준 것을 선택하였다. Fig. 1은 122x42 계산 격자를 가진 2차원 격자계에 반응과정 변수의 변화를 겹쳐서 표현한 것이다. 3차원 해석에 있어서 세 가지의 다른 경사 방법을 이용하였다. 첫 번째는 2차원 초기 조건을 진행 방향으로 간단히 확장한 것이다. 두 번째는 대각선 방향으로 기울기를 주었고 세 번째는 비틀림 기울기를 준 것이다. 첫 번째의 경우는 직사각형 유동 형상을 지닌 형태로 발달하고 나머지 둘은 대각선 유동형상을 지닌 형태로 발달한다.

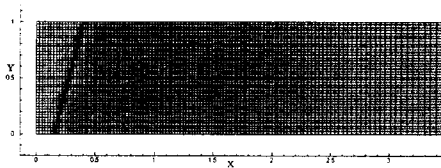
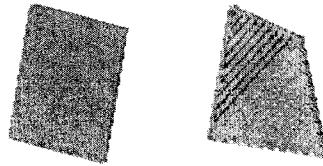


Fig. 1 Computational grid overlaid by initial distribution of reaction progress variable for 2-D model.



(a) Rectangular Mode (b) Diagonal Mode

Fig. 2 Initial distribution of reaction progress variable for 3-D model.

입구 경계조건은 유도변수 $f \equiv (U_{INF}/U_D)^2 = 1.0$ 인 C-J 데토네이션 속도로 고정하였다. 출구에서는 전방 유동 속도가 초음속인 경우에는 보간법에 의하여 계산하며, 아음속일 경우는 음속을 가지게 하였다. 벽면에서는 단열 및 slip 조건을 부여하였다. 출구에서는 C-J 조건을 만족시키기 위해 충분히 긴 계산영역을 가지게 하여 데토네이션파의 평균 속도는 C-J 데토네이션 속도를 유지하였다.

Smoked-foil 기록은 계산 영역의 폭에 대하여 충격파가 교차하는 뒤쪽에서의 정점 압력 값을 기록하는 방법으로 수치적으로 구현된다. Smoked-foil 기록의 물리적 메커니즘은 삼중점 근처의 전단력에 의하여 만들어지지만 수치 해석의 간편화를 위하여 정점 압력을 기록하는 방법이 널리 이용되고 있다. Smoked-foil 기록은 파가 고정된 계산 좌표계를 실험실 좌표계로 변환시켜 기록된다.

2.5 유체역학적 해석 알고리즘

유체 동역학 방정식은 유한 체적 cell-vertex 공식에 의하여 이산화 된다. 셀 경계에서의 수치 플럭스는 3차 정확도의 MUSCL-type TVD 기법에 의한 Roe의 근사 리만 해법으로 계산하였다. 이산화 방정식은 4차 정확도의 Runge-Kutta 기법을 이용하였다. 압축성 반응 유동의 수치 해석에 대한 자세한 내용은 이전의 연구에서 논의 하였으므로 여기에서는 생략한다.

경계영역 분할에 의한 MPI-II언어를 이용한 계산 코드의 병렬화를 수행하였다. 병렬 계산은 실험실에서 자체 제작한 200개 정도의 AMD Athlon™ 64-X2 프로세서를 가진 윈도우 PC 클러스터를 이용하였다.

3. 해석결과 및 고찰

3.1 2차원 모델의 격자 분석

3차원 해석에 앞서 2차원 모델에서 적절한 격자 해상도의 요구조건에 관하여 해석을 수행하였다. $k = 2000$ 인 경우에 계산한 결과 단위 튜브 폭 당 1.5 개의 셀이 존재하였다. Fig. 3은 현 조건에 있어서 전형적인 smoked foil 기록이다. 초기의 기울어진 형태의 교란에 의하여 불안정한 셀 구조가 만들어 진다. 그러나 얼마간의 시간이 흐른 후에는 셀 구조는 주기적인 형태로 안정화되며, 이후로는 전체산 시간에 거의 일정한 형상을 유지한다.

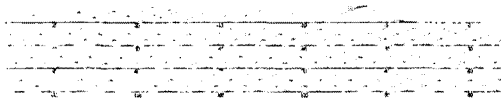


Fig. 3 Numerical smoked-foil record of weakly unstable detonation with $k = 2000$.

Figure 4는 동일한 열-유체 유동 조건에서 격자 해상도가 다른 모델들의 smoked-foil 기록을 비교한 것이다. 격자 해상도의 차이에 의한 셀 형상의 선명도는 비록 다르지만 데토네이션 셀 크기는 격자 해상도와 무관하게 거의 동일하다. 약간의 셀 형상의 지연이 존재하나 셀 크기의 차이는 얼마간의 영역에서만 존재할 뿐이다. 그래서 계산 효율을 고려하여 3차원 해석에서는 낮거나 중간 정도의 격자 해상도 모델을 사용하였다.

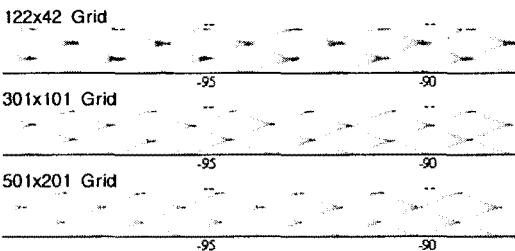


Fig. 4 Numerical smoked-foil record for three different grid resolution.

3.2 $k = 2,000$ 의 해석 결과

3차원 해석은 우선 $k = 2000$ 인 $122 \times 42 \times 42$ 격자 모델에서 수행하였다. 해석은 모델에 세 가지의 다른 초기 조건을 부여하여 수행하였

다. 이중 하나는 2차원 초기 모델은 진행방향으로 확장한 것이다. Fig. 5는 초기 조건으로부터 시간에 따른 파면 구조의 발달을 보여주고 있다. 이 결과로부터 파면의 주기적 진동이 직사각형인 형상이 관찰되며, 튜브 폭으로 1.5개의 셀이 관측된다.

두 번째의 초기 조건은 비틀린 초기 조건을 적용하였으며, Fig. 6은 이 조건의 시간에 따른 파면 형상의 발달 과정을 나타낸 것이다. 이 경우에는 파면의 진동이 대각선 모드로 진동하는 것이 관찰된다. 세 번째는 파면이 대각선 방향으로 경사진 초기 조건이 주어졌으나, 데토네이션 파면의 진동은 두 번째 경우와 같은 대각선 모드로 발달된다. 데토네이션 셀 폭은 전체 튜브 폭을 차지하며, 대각선 모드의 결과로부터 어떠한 큰 차이점도 관찰되지 않는다.

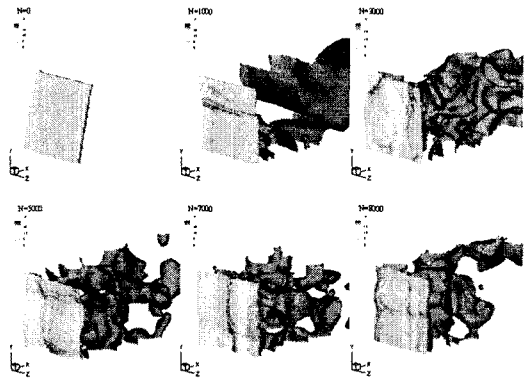


Fig. 5 Evolution of rectangular mode of detonation wave oscillation from the extended 2-D initial condition.

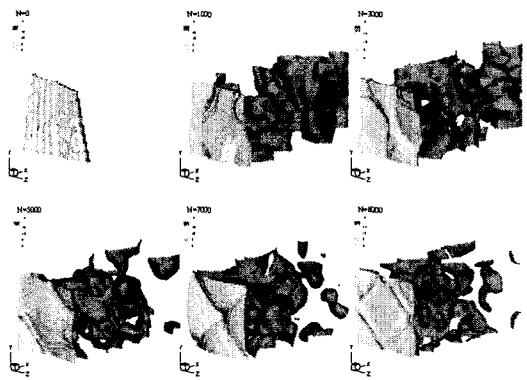


Fig. 6 Evolution of diagonal mode of detonation wave oscillation from the twisted initial condition.

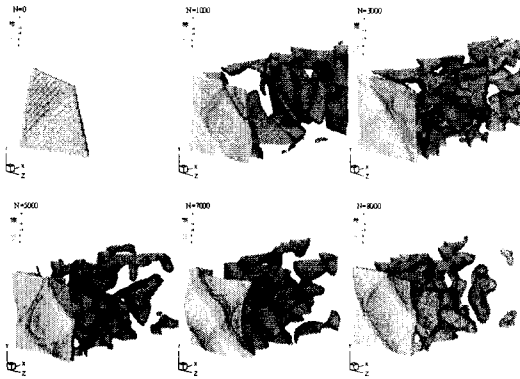


Fig. 7 Evolution of diagonal mode of detonation wave oscillation from the twisted initial condition.

Figure 8은 해석모델의 smoked foil 기록을 비교한 것이다. 2D와 3D 직사각형 모드에서는 3D 기록에서 진행 방향으로 회색의 명암이 존재한 것을 제외하고는 매우 유사한 크기의 데토네이션 셀 기록을 보인다. 앞선 3D 연구로부터 이러한 명암 기록은 셀 형상이 수직으로 움직이는 진행 파에 의하여 기록되는 동안에 진행파가 측면과 주기적으로 부딪히는 움직임에 의하여 새겨짐을 알고 있다. 하지만, 다음의 두 대각선 모드의 결과에서는 이러한 형상이 보이지 않는다. 대각선 모드에서는 slapping 파의 기록이 보이지 않는 데 이는 측면과 만나는 파가 45도로 기울어져서 벽에서 경사지게 반사되기 때문이다. 결과적으로 대각선 모드에서의 셀 사이즈는 튜브 폭 전체와 일치한다.

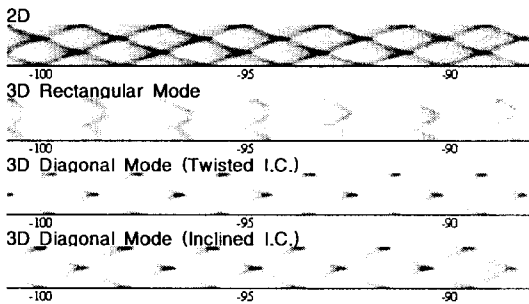


Fig. 8 Numerical smoked-foil records from 2-D and 3-D simulations with $102 \times 42 \times 42$ grid, $k = 2,000$

3.3 $k = 4,000$ 의 해석 결과

위의 결과들을 기초로 하여 더 세밀한 계산을 정밀한 격자와 더 큰 pre-exponential 인자

$k = 4,000$ 에서 수행하였다. 앞에서와 유사하게 직사각형 및 대각선 모드 둘은 서로 다른 초기 상태로부터 계산을 실시하였다. Fig. 9는 튜브 폭으로 더 많은 수의 셀을 가진 직사각형 모드의 데토네이션 파 진동의 결과이다. 삼차원 smoked-foil 기록 메커니즘은 결과들의 비교로부터 쉽게 이해되어진다.

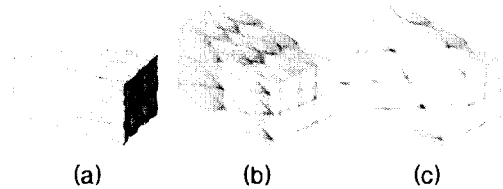


Fig. 9 Rectangular mode of detonation wave oscillation obtained with $302 \times 102 \times 102$ grid, $k = 4,000$. (a) Pressure contours on the wall boundaries and surface plots of the leading front, (b) Numerical smoked-foil record, (c) 45° of the smoked-foil record.

Figure 9(a)의 smoked-foil 기록은 왼쪽과 위쪽 면에 있어서 상호 교차하는 slapping 파를 가진 벽면 경계에서 셀 형상을 나타낸 것이다. 그러나 지금의 대각선 모드에서의 결과는 진동이 균일하지 않고 Fig. 3의 초기 위상과 유사한 일정하지 않은 셀 폭을 보이고 있다. 이러한 불규칙성은 원래 큰 활성화 에너지에 의해 만들어지지만, 이것만이 아니라 여러 종류의 교란에 의해서나 셀 폭과 튜브 폭의 불일치에 의해서도 만들어진다.

직사각형 모드에 있어서 Fig. 9(b)의 smoked-foil 기록의 45° 단면은 smoked-foil 기록의 대각선 형상을 나타낸다. 대각선 모드 결과들에 관하여 앞 절에서 논의한 것처럼 이 단면에서는 slapping wave가 보이지 않는다. 그러므로 직사각형과 대각선 모드는 서로 완전히 다른 것이 아니라 서로 유사하다고 판단된다. 이 결과는 또한 대각선 모드 모사에 관한 다음의 결과에서도 알 수 있다.

Figure 10은 튜브 폭으로 많은 수의 셀을 가진 대각선 모드의 데토네이션 파 진동 결과이다. 직사각형 모드와는 다르게 일정한 셀 형상의 결과를 보인다. 앞에서 토의한 것처럼 데토네이션 셀은 벽면방향으로는 slapping wave가 나타나지 않지만, Fig.10(b)의 45° 방향의 smoked-foil 단면에서는 slapping wave가 확실히 보인다. 따라서 직사각형 모드와 대각선 모드가 기하학적으로 유사하다는 결론이 나온다. 또한 대각선 모드에

서의 셀 사이즈가 직사각형 모드에서보다 $\sqrt{2}$ 배 더 크다는 것 또한 알 수 있다.

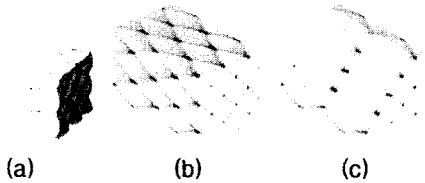


Fig. 10 Diagonal mode of detonation wave oscillation obtained with $302 \times 102 \times 102$ grid, $k = 4,000$. (a) Pressure contours on the wall boundaries and surface plots of the leading front, (b) Numerical smoked-foil record, (c) 45 degrees of the smoked-foil record.

14의 실험결과와 실질적으로 잘 일치하고 있다.

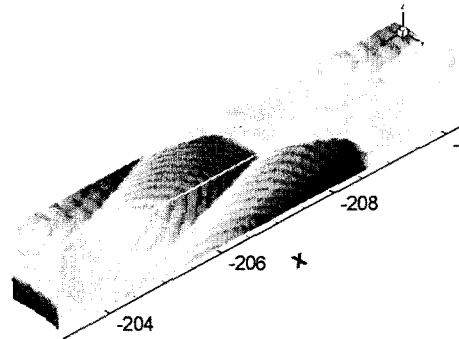


Fig. 12 3-D numerical smoked foil record for spinning detonation.

3.4 Spinning Detonation 의 수치모사

데토네이션 파 전파의 회전 모드는 데토네이션 셀 사이즈가 튜브의 직경보다 클 경우 낮은 민감도의 혼합기체에서 관찰된다. 지금의 연구에서는 데토네이션의 회전 모드는 삼차원 연구의 확장으로서 직사각 튜브에서 모사된다. Fig.11 에 보이는 것처럼 이전의 연구에서 혼합기체의 낮은 민감도를 나타내는 반응상수 값, k 가 작을 때 절반 크기의 데토네이션 파 셀이 관찰된다. 2차원 결과와 데토네이션 회전은 같은 원리이므로, 이전 연구의 절반인 반응상수 값 $k = 1,000$ 에서 $122 \times 42 \times 42$ 격자 모델에서 수치적 모사를 하였다.



Fig. 11 Numerical 2-D smoked foil record showing half cell width within the tube width.¹¹

Figure 12는 이 경우에서의 수치적 smoked-foil 기록이다. 셀 형상은 진행 방향으로 오른쪽과 위쪽 벽면에서 상호 교차하는 회전파의 위치가 관찰된다. 또한 이것은 측면 방향으로 움직이는 삼중점이 최종적으로는 벽면을 따라 회전하면서 움직인 결과로 이해된다. Fig. 13는 옆 벽면들을 따라서 회전하는 삼중점을 나타내는 두드러진 삼중점의 궤적과 반사파를 표현한 2차원의 네 벽면의 smoked-foil 기록을 펼친 것이다. 이 결과는 비록 혼합조건의 차이에 의하여 데토네이션 파의 속도와 궤적의 각에 차이가 나지만, Fig.



Fig. 13 Unfolded smoked foil record of four walls for the 3-D spinning detonation; detonation propagates left to right.

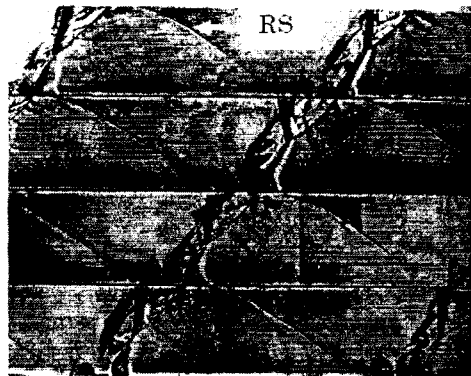


Fig. 14 Experimental smoked foil records of spin detonation in square tube by E.A. Lundstrom²³; detonation propagates from left to right.

4. 결론

정사각형 튜브에서 데토네이션 파 전파의 삼차원적 형상에 대한 수치적 연구를 수행하였다. 삼차원에서 비정상 상태 해석 결과로부터

smoked-foil 기록에서 셀 길이는 같지만 셀 폭은 다른 불안정성 결과와 같은 직사각형 모드와 대각선 모드의 상세한 체계를 확인하였다. 2 차원과 3 차원 직사각형 모드의 데토네이션 셀 사이즈는 같은 유동 조건에서 3 차원 결과에서의 slapping 파의 형상을 제외하고는 동일하다. 이것은 직사각형 및 대각선 모드는 서로 다르게 보이지만 smoked-foil 기록의 45° 방향 단면으로부터 유사성을 발견한 결과에 의해서도 이해된다.

데토네이션 파 전파의 회전모드는 만약 튜브 직경보다 데토네이션 셀 크기가 더 클 경우에 낮은 민감도의 혼합기체에서 관찰된다. 다른 혼합 조건을 제외하고는 본 수치적 해석 결과는 실험 결과와 실질적으로 같다.

참 고 문 헌

- [1] Fickett, W., and Davis, W.C., *Detonation Theory and Experiment*, Dover Publications, New York, 2000
- [2] Taki, S., and Fujiwara, T., "Numerical Simulation of Triple Shock Behavior of Gaseous Detonation," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 18, 1981, pp. 1671-1681
- [3] Oran, E.S., Boris, J.P., Young, T., Flanigan, M., Burks, T., and Picone, M., "Numerical Simulations of Detonations in Hydrogen-Air and Methane-Air Mixtures," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 18, 1981, pp. 1641-1649
- [4] Oran E.S., Weber, J.W., Stefaniw, E.I., Lefebvre, M.H., and Anderson, J.D., "A Numerical Study of a Two-Dimensional H₂-O₂-Ar Detonation Using a Detailed Chemical Reaction Model," *Combustion and Flame*, Vol. 113, 1998, pp.147-163
- [5] Gamezo, V.N., Desbordes, D., and Oran E.S., "Two-Dimensional Reactive Flow Dynamics in Cellular Detonation Waves," *Shock Waves*, Vol. 9, 1999, pp. 11-17.
- [6] Singh, S., Powers, J.M., and Paolucci, S., "Detonation Solutions from Reactive Navier-Stokes Equations," AIAA Paper 1999-0966, January 1999.
- [7] Nikolic, M., Williams, D.N., and Bauwens, L., "Detonation Cell Sizes - A Numerical Study," AIAA Paper 1999-0967, January 1999.
- [8] Gavrikov, A.I., Efimenko, A.A., and Dorofeev, S.B., "A Model for Detonation Cell Size Prediction from Chemical Kinetics," *Combustion and Flame*, Vol. 120, 2000, pp. 19-33.
- [9] Sharpe, G.J., "Transverse Waves in Numerical Simulations of Cellular Detonations," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 447, 2001, pp. 31-51
- [10] Hu, X.Y., Khoo, B.C., Zhang, D.L., and Jiang, Z.L., "The Cellular Structure of a Two-Dimensional H₂/O₂/Ar Detonation Wave" *Combustion Theory Modeling*, Vol. 18, 2004, pp. 339-359.
- [11] Choi, J.-Y., Ma, F., and Yang, V., "Numerical Simulation of Cellular Structure of Two-Dimensional Detonation Waves," AIAA Paper 2005-1174, 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Jan. 10-13, 2005, Reno, NV
- [12] Williams, D. N., Luc Bauwens and Oran, E. S., "Detailed Structure and Propagation of Three-Dimensional Detonations," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 26, 1997, pp. 2991-2998.
- [13] Zhang, Z.-C., Yu, S. T. J. and Chang, S.-C., "A Space-Time Conservation Element and Solution Element Method for Solving the Two- and Three-Dimensional Unsteady Euler Equations Using Quadrilateral and Hexahedral Meshes," *Journal of Computational Physics*, Vol. 175, 2002, pp.168-199.
- [14] Tsuboi, N., Katoh, S. and Hayashi, A. K., "Three-Dimensional Numerical Simulation for Hydrogen/ Air Detonation: Rectangular and Diagonal Structures," *Proceedings of*

- the Combustion Institute*, Vol. 29, 2002, pp. 2783 - 2788.
- [15] Deiterding, R., "Numerical Structure Analysis of Regular Hydrogen-Oxygen Detonations," Proc. of fall '03 meeting of Western States Section of The Combustion Institute, Oct. 20-21, 2003
- [16] Eto, K, Tsuboi, N. and Hayashi, A. K., "Numerical Study on Three-dimensional C-J Detonation Waves: Detailed Propagating Mechanism and Existence of OH Radical," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, 2005, pp. 1907-1913.
- [17] Hayashi, A. K., Eto, K. and Tsuboi, N., "Numerical Simulation of Spin Detonation in Square Tube," 20th ICDERS, Jul.31-Aug.5, McGill University, Montreal, Canada.
- [18] Tsuboi, N., Eto, K. and Hayashi, A. K., "Three-Dimensional Numerical Simulation of H₂/Air Detonation in a Circular Tube: Structure of Spinning Mode," 20th ICDERS, Jul.31-Aug.5, McGill University, Montreal, Canada
- [19] Deledicque, V. and Papalexandris, M. V., "Computational Study of Three-Dimensional Gaseous Detonation Structures," *Combustion and Flame*, Available online 15 November 2005, to be appeared 2006.
- [20] Austin, J. M., Pintgen, F. and Shepherd, J.E., "Reaction Zones in Highly Unstable Detonations," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.30/2, 2005, pp. 1849-1858
- [21] Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 1: Validation," *AIAA Journal*, Vol. 38, No. 7, July 2000, pp.1179-1187.
- [22] Choi, J.-Y., Jeung, I.-S. and Yoon, Y., "Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part 2: Comparison," *AIAA Journal*, Vol. 38, No. 7, July 2000, pp.1188-1195
- [23] Lee, J.H., Soloukhin, R.I., and Oppenheim, A.K., *Astronautica Acta*, Vol. 14, pp.565-584, 1967