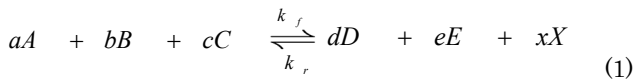


1. 緒言

化石燃料の燃焼に伴い排出される CO<sub>2</sub>ならびに NO<sub>x</sub> などの大気汚染物質は環境問題となっている。このような環境問題を解決するため、数値シミュレーションにより燃料の燃焼特性および大気汚染物質の生成特性を検討することは有効な手段である。そこで液体燃料の燃焼を対象とした反応動力学モデルを構築して、燃焼特性および NO<sub>x</sub> 生成特性を検討することを目的とし、まずは反応機構が簡単なメタン・空気燃焼反応の反応動力学解析を行い、当量比を変化させたときの燃焼特性を検討した。

2. 解析方法および解析条件

式(1)に示す素反応において、化学種  $X$  の生成速度( $d[X]/dt$ )は式(2)で表される。



$$\frac{1}{x} \frac{d[X]}{dt} = k_f [A]^a [B]^b [C]^c - k_r [D]^d [E]^e [X]^x \quad (2)$$

ここで $[A],[B],\dots,[X]$ は化学種 A,B, $\dots$ X のモル濃度[mol/cm<sup>3</sup>]、 $a, b, \dots, x$ は量論係数、 $t$ は時間[s]、 $k_f, k_r$ は正および逆向きの反応速度定数である。各化学種の生成速度式を連立して解くことにより、化学種のモル濃度 $[X]$ を求める。

反応に伴う温度の変化については式(4)に示すエネルギーの保存式より求める。

$$c_p C \frac{dT}{dt} = -\sum_{i=1}^v H_i m_i \quad (3)$$

ここで $c_p$ は定圧比熱[kcal/mol・K]、 $C$ は全モル濃度[mol/cm<sup>3</sup>]、 $T$ は温度[K]、 $H_i$ は化学種  $i$  の生成エンタルピー[kcal/mol]、 $m_i$ は化学種  $i$  の生成速度[mol/cm<sup>3</sup>・s]であり式(3)より与えられる。

解析に用いたメタン燃焼反応モデルにおいて考慮した化学種は 19 種、素反応式 61 本である。解析条件は圧力が 1.0atm のまま一定とし初期温度は 1800K、当量比を 0.8 - 1.2 の間で計算を行った。また、計算において時間刻みは 10<sup>-6</sup>s、計算回数は 10<sup>4</sup>とした。

3. 解析結果および考察

図 1、2、3 に各当量比における CH<sub>4</sub>、CO および NO 濃度の経時変化を示す。反応開始とともに CH<sub>4</sub>は熱分解し、当量比によらず 2ms で CH<sub>4</sub>濃度が急激に減少していることから着火していることが示唆される。着火することにより燃焼が開始することから CO、NO 濃度ともに 2ms 付近から増加する。当量比が高くなるにつれて CO 濃度は高くなるのに対し、NO 濃度は低くなっていることがわかる。

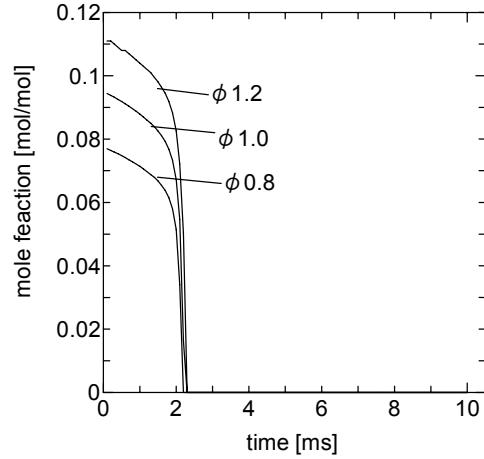


図 1 CH<sub>4</sub>濃度の経時変化

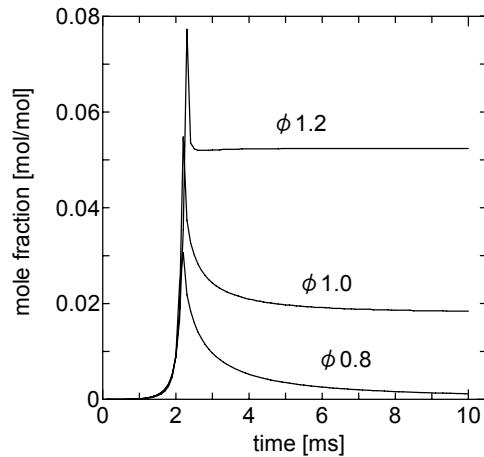


図 2 CO 濃度の経時変化

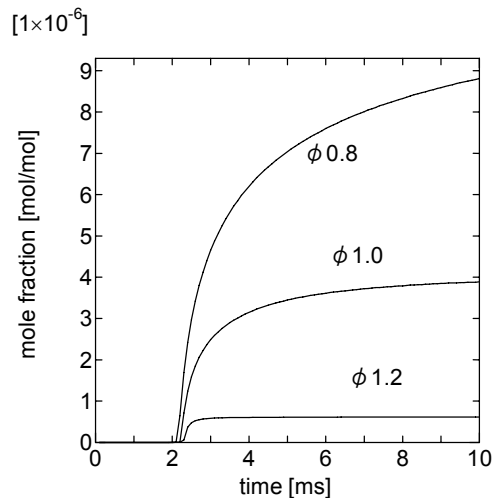


図 3 NO 濃度の経時変化