

課題1

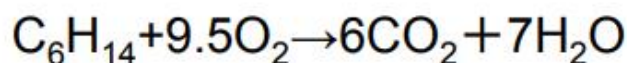
正ヘキサン+空気(79 vol.%窒素+21 vol.%酸素)の予混合気が断熱された系で完全燃焼(燃料は酸素と反応して二酸化炭素と水になる)した後の温度を当量比の関数として求めよ.

- ・定圧変化と定容変化の2通りについて求めよ. 前者の場合は, 燃焼前後の体積比, 後者の場合は燃焼前後の圧力比も求めよ.
- ・燃焼前の温度は適宜設定してよい.
- ・燃焼前後の混合気は全て気体として存在するものとする.
- ・当量比が1より大きい場合は, 余った燃料は反応せずに燃料のまま残るとする. (現実的ではないが)

課題2

正ヘキサン+空気(79 vol.%窒素+21 vol.%酸素)の予混合気が定容・断熱な系で自発点火する際の温度, 圧力, 組成履歴を求めよ. また, タイムステップを変じて, タイムステップを小さくするほど解が収束することを確認せよ.

- ・初期温度, 初期圧力, 当量比は適宜設定すること.
- ・反応の過程において全成分は気体として存在するものとする.
- ・理想気体としてよい.
- ・当量比が1より大きい場合は, 余った燃料は反応せずに燃料のまま残るとする. (現実的ではないが)
- ・正ヘキサンと酸素は以下の不可逆の総括一段反応をとする.



反応速度は $\omega = k [\text{C}_6\text{H}_{14}]^{0.25} [\text{O}_2]^{1.5}$

反応速度定数は次のアレニウス式で表される. $k = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$

$E = 126 \text{ kJ/mol}$

$A = 5.7 \times 10^{11}$ (但し, これは $[\text{C}_6\text{H}_{14}]$, $[\text{O}_2]$ を $[\text{mol}/\text{cm}^3]$ で, ω を $[\text{mol}/(\text{cm}^3 \text{ s})]$ で表す時の値である.)

課題3-1

幅100mmの空間のちょうど真ん中に仕切りがあり、左側には二酸化炭素が、右側には窒素が入っている。時間0において仕切りを外し拡散により二酸化炭素と窒素の混合が始まる。時間0以降に二酸化炭素の質量分率の分布がどのように変わっていくかを示せ。

次に二酸化炭素の代わりを水素とした場合について比較せよ。

- 空間的に1次元として扱ってよい。
- 両端は閉鎖されており、物質の移動に対して閉じているとする。
- 理想気体としてよい。
- 温度、圧力は空間内で一様・一定であり、300 K, 0.1 MPaとする。
→エネルギー保存は考えなくてよい。
- 分子量の違いから、厳密には質量平均流れが生じるが、質量平均速度は0として扱ってよい。
→質量保存、運動量保存は考えなくてよい。考えるのは化学種保存だけ。
- 2成分系の拡散であり、Fickの法則が適用可。
- 二成分拡散係数を以下の定数とする。
二酸化炭素–窒素 0.171 cm²/s, 水素–窒素 0.784 cm²/s

課題3-2

幅100mmの空間のちょうど真ん中に仕切りがあり、片側にはモル分率で正ヘキサンが0.02, 窒素が0.98, もう一方には酸素が0.2, 窒素が0.8入っている。仕切りを外した後の質量分率と温度の分布が時間とともにどのように遷移するかを示せ。

- 空間的に1次元として扱ってよい。
- 正ヘキサンと酸素は課題2と同じ不可逆の総括一段反応をとする。
- 正ヘキサン, 水は全て気体として存在するとする。
- 理想気体としてよい。
- 両端は開放端であり, エネルギー, 物質の移動がある。両端の温度, 組成は初期状態から不変とする。
- 圧力は空間内で一様・一定であり, 0.1 MPaとする。また, 分子量の違い, 化学反応, 温度分布から, 実際には質量平均流れが生じるが, 質量平均速度は0として扱うことにする。
→質量保存, 運動量保存は無視。
- 温度は初期状態で一様に600Kとする。その後, 化学反応による発熱により温度分布が生じる。

- Dufour効果なし, 輻射なし, 外力なしとし, 拡散に伴うエネルギー輸送を無視し, 熱伝導はフーリエの法則に従うとする. また, 熱伝導率は成分, 温度に依らず一定で $25.83 \times 10^{-3} \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ とする.

$$\rightarrow \text{エネルギー保存} \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho c_{pm}} \left\{ - \sum_i (w_i h_i) \right\} + \frac{\lambda}{\rho c_{pm}} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

- 実際起こるのは5成分系の拡散ではあるが, 窒素以外の化学種については主成分の窒素に対する拡散のみを考えるものとする. \rightarrow Fickの法則
- 二成分拡散係数は温度に依らず一定とし, 以下とする.

正ヘキサン-窒素 $0.093 \text{ cm}^2/\text{s}$, 酸素-窒素 $0.202 \text{ cm}^2/\text{s}$

二酸化酸素-窒素 $0.171 \text{ cm}^2/\text{s}$, 水-窒素 $0.256 \text{ cm}^2/\text{s}$

- ある空間座標の正ヘキサン, 酸素, 二酸化炭素, 水の質量分率が分かれば, 残りが窒素なので, 窒素の拡散は計算しなくてもよい.
- 各化学種の定圧比熱, エンタルピの温度依存性は別紙の通り.

※ タイムステップ, 格子間隔ともに, 課題3-1より桁違いに小さくしないと計算が飛びます.

※ 余裕があれば, 初期温度を上下に振ってその影響を確認して下さい.