

Hesaplamaalı akışkanlar dinamiği ile dizel motorlarında emisyon oluşumu ve azaltılmasının modellenmesi

Alper T. ÇALIK*, A. Metin ERGENEMAN, Valeri I. GOLOVITCHEV

İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Otomotiv Programı, 34469, Ayazağa, İstanbul

Özet

Bu çalışmada, özellikle ağır vasıta dizel motorunda azot oksit (NO_x) ve is ($C(s)$) emisyonlarının oluşumu ve azaltılması, Sayısal Akışkanlar Dinamiği (CFD) modellemesi yardımıyla incelenmektedir. KIVA-3VR2 ve CHEMKIN-II paketi modelleme için kullanılmıştır. Chalmers University of Technology'de geliştirilen n-heptan ve toluen karışımından oluşan dizel yakıt modeli (Diesel Oil Surrogate, DOS), türbülans/yanma etkileşimin için kısmi karışımli reaktör modeli (Partially Stirred Reactor, PaSR), detaylı reaksiyon mekanizması ve geliştirilmiş demet modeli KIVA-3VR2'ye uyarlanmış ve modellemeler gerçekleştirilmiştir. Dizel yakıt modeli ve reaksiyon mekanizması sabit hacimli bomba deneylerinde, değişik basınç ve hava fazlalık katsayısı (HFK, λ), değerleri için, sıcaklığa bağlı tutuşma gecikmesi (TG) esas alınarak doğrulanmıştır. Sonraki aşamada Volvo D12C ağır vasıta dizel motorunda 18.5 ve 14.0 sıkıştırma oranları, farklı yük, püskürtme zamanı değerleri ve egzoz gazı geri dönüşü (EGR) oranları için modelleme çalışmaları yapılarak deney verileri ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlara göre, silindir içi basınç ve sıcaklık değerleri, ısı açığa çıkış hızı ve yanma verimi deney sonuçlarıyla uyumludur. NO_x ve is emisyonları eğilim olarak deney sonuçlarıyla uyumludur ancak nicel olarak geliştirmeye ihtiyaç vardır. Emisyonlardaki farklılığın nedeni olarak, modelleme için kullanılan detaylı reaksiyon mekanizmasındaki is yanması, NO_x ve CO oluşum reaksiyonları arasındaki çok hassas ve birbirini etkileyen dengenin henüz tam olarak sağlanamamış olması gösterilebilir. Bu konuda geliştirmeye ihtiyaç duyulmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Dizel motoru, modelleme, NO_x -is emisyonları.

*Yazışmaların yapılacağı yazar: Alper T. ÇALIK. calik@itu.edu.tr; Tel: (212) 285 34 44.

Bu makale, birinci yazar tarafından İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Otomotiv Programı'nda tamamlanmış olan "Hesaplamaalı akışkanlar dinamiği (CFD) ile ağır vasıta dizel motorlarında emisyon oluşumu ve azaltılmasının modellenmesi" adlı doktora tezinden hazırlanmıştır. Makale metni 14.09.2007 tarihinde dergiye ulaşmış, 03.01.2008 tarihinde basım kararı alınmıştır. Makale ile ilgili tartışmalar 31.07.2009 tarihine kadar dergiye gönderilmelidir.

CFD modeling of emissions formation and reduction in heavy duty diesel engines

Extended abstract

The main emission problem for conventional diesel combustion is NO_x -soot tradeoff (diesel dilemma) which could not be completely eliminated with the in-cylinder combustion techniques till now and still after-treatment process is necessary to meet the present emission legislations. Also with the development of the new engines which have different combustion regimes such as Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI), Modulated Kinetics (MK), Low Temperature Combustion (LTC), Premixed Charge Compression Ignition (PCCI), new emissions such as HC and CO became significant for compression ignition engines.

This study mainly investigates formation and reduction of NO_x and soot emissions in diesel engine combustion, especially in Heavy Duty Diesel (HDD) engines with the help of CFD engine modeling. KIVA-3VR2 and CHEMKIN-II package were used for the modeling purposes. CHALMERS' Diesel Oil Surrogate (DOS) model based on a blend of aliphatic (n-heptane, 70%) and aromatic (toluene, 30%) components, turbulence/chemistry interaction approach with Partially Stirred Reactor (PaSR) model, detailed chemical mechanism and modified spray model were implemented into the KIVA-3VR2 code for the modeling tasks. DOS and detailed chemical mechanism were validated comparing the ignition delay (ID) times with the present available shock tube data for different temperatures at different pressure and excess air ratios, λ . Validation of the DOS and its constituents shows that developed reaction mechanism represents well enough ID and Negative Temperature Dependence behavior. Also it is calculated that for different λ values (1 / Equivalence Ratios, ER) ignition delay time reduces with the increasing of ER (e.g., for rich mixtures) which is consistent with the experiments. Then modeling results for Volvo D12C engine at MK combustion (Compression Ratio, CR, 18.0) and LTC (CR = 14.0) regimes were compared with the experimental data. Present reaction mechanism is modified in order to improve its NO_x -soot emissions behavior which has a good emission calculation tendency, but still quantitatively weak. Different fuel injection times, loads and both EGR-free and EGR cases were studied to extend the modeling capability. The MK

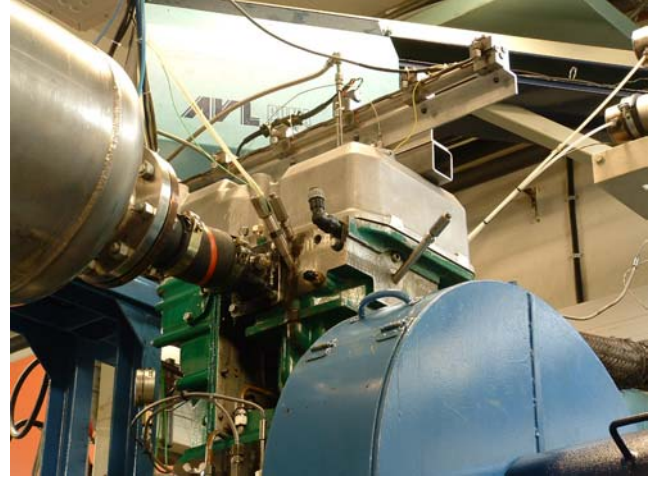
combustion regimes in the Volvo D12C DI diesel engine realized under selected retarded fuel injections (e.g. Start of Injection, SOI, varied from -5 till to 10 Crank Angle Degree (CAD) After Top Dead Centre (ATDC) causing the ID to be longer than the injection duration. For injection timings, -5, 0, 5 and 10 ATDC, predicted trends clearly indicate that the combustion mode shifts from conventional diesel-like to HCCI-like mode following from early to late injection cases. This behavior is not clear in the pressure vs. crank angle curves because these retarded injections corresponds to the expansion part of the cycle, and expansion avoids sudden pressure rise sourced from HCCI-like combustion. However it is clearly visible from the Rate of Heat Release (RoHR) curves that, in retarded injection conditions, RoHR maxima increase as expected because of the increased premixed combustion phase, which increases ID times in such a way that ignition occurs after the completion of fuel injection process similar to the HCCI combustion mode. For all cases, calculation results for in-cylinder pressure, temperature, RoHR and combustion efficiency are in a good agreement with experimental results. NO_x and soot emissions are reasonably well also. Although tendency of the calculated emissions is good, a quantitative improvement for emission predictions, especially for soot emissions, is required. In diesel combustion, most of the combustion process takes place over soot-formation and soot-oxidation path and soot emission is the difference between these formed and oxidized soot amount, which corresponds to only a small fraction of formed soot ($\leq 1\%$). Hence modeling of soot emissions is very hard, e.g., even 1% calculation error for soot oxidation will drastically affect the resulted soot emissions. NO_x formation is also strictly coupled with the soot-oxidation process because the remained oxygen radical which is necessary for NO formation depends on the soot-oxidation process. If soot-oxidation part is dominant in the mechanism, then excessive soot oxidation process can result lower soot emissions than the real amount by consuming most of the available oxygen radical which will be used later for the NO formation reactions. In conclusion excessive soot oxidation gives less soot emissions and indirectly prevents proper amount of NO formation. For this reason more accurate modeling of NO_x -soot emissions in the presented detailed chemistry approach requires a proper balance between soot-oxidation and NO, CO formation reactions

Keywords: Diesel combustion, NO_x -soot emissions, CFD modeling.

Giriş

Klasik dizel yanmasındaki esas emisyon problemi NO_x-is emisyonları ikilemi olarak güncelliğini korumaktadır. NO_x-is emisyonlarının birlikte anılmasının sebebi birbirleriyle zıt orantılı olarak oluşmaları ve genelde birini azaltıcı tedbirlerin diğerini artırmasıdır (tahterevalli dengesi). Bunun yanında yeni geliştirilmekte olan kimyasal kinetik kontrollü yanma (MK Combustion), alevsiz yanma (LTC) gibi farklı yanma stratejilerine sahip sıkıştırılmalı ateşlemeli (dizel veya dizel-benzeri) motorlarda karbon-monoksit (CO) ve hidrokarbon (HC) emisyonları da önem kazanmıştır.

Bu çalışmada ağır vasıta dizel motorunda NO_x ve is emisyonlarının oluşumu ve azaltılması, Sayısal Akışkanlar Dinamiği (CFD) modellemesi yardımıyla incelenmektedir. Modelleme çalışmalarında KIVA-3VR2 ve CHEMKIN-II paketi kullanılmıştır. Chalmers University of Technology'de geliştirilen n-heptan (%70) ve toluen (%30) karışımından oluşan dizel yakıt modeli (DOS), türbülans/yanma etkileşimi için kısmi karışımli reaktör modeli (PaSR), detaylı reaksiyon mekanizması ve geliştirilmiş demet modeli KIVA-3VR2'ye uyarlanmış ve modellemeler gerçekleştirilmiştir. DOS ve reaksiyon mekanizması sabit hacimli bomba deneylerinde, değişik basınç, hava fazlalık katsayısı, λ değerleri için, sıcaklığa bağlı tutuşma gecikmesi esas alınarak doğrulanmıştır. Sonraki aşamada Volvo D12C (Şekil 1) ağır vasıta dizel motorunda 18.0 ve 14.0 sıkıştırma oranları, farklı yük, püskürtme zamanı değerleri ve egzoz gazı geri dönüşü (EGR) oranları için modelleme çalışmaları yapılarak deney verileri ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlara göre, silindir içi basınç, sıcaklık, ısı açığa çıkış hızı ve yanma verimi deney sonuçlarıyla uyumludur. NO_x ve is emisyonları eğilim olarak deney sonuçlarıyla uyumludur ancak nicel olarak geliştirmeye ihtiyaç vardır. Emisyonlardaki farklılığın nedeni olarak, modelleme için kullanılan detaylı reaksiyon mekanizmasında, is yanması, NO_x ve CO oluşum reaksiyonları arasındaki çok hassas ve birbirini etkileyen dengenin henüz tam olarak sağlanamamış olması gösterilebilir. Bu konuda geliştirmeye ihtiyaç duyulmaktadır.

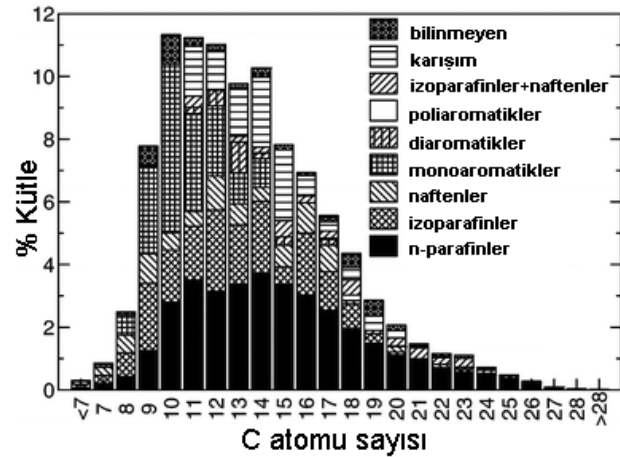


Şekil 1. Tek silindirli Volvo D12C direkt püskürtmeli, modellemesi yapılan, dizel motoru (Rente, 2004)

Hesaplama modeli

Dizel yakıt modeli

Uygulamadaki dizel yakıtları büyük oranda alifatik, halkalı ve aromatik bileşenlerden oluşur ve dizel yakıtının yanmasının modellenmesinde kullanılan detaylı reaksiyon mekanizmalarında yakıtın tüm bileşenlerinin göz önüne alınması, günümüz imkanları içinde, mümkün değildir (Şekil 2).



Şekil 2. Ticari dizel yakıtının bileşimi (Dagaut, 2002)

Bu nedenle, modelleme çalışmalarında dizel yakıtını temsil eden temsilli yakıtlar (bu çalışmada DOS olarak anılacaktır) kullanılırlar. Bu çalışmada kullanılan temsili yakıt (DOS) n-heptan

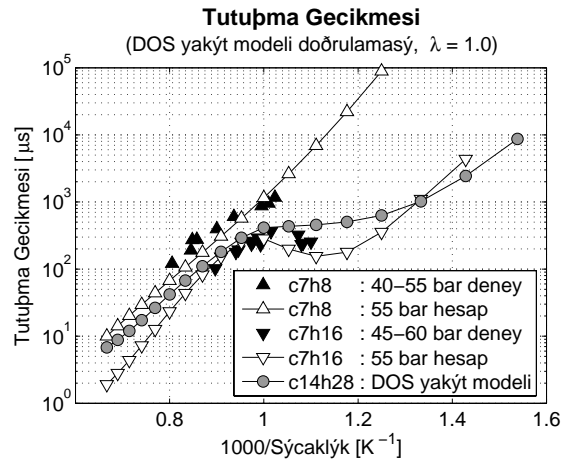
(C_7H_{16}) ve toluen (C_7H_8) olmak üzere iki bileşenden oluşmaktadır. DOS'un ilk bileşeni n-heptan (C_7H_{16}), gerçek dizel yakıtının tutuşma gecikmesini, TG, temsil etmek için seçilmiştir. Uzun zincirli bir hidrokarbon ve alifatik bir bileşen olan n-heptan'ın setan sayısı uygulamadaki dizel yakıtının setan sayısına yakındır (n-heptan setan sayısı = ~ 56). DOS'un ikinci bileşeni toluen (C_7H_8) ise dizel yakıtı içindeki aromatik bileşenleri temsil etmek için seçilmiştir. Bilindiği gibi yakıt içerisindeki aromatik bileşenlerin is oluşumuna önemli etkisi vardır. Sonuç olarak, setan sayısı ve gerçek dizel yakıtının diğer özelliklerini yeterince iyi temsil edebilen dizel yakıt modeli olarak %70 n-heptan (C_7H_{16}) ve %30 toluen (C_7H_8) karışımından oluşan bir yakıt modeli varsayılmıştır ($C_{14}H_{28}$).

Dizel yakıt modeli, sıvı ve buhar fazlarındaki yakıtın ısıl ve yayılım özellikleri ile buhar bileşenlerinin tutuşma özelliklerini tanımlayan iki kısımdan oluşur. Standart KIVA-3VR2 yazılımında (Amsden, 1997) tanımlandığı şekliyle dizel yakıt modeli, gerçek dizel yakıtı özelliklerinin önerilen $C_{13}H_{23}$ kimyasal formülü ile derlenmesinden oluşur. Burada önerilen DOS yakıt modelindeki n-heptan ve toluen benzer uçuculuk değerlerine sahip olduğundan dolayı, yakıt tek bileşen ile temsil edilerek, yakıt buharının dağılımı ve yerel bileşimi makul şekilde tahmin edebilir. Önerilen yakıt buharı bileşenleri C_7H_{16} ve C_7H_8 ile uyumlu olması için, kullanılan yakıt formülü standart KIVA-3VR2'deki $C_{13}H_{23}$ yerine $C_{14}H_{28}$ olarak değiştirilmiştir. Daha sonra n-heptan ve toluen için detaylı reaksiyon mekanizmaları geliştirilmiş ve bomba deneyleri sonuçları Gauthier ve diğerleri (2004) ile doğrulanmıştır.

Zengin karışımli asetilen alevleri için dört aromatik halkaya kadar aromatik oluşum kinetiği ile birleştirilmiş n-heptan ve toluen yanma kimyasından oluşan böyle detaylı bir mekanizma CHEMKIN-II yazılımının SENKIN bölümü kullanılarak yapılan duyarlılık analizi ile ~ 72 bileşen ve ~ 306 reaksiyondan oluşan bir mekanizmaya indirgenmiş ve dizel yanmasını modellemek için KIVA-3VR2 yazılımına uyarlan-

mıştır. Uyarlanan mekanizma, alifatik hidrokarbonlar için düşük ve yüksek sıcaklıklı yanma rotalarını ve toluen için yüksek sıcaklıkta yanmayı göz önüne alır. Bu mekanizma, dizel yakıtının tutuşma ve yanma gelişimini ve polisiklik aromatik hidrokarbonların (PAH), üç boyutlu aromatik halka asenaftalin (A2R5) merkezli, gaz fazı is öncülerine kadar olan oluşumlarını tahmin edebilir. Düşük sıcaklık toluen yanma alt-mekanizması basitleştirilmiştir çünkü karışım içindeki toluen'in n-heptan ile olan tutuşma gecikmesi esas olarak en çok reaktif olan bileşen tarafından yönetilir.

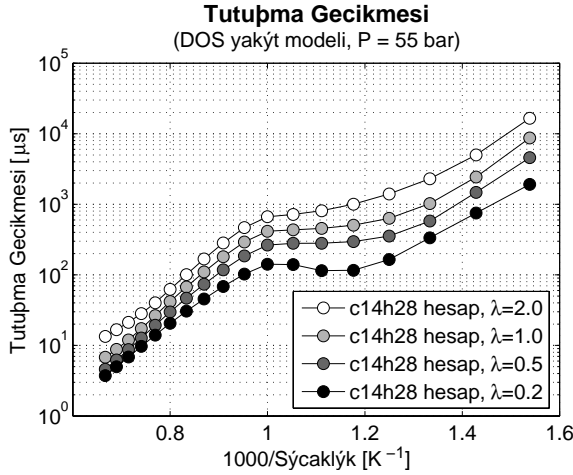
Şekil 3'de DOS yakıt modelinin doğrulaması gösterilmektedir. Burada DOS yakıt modeli bileşenlerinin hesaplanan TG süreleri (şekilde "hesap" olarak isimlendirilmiştir) bomba deneylerinde ölçülen sonuçlarla (şekilde "deney" olarak isimlendirilmiştir) karşılaştırılmıştır.



Şekil 3. DOS yakıt modeli ve bileşenleri için hesaplanan ve bomba deneyleri ile ölçülen TG sürelerinin karşılaştırması

Şekil 3'deki tüm karşılaştırmalar $\lambda = 1.0$ değeri için yapılmıştır. Hem toluen hem de n-heptan'ın hesaplanan TG süreleri deneylerde ölçülen değerlere uygunluk göstermektedir. n-heptan'ın, nispeten düşük sıcaklıklarda, TG süresinin sıcaklığın artmasıyla azalması hali (negatif sıcaklık değişimi) de başarıyla modellenmiştir (Şekil 3'deki c7h16 deney ve hesaplama sonuçlarının eğrileri). Ayrıca şekilde DOS yakıt modelinin de hesaplanan TG süreleri verilmiştir.

Şekil 4’de ise doğrulanmış DOS yakıt modelinin farklı λ değerleri için hesaplanan TG süreleri gösterilmiştir. Karışım zenginleştikçe TG süreleri azalmaktadır ki bu da deney sonuçlarıyla uyumludur.



Şekil 4. DOS yakıt modelinin farklı λ değerleri için hesaplanan TG sürelerinin değişimi

Yakıt modelinin, onu oluşturan n-heptan (C_7H_{16}) ve toluen (C_7H_8) bileşenlerine parçalanmasını tanımlamak için, aşağıdaki gibi tek adımlı global bir piroliz yanma reaksiyonu mekanizmanın başlangıcına eklenmiştir.



İs oluşum mekanizması, asetilenden ilk aromatik halka A1’in oluşumuna kadar bir seri elementer reaksiyon basamaklarını içerir. Bu reaksiyon basamakları, aromatik halkaların zinciriyle sonuçlanan, H çıkarma ve C_2H_2 ekleme adımlarıyla takip edilir (HACA mekanizması). Toluen, asetilen ile etkileşime girmeden, A1 halkasının oluşturabilir. Model, dizel yakıt modeli ile bileşenleri n-heptan ve toluen’in bomba deneylerinde ölçülen zamanla değişimlerini, ve yanma işlemindeki is oluşumu/yanması gibi özellikleri tahmin edebilmiştir.

Geliştirilmiş demet modeli

Gerçek motorda dizel yakıtı enjektörler vasıtasıyla yanma odasına bir sıvı jeti olarak püskürtülerek gönderilmektedir. Bu sıvı jeti, ortamda bulunan gazın aerodinamik etkisiyle karşılaşır.

Aerodinamik ve yüzey gerilme kuvvetlerinin bileşkesi, sıvı jeti yüzeyinin bozulma ve salınım hareketlerini kuvvetlendirir. Bu durumda sıvı jeti artan salınım hareketleriyle parçalanarak küçük damlacıklara bölünür. Bu fiziksel olay literatürde parçalanma, atomizasyon, olarak tanımlanmaktadır. Standart KIVA-3VR2 yazılımında bu karmaşık olaylar basitleştirilerek; yakıt demeti çıkış açısı, damlacık başlangıç büyüklükleri ve yakıt demetini temsil eden damlacık parsellerinin sayısı gibi özellikler uygun giriş değerleri alınarak seçilirler (Taşkıran, 2004).

Modellemenin doğruluğunu iyileştirmek için KIVA-3VR2 yazılımının, yakıt püskürtme, karışım oluşumu ve yanma alt modelleri iyileştirilmiştir. Demet atomizasyonu birincil ve ikincil olmak üzere iki safhaya bölünebilir. Bu safhalar aerodinamik dalga yayılımı kararsızlığı teorisi kullanılarak modellenerek demet ve damlacık parametreleri belirlenebilir. Demetin ilk parçalanma safhası, demet ile ortam (yanma odası) gaz fazının etkileşimine dayanır ve sıvı demet çekirdeğine yakın bölgede, daha sonra ana damlacıklara parçalanacak olan, ligamentlerin oluşumuna neden olur. İlk parçalanma safhası tamamlandıktan sonra ana damlacık parametrelerine (boyut, hız vs.) bağlı olarak ikincil parçalanma başlar. Demet modelinde Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor (KHRT) modelleri damlacık püskürtme modeli ile birleştirilerek, iyileştirilmiş ve doğrulanıp uygulanmıştır (Beale ve Reitz, 1999).

KHRT modeli sadece ampirik olarak tanımlanan demet çekirdeği uzunluğunun (nüfuz derinliğinin) ötesindeki damlacıkları etkileyecek şekilde uyarlanmıştır. Böylece sıvı demet çekirdeği RT kararsızlığından etkilenmez ve neredeyse modellemede kullanılan ağ yapısından bağımsız olarak demet nüfuz derinliği tahmin edilebilir.

İkili çarpışma geometrisini esas alarak geliştirilen çarpışma modeli, birleşme ve bouncing (çarpışan iki damlacık arasında momentum değişiminin olup kütle ve enerji değişiminin olmaması) durumlarını dikkate alır. Duvar film modeli, yakıtın kritik buharlaşma sıcaklığının üzerine çıkmasını önleyecek şekilde değiştiril-

miştir. Damlacık hareketini iyileştirmek amacıyla, damlacık/gaz etkileşiminde hücre gaz hızı interpolasyonu kullanılmıştır. Böylece, hesaplamadan kaynaklanan yonca şekilli sanal demet davranışını ortadan kaldırır.

Isı transfer modeli, orijinal KIVA-3VR2 yazılımında olduğu gibi duvar/film etkileşim formülüne dayanır. Piston, silindir kafası ve duvarlarına deney verileriyle uygun sıcaklık değerleri verilir.

Türbülanslı yanma modeli

Reaktif akışları modelleyen birçok yöntem Navier-Stokes denklemlerinin Reynolds Ortalama metodu ile (RANS) sayısal çözümünü içerir. Herhangi bir güvenilir türbülanslı yanma modelinin püf noktası, türbülans karışım modelinde, mikro ve makro iki ayrı türbülans mekanizmasının karışımı ve birleştirilmesidir. Karışım düzgünlüğünün (heterojen karışım) etkisini modelleyebilmek için genelleştirilmiş kısmi-karışımli reaktör modeli (PaSR) kullanılmıştır. İlk kez Villermaux ve Devillon (1972) tarafından ortaya atılan orijinal PaSR modeli, Interaction by Exchange with the Mean (IEM) yaklaşımının basit bir formudur. Reaktör içinde lagrangian parçacık bölünmesini dikkate alarak IEM modelini kısaca tarif edelim. Reaktöre gönderilen parçacıklar, reaktörde önceden bulunan eski parçacıklarla karışarak ısınmakta ve reaksiyona girmektedir. Parçacık karışım hızı mikro-karışım zaman ölçeği τ_{mix} 'e bağlıdır. Reaktör içindeki bileşenlerin yoğunluklarını tanımlayan zamana bağlı denklemler:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\langle c \rangle - c}{\tau_{mix}} + f_r(c, T); c(t=0) = c_0 \quad (1)$$

Burada, c , anlık bileşen molar konsantrasyonu, T , karışım sıcaklığı ve $f_r(c, T)$, kimyasal kaynak terimi olup, $\langle \rangle$ ortalama işlemini temsil eder. Bileşenlerin indisleri basitlik amacıyla gösterilmemiştir.

Ortalama $\langle c \rangle$ değeri, pdf $p(c)$ integrali şeklinde, bileşenlerin reaktör içindeki dağılımını aşağıdaki gibi tanımlanır,

$$\langle c \rangle = \int_0^1 c \cdot p(c) \cdot dc \quad (2)$$

Reaktör içinde belirli bir zaman ve parçacık bölünmesi için, ergodisite kabulü ile konsantrasyon dağılımı,

$$p(c) \cdot dc = \phi(t) \cdot dt \quad (3)$$

olarak verilir. Burada $\phi(t)$ zaman, t , gibi belirli bir değişkenin rasgele fonksiyonudur. Bu fonksiyon üstel bir dağılım $\phi(1/\tau_r, t) = e^{-t/\tau_r} / \tau_r$ şeklinde kabul edilir. Burada τ_r parçacıkların reaktördeki ortalama karışma süresidir. Üstel dağılım, Poisson dağılımının, reaktördeki bekleme süresi esnasındaki bir ayrı oluşum veya “varımı” ile azaltılmış şeklidir. Son olarak ortalama işlemi aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$\langle c \rangle = \int_0^\infty c(t) \cdot \phi(t) \cdot dt \quad (4)$$

Bu model PaSR modeli olarak bilinir. Golovitchev ve diğerlerinin (2000) genişletilmiş PaSR modelinde, 2-4 denklemleri ile tanımlanan ortalama işlemi, hesaplama hücresindeki korunum denklemlerinin sayısal çözümleri ile değiştirilerek, $\langle c \rangle$ ve diğer akış parametreleri bulunmaktadır. Hesaplama ağının hücreleri, orijinal IEM modelinde karışım bileşimini temsil eden parçacıklar gibi değerlendirilebilir. Sayısal çözüm, çok adımlı reaksiyon mekanizmasında bileşenler için kütle korunum denklemlerine uygulanan operator-ayırıştırması metoduna dayanır. Bu yaklaşıma göre son hesaplama adımı, bir hesaplama hücre boyutundaki sabit PaSR hacimdeki yanmayı temsil eder, öyleki reaksiyonlar aşağıdaki Adi Diferansiyel Denklem, ADD, sistemiyle tanımlanan hacim kesrinde gerçekleşir,

$$\frac{d \langle c \rangle}{dt} = \frac{\langle c^1 \rangle - \langle c^0 \rangle}{\tau} = \frac{c^1 - c^0}{\tau} = f_r(c, T) \quad (5)$$

Yukarıda, kimyasal kaynak terimi sanal reaktör konsantrasyonlarında hesaplanır, τ integrasyon adımı olup ortalama sembolü ihmal edilecektir.

Model, reaktör çıkışındaki c^1 , reaktör içindeki, c , ve reaktör girişindeki, c^0 konsantrasyonlarını ayırır. Bir sonraki adımda c^1 , c^0 ile yer değiştirir. $c \equiv c^1$ olması durumunda 5 sistemi geleneksel sayısal metotlarla (örneğin CHEMKIN-II paketinin kinetik programı ile) çözülebilir. Aksi takdirde bu denklemler, c^1 ve c gibi iki adet bilinmeyen olmasından dolayı, çözülemez ve 5 sistemini çözebilmek için (1) denkleminin rutin olarak çözülebilen kararlı hali alınır (Denklem 6).

$$\frac{c^1 - c^0}{\tau} = \frac{c^1 - c}{\tau_{mix}} = f_r(c, T) \quad (6)$$

Motor modellemesi

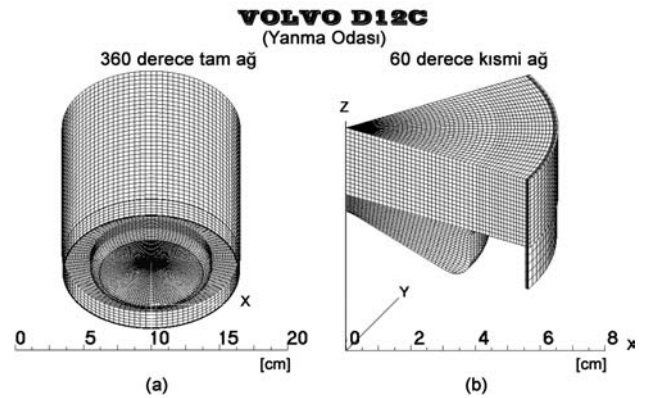
Modelleme çalışmalarının sonuçları Chalmers University of Technology, Combustion Division'da gerçekleştirilen motor deney ölçümleri ile karşılaştırılmıştır. Kullanılan deney motoru AVL 501 bazlı Volvo D12C silindir kafasına sahip tek silindirli bir deney motorudur. Motor su, yakıt sıcaklıkları, yağ sıcaklık ve basıncı, emme havasının sıcaklığı, basıncı ve nemi gibi çevre birimleri gerekli hassasiyette ve uygun şekilde şartlandırılmıştır. Motor istenilen işletme şartında kararlı duruma geldikten sonra ölçümler gerçekleştirilmiştir. Emisyonlar, emme havası ve egzoz sıcaklığı ve basıncı 120 s süreli ile 100 Hz frekansında kayıt edilerek ortalama değerleri alınmıştır. Silindir içi basıncı ve püskürtme basınçları ise 0.1° KMA hassasiyette ölçülmüştür. İS ve NO_x emisyonları her çalışma noktası için bir kez ölçülmüştür. Isı açığa çıkış (RoHR) eğrileri ise basınç-KMA (p-v) diyagramı kullanılarak elde edilmiştir.

Deney motorunun yanma odası 89 mm çaplı oyuktan oluşan bir pistonla sahiptir. Yanma odası ve enjektör detayları aşağıda verilmiştir (Tablo 1)

İlk modellemeler 360° tam ağ yapısında enjektörün simetrik 6 demetini içerecek şekilde yapılmıştır. Daha sonra, 60° kısmi ağ yapısı ile yapılan modellemeler tam ağ yapısı ile yapılan modellemeler ile karşılaştırılmıştır. Silindir içindeki boşluk hacimlerini de dikkate alan her iki ağ yapısı da Şekil 5'de verilmiştir.

Tablo 1. Volvo D12C motorunun başlıca özellikleri

Motor Tipi:	AVL Type 501, tek silindirli dizel deney motoru	
Silindir kafası	Volvo D12C :4 supap :Düşük döngülü	[-]
Çap:	131	[mm]
Strok:	150	[mm]
Biyel uzunluğu:	260	[mm]
Strok Hacmi:	2.02	[l]
Sıkıştırma oranı:	18.5:1	[-]
Piston:	ω şeklinde, Ø= 89 mm eksenel oyuklu	[-]
Yakıt püskürtme sistemi	2 aktüatörlü DELPHI E3 Dizel Ayrık Yollu Elektronik Püskürtme	[-]
Demet açısı	153	[°]
Enjektör meme adedi ve çapı:	6 x 0.237	[mm]



Şekil 5. Volvo D12C a) 360° tam ve b) 60° kısmi ağ yapısı

Kullanılan ağ yapısı ile deney motorunun sıkıştırma oranı değeri ayarlanmıştır. Bu ağ geometrileri KIVA-3VR2'nin ağ yapılandırma programı, k3prep, kullanılarak oluşturulmuştur. 360° ağ 272899, 60° ağ ise 82912 altıgen hücreden oluşmaktadır.

Modelleme çalışmalarında ilk olarak mevcut deney verileri göz önüne alınmıştır. Eldeki deney verileri püskürtme zamanları (SOI) farklı

dört adet çalışma noktasından oluşmaktadır: %25 yük, 1000 d/d motor hızı ve SOI = -5, 0, +5, +10 Üst Ölü Nokta Sonrası (ÜÖNS) Krank Mili Açısı (KMA). Ana parametreler Tablo 2’de verilmiştir. Püskürtme avansı -5 den başlayıp +10 KMA’ya kadar değiştirilmiştir. Püskürtülen yakıt miktarı sabit tutulmuştur. Tüm ölçümler motor kararlı çalışma konumuna ulaştıktan sonra yapılmıştır. Modellemenin başlangıç şartları olarak emme supabı kapanma anında (-121 KMA ÜÖNS) ölçülen silindir içi basınç ve bu basınca göre hesaplanan sıcaklık değerleri alınmıştır (Tablo 2).

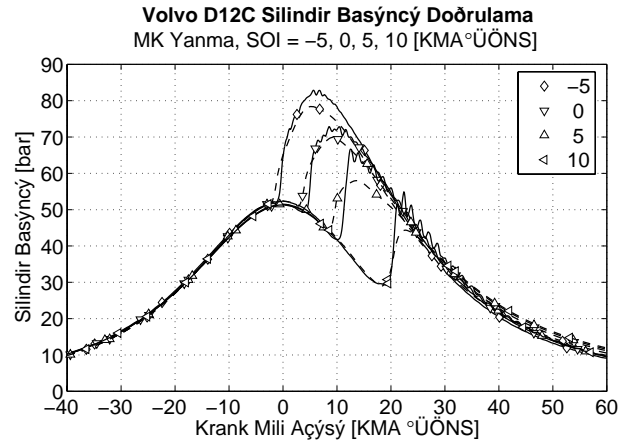
Tablo 2. %25 yük ve 1000 d/d motor hızındaki modelleme noktaları

Püskürtme avansı, [ÜÖNS]	-5.0	0.0	5.0	10.0
Yakıt miktarı, [mg]	60.8	63.9	64.8	62.3
Ölçülen başlangıç basıncı, [bar]	1.40	1.30	1.30	1.30
Hesaplanan başlangıç sıcaklığı, [K]	325	313	314	317

İlk olarak bu dört deney noktası kullanılarak modelleme çalışmalarına başlanmış ve geliştirilen kodun doğrulanması gerçekleştirilmiştir. Modelleme çalışmalarında supapların kapalı olduğu varsayılmıştır. Bu nedenle modelleme işleminde emme supabının kapanma anından başlayıp, egzoz supabının açılma anına kadar olan KMA bölgesi dikkate alınmıştır. Ölçülen silindir içi basınç ve ısı açığa çıkış hızı, RoHR (ısı açığa çıkışı da ölçülen silindir basınç eğrisi kullanılarak elde edilir), modelleme sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Burada modelleme ile hesaplanan RoHR değerleri, bütün kimyasal reaksiyonlarda açığa çıkan ısının toplamına karşılık gelir. Yanma verimini araştırmak için, modelleme ile bulunan RoHR değerinin toplamı, yakıtın alt ısıl değeri (42.5 MJ/kg) ile karşılaştırılmış ve dizel yakıt modelinin ısıl değerinin yaklaşık 45 MJ/kg olduğu tespit edilmiştir. Yakıtın ısıl değeri hesabındaki doğruluk, yanmanın tamamlanıp tamamlanmadığını anlamak için yeterlidir.

Edwards ve diğerlerinin (1992) gözlemlerine göre, dizel demeti yanmasındaki ısı açığa çıkışı

iki ayrı safhadan oluşmaktadır. İlk kısım yüksek hızlı yanmanın gerçekleştiği özellikleri gösterirken (hızlı basınç artışı), ikinci kısım daha düşük hızlı yanma özelliği gösterir. İlk kısım ön karışimli yanma bölgesi olup, bu bölgede yanma, tutuşma ve alev yayılımının etkileşiminden meydana gelir. İkinci kısım ise karışım kontrollü yanma olarak adlandırılır. Bu bölümde yakıt demeti tamamen alev ile çevrelenmiş ve yanma difüzyon kontrollü bir işlemdir. Eğer yakıt püskürtme işlemi ÜÖN sonrasında yapılırsa, azalan basınç ve sıcaklık koşullarında nispeten soğuk akış evresinden sonra tutuşma gerçekleşir. Bu durumda tutuşma birçok bölgede aynı anda başlar ve Homojen Karışimli Sıkıştırma Ateşlemeli (HCCI) motoruna benzer şekilde bütün yanma odasına hızla yayılır. Hesaplanan basınç ve RoHR değerleri (Şekil 6’da kesikli çizgi ile gösterilmiştir) deney verileri ile karşılaştırılmıştır (Şekil 6’da sürekli çizgi ile gösterilmiştir). Hesaplanan basınç eğrileri deney sonuçlarıyla oldukça uyumludur.

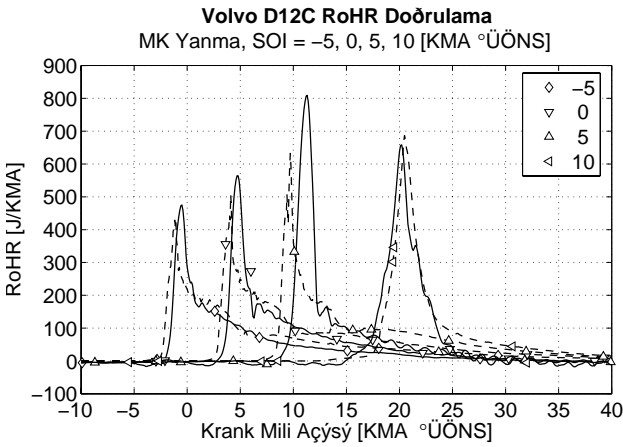


Şekil 6. MK yanma rejiminde hesaplanan basınç eğrilerinin deney verileri ile karşılaştırılması

Hesaplanan RoHR eğrilerinin deney verileri ile karşılaştırması da Şekil 7’de gösterilmiştir. Burada, püskürtmenin gecikmesiyle birlikte klasik dizel yanmasından HCCI benzeri ön karışimli yanmaya geçiş belirgin olarak görülmektedir (Şekil 7).

Şekil 6 ve Şekil 7’den görüldüğü gibi kullanılan model basınç ve RoHR parametreleri açısından deney verileri ile yakın sonuçlar vermektedir. Böylece modelimizin doğrulanması tamamlanmış

olup, deney verilerinin olduğu noktalar dışında seçilecek olan diğer püskürtme zamanlarında yeni modeller yapılabılır hale gelmiştir. Deney verilerinin olduğu mevcut dört adet püskürtme avansı noktasına ilaveten SOI = -10, -15, -20, -25, -30, -40 ve -60 KMA'ya kadar daha erken püskürtme noktaları ilave edilerek, modelleme sahası genişletilmiştir (PCCI yanması). Böylece, CO emisyonlarını, NO_x emisyonunu artırmadan düşürmek amacıyla Shimo ve diğerleri (2006) tarafından önerilen erken püskürtme durumlarına benzer şartlar da modellenmiştir. Ancak -60 ve -40 KMA püskürtme avanslarında tutuşma veya verimli yanma gerçekleşmediği için bu noktalar elenmiştir. Şekil 8'de bu durum basınç eğrileri üzerinden görülmektedir. SOI = -60 noktasında hiç tutuşma olmaz iken SOI = -40 noktasında tutuşma gerçekleşmesine rağmen yanma verimsiz olmuştur. Bu nedenle genişletilmiş modelleme çalışmaları SOI = -30 KMA ile +10 KMA ÜÖNS püskürtme avansı arasında kalan bölgeyi dikkate almaktadır.

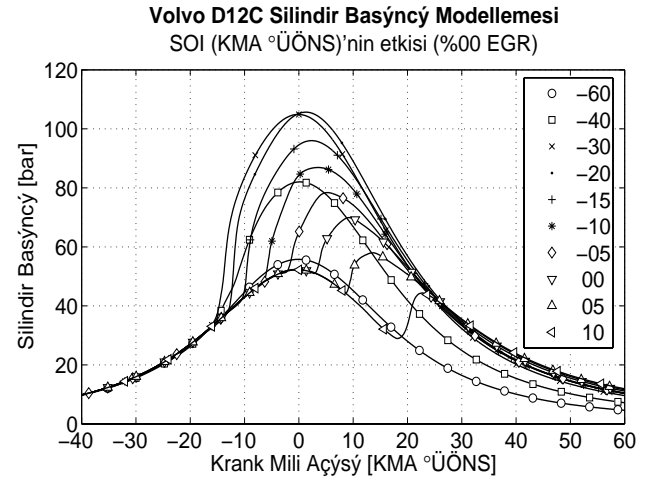


Şekil 7. Hesaplanan RoHR değerlerinin deney sonuçlarıyla karşılaştırılması

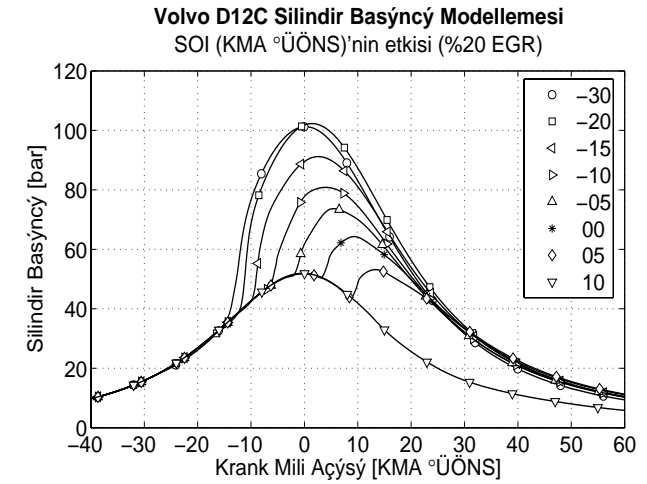
%20 EGR oranındaki modelleme çalışmalarına baktığımızda, tüm noktalar için, silindir içi basınçların maksimum değerlerinde beklenen azalmanın olduğu görülmektedir (Şekil 9).

Modelleme yoluyla hesaplanan NO_x emisyonları da Şekil 10'da verilmiştir. Şekil 10'da verilen modelleme çalışmalarına göre, hem püskürtme avansının hem de EGR miktarının NO_x emis-

yonları üzerindeki etkisi literatürdeki gerçek deney verilerine eğilim açısından uygunluk göstermektedir. %50 EGR ve geç püskürtme (SOI = +10 KMA) gibi uç şartlarında tutuşmanın gerçekleşmediği Şekil 10 ve Şekil 11'de görülmektedir. Bu noktada hem NO_x hem de CO değerlerinin sıfıra yakın olması tutuşma ve verimli yanmanın olmayacağını göstermektedir.

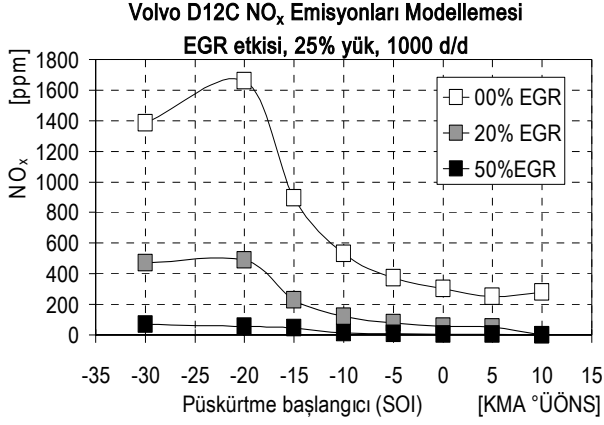


Şekil 8. Değişik püskürtme avansları için hesaplanan basınç eğrileri, EGR yok

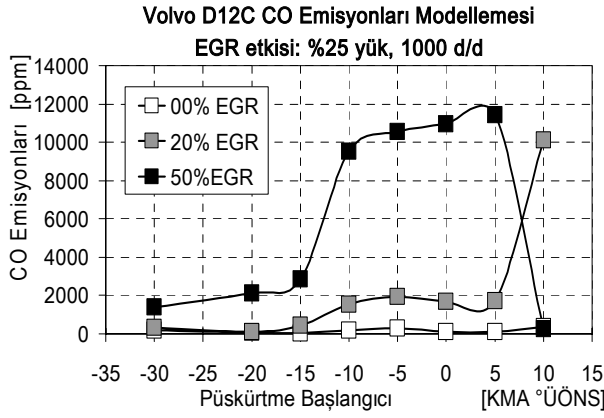


Şekil 9. Değişik püskürtme avansları için hesaplanan basınç eğrileri, %20 EGR

CO emisyonları ise, NO_x emisyonlarının aksine artan EGR oranı ile birlikte artmaktadır. EGR oranının çok artması ise (%50 EGR durumu) normal ve art püskürtme durumlarında CO emisyonlarını şiddetli derecede artırmaktadır (Şekil 11).



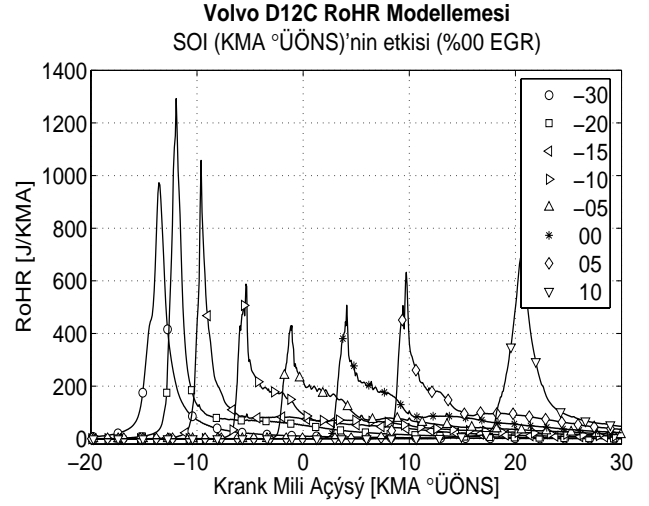
Şekil 10. Farklı EGR oranları için hesaplanan NOx emisyonları



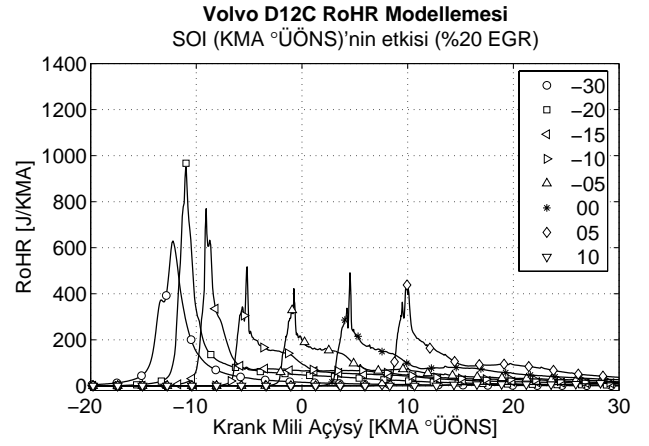
Şekil 11. Hesaplanan CO emisyonları

RoHR dağılımlarında görüleceği gibi erken püskürtme, (SOI = -30, -20, -15) ön karışım oranını artırmakta ve yanmanın ilk safhasında homojen karışimli yanma özelliği göstererek hızlı ısı açığa çıkışına neden olmaktadır. Böylece HCCI benzeri yanmaya yol açmaktadır (Şekil 12). Benzer durum geç ÜÖNS yapılan geç püskürtme koşullarında da beklenmektedir. Geç püskürtme sırasında, silindir hacminin genişlemesinden dolayı sıcaklık ve basınçlar düşmekte ve bu yüzden TG artmakta ve karışım için daha fazla zaman kalmaktadır. Yanmanın ilk safhası erken püskürtmeye benzer olarak homojen karışimli yanma başlangıcını andırmaktadır.

%20 EGR, ısı açığa çıkış hızını tüm noktalarda azaltmaktadır (Şekil 13). Bu durum EGR oranının artırılmasıyla daha da belirgin hale gelir.



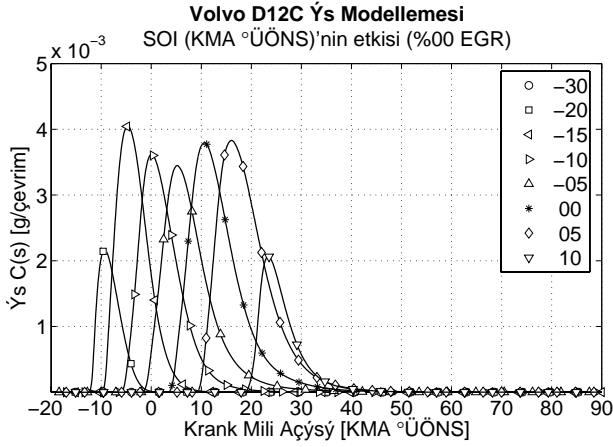
Şekil 12. Hesaplanan RoHR dağılımı, EGR yok



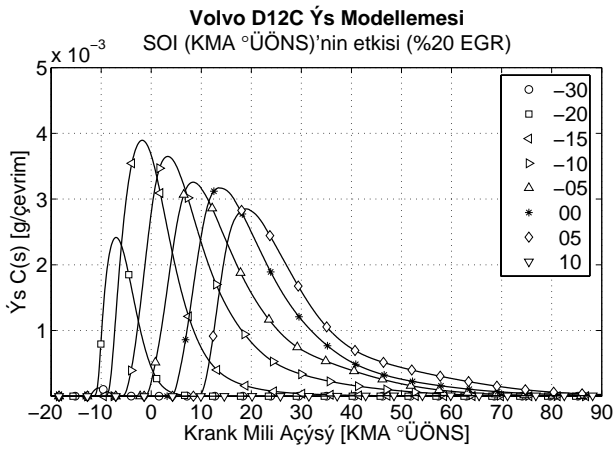
Şekil 13. Hesaplanan RoHR dağılımı, %20 EGR

Şekil 14 ve Şekil 15 ile verilen sonuçlara göre %20 EGR kullanımı is oluşumunu çok az artırmaktadır ve ön karışimli yanma rejiminin EGR ile birlikte uygulanması neticesinde is emisyonlarını çok artırmadan NOx emisyonları bakımından avantaj elde edilebilir. Şekil 14'de EGR'siz durumda is oluşumu daha fazla olmakla birlikte, çevrim sonunda kalan (yakılamayan) is miktarı ve %20 EGR'li duruma göre daha azdır (Şekil 15). EGR yanma hızlarını düşürerek yanmanın ÜÖNS bölgesine sarkmasına neden olmakta ve oluşan isin yakılması için daha az zaman kalmaktadır. Bu nedenle EGR ile birlikte egzozdaki is artar.

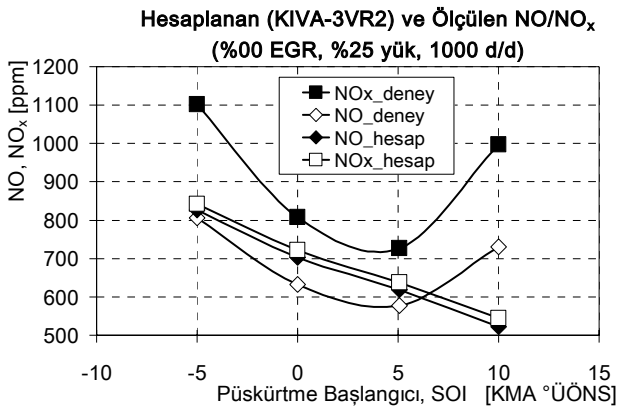
Son olarak mevcut deney verileri ile NOx ve is emisyonlarının karşılaştırmaları Şekil 16 ve Şekil 17'de verilmiştir.



Şekil 14. Hesaplanan is emisyonları, EGR yok



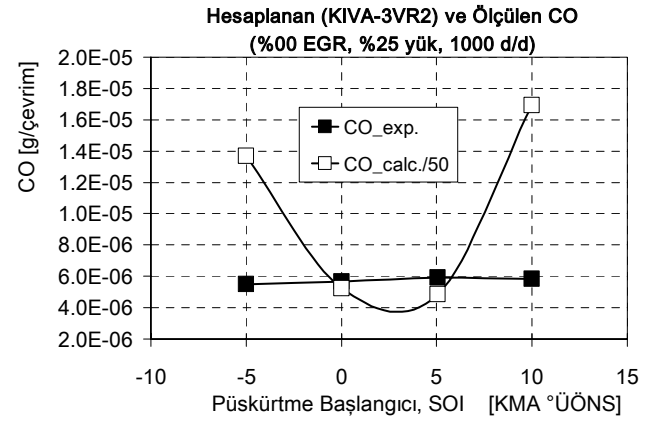
Şekil 15. Hesaplanan is emisyonları, %20 EGR



Şekil 16. Hesaplanan NO/NO_x emisyonlarının deney verileri ile karşılaştırılması EGR yok

NO_x emisyonlarının tahmini nicel olarak da gayet başarılıdır. Ancak aynı durum CO emisyonları için söylenemez. Hem eğilim olarak hem de miktar olarak CO emisyonlarını iyi derecede

tahmin etmek mümkün olmamıştır. Bunun nedeni reaksiyon mekanizmasında, emisyonların oluşumunun birbirleriyle çok hassas dengelerle bağlantılı olmasından kaynaklanmaktadır. Örneğin reaksiyon mekanizmasında is yanmasını artırdığınızda, is yakılması sırasında ortamdaki oksijen tükenerek CO'ın yakılmasına çok az oksijen kalır. Bu durum CO emisyonlarının anormal derecede artması sonucunu doğurur. Tahterevalli etkisine benzer şekilde mekanizma değişik bileşenler için farklı yönde sonuçlar verir.



Şekil 17. Hesaplanan CO emisyonlarının deney verileri ile karşılaştırılması

Buradan emisyon eğilimlerinin deney verileri ile uyumlu olduğu, ancak nicel olarak modellemenin geliştirmeye ihtiyaç duyduğu sonucu çıkmaktadır.

Sonuçlar

- Erkenden geç püskürtmeye doğru farklı püskürtme avansları ile MK ve PCCI yanma rejimlerini içeren farklı yanma modları incelenmiştir.
- Deney verilerinin mevcut olduğu noktalar, modeli doğrulama amacıyla kullanılmış ve basınç ve RoHR modelleme sonuçlarının deneylerle oldukça uyumlu olduğu belirlenmiştir.
- Farklı EGR değerleri için farklı yanma modları incelenmiştir. Geç püskürtme şartlarında EGR uygulanması durumunda oluşabilecek yüksek CO ve is emisyonlarını önlemek için erken püskürtme ve daha az EGR miktarları denenmiş ve avantajlı bir rejim

olarak ortaya çıkmıştır. Bu rejim PCCI yanma rejimi olarak tanımlanabilir.

- Modelleme ile bulunan emisyonların eğilimleri iyi olmakla birlikte nicel olarak iyileştirmeye ihtiyaç vardır. Detaylı reaksiyon mekanizmasında is yanması, NO ve CO oluşum reaksiyonları arasında çok hassas olan dengenin daha iyi kurulması gerekmektedir.

Kaynaklar

- Amsden, A.A., (1997). KIVA-3V: A block-structured KIVA program for engines with vertical or canted valves, LA-13313-MS.
- Beale, J.C. and Reitz, R.D., (1999). Modeling spray atomization with the Kelvin-Helmoltz/Rayleigh-Taylor Hybrid Model, *Atomization and Sprays*, **9**, 623-650.
- Dagaut, P., (2002). On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel, *Physical Chemistry Chemical Physic*, **4**, 2079-2094.
- Edwards, C.F., Siebers, D.L., ve Hoskin, D.H., (1992). A study of the autoignition process of a diesel spray via high speed visualization, *SAE Paper*, 920108.
- Gauthier, B.M., Davidson, D.F. ve Hanson, R.K., (2004). Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures, *Combustion and Flame*, **139**, 4, 300-311.
- Golovitchev, V.I., Nordin, N., Jarnicki, R. and Chomiak, J., (2000). 3-D Diesel spray simulations using a new detailed chemistry turbulent combustion model, *SAE Paper*, 2000-01-1891.
- Rente, T., (2004). Injection strategies for heavy duty DI diesel engines, *PhD Thesis*, Department of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden.
- Shimo, D., Kataoka, M., Sagane, Y., Fujimoto, H. ve Terazawa, Y., (2006). EM reduction by a large amount of EGR and excessive cooled intake gas in diesel engines, *FISITA Paper*, F2006P372.
- Taşkıran, Ö., (2004). Gemi dizel motorlarında karışım oluşumunun çok boyutlu matematiksel modeli, *Yüksek lisans tezi*, İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
- Villiermaux, J. and Devillon, J.C., (1972). Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d'interaction phénoménologique, *Proceedings of the 2nd International Symposium on Chemical Reaction Engineering*, 1-13.