

# **HCCI Motorlarda Depozit Oluşumunun Kimyasal Kinetik Modellenmesi**

**Proje No: 109M019**

Doç.Dr. Hakan Serhad SOYHAN  
Prof.Dr. Cem SORUŞBAY  
K. Ercüment GÜL

AĞUSTOS 2010  
SAKARYA

## **ÖNSÖZ**

Genelde, herhangi bir yakıt için yüzey sıcaklığı düştükçe, yanma odası depozit oluşum miktarı artar. Bu yanma odası depozitleri motorun çevre sıcaklığını değiştirebilir. Ayrıca yüzeye yakın bölgelerde kendiliğinden tutuşmaya kimyasal etkisi bulunabilir. HCCI (Homojen Şarjlı Sıkıştırılmalı Ateşlemeli) motorlarda ısı yayılımı, önemli oranda sıcaklıktan etkilenen kendi kendine tutuşma ile gerçekleşir. Bu yüzden HCCI yanmasının, yanma odası depozitlerinden etkilenmesi muhtemeldir. Bu projede yukarıda belirtilen etkiler incelenmiştir. Proje TÜBİTAK 1002 fonu tarafından desteklenmiştir.

# İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	2
ŞEKİLLER LİSTESİ	4
TABLolar LİSTESİ	5
ÖZET	6
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ	6
BÖLÜM 1. GİRİŞ	8
BÖLÜM 2. YÖNTEM	10
2.1. Fiziksel Model	10
2.2. Matematiksel Model İçin Temel Denklemler	10
2.2.1 Silindir içi yanmanın denklemleri	12
2.3. Kimyasal Kinetik Model	14
2.4. Türbülans Modeli	15
2.4.1 Türbülans Modeli denklemleri	17
2.4.2 Türbülansın yanma üzerindeki etkileri	18
BÖLÜM 3. SİLİNDİR İÇİ KARIŞIM VE YANMA MODELLERİ	19
3.1. Deneysel Model	19
3.2. Nümerik Model	20
3.3 CHEMKIN Kimyasal Kinetik Simülatörü	22
3.4. Model Parametreleri	23
3.4.1 Modelin Gambit ve Fluent 12.1 de oluşturulması	23
3.4.2 Fluent-Chemkin senkronizasyonu ve Yanma Kimyası	29
3.4.3. Dinamik ağ yapısı stratejisi	31
3.4.4. Silindir içindeki karışımın tanımlanması	33
3.4.5. Sınır koşullarının tanımlanması	34
3.4.6. Başlangıç koşullarının belirlenmesi ve çözüme başlama	34
3.4.7 Analiz sonuçlarının alınması	34
BÖLÜM 4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	35
REFERANSLAR	43

## ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 2.1. n-heptan ve izo-oktan'ın düşük sıcaklıkta kimyasal oksidasyonunun şematik diyagramı
- Şekil 3.1. Chemkin-HAD kodunun çalışma şeması
- Şekil 3.2. Gambit programında çizilip ağ yapısı oluşturulan model
- Şekil 3.3. Karışım ve yanma analizi için modellenen piston silindir düzeneği
- Şekil 3.4. Fluent programında çözücü parametrelerinin düzenlenmesi.
- Şekil 3.5. Ricardo Hydra motorunun ölçülerine göre 3D modellenen piston
- Şekil 3.6. 2D modellenen pistonun Fluent programında görüntüsü
- Şekil 3.7. Fluent yazılımında dinamik mesh parametre seçimleri
- Şekil 3.8. 2D Pistonun meshlenmiş görüntüsü
- Şekil 3.9. 2D Pistonun farklı KMA'larda görüntüsü
- Şekil 3.10. Dinamik ağ yapısının oluşumu
- Şekil 3.11. Dinamik ağ yapısı parametreleri
- Şekil 3.12. Analiz esnasında kullanılan materyallerin tanımlanması
- Şekil 4.1. Deneysel ve analiz yöntemle elde edilen silindir içinde sıkışma esnasında oluşan basınç değişiminin karşılaştırılması
- Şekil 4.2.  $C_8H_{18}$ 'in değişimi ( 346, 350, 354, 364, 365 KMA'da)
- Şekil.4.3.  $C_8H_{18}$ , OH, CO ve  $HO_2$  nin kütle oranlarının değişimi
- Şekil.4.4.  $CO_2$  kütle oranının KMA' ya göre değişimi
- Şekil 4.5.  $O_2$  kütle oranının KMA' ya göre değişimi
- Şekil 4.6.  $NO_x$ 'in kütle kesrinin KMA' ya göre değişimi
- Şekil 4.7. Silindir içi ortalama sıcaklığın KMA' ya göre değişimi
- Şekil 4.8. Cidar birikintisi olmayan durumda Statik Basıncın değişimi
- Şekil 4.9. Cidar birikintisi olmayan durumda silindir içi Statik Sıcaklık değişimi
- Şekil 4.10. Cidar birikintisi olmayan durum için oksijen kütle kesrinin değişimi
- Şekil 4.11. 2 mm Cidar birikintisi olan durum için Statik Basınç değişimi
- Şekil 4.12. 2 mm Cidar birikintisi olan durum için silindir içi Statik Sıcaklık değişimi
- Şekil 4.13. 2 mm Cidar birikintisi olan durum için oksijen kütle kesri değişimi
- Şekil 4.14. Farklı KMA'lar için  $C_7H_{16}$  mol kesirleri

## TABLolar LİSTESİ

- Tablo 3.1. Ricardo Hydra motor özellikleri  
Tablo 3.2. Silindir İçi Yanma Modeli Parametreleri  
Tablo 3.3. Kimyasal mekanizma ve orantı sabitleri (cm<sup>3</sup>-mol-sn-cal birimleri)  
Tablo 4.1. Deneysel ve analiz yöntemle elde edilen basınç verileri

## SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

- A** : Alan  
 **$\alpha$**  : Isı taşınım katsayısı  
**A<sub>f</sub>** : Alev cephesi alanı  
**B** : Çap  
**c** : Favre değişkeni  
**C<sub>p</sub>** : Sabit basınç altında belirli bir ısı  
**D<sub>t</sub>** : Türbülans yayılma gücü  
**E** : Aktivasyon enerjisi  
**E<sub>A</sub>** : Efektif aktivasyon enerjisi  
**ff** : Türbülanslı alev faktörü  
**m<sub>b</sub>** : Yanmış gazın toplam kütlesi  
 **$\dot{m}_b$**  : Kütle akışı  
**M<sub>j</sub>** : Molekül ağırlığı  
**N<sub>r</sub>** : Kimyasal reaksiyon sayısı  
**N<sub>s</sub>** : Kimyasal bileşen sayısı  
**Nu** : Nusselt sayısı  
 **$\theta$**  : Krank mili açısında yanmış kütle miktarı  
 **$\theta_0$**  : Yanmanın başladığı krank mili açısı  
 **$\Delta\theta_b$**  : Yanma Süresi  
 **$\Phi$**  : Yakıt/hava oranı  
 **$\mu$**  : Akışkan için moleküler vizkosite  
 **$\rho$**  : Yoğunluk  
 **$\rho_u$**  : Yanmamış gazın yoğunluğu  
**P** : Statik basınç

R	: Gaz sabiti
$\sigma$	: Stefan-Boltzman sabiti
$\sigma_h$	: Prandtl sayısı
$\sigma_{ij}$	: Viskoz gerilme tensörü
Sp	: Ortalama piston hızı
$\delta_{ij}$	: Kronecker delta fonksiyonu
$\tau$	: Tutuşma Gecikmesi
T	: Sıcaklık
U	: Hız
$U_1$	: Laminer alev cephesi hızı
$U_t$	: Türbülanslı alev cephesi hızı
V	: Hacim
$\omega_k$	: Reaksiyon hızı
$V_c$	: Ölü hacim
Y	: Kütle kesri
$\Gamma_D$	: Difüzyon katsayısı
AÖN	: Alt Ölü Nokta
HAD	: Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği
CN	: Setan sayısı
HP	: Beygir Gücü
KMA	: Krank Mili Açısı
ON	: Oktan Sayısı
RPM	: Dönme sayısı [devir/dakika]
SI	: Kıvılcım Ateşleme
ÜÖN	: Üst Ölü Nokta
HCCI	: Homojen dolgulu sıkıştırırmalı ateşleme

## **ÖZET**

Bu çalışmada dört zamanlı bir motorun bir silindirin içinde gerçekleşen karışım ve yanmanın analizi Fluent ve Chemkin programları kullanılarak yapılmıştır. Bir HCCI motor için elde edilen deneysel çalışma modellenerek yapılan analiz sonucunda elde edilen veriler deneysel veriler ile karşılaştırılmıştır. Yapılan karşılaştırma sonunda, modelleme sonuçlarının deneysel verilerle kabul edilebilir bir uyum gösterdiği görülmüştür. Analizin yeterliliği sunulduktan sonra deneysel olarak ölçülemeyen birtakım kimyasal reaksiyonlar ve yanma ürünlerindeki değişim, yapılan çalışmanın ikinci bölümünde incelenmiştir.

**ANAHTAR KELİMELER:** HCCI, depozit, kimyasal kinetik, modelleme

## **ABSTRACT**

In this work, analysis of mixing process and combustion in a cylinder of a four-stroke engine has been carried out by using Fluent and Chemkin softwares. An HCCI engine is modeled and results obtained from experiments are used to validate the model's accuracy. It is observed that results obtained from the model have a good agreement compared to the ones from experiments. Then, within the second part of the work, the model is used to simulate the behavior of some chemical reactions which could not be obtained from experimental measurements and to estimate combustion products.

**KEYWORDS:** HCCI, deposit, chemical kinetics, modeling

## BÖLÜM 1. GİRİŞ

Yanma odası cidar birikimleri oluşum seviyesi, yakıt ve yakıt katkıları, motorun büyüklüğü, dizaynı ve çalışma koşulları ve çalışma süresine bağlı olmakta ve yakıt ile motor yağı nedeniyle meydana gelmektedirler. Cidar birikimleri miktarı genelde silindir başına 1-3 gram arasındadır. Oluşan birikim, motor performansına ve emisyonlara farklı şekillerde etkiye bulunur. CCD oluşumu volumetrik verimi azaltır, ısı kayıplara neden olur ve yanmayı etkiler. Yüksek oktan sayılı yakıt gereksinimi artar, maksimum güç azalır. Yakıt ekonomisi sağlar ve karbondioksit emisyonlarını düşürür, ancak azot oksit ve hidrokarbon emisyonlarını da olumsuz etkiler. (EBERT, 1985)

Yanma odası cidar birikimleri, yakıt ve motor yağlama yağından kaynaklanmaktadır. (SHIPINSKY, 1993 ) Esas birikim oluşum mekanizması yakıt ve yağlama yağı radikallerinin oksidasyon ürünleriyle tepkimeye girmesi ve sıcak yüzeyler üzerinde yoğunlaşması ile meydana gelir. Ardından oluşan ürünler, sıcak yüzeyler üzerinde yoğunlaşır ve polimerleşme gerçekleşir. Cidar birikimleri yüzey tabakasındaki ısınan yağlar tarafından ve %2'den az oksijen içeren difüzyon alevi içinde yanan yakıtlar tarafından oluşturulur. Ancak yağ filmi, periyodik ateşlemeyi engellemeye başlarsa depozitler oksijen konsantrasyonundaki CCD ile benzer olur ve pridin çözünürlüğü elde edilir. Lauer ve Friel yüzeyde yoğunlaştırılan cidar birikimleri belirtisinin oksidatif ısı bozunmasını önerirler. Önerilen bu yöntem alevden duvara nüfuz eden radikaller nedeniyle oluşan reaksiyonlarla başlar. (LAUER, 1960)

Yanma odasından çıkarılan cidar birikimlerinin ısı kapasitesi 0.84-1.84 kJ/kgK arasındadır. Buradan karbon birikintisinin karbon içeriği ile ısı kapasitesi arasında pozitif bir ilişki olduğu görülmektedir. (NAKAMURA, 1993)

Cidar birikimlerinin, yanma odasının farklı kısımlarında önemli farkları bulunmaktadır. Örneğin, yüzey sıcaklığının yüksek olduğu egzoz supaplarındaki cidar birikimleri neredeyse tamamen inorganik bileşiklerdir. Son gaz bölgesindeki cidar birikimleri daha düşük oksijen ve daha yüksek karbon içerirler. Ayrıca farklı motorların cidar birikimlerinin H/C oranlarında önemli farklar bulunmaktadır. (ADAMS, 1993)

Cidar birikimleri büyüklüğüne ve miktarına etki eden birçok motor parametresi bulunmaktadır. En önemli motor parametrelerinden olan devir ve yükün artması durumunda depozit oluşumu azalır. (TAKEI, 1994) Toplam yakıt sarfiyatı ile ilse CCD ağırlığı arasında ters bir orantı bulunmaktadır.

Birikim miktarının artması durumunda ise, yüzey sıcaklıkları cidar birikimlerinin izolasyon etkisinden dolayı azalmaktadır. (HAYES, 1992) Bu cidar birikimleri kalınlığının değişmesinden anlaşılabilir. (DUMONT, 1951) Örneğin, Nakamura duvar yakını yüksek konsantrasyon karbonlu ve Ca, Zn gibi yüksek konsantrasyon inorganik madde içeren kurşunsuz benzinden keskin konsantrasyon gradyeni belirtmiştir. Bu Chapman'ın cidar birikimleri yüzeyinde kalsiyum sülfat ve çinko fosfat biçiminde gösterdiği gibidir. CCD boyunca ısı transferinin ölçümü ve modellenmesi cidar birikimleri artışıyla yüzey sıcaklığının azaldığını doğrulamaktadır. Ayrıca, motorun farklı seviyelerinde cidar birikimlerinin termogravimetrik analizi (TGA) Daly tarafından bu durumu yine doğrulamaktadır. Daly'nin sonuçlarının daha karışık cidar birikimleri oluşumu süreçlerine dayandığı söylenebilir. (DALY, 1994)

Yüzeydeki cidar birikimleri belirtisinin konsantrasyonu bu süreçte kritik bir adımdır ve depozit oluşumu yüzey sıcaklığına önemli miktarda bağlıdır (SHORE, 1958). Yüzey sıcaklıkları cidar birikimleri miktarını azaltmaktadır.

Tsukasaki, metanol ile çalışan otomobillerde CCD'nin ana olarak yağlama yağından meydana gelen kalsiyum içerdiğini belirtmiştir. (TSUKASAKI, 1990)



Yanma odası duvarlarındaki ısı transferine CCD'nin etkisi, birçok bağımsız çalışmayla deneysel olarak kanıtlanmıştır. (HAYES, 1992) Bir çevrimde ısının saklanması ve sonraki çevrimde taze doluyla birlikte ısının ortama bırakılması şeklinde, yalıtıcı gibi ve ayrıca ısı haznesi gibi davranırlar. Ayrıca belli bir hacim kaplarlar ve bu nedenle sıkıştırma oranını yükseltirler. Son olarak; yanmamış yakıtı, ön-kilit çeşidi ve ileri düzey kimyasal tepkimeleri, katalitik etkileri sayesinde yutarlar ve serbest bırakırlar.

Birçok modern motorda piston kenarları düzdür ve piston ile silindir kafa arasındaki mesafe oldukça küçüktür. Emisyonları düşük tutmak için bu değerin, piston üst ölü noktada iken 0.7 mm'den daha ufak bir değer olması istenir. (RUSS, 1993) Bu durum, yanma odası cidar birikimlerine elemine edilebilir ve piston tablası silindir kafası yüzeyine vurabilir. "Karbon vuruntusu" veya "Yanma odası depozit girişimi (CCDI)" olarak adlandırılan bu durumda 1 kHz'den 10 kHz'e kadar ses oluşur.

Bu problem silindir kafası ile piston arasındaki mesafenin, piston üst ölü noktada iken 1 mm'den az olduğu motorlarda görülmektedir. (RUSS, 1993) Moore, CCDI'da farklı cidar birikimleri kontrollerinde büyük farklılıklar olduğunu belirtmiştir. (MOORE, 1994) CCD oluşumuna daha az etkide bulunan yakıtlar ise, CCDI sorununu hafifletmektedir.

Benzinin aromatik içeriğinin artması ile, cidar birikimleri oluşumunun arttığını gösteren birçok yayınlanmış deneysel çalışmalar bulunmaktadır. (GIBBS, 1993) Gibbs CCD oluşum artışının  $C_7+C_8$  aromatikleri, olefinler,  $C_9$  ve daha yüksek aromatiklerle arttığını belirtmektedir. Fakat tüm bu çalışmalar, kompozisyon değişiminin etkilerini uçuculuk karakteristiğinin etkilerinden ayırtmamaktadır. CCD oluşumundaki değişikliklerin bir çoğu, yakıtın kaynama noktasının değişmesinden de olabilir.

Genellikle uzun çalışma sürelerinden sonra egzoz emisyonlarında %25'e varan artımlar söz konusudur. Bir kısım artışın sebebi emme subaplarındaki sorunlar, enjeksiyon, ateşleme sistemlerinden kaynaklanmaktadır. CCD'nin egzoz gazları üzerindeki etkisi yeni ve kullanılmış motorlarda silindir gömlekleri temizlendikten sonra NOx gazları CCD çıkarıldığında azalmıştır ve proses ilerledikçe cidar birikimleri oluşumuna bağlı olarak artmıştır. CCD ağırlıkları özel katkıları kullanılarak azaltılmış ve sonunda NOx gazlarının da azaldığı görülmüştür. Dört farklı model araç üzerinde yapılan testler %95 oranında güven sağlamıştır. Studzinski'nin sonuçlarına bağlı olarak NOx üzerindeki cidar birikimleri piston üzerindeki cidar birikimlerinden daha etkilidir. HC oranı CCD olmadan yapılan çalışmalarda düşüktür fakat Bower'in raporlarında değişiklik olmamıştır. (HOUSER, 1993) Gerçek yol testlerinde de ( yakıtın IVD içerdiği durumda) HC oranı düşüktür. 16000 km'lik gerçek sürüş testinde 15 araç kullanılmış ve kimine kurşunsuz benzin kimine ise 2 farklı tipte IVD katkısı koyulmuştur. Bu testlerde CCD'nin HC oranını düşürdüğü görülmüştür fakat kesinlik kazanmamıştır. Yanma odasında bulunan çatlaklardaki depozitler bu çatlakların hacimlerini düşürmekte ve sonucunda ve sonucunda HC oranı düşmektedir. Buna karşın CCD yakıtındaki HC'leri egzoz zamanı boyunca tutar ve ardından bırakır. Bu olay yakıtta bulunabilecek yağ ile ilgili olabilir.

Wen Zeng, Maozhao Xie ve Ming Jia, HCCI motorlarda ateşleme avansının artması ile HC ve CO emisyonlarının azaldığını, NOx emisyonlarının arttığını ve yanma veriminin yükseldiğini gözlemlemişlerdir. Ayrıca katalitik yanmanın geleneksel yanmaya göre emisyonlar ve cidar birikimlerine etkilerini gözlemlemişlerdir. (WEN, 2007) Katalitik yanma, yüzey reaksiyon kinetiği, gaz reaksiyon kinetiği, kütle, momentum ve enerji transferlerini içeren karmaşık fiziksel ve kimyasal bir proses olup cidar birikimlerinin oluşumuna etki göstermektedir. (WEN, 2007)

Yusmady Mohamed Arifin ve Masataka Aria, yüzey sıcaklıklarının cidar birikim miktarına ve yapısına etkisi olduğunu belirtmişlerdir. (YUSMADY, 2010) Cidar birikimleri, supaplar, piston yüzeyi ve yanma odasında oluşup ve yakıtın özelliği, yüzey malzemesi, basınç, yanma odası geometrisi gibi faktörlerin etkisi altında oluşmaktadır. Ancak en önemli

parametrelerden biri de yüzey sıcaklıklarıdır. En yüksek buharlaşma oranı noktası, MEP (maximum evaporation point), yakıt damlacığının en kısa sürede buharlaştığı noktadır. Bu nokta, yakıtın buharlaşarak sıcak yüzeye yapışma yeteneğini gösterir.

İki tip cidar birikim gelişimi vardır. Bunlardan birincisi, iki aşamalı gelişimdir. Bu yüzey sıcaklıklarının MEP sıcaklık değerinden düşük olduğu durumlarda gerçekleşir. Diğeri ise tek aşamalıdır ve bu da yüzey sıcaklıklarının MEP sıcaklık değerine yakın olduğu durumlarda gerçekleşmektedir. Y.M. Arifin ve M.Aria, birikim oluşumunun MEP sıcaklığına yakın yüzey sıcaklıklarında azaldığını gözlemlemişlerdir. (YUSMADY, 2010)

Y.M. Arifin ve M.Aria, biyodizel yakıtının kullanıldığı durumlarda cidar birikimlerinin oluşumlarını incelemiş, farklı biyodizel kullanımı durumlarında birikim oluşumlarını karşılaştırmıştır. Hindistan cevizi yağından yapılan biyodizel yakıtının, palmiye yağından yapılan biyodizel yakıtına göre birikim oluşumunun azaltılması bakımından daha avantajlı olduğu gözlemlenmiştir. Ancak Hindistan cevizi yağı biyodizelinin yapısı nedeniyle birikim sıcaklığı yüzey sıcaklığını geçebilmekte ve bu durum motorlarda vuruntu gibi problemlere yol açabilmektedir. (YUSMADY, 2010)

## BÖLÜM 2. YÖNTEM

### 2.1. Fiziksel Model

HCCI-motorlarda kendiliğinden tutuşma zamanı tahmini yanma parametrelerinin fonksiyonu olarak hesaplanabilir. Bu hesaplamaları yapabilmek için motor simülasyonları geliştirilmiştir.

Bu çalışmada basınç, sıcaklık ve türlerin konsantrasyonlarının detaylı kimyasal mekanizma ile hesaplanması için sıfır boyutlu bir model sunan “Chemkin-CFD” programı kullanılmıştır. Çok boyutlu simülasyonlar ise ANSYS FLUENT programı kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

### 2.2. Matematiksel Model İçin Temel Denklemler

Silindir içerisindeki akışın bağlı olduğu temel denklemler, reaksiyona girmeyen akışın, süreklilik denklemiyle birlikte sıcaklığın gaz yoğunluğu yerel değerleri, basınçla ilgili ana bir denklem ile enerji tasarrufu için kütle sinin korunması ve durgunluk entalpisi veya belirli iç enerji denklemi için momentum korunumu için Navier-Stokes denklemleri vardır. Akışkanların reaksiyonu durumunda ek denklemler kimyasal türleri ve reaksiyon oranı derişimleri için gereklidir.

Süreklilik denklemi

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (2.1)$$

Navier – Stokes Denklemi

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = - \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial x_j} \sigma_{ij} \quad (2.2)$$

Burada birimler sırasıyla,  $\rho, U, P, \sigma_{ij}$  yoğunluk, hız, statik basınç ve viskoz gerilme tensörü olarak tanımlanır.

$$\sigma_{ij} = \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial U_1}{\partial x_1} \delta_{ij} \quad (2.3)$$

Yukarıdaki denklem sıvılar için Newton tipi akışkan olup,  $\mu$  akışkan için moleküler vizkositeyi,  $\delta_{ij}$  ise "Kronecker delta fonksiyonu"nu tanımlamaktadır ve

$$\delta_{ij} = 1 \text{ ise } i = j, \delta_{ij} = 0 \text{ ise } i \neq j$$

şeklinde formüle edilmiştir.

Durma Entalpi denklemi

Durgunluk entalpisi iç, kinetik ve potansiyel enerjilerin toplamı ile tanımlanır;

$$h_s = e + \left( \frac{U_i U_i}{2} + \frac{P}{\rho} \right) \quad (2.4)$$

Mutlak sıcaklık T ise;

$$h_s = c_p T + \left( \frac{U_i U_i}{2} \right) \quad (2.5)$$

$c_p$  sabit basınç altında belirli bir ısı olarak kabul edilir ve denklem düzenlenirse

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho h_s) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho U_j h_s) &= \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial h_s}{\partial x_j} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( 1 - \frac{1}{\sigma_h} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{U_i U_i}{2} \right) \right] & \\ + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu U_i \frac{\partial U_j}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu U_j \frac{\partial U_1}{\partial x_1} \right) & \end{aligned} \quad (2.6)$$

ifadesi elde edilir. Burada  $\sigma_h$  Prandtl sayısını ifade etmektedir. Denklemin sağ tarafındaki son üç terim ısı içindeki mekanik enerjinin viskoz dönüşümü temsil ederek ihmal edilebilir küçük mevcut koşullar sağlamaktadır. Bu analiz için gerekli mükemmel gaz denklemi

$$P = \rho RT \quad (2.7)$$

olup bu denklemde R gaz sabitini ifade etmektedir.

Tüm transport denklemleri yukarıda verilen skaler büyüklükler bu tür konsantrasyonlar ve diğer süreçler için aşağıdaki genel denklem formu kullanılmıştır:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi \quad (2.8)$$

Burada  $S_\phi$  için,  $\phi$  skaler bir büyüklüğü,  $\Gamma_\phi$  difüzyon katsayısını belirtmektedir.

### 2.2.1 Silindir içi yanmanın denklemleri

Yanmış gaz bölgesinde gazları b indisi, yanmamış gaz için matematiksel model u ile gösterilmektedir. Yanmış gazın toplam kütlesi  $m_b$ , Wiebe fonksiyonu ile krank açısına bağlı olarak hesaplanmıştır:

$$m_b = m_{\text{toplam}} \left( 1 - \exp \left[ -b \left( \frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta} \right)^{n+1} \right] \right) \quad (2.9)$$

Burada, b ve n motor özelliklerine göre belirlenebilen parametreler,  $\theta$  krank açısı,  $\theta_0$  yanma başlangıcını ve  $\Delta\theta$  yanma için geçen toplam süreyi temsil etmektedir.

Zamana bağlı silindir hacmi,  $V_t$ , krank açısının fonksiyonu olarak hesaplanmıştır:

$$V_t = V_c + \frac{\pi B^2}{4} (l + a - a \cos \theta - (l^2 - a^2 \sin^2 \theta)^{1/2}) \quad (2.10)$$

Boş hacmi  $V_c$ , çap deliği  $B$ , biyel kolu uzunluğu  $l$  ve krank mili yarıçapı olan  $a$  motor geometrisi tarafından belirlenir.

Kütle denge denklemleri, yanmış gaz bölümü için aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\rho_b \frac{dY_{j,b}}{dt} = M_{j,b} \sum_{k=1}^{N_r} v_{j,k} \omega_k + \rho_b \frac{\dot{m}_b}{m_b} (Y_{j,f} - Y_{j,b}) \quad (2.11)$$

Burada  $Y_{j,b}$  j indisleri için kütle oranı, t zaman,  $M_j$  molekül ağırlığı,  $v_{j,k}$  reaksiyondaki stokiyometrik katsayı değerleri,  $\omega_k$  reaksiyon hızı, m kütle,  $\dot{m}_b$  kütle akışı,  $N_r$  sistemdeki kimyasal reaksiyon sayısıdır.

Denklemler kümesini mükemmel bir gaz olarak ön alev adyabatik olarak, yanmış gazlar ile reaktör karıştırılır ve temel denklemler gibi görünür. Yukarıdaki denklemde Sağ tarafta ilk olarak yanmış gaz, kimyasal kaynak olarak anlatılıp NO oluşumu tahmini modeli dâhil edilebilir. Denkleminin sağ tarafı son durum yanmış gaz için alev ön girişine bağlıdır. Alevinde ön kısmında ve yanmış gazın ortalama türlerin kütle oranı ile hemen arkasında türlerin kütle kesir farkı oluşturmaktadır. Adyabatik koşullarda alev önünde varsayılır. Alevin hemen arkasında sıcaklık ve türlerin konsantrasyonlarının Gibbs serbest enerji kuralına minimize edilerek hesaplanmıştır. Yanmış gazın ısı denge denklemi:

$$\rho_b c_{pb} \frac{dT_b}{dt} = \frac{dP}{dt} - \sum_{j=1}^{N_g} h_{j,b} M_{j,b} \sum_{k=1}^{N_r} v_{j,k} \omega_k + \rho_b \frac{\dot{m}_b}{m_b} \sum_{j=1}^{N_g} Y_{j,f} (h_{j,f} - h_{j,b}) - \sigma \epsilon T_b^4 \quad (2.12)$$

Burada, T sıcaklık, Ns bileşen sayısı,  $c_p$  sabit basınçta ısı kapasitesi, h entalpi,  $\sigma$  Stefan-Boltzman sabiti ( $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ ) ve  $\epsilon$  ise CO<sub>2</sub> ve H<sub>2</sub>O için ortalama salım gücü değeridir. Denklem sağı tarafındaki terimler bir grup içinde görülür. Yanmamış gazların korunumu ise:

$$\rho_u \frac{dY_{j,u}}{dt} = M_{j,u} \sum_{k=1}^{N_r} v_{j,k} \omega_k \quad (2.13)$$

olup burada u yanmamış gazları gösterir.

Yanmamış gazın ısıl denge denklemi:

$$\rho_u c_{p,u} \frac{dT_u}{dt} = \frac{dp}{dt} - \sum_{j=1}^{N_s} h_j M_{j,u} \sum_{k=1}^{N_r} v_{j,k} \omega_k + \alpha \frac{A_w}{V_u} (T_w - T_u) \quad (2.14)$$

Burada A alan, V hacim,  $\alpha$  ısı taşınım katsayısıdır. w ise silindir duvarını göstermektedir. Yanmamış gazlar için denklem (2.13) ve (2.14) duvarlar ve alev ön ısıyı elde etmek için ısı kaybı ile akış reaktör hesaplanması için denklemler yakın bir benzerlik göstermektedir. Sıcaklık yanmış gaza göre daha düşük olduğundan yanmamış gazların ışıyım ısı kayıplarının enerji dengesi, göz ardı edilmektedir. Duvarda, sonunda gaz soğutma hesabı Woschni denklemi kullanılarak alınır.

Silindir basıncı, yanmış ve yanmamış bölgeler arasında ortalama ağırlıklı basınç denklemi kullanılarak hesaplanır.

$$P = \frac{m_b R_b \bar{T}_b + m_u R_u T_u}{V_t} \quad (2.15)$$

Burada R gaz sabiti,  $\bar{T}_b$  yanmış gaz olarak aşağıdaki denkleme göre hesaplanan ortalama sıcaklıktır.

$$\bar{T}_b = \frac{1}{x_b} \int_0^{x_b} T_b dx_b \quad (2.16)$$

Görüldüğü gibi hiçbir kütle yanmamış gaz bölgesini girmemiş ve giriş kütle akışı sıfırdır. Böylece

$$\dot{m}_u = -\dot{m}_b \quad (2.17)$$

denklemi kütle korunumu yasasından yazılabilir.

Yanmış gaz hacmi hesaplanırsa:

$$V_b = \frac{m_b R_b \bar{T}_b}{P} \quad (2.18)$$

olarak bulunur.

### 2.3. Kimyasal Kinetik Model

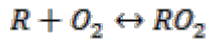
Motorlarda kendiliğinden tutuşmanın modellenenebilmesi için kimyasal kinetik hakkında detaylı bilginin elde bulunması gereklidir. Son yıllarda kimyasal kinetik model içten yanmalı motorlarda yanma analizi için çok önemli bir olgu haline gelmiştir.

Genel olarak reaksiyon mekanizması giren yakıt ve oksitleyicilerin son ürüne kadar olan ve yanma olayından sonra oluşan tüm kimyasal ürünleri içeren dönüşümün temel adımlarını içerir. Bu durum kimyasal bileşiklerin konsantrasyonlarının kombinasyonlarını ve reaksiyon ısısına bağlı enerji denklemlerini elde etmemizi sağlamaktadır.

Yanma ortamında temel yakıtlar hidrokarbonlardır. Yanan hidrokarbonların kimyasal kinetik modelleri çok karışıktır. Yüzlerce alt reaksiyon içeren ve birçok kimyasal bileşiğin temel kimyasal mekanizma bilgisi ile bu şemalar sürekli gelişmektedir. Hidrokarbon yanması zincirleme reaksiyonlar tarafından kontrol edilir. Altta görülen reaksiyon yüksek sıcaklıkta öncelikli zincir reaksiyonlarını sağlamaktadır.



Farklı şekilde bozulma zincir reaksiyonunun düşük sıcaklıktaki hidrokarbon yanmasını şematik olarak aşağıda görebiliriz.



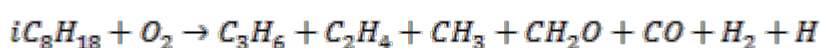
Bu denklemde R bir alkali radikaldir. Ürün olan  $RO_2$  radikali ise H atomunu doğrudan üretebilmektedir.

Hidrokarbon yakıtların oksidasyonundaki yanma işlemi, yakıt ve oksitleyicinin su ve karbondioksit dönüşümünden ibarettir. Öncelikle yakıt küçük moleküllere parçalanır. Daha sonra ise orta ölçekli ürünler sırayla tükenerek son ürünleri oluşturur. Hidrokarbon yakıtların bu önemli yanmanın alt mekanizması hakkında ayrıntılı bilgiye Westbrook ve Dryer'ın derlemesinden ulaşılabilir. (Westbrook, 1984) Bu mekanizmalar daha sonra Westbrook ve ekibi tarafından <https://www.llnl.gov/str/Westbrook.html> adresinde güncellenmiştir.

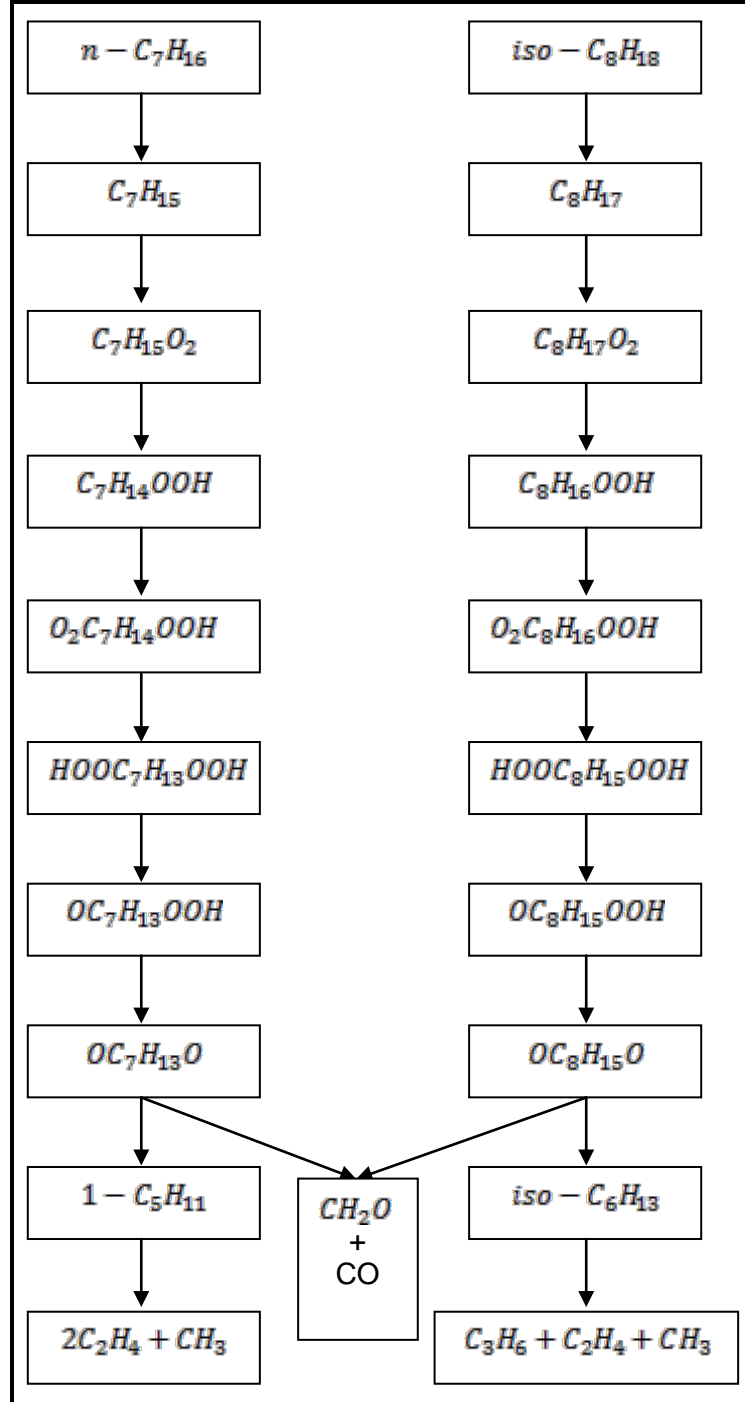
Hidrokarbon yanma prosesindeki kimyasal reaksiyonlar sıcaklık ve basınca bağlı olarak değişiklik gösterebilirler. Yaklaşık olarak 1000 K sıcaklığının altında gerçekleşen reaksiyonlar “düşük sıcaklık mekanizması” ve 1000 K'nin üstünde gerçekleşen reaksiyonlar da “yüksek sıcaklık mekanizması” ile tanımlanmaktadır.

n-heptan için ayrıntılı mekanizma Chevalier ( $C_1$ - $C_4$  kinetiği) ve Müller ( $C_3$ - $C_8$  kinetiği)'den elde edilmiştir (75 durum ve 510 reaksiyon). Yakıtın oktan sayısı araştırmada akış reaktör oranı olarak tanımlanır ve kod azaltma sürecinde bir girdi parametresi olarak kullanılır. Şekil 2.1'de n-heptan ve izo-oktan için düşük sıcaklık oksidasyon kimyası şemasını gösterilmektedir. (CHEVALIER, 1993, MÜLLER, 1993)

izo-oktan ve n-heptan'ın düşük sıcaklık oksidasyonu için global reaksiyonu



şeklinde modellenmiştir. Oksidasyon mekanizmalarında n-heptan için  $C_2H_4$  üretimi varken izo-oktan için  $C_3H_6$  üretimi de mevcuttur. izo-oktan ve n-heptan için vuruntu karakteristiği çeşitli deneysel çalışmalar sayesinde çok iyi bilinmektedir. izo-oktan'ın kendi- tutuşmasına dair yaygın olarak bilinen deneysel bulgular Fieweger ve diğerleri tarafından elde edilmiştir.



Şekil 2.1. n-heptan ve izo-oktan'ın düşük sıcaklıkta kimyasal oksidasyonunun şematik diyagramı

## 2.4. Türbülans Model

Reynolds sayısı, bir akışkanın, atalet kuvvetlerinin ( $vsp$ ) viskoz kuvvetlere ( $\mu/d$ ) olan oranıdır. Akışkan hızı artarsa akış karakteristiğinde değişimler meydana gelir. Bu durumda yoğunluğa bağlı olarak akışkanın ataleti viskoz kuvvetlerden daha önemli olur ve türbülanslı akış rejimine geçilir.

Bir türbülanslı akış doğal olarak sıvı parçacıkların tümünün değişmesinde rol oynar. Ortalama hızlar ve basınç alanı, sadece bir veya iki boyutta, türbülanslı dalgalanmalar ise her zaman bir üç boyutlu bir karaktere sahip farklı akımlara sahiptir. Türbülanslı akış yapısı girdap olarak tanımlanan bir dizi dönme akışı içerir. Başlangıçta uzun bir mesafe ile ayrılmış sıvı parçacıkları türbülanslı akış içinde birbirine yakın hareket ettiği görülür. Bunun sonucu, ısı ve kütle geçişi etkili olarak içerisinde bulunmaktadır. Ortalama akım enerjisi çıkarmada girdap uzaması denilen yöntem kullanılmaktadır.

Karakteristik hız göstergesi  $v(m/s)$ , uzunluk göstergesi  $l(m/s)$  büyük girdap hızı olarak  $U$  ve uzunluğu olarak da  $L$  ye göre aynıdır. Bu büyük girdaplara atalet etkileri ve viskoz etkileri hâkim olan etkiler yok denilecek kadar azdır. Büyük girdapların etkisi viskoz olmayan ve açısız momentum girdap uzaması sırasında muhafaza edilmektedir. Dönme hızının ve azaltılması ile kesit yarıçapında artışa neden olur. Böylece süreç daha küçük transfer uzunluk ölçeklerinde hareketleri yaratır ve daha küçük zaman ölçeklerinde de yenilenmiş olur. Uzama çalışması büyük girdaplar üzerinde ortalama akış tarafından sürdürülüp yapılan türbülansla enerji sağlar. Küçük girdaplar ise kendilerini; güçlü büyük girdaplar ve daha zayıf ortalama akım tarafından uzatılarak bulunmaktadır. Bu durumda, kinetik enerji büyük küçük girdaplar tarafından taşınırlar. Büyük girdapların yapısı izotropik değildir. Akışın bağımlı güçlü etkileşimi nedeniyle ortalama akım vardır. Viskozite küçük ölçeklerde yönünü dışarı yayma eğilimindedir. Türbülanslı akış yüksek Reynolds sayılarında ortalama küçük girdaplar nedeniyle izotropik olarak mevcuttur.



### 2.4.1 Türbülans modeli denklemleri

Türbülans modeli bir hesaplama yöntemi olarak ortalama akış denklemleri (süreklilik ve diğer denklemler sistemleri için) ile türbülanslı çalkantı değerlerinin hesaplanmasında kullanılmaktadır.

Klasik modellerde karışım uzunluğu modeli ve k-ε modeli halen çok yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu varsayımı iki viskoz durumu; uzamalar ve Reynolds ortalama akış arasında bir benzeşime dayanarak incelenmektedir. Her iki momentum denklemi Newton kanununa göre uzamalar; sıvı elemanların deformasyon hızı ile orantılı olarak alınır. Bu denklem yazılacak olursa;

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.1)$$

Denklemden görüldüğü gibi türbülans bozunmaları kayma olmadıkça izotermal akımlar sıkıştırılmaz. Ayrıca, karışımdaki ortalama oran olarak deformasyon artar. Bu durumda ise:

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u_i^* u_j^*} = \mu_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.2)$$

Türbülans transport ısısı, kütle ve diğer skaler özellikleri ile benzer modellenmiştir. Yukarıdaki denklemden türbülanslı momentum transport hızının ortalama gradyanı ile doğru orantılı olduğu görülebilmektedir. Skaler büyüklük olan türbülans transportu ile taşınan miktar ortalama değerinin gradyanı alınır. Bu durumda herhangi bir skaler büyüklük olarak değerlendirildiğinde;

$$-\overline{\rho u_i^* \theta_j^*} = \Gamma_t \left( \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right) \quad (4.3)$$

Türbülans modeli olarak iki denklem türbülans modeli olarak da bilinen k-ε türbülans modeli seçilmiştir. Türbülans kinetik enerjisi (k) için taşınım denklemi

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_z k)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho u_r k)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial r} \right) - S_k \quad (4.4)$$

Türbülans kinetik enerjisi yutulma miktarı (ε) için taşınım denklemi

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_z \varepsilon)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho u_r \varepsilon)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial k}{\partial r} \right) - S_\varepsilon \quad (4.5)$$

#### 2.4.2 Türbülansın yanma üzerindeki etkileri

Motorda yanma türbülanslı bir ortamda gerçekleşir. Türbülansın etkisi alevi deforme ederek uzatmak (türbülansın derecesine bağlı olarak) ve böylece yüzey alanının büyütme şeklinindedir ve sonuçta etkin alev hızını artırmaktadır.

Bujide kıvılcım çaktıktan sonra gerçekleşen tutuşma gecikmesinin ardından alev gelişimi başlar ve hemen hemen küresel ve dış yüzeyi düz olarak ortaya çıkar.

Buji yakınındaki akışkan hareketinin ateşleme ve fakir tutuşma/yanma limiti üzerinde önemli etkisi vardır. Şayet hızın şiddeti çok büyükse tutuşma mümkün olmaz. Yüksek akış hızlarında alev elektrotlardan uzağa sürüklenerek temas alanı azalır ve böylece elektrotlara olan ısı kaybı düşer.

Alev gelişimi, karışımın durumu ve bileşeninin yanı sıra daha öncelikli olarak buji yakınındaki akışkan hareketinden etkilenir.

Alev yapısı yanma odası boyunca alev ilerledikçe gelişmesine devam eder. “Hızlı yanma açısı” olarak adlandırılan ve karışımın büyük bir bölümünün yandığı periyot yanma odası içerisindeki şartlardan önemli ölçüde etkilenir. Bu açı alev gelişiminin sona erdiği (genellikle yanmış kütle oranının %10 olduğu bölüm) ve yanmanın sona erdiği (genellikle yanmış kütle oranının %90 olduğu bölüm) periyotlar arasında kalan bölüm olarak tarif edilir.

Motor deneyleri artan girdap ve/veya azalan yanma periyodu arasında pozitif bir bağıntı olduğunu göstermiştir.

## BÖLÜM 3. SİLİNDİR İÇİ KARIŞIM VE YANMA MODELLERİ

### 3.1. Deneysel Model

Analitik çalışmada temel alınan model ile elde edilen veriler bir HCCI motorun yanma performansını araştırmak için kullanılan deney düzeneğinden sağlanan veriler ile karşılaştırılarak geçerliliği araştırılmıştır.

Deney düzeneğinde tek silindirli Ricardo Hydra araştırma motoru 4 supaplı Typon yanma odası silindir kafası ile birlikte kullanılmıştır. Piston, silindir içinde HCCI motorun ihtiyaç duyduğu 14,04 gibi yüksek sıkıştırma oranına ulaşmak için silindir kafasına kadar yükselmiştir. Motor özellikleri ve supap zamanlamaları Tablo 3.1 de görülmektedir.

Tablo 3.1. Ricardo Hydra motor özellikleri

Parametre	Değer	Birim
Silindir Çapı, Piston Stroku	86	mm
Biyel Kolu Uzunluğu	143,5	mm
Sıkıştırma Oranı	14,04	-
Emme Supabı Çapı	32	mm
Supap Sayısı	4	-
Emme Supabı Açılma açısı	340	oKMA
Emme Supabı Kapanma açısı	612	oKMA
Egzoz Supabı Açılma açısı	120	oKMA
Egzoz Supabı Kapanma açısı	332	oKMA

Deneysel çalışmada yakıt piston ÜÖN'da iken, emiş ağzına ve kapalı olan emme supabının arkasına enjekte edilmiştir. Bu zamanlama yakıtın tamamen buharlaşmasını ve hava ile tamamen karışıp yanmasını sağlamak için düzenlenmiştir. Emme kanalına elektrikli kompresörle basınç uygulanarak giriş havasını ısıtabilecek bir düzenek geliştirilmiştir. Giriş havasının sıcaklığı manifoldun üst yüzüne yerleştirilmiş termo-eleman ile ölçülmüştür. Yapılan testler tek bir yakıt (kurşunsuz benzin) kullanılarak tamamlanmıştır. Deneysel çalışmanın başlangıç sınır koşulları ise 523 K, 1 bar ve 1200 devir/dakika olarak düzenlenmiştir. Yağlayıcı ve soğutucu akışkan sıcaklıkları ise 90 °C sabit sıcaklığa göre düzenlenmiştir.

### 3.2. Nümerik Model

Fluent'te daha önceden yapılmış karışım ve yanma modeli vardır. Bu modeller genellikle ön karışımli silindirde kıvılcım ateşlemeli ve ön karışımli vuruntulu ve direkt enjeksiyonlu silindirler için kendiliğinden tutuşma olarak tanımlanmışlardır. Kıvılcım ateşlemeli model Lipatnikov'un çalışmasını temel alır ve Fluent'te önkarişimli ve kısmen ön karışımli yanma için ileri değişken Zimont modeli temelinde uygulanır. Vuruntu ve yanma gecikmesi modelleri Fluent' te benzer ileri değişkenli formüllere dayalıdır.

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j c) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D_t \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + \rho S_c \quad (4.1)$$

Buradaki  $S_c$  ise;

$$S_c = \begin{cases} 0, & t < t_0 \\ \int_{t=t_0}^{t=t} \frac{dt}{\tau}, & t \geq t_0 \end{cases} \quad (4.2)$$

şeklinde tanımlanır.

Formülde  $D_t$  türbülans difüzyon katsayısı,  $\rho$  yoğunluk ve  $c$  ise Favre değişkenidir. İndüksiyon zamanı (tutuşma gecikmesi)  $\tau$  birçok kaynaktan elde edilen deneysel bağıntıdır. Bunlardan ikisi aşağıda verilmiştir.

Vuruntulu yanmada tutuşma gecikmesinin hesaplanması için Douaud ve Eyzat tarafından geliştirilen aşağıdaki bağıntı kullanılmıştır:

$$\tau = 0.01768 \left( \frac{ON}{100} \right)^{3.402} p^{-1.7} \exp \left( \frac{3800}{T} \right), \quad (4.3)$$

Bu bağıntıda ON oktan sayısını,  $p$  bölgesel basınç ve  $T$  ise hücredeki yerel sıcaklık değerini göstermektedir. Bu bağıntı tutuşma gecikmesini saniye cinsinden vermektedir bunun yanında diğer araştırmacılar tarafından kullanılabilen genel bir bağıntı formudur. Dizel motorlarda tutuşma gecikmesi bağıntısı Hardenburg ve Hase tarafından aşağıdaki eşitlik ile verilmektedir:

$$\tau = (0.36 + 0.22S_p) \exp \left( E \left( \frac{1}{RT} - \frac{1}{17,190} \right) + \left( \frac{21.2}{p - 12.4} \right)^{0.63} \right), \quad (4.4)$$

Bu bağıntıda  $S_p$  ortalama piston hızı,  $E$  aktivasyon enerjisi,  $R$  universal gaz sabiti,  $p$  ve  $T$  ise yerel hücrelerin sırayla basınç ve sıcaklık değerleridir. Aktivasyon enerjisi ise:

$$E = \frac{E_A}{25 + CN} = \frac{618,840}{25 + CN} \quad (4.5)$$

Burada  $CN$  setan sayısı ve  $E_A$  ise efektif aktivasyon enerjisidir. Denklem (4.3) krank açısı derecesine göre tutuşma gecikmesini simgelemektedir. Fakat bu değer hesaplama sırasında saniyeye çevrilmiştir. Genel bağıntı ise:

$$\tau = A T^a P^b ON^c n^d \Phi^e \exp \left( \frac{E_A}{RT} \right), \quad (4.6)$$

olarak Fluent programında kullanılmaktadır.

Vuruntu ve yanma gecikmesi modellerinin her ikisi için hücre içi yakıt değeri kullanıcı tanımlı kesme değerinin altındaysa yanma prosesi için kaynak terimi değişkeni güncellenmeyecektir. Diğer bir deyişle yanma için gerekli bileşenlerin yanmanın oluşabilmesi için gerekli değere ulaşmaları gerekmektedir. Yakıtın yanabilmesi için yüksek basınç ve sıcaklık değeri gereklidir. Vuruntu ve yanma gecikmesi modelleri ileri deęişken için bir formu paylaşırlar, vuruntu modelinin amacı vuruntu şartları karşılandığında enerjiyi arttırmaktır. Fluent'teki Zimmont modelinde vuruntu olayı ileri deęişkeninin yanma bölgesine hareketlenmesine yol açmaktadır. Vuruntunun oluşmasından dolayı enerji artarsa bölgesel deęerler hesaplanır bunun yanında ön karışımly yanma modeli vuruntu anında tamamen aktif durumdadır. Hardenburg yanma gecikmesi modeli ile beraber kombine edilmiş EDC modelinin birlikte kullanıldığı yanma modeli sonuçları ilerleyen bölümlerde verilecektir.

Birçok yakıt hızlı yanıcıdır ve genellikle reaksiyon oranları türbülans karışımı tarafından kontrol edilir. Ön karışımly olmayan alevlerde türbülans yakıt ve oksitleyiciyi hızlı bir şekilde yandıkları reaksiyon ortamında yavaşça karıştırır. Ön karışımly alevlerde türbülans soęuk reaktanlar ile sıcak ürünleri yavaşça reaksiyon ortamında karıştırır. Bu gibi durumlarda yanmanın sınırlı, karmaşık ve genelde bilinmeyen bir karışım olduęu düşünülür. Fluent programı Magnussen ve Hjertager'in çalışmalarına dayanan türbülans-kimya etkileşimi için EDC modelini içinde barındırır. Bu modele göre; reaksiyon "r" sonucu oluşan ürünlerin net oranı "i" için  $R_{i,r}$  aşağıdaki iki denklem ile ifade edilir.

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\epsilon}{k} \min \left( \frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad (3.7)$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\epsilon}{k} \min \left( \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j v'_{j,r} M_{w,j}} \right) \quad (3.8)$$

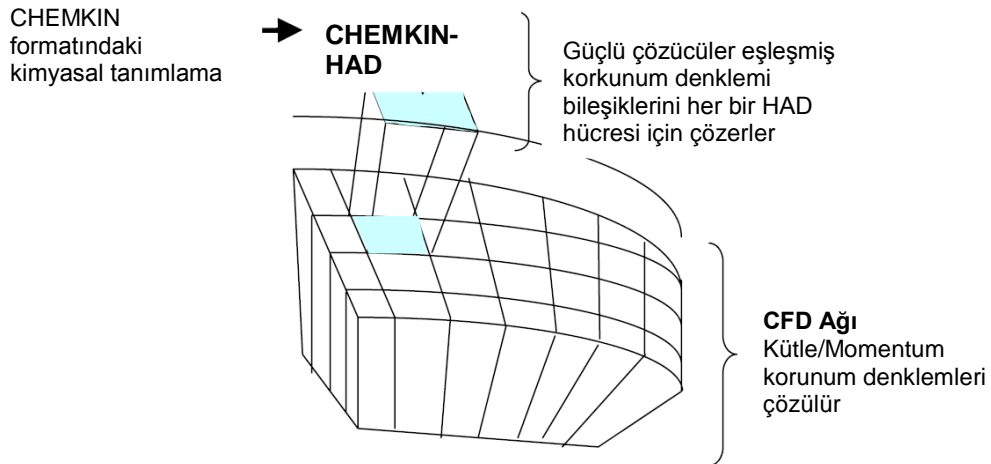
Bu denklemlerde  $Y_P$  herhangi bir ürünün "P" kütle oranı,  $Y_R$  partiküler reaktantın kütle oranı, A değeri 4.0 olan ampirik sabit, B ise değeri 0.5 olan ampirik sabittir.

### 3.3 CHEMKIN Kimyasal Kinetik Simülatörü

CHEMKIN yazılımı motor analizleri için tanımlanan yazılımlar arasında kimyasal kinetik çözümler için geliştirilmiştir. CHEMKIN yazılımı içinde kimyasal reaksiyon adımlarını barındıran detayly bir veri dosyası mevcuttur. Bu veri dosyası ile detayly veya indirgenmiş reaksiyon denklemleri modellenenbilmektedir. Fakat FLEUNT ve STAR-CD gibi hesaplamalı

akışkanlar dinamiği (HAD, CFD) problemlerini çözen paket programlar en fazla 50 adımdan oluşan indirgenmiş reaksiyonun mekanizmalarını çözmeye izin vermektedirler. HAD programlarınca dışarıdan çağrılan CHEMKIN formatındaki indirgenmiş reaksiyonun mekanizmaları programların içlerinde bulunan çözücüler sayesinde analize işlenirler. Bu sayede kimyasal reaksiyon esnasında oluşan tüm kimyasal olaylar çözücünün izin verdiği ölçüde ortaya çıkarlar.

Kimyasal modül olan Chemkin-HAD doğrudan HAD'ın problemine yönelerek etkili ve hızlı bir şekilde kimyasal ve akış problemlerini harmanlayarak çözüme ulaşmayı sağlar. Chemkin-HAD yazılımı üçüncü parti HAD kodu ile detaylı kimyayı kombine etmektedir. Bu kod sayesinde katı gaz fazı ve gaz-yüzey kimyasını da çözmek mümkündür. Zamana bağlı ve anlık problemlerin korunum denklemlerini de çözebilmektedir. Girdi olarak kod kimyasal kinetik mekanizması ve termodinamik datasına CHEMKIN formatında ihtiyaç duyulmaktadır. Her HAD zamana aralığında veya her bir anlık iterasyon ve her bir HAD hücresi için sıcaklık ve kimyasal bileşen profili için çözüm yapabilmektedir. HAD kodu kullanımına bağlı olarak kimyasal bileşiklerin ürün miktarı veya sıcaklığı gibi diğer veriler hesaplanabilir. Yazılım ayrıca yayılma gücü, ısı iletimi ve viskozite gibi çoklu bileşen moleküler transport özelliklerini akış simülasyonunda HAD kullanarak çözüme kabiliyetine sahiptir. Şekil 3.1'de Chemkin-HAD kodunun nasıl çalıştığı görülmektedir.



Şekil.3.1. Chemkin-HAD kodunun çalışma şeması.

### 3.4. Model Parametreleri

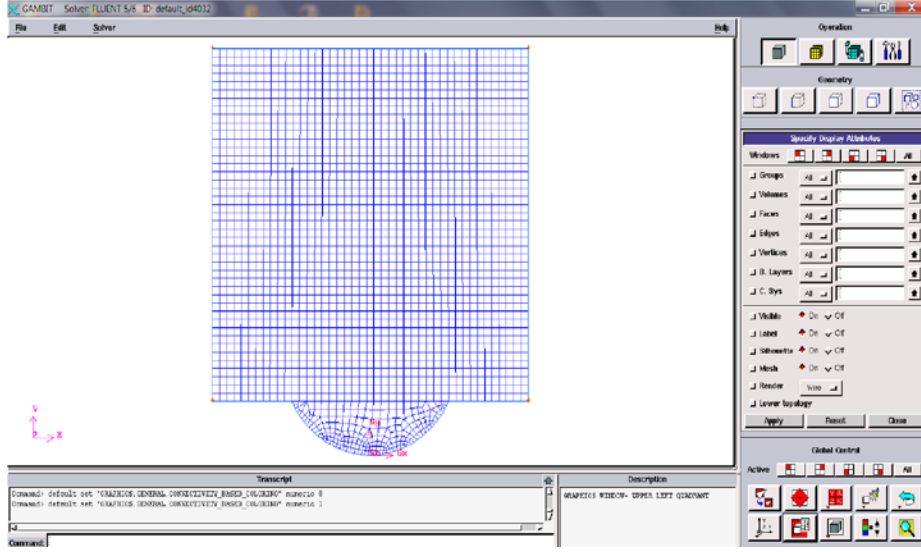
Sayısal olarak hesaplamalı akışkanlar dinamiği yöntemi ile analizi yapılacak olan piston silindir modeli için gerekli olan birçok parametre vardır. Bu çalışmada kullanılan tüm parametreler deneysel çalışmada kullanılan parametrelerdir. Analiz esnasında kullanılacak model parametreleri Tablo 3.2’de görülmektedir. Tüm bu değerler programın silindir için karışım ve yanma modellerine özgü olan özel bir menü aracılığıyla programa girilmiştir.

#### 3.4.1 Modelin Gambit ve Fluent 12.1’de oluşturulması

Silindir içi karışım ve yanma prosesini modellemek için önce Gambit programında yeni bir piston silindir düzeneği çizilip ağ yapısı oluşturması gerekmektedir. Bu çalışmada 4 zamanlı bir dizel motorunun piston silindir düzeneği modellenmiştir. Modelin verilerini Fluent’de tanımlamadan önce 2 boyutlu model Gambit programında çizim yapılarak ağ yapısı (mesh işlemi) oluşturuldu. Şekil.3.2’de görüldüğü üzere dinamik mesh başlamadan piston alt ölü noktada iken modelin ağ yapısında toplam 4656 element ve 3986 düğüm noktası bulunmaktadır. Gambit programında modelin sınır koşullarının girileceği bölgelerin adlandırılması yapıldı ve tüm bölgelerin fiziksel özellikleri (katı-sıvı-gaz) belirlendi. Son olarak mesh optimizasyonu yapılarak hesaplanan sonuçların mesh yapısı ve sayısından bağımsız olması sağlandı.

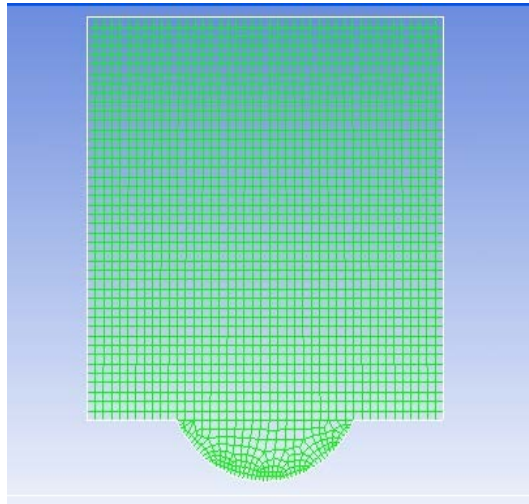
**Tablo 3.2. Silindir İçi Yanma Modeli Parametreleri**

Krank Dönme Sayısı (d/d)	1200
Krank Periyodu (KMA)	360
Başlangıç Krank Mili Açısı	180
Piston Stroku (mm)	86
Krank Açısı Adım Uzunluğu (derece)	1
Biyel kolu uzunluğu (mm)	149.5
Silindir çapı (mm)	86
Sıkıştırma Oranı	14.04
$\lambda$	3.5



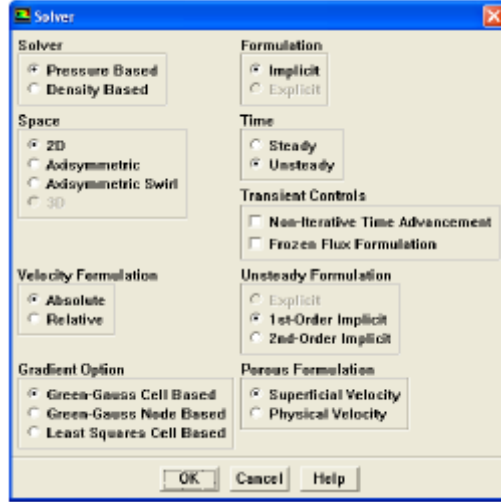
Şekil.3.2.Gambit programında çizilip ağ yapısı oluşturulan model.

Modelin Fluent'e aktarılmasından sonra önce zamana bağlı (transient) ve 2 boyutlu analiz yapılacağı ara yüzde tanımlandı ve Fluent çözücüsü (solver) basınç temelli olarak ayarlandı. Fluent programına aktarılan model Şekil.3.3'de ve çözümün hangi modele göre yapılacağını seçildiği menü Şekil 3.4'de görülmektedir.



Şekil.3.3 Karışım ve yanma analizi için modellenen piston silindir düzeneği.





Şekil.3.4. Fluent programında çözücü parametrelerinin düzenlenmesi.

Önceki bölümlerde matematiksel modeli verilmiş olan k-epsilon türbülans modeli modelin türbülans çözücüsü olarak Fluent'te tanımlandıktan sonra k-epsilon türbülans modeli standart olarak ayarlandı. Viskozite modelin tanımlandığı pencerede diğer parametreler programın varsayılanı olarak bırakıldı. Programın sıcaklık değerlerini ölçmesini sağlamak için model parametreleri sekmesinden enerji çözümü açıldı.



Şekil 3.5. Ricardo Hydra motorunun ölçülerine göre 3D modellenen piston

Deney sonuçları ile analiz sonuçları karşılaştırılacak olan Ricardo Hydra motorun değerleri yukarıda görüldüğü şekildedir. Piston öncelikle bu değerlere göre modellenmiştir.

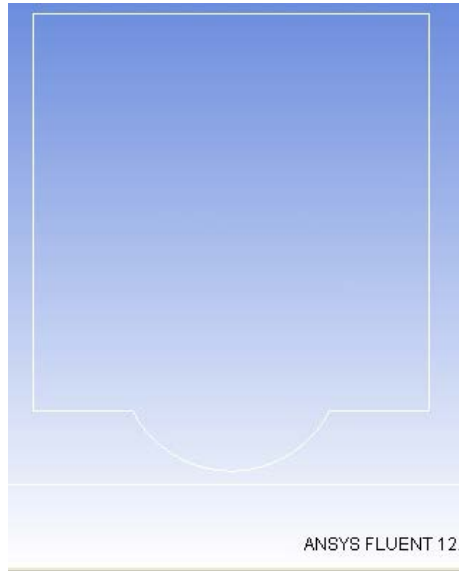
Sıkıştırma oranı =  $1 + (\text{Yanma Odası Hacmi} / \text{Silindir Hacmi})$  ;

(Formülde silindir-silindir kafa arasındaki boşluğun hacmi ihmal edilmiştir.)

Silindir Hacmi =  $2 \times 3.14 \times 43^2 \times 86 = 0,998$  lt; silindir hacmi yaklaşık 1 lt kabul edilmiştir.

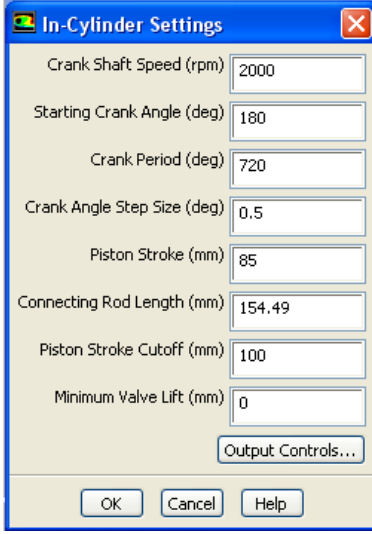
$14.04 = 1 + \text{Yanma Odası Hacmi}$  ve buradan Yanma Odası Hacmi = 13.04 hesaplanmıştır. İlk oluşturulacak model için yanma odası geometrisi yarım küre olacak şekilde kabul edilmiştir ve  $13.04 = \frac{2}{3} \times 3.14 \times r^3$  formülünden  $r = 18.4$  mm (Yanma odası yarıçapı)

Ancak yapılan çalışmalar sonrasında modelde bazı değişiklikler yapılmıştır. Gerçek motor ile daha yakın sonuçlar elde edilebilmesi açısından yanma odası geometrisi değiştirilmiştir. Yarım küre yerine derinliğin yaklaşık yarıçapın yarısı kadar olması istenmiştir ve aynı yanma odası hacmine sahip olabilmesi açısından yanma odası yüzey yarıçapı 24mm ve derinliği 13.13 mm seçilmiştir. Ayrıca çalışma, sonuçları değiştirmemesi ve işlem sürelerini kısaltması bakımından 2 boyuta indirgenerek yapılmıştır.

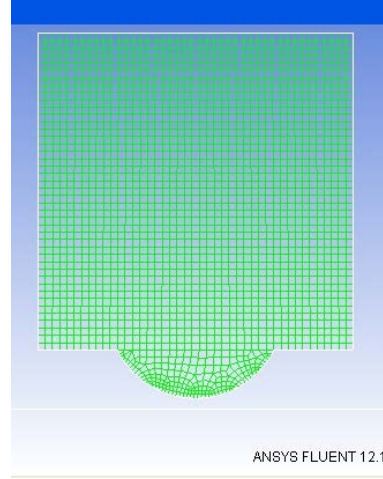


Şekil 3.6. 2D modellenen pistonun Fluent programında görüntüsü

Modelleme işlemi, piston AÖN'da olacak şekilde yapılmıştır ve yanma odası oyuğu alt kısımda bulunmaktadır. Oluşturulan dinamik mesh ile silindirin içinde bulunan ön karışım pistonun hareketi ile sıkışarak basınç ve sıcaklık değerleri. Öncelikli olarak farklı mesh sayılarında dağılımlara bakılarak optimum mesh değeri belirlenecektir.



Şekil 3.7. Fluent yazılımında dinamik mesh parametre seçimleri



Şekil 3.8 2D Pistonun meshlenmiş görüntüsü

Yapılan simülasyon çalışmalarında temel olarak amaç, motordaki yanma sonrasında oluşan silindir cidar birikintilerinin etkilerini görmektir. Öncelikli olarak cidar birikintisi olmayan durum için ve sonrasında 2mm cidar birikintisi olan durumlar için silindir duvarlarında farklı ısı transferi değerleri verilerek çalışma gerçekleştirilmiştir. Silindir gömleği için ısı iletkenliği 50 W/mK ve cidar birikintilerinin ısı iletkenliği için 0.1 W/mK değerleri alınmış ve aşağıdaki formülasyonlara göre çözüm yapılmıştır.

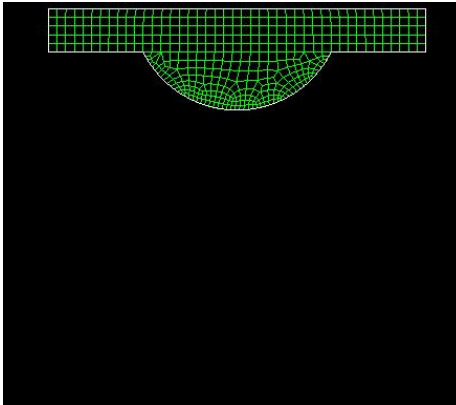
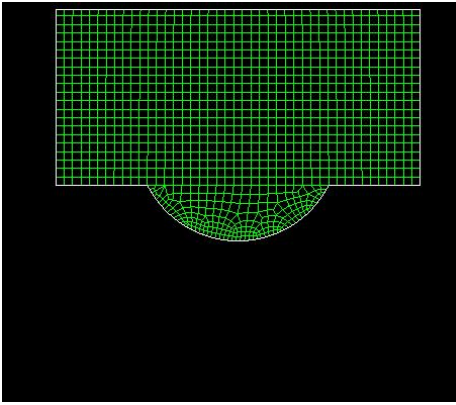
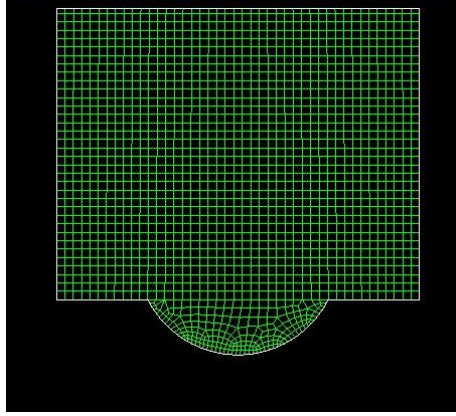
Homojen silindir için (tek tabaka malzeme): 
$$Q = \frac{2\pi\lambda(t_1 - t_2)}{\ln \frac{d_2}{d_1}} L$$

Çok tabakalı/katmanlı silindir için: 
$$Q = \frac{2\pi(t_1 - t_2)}{\frac{\ln \frac{d_2}{d_1}}{\lambda_1} + \frac{\ln \frac{d_3}{d_2}}{\lambda_2} + \frac{\ln \frac{d_n}{d_{n-1}}}{\lambda_n}} L$$

L = Silindir boyu (m)

d1 = Silindirin iç çapı

d2 = Silindir dış çapı {d3, d4, ..., dn içten dışa doğru tabakaların çapları}



Şekil 3.9. 2D Pistonun farklı KMA'larda görüntüsü

### 3.4.2 Fluent-Chemkin senkronizasyonu ve Yanma Kimyası

Daha önce Chemkin kimyasal reaksiyon çözücüsünün HAD programlarında nasıl kullanıldığından bahsedildi. Buna göre programın yanma esnasında oluşacak kimyasal reaksiyonu çözmesini sağlamak için model kısmından kimyasal tür transportu (chemical species transport) opsiyonu ve analizin hacimsel kimyasal çözümlemeyle çözülmesini

sağlamak için hacimsel (volumetric) opsiyonu seçildi. Ardından türbülans-kimyasal etkileşim sekmesinden Yanma kimyasının çözümünde EDC çözümü kullanıldı. Daha sonra Fluentte Chemkin kimyasal çözümlemesini çalıştırmak için özellikler kısmından “KINetics from Reaction Design” sekmesi açıldı ve gelen Chemkin mekanizma aktarımı menüsünden analiz için kullanılacak reaksiyon mekanizması olarak indirgeme datası Tsurushima tarafından HCCI yanması için geliştirilen mekanizma kullanıldı. Bu mekanizmayı Tablo 3.3’de görülebilir. Buradaki kimyasal reaksiyonlar için gerekli ısıl mekanizma datası yine Tsurushima tarafından geliştirildiği haliyle programa girildi. Bu datalar sayesinde yanma reaksiyonu uygun fiziksel koşullar olduğu anda gerçekleşmeye hazır konuma gelmiş oldu. Ardından yanmanın kendi kendine oluşması için programın model sekmesinden kendi kendine yanma-yanma gecikmesi bölümü açılarak Hardenburg çözümü için olağan ayarlarda, C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> (izo-oktan) yakıtı seçildi. Yanma oluşumunun bu sayede gerçek şartlar altında istenen anda gerçekleşmesi sağlandı.

### **3.4.3. Dinamik ağ yapısı stratejisi**

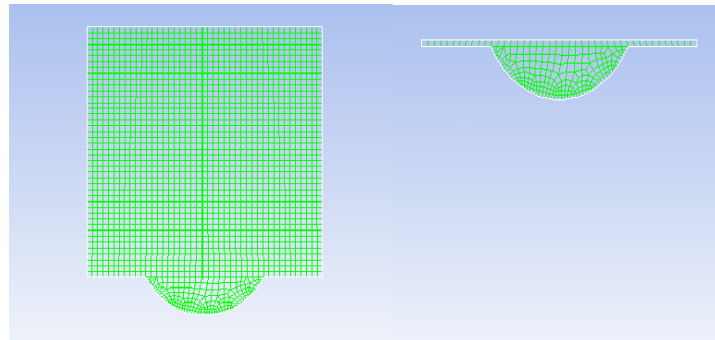
Fluent 12.1 silindir içi hareket ile alan deformasyonunu birleştiren üç farklı dinamik ağ yapısı stratejisi barındırır. Bu dinamik ağ yapıları; yaylanma yumuşatması (spring smooting), bölgesel ağ yapısı oluşturma ve dinamik ağ yapısı katlama olarak sıralanır. Tüm bu dinamik ağ yapısı stratejilerinin ortak özellikleri ise çözücünün hücre topolojisi ve düğüm noktası hareketlerinin iç hücre ve düğüm noktalarını otomatik olarak tanımasıdır. Kullanıcıların yapması gereken tek şey sınır koşullarındaki hareketi tanımlamaktır. İçyapıdaki ağ yapısı sınır hareketlerinin her bir zaman aralığına karşılık kullanıcı tarafından tanımlanır. Yaylanma temelli düzleme metodunda (spring-based smooting) herhangi iki ağın düğüm noktası ideal bir şekilde birbirine bağlanır. Verilen sınır düğüm noktasındaki yer değiştirme bütün yay bağlantılı düğüm noktası boyunca zorlanmış orantı ile elde edilir ve böylece sınır düğüm noktası yer değiştirmesi hacim ağ yapısına göre üretilmiş olur. Denge anında düğüm noktalarındaki net kuvvet düğüm noktasındaki yaylanma bağlantısı nedeniyle sıfır olmalıdır. Çözümün iterasyon sisteminde bu sonuç her zaman adımı için çözülür. Çalışmada modellenen pistonun hareketi için yay temelli düzgünleştirme metodunun örneği Şekil.3.5’de verilmiştir. Analize başlarken piston AÖN den ÜÖN ye hareket ettiği için ağ yapısı önce silinip sonra tekrar oluşmaktadır. Analiz esnasında deforme olan sadece silindir çeperleridir, hareket halinde olan ise piston çeperidir. Diğer dinamik ağ yapısı ayarları önceki modeldeki gibi düzenlenmiştir. Şekil 3.5’de dinamik ağ yapısının oluşumunu görülmektedir.

Tablo.3.3 Kimyasal mekanizma

No.	Reaksiyon	A	n	Ea
R1	$C_7H_{16} + O_2 = C_7H_{15} + HO_2$	1.000E + 16	0.00	4.600E + 04
	Rev/	1.000E + 12	0.00	0.000E + 00 /
R2	$C_7H_{15} + O_2 = C_7H_{15}O_2$	1.000E + 12	0.00	0.000E + 00
	Rev/	2.510E + 13	0.00	2.740E + 04 /
R3	$C_7H_{15}O_2 = C_7H_{14}OOH$	1.510E + 11	0.00	1.900E + 04
	Rev/	1.000E + 11	0.00	1.100E + 04 /
R4	$C_7H_{14}OOH + O_2 = O_2C_7H_{14}OOH$	3.160E + 11	0.00	0.000E + 00
	Rev/	2.510E + 13	0.00	2.740E + 04 /
R5	$O_2C_7H_{14}OOH \Rightarrow C_7KET + OH$	8.910E + 10	0.00	1.700E + 04
R6	$C_7KET \Rightarrow C_5H_{11}CO + CH_2O + OH$	3.980E + 15	0.00	4.300E + 04
R7	$C_5H_{11}CO + O_2 \Rightarrow C_3H_6 + C_2H_4 + CO + H$ $O_2$	3.160E + 13	0.00	1.000E + 04
R8	$C_7H_{16} + OH \Rightarrow C_7H_{15} + H_2O$	6.000E + 14	0.00	3.000E + 03
R9	$C_7H_{15} + O_2 = C_7H_{14} + HO_2$	3.160E + 11	0.00	6.000E + 03
	Rev/	3.160E + 11	0.00	1.950E + 04 /
R10	$C_7H_{14} + O_2 \Rightarrow C_5H_{11} + CH_2O + HCO$	3.160E + 13	0.00	1.000E + 04
R11	$C_7H_{16} + HO_2 = C_7H_{15} + H_2O_2$	1.000E + 13	0.00	1.695E + 04
R12	$C_7H_{15} \Rightarrow C_5H_{11} + C_2H_4$	2.500E + 13	0.00	2.881E + 04
R13	$C_5H_{11} = C_3H_7 + C_2H_4$	1.138E + 15	-0.42	2.701E + 04
R14	$C_8H_{18} + O_2 = C_8H_{17} + HO_2$	1.000E + 16	0.00	4.600E + 04
	Rev/	1.000E + 12	0.00	0.000E + 00 /
R15	$C_8H_{17} + O_2 = C_8H_{17}O_2$	1.000E + 12	0.00	0.000E + 00
	Rev/	2.510E + 13	0.00	2.740E + 04 /
R16	$C_8H_{17}O_2 = C_8H_{16}OOH$	1.510E + 11	0.00	2.180E + 04
	Rev/	1.000E + 11	0.00	1.100E + 04 /
R17	$C_8H_{16}OOH + O_2 = O_2C_8H_{16}OOH$	3.160E + 11	0.00	0.000E + 00
	Rev/	2.510E + 13	0.00	2.740E + 04 /
R18	$O_2C_8H_{16}OOH \Rightarrow C_8KET + OH$	8.910E + 10	0.00	1.700E + 04
R19	$C_8KET \Rightarrow C_6H_{13}CO + CH_2O + OH$	3.980E + 15	0.00	4.300E + 04
R20	$C_6H_{13}CO + O_2 \Rightarrow C_3H_6 + C_3H_6 + CO + H$ $O_2$	3.160E + 13	0.00	1.000E + 04
R21	$C_8H_{18} + OH \Rightarrow C_8H_{17} + H_2O$	6.000E + 13	0.00	3.000E + 03
R22	$C_8H_{17} + O_2 = C_8H_{16} + HO_2$	3.160E + 11	0.00	6.000E + 03

Tablo.3.3 Kimyasal mekanizma

No.	Reaksiyon	A	n	Ea	
		Rev/	3.160E + 11	0.00	1.950E + 04 /
R23	$C_8H_{16} + O_2 \Rightarrow C_6H_{13} + CH_2O + HCO$		3.160E + 13	0.00	1.000E + 04
R24	$C_8H_{18} + HO_2 = C_8H_{17} + H_2O_2$		1.000E + 13	0.00	1.695E + 04
R25	$C_8H_{17} \Rightarrow C_6H_{13} + C_2H_4$		3.617E + 17	-1.27	2.970E + 04
R26	$C_6H_{13} = C_3H_7 + C_3H_6$		7.204E + 13	-0.03	2.790E + 04
R27	$C_3H_7 + O_2 = C_3H_6 + HO_2$		3.000E + 11	0.00	3.000E + 03
R28	$C_3H_6 + C_3H_6 \Rightarrow C_2H_4 + C_2H_4 + C_2H_4$		3.160E + 13	0.00	1.000E + 04
R29	$C_2H_4 + OH = C_2H_3 + H_2O$		1.200E + 13	0.00	5.955E + 03
R30	$C_2H_3 + O_2 = CH_2O + HCO$		4.000E + 12	0.00	-2.500E + 02
R31	$CH_2O + OH = HCO + H_2O$		2.430E + 10	1.20	-4.470E + 02
R32	$HCO + O_2 = CO + HO_2$		1.350E + 13	0.00	4.000E + 02
R33	$CO + OH = CO_2 + H$		6.000E + 06	1.30	-7.580E + 02
R34	$H_2O_2 + OH = HO_2 + H_2O$		1.000E + 13	0.00	1.800E + 03
R35	$H + O_2 + M = HO_2 + M$		2.800E + 18	-0.90	0.000E + 00
R36	$HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$		1.300E + 11	0.00	-1.630E + 03
R37	$H_2O_2 + M = OH + OH + M$		1.200E + 17	0.00	4.600E + 04
R38	$C_2H_4 + O_2 \Rightarrow CH_2O + CH_2O$		3.000E + 13	0.00	3.000E + 04

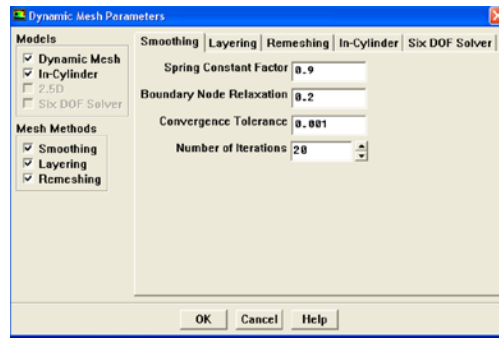


Şekil. 3.10 Dinamik ağ yapısının oluşumu. Piston AÖN de (sol taraf), piston ÜÖN da (sağ taraf).

Üçgensel ve dörtgensel ağ yapısı bölgelerinde yay temelli düzleme metodu normal olarak kullanılabilir. Sınır yer değiştirmeleri geniş olduğu zaman problemin doğruluğunu ve yakınsamasını sonraki adımlarda etkileyebilecek şekilde hücre kalitesi kötüleşir veya hücreler bozular. Bu durum özellikle yüksek en boy oranına sahip tetrahedral hücrelerin sonlu

hacimleri için doğrudur. Bu problemi önlemek için Fluent düşük kalitedeki hücreleri ve yığına bölgesel tekrar ağ yapısı oluşturur.

Oluşturulan model için Şekil.3.6'da görüldüğü gibi düzleme sekmesinde yayılma faktörü 0.9, sınır düğüm noktası yumuşaması 0.2, yakınsama toleransı 0.001 olarak ayarlandı. Katmanlama sekmesinde ayırma faktörü 0.4, çökme faktörü 0.4 ve tekrar ağ yapısı oluşturma sekmesinde ise en küçük uzunluk ölçeği 0.0008 m, en büyük uzunluk ölçeği 0.0012 m, en büyük hücre yamukluğu 0.7, tekrar ağ yapısı oluşturma aralığı 1 olarak ayarlandı.



Şekil.3.11. Dinamik ağ yapısı parametreleri

Bu ayarların yanında dinamik ağ yapısının oluşması için en önemli kısım modelde belirlenen sınır koşulları için dinamik ağ yapısı bölgelerinde ayrıca düzenleme yapılmasıdır. Buna göre modelin hangi bölgesinin hangi doğrultuda hareket edeceği tanımlanarak deformasyon veya rijit hacim tipinde olduğu programa girildi. Piston bölgesinin yukarı ve aşağı doğru hareketinde her 1 mm'de bir ağ yapısı oluşturulması için gerekli bilgi programa verildi.

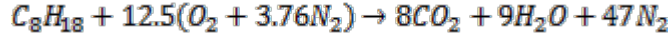
#### 3.4.4. Silindir içindeki karışımın tanımlanması

Chemkin programını çalıştırmak için programa aktarılan kimyasal reaksiyon ve termodinamik dataları, otomatik olarak programın içindeki malzemeler menüsüne tepkimeye giren ve çıkan tüm kimyasal bileşikleri aktarır. Bu sayede malzemeler kısmına akışkan ve gaz olan herhangi bir kimyasal bileşiğin girilmesine gerek kalmaz. Bunun yanında sadece silindir çeperlerinin malzemesi girilmesi gereklidir. Şekilde programa aktarılan kimyasal bileşikler görülmektedir. Şekil 3.7'de malzemeler menüsüne aktarılan kimyasal bileşiklerin bir kısmı görülmektedir.

Reaksiyon mekanizması adı altındaki menüde yanma mekanizmasına girecek ve çıkacak ürünlerin yanma denklemi girilmelidir. Bu menüde stokiyometrik yanma denkleminin programa girilmesi yeterlidir. Hava fazlalık katsayısı daha sonra hesaplanır yanma reaksiyonuna girecek hava ve yakıtın kütle oranları başlangıç koşulları menüsünde çözüme



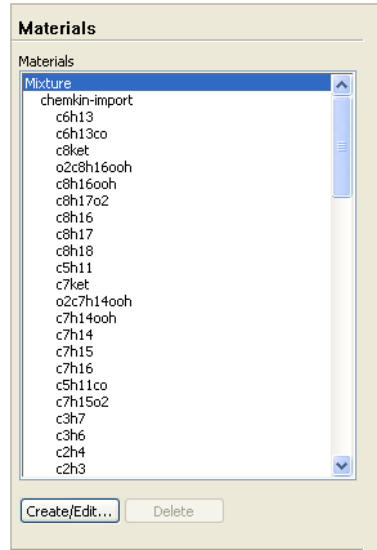
başlamadan önce bu oranlar girilmelidir. Yapılan yanma analizinde gerçek hava yakıt oranının stokiyometrik hava yakıt oranına bölünmesiyle elde edilen  $\lambda=3.5$  olarak alınarak yanma işlemi gerçekleştirildi. Buna göre analizde modellenen yanma reaksiyonları stokiyometrik durum için;



$\lambda=3.5$  için:



şeklinde alınmıştır.



Şekil.3.12. Analiz esnasında kullanılan materyallerin tanımlanması

### 3.4.5. Sınır koşullarının tanımlanması

Modelde piston ve silindirin duvar çeperlerinde sınır koşulları belirlenmiştir. Deney koşulları göz önüne alındığında gerçekleşen yanma olayı esnasında silindir çeperlerinden ısı geçişi olmuştur. Yapılan modelin gerçekçi sonuçlara ulaşabilmesi için silindir çeperleri ve piston yüzeyinden olan ortalama bir ısı akışı hesaba katılmıştır. Bu ısı akısına deneysel verilerden elde edilen ortalama silindir içi sıcaklığı ve duvar çeperlerinin sabit 363 K sıcaklığı durumuna göre hesaplanmıştır.

### 3.4.6. Başlangıç koşullarının belirlenmesi ve çözüme başlama

Analize başlanmadan önce gerekli tüm başlangıç koşullarının düzenlenmesi gereklidir. Buna göre analizin başlangıç basınç değeri 101325 Pa, sıcaklık değeri 523 K,  $\lambda=3.5$  için  $C_8H_{18}$

yakıtının kütlesele oranı 0,018627, oksijenin kütlesele oranı 0,2287 olarak tanımlanmıştır. Diğer kütlesele oranları program otomatik olarak hesaplar ve çözüme işler.

Çözüme başlamadan önce analizde kaç adet zaman aralığı olacağı ve her zaman aralığında kaç adet iterasyon yapılacağı belirtilmelidir. Yapılan yanma analizinde her bir zaman aralığı 0.5 KMA'ya denk gelmekte ve buna göre her zaman aralığı 4.1666e-05 s olmaktadır. Piston, analiz süresince 360 KMA hareket edeceği için 720 adet zaman aralığı tanımlanmıştır. Her zaman aralığı için ise azami iterasyon sayısı ise 30 olarak belirlenmiştir. Yapılan çözümlerde her zaman adımı için 30 iterasyonun ideal olduğu saptanmıştır.

### **3.4.7 Analiz sonuçlarının alınması**

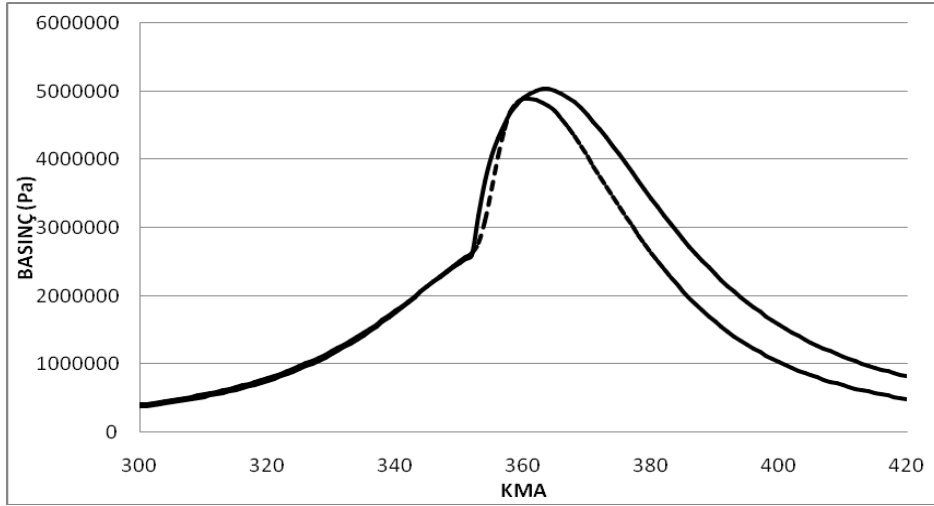
Analiz sonunda elde edilecek veriler sayısal ve görsel olarak elde edilebilmektedir. Sayısal verileri elde etmek için programın monitör sekmesinden istenilen değişkenin çıktısı akış zamanına veya zaman adımına göre alınabilir. Yapılan akış ve yanma analizlerinde basınç, sıcaklık, yanma reaksiyonuna giren ve çıkan ürünlerin kütle oranlarının verileri alınmış, zaman adımı kullanılarak KMA göre grafik olarak çizdirilmiştir. Görsel veriler ise programın komut çalıştırma sekmesine gerekli komutları girerek elde edilmektedir. Buna göre analiz esnasında ekrana her 2 KMA da bir analiz ekranına çağırılan akış hızı ve izo-oktanın mol oranını belirli bir skala içerisinde renkli olarak görüntüleyen görsel sonuçlar kaydedilmiştir. Daha sonra 2 KMA da bir kaydedilen bu resimler video görüntüsü olacak biçimde birleştirilmiştir.

## **BÖLÜM 4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA**

Silindir içi yanma modelinde asıl amaç silindir içinde piston AÖN' da iken hali hazırda bulunan hava-yakıt karışımının sıkışma esnasında nasıl bir yanma rejimi izlediğinin incelenmesiydi. Yanma sonucu silindir içinde oluşan yüksek basınç ve sıcaklığın her bir KMA'ya göre bulunması ve deneysel verilerle karşılaştırılması hedeflendi. Karşılaştırılan veriler sonucunda deneysel çalışma ile olan uygunluğa göre yanma esnasında ve sonucunda ortaya çıkan kimyasal tepkimeler ve ürünlerin incelenmesi amaçlandı. Şekil 4.1'de deneysel verilerle analiz sonuçları karşılaştırılmıştır.

Karşılaştırma sonucunda yanma başlangıcı ve yanma esnasındaki zaman aralığında verilerin tutarlı olduğu görülmektedir. Fakat yanma azami basıncının analiz verilerinde biraz düşük olduğu gözden kaçmamaktadır. Yanma sonrası kısımda ise yapılan analizde yanma sonrası oluşan yüksek basınç yüzünden supaplardan olan kaçaklar yüzünden oluşan basınç kayıpları

göz ardı edildiği için veriler farklılık göstermiştir. Azami basıncın biraz düşük olması ve yanma esnasında görülen küçük farklılık yaklaşım metotlarındaki hesaplama hatalarından kaynaklandığı düşünülmektedir.



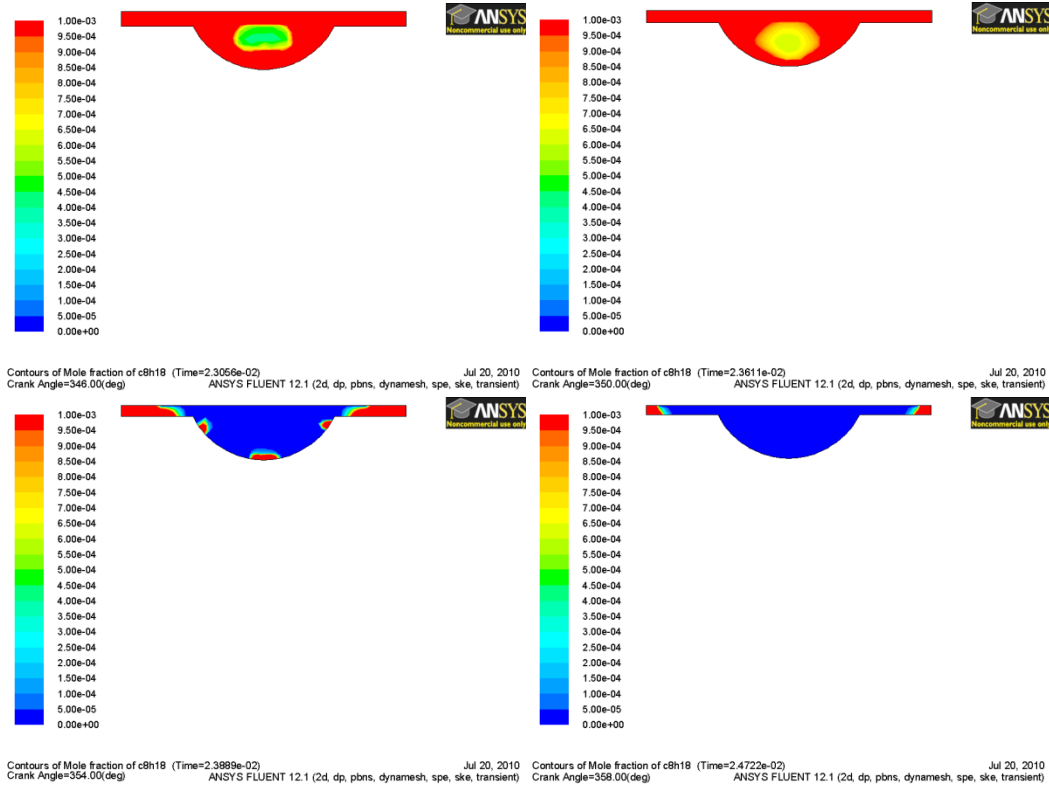
Şekil.4.1. Deneysel ve analiz yöntemle elde edilen silindir içinde sıkıştırma esnasında oluşan basınç değişiminin karşılaştırılması.

Şekil 4.2'de görüldüğü üzere yakıt ( $C_8H_{18}$ ) tam olarak 346 KMA da tükenmeye başlamaktadır. Bu andan itibaren yavaş yanma başlamış olup yakıt kimyasal reaksiyona girmiştir. En yüksek tükenme hızı 352 ile 358 KMA arasında oluşmuş ve bu aralıkta yakıtın % 70' e yakını bitmiştir. Yakıtın tamamı ise 375 KMA' da tamamen tükenmiştir. Yakıtın tükenme aralığının yanmanın gerçekleşme aralığı ile aynı olduğunu kabul edebiliriz. Deneysel verilere göre karşılaştırıldığında yakıtın daha hızlı tükenmesi gerektiğini söyleyebiliriz.

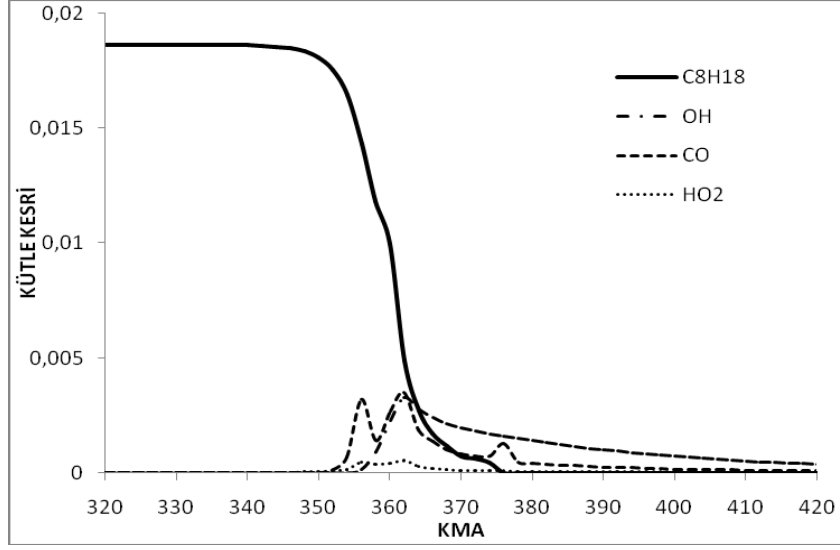
Şekil 4.3'de ise  $C_8H_{18}$ , OH, CO ve  $HO_2$ 'nin kütle oranlarının KMA'ya göre değişimi verilmiştir. Silindir içinde başlangıçta 0.018627 kütle oranıyla karışımında bulunan  $C_8H_{18}$  yanma başladığı anda hızla tükenip bitti görülmektedir. OH ise yanma başladıktan sonra hızla artmış ve 0.00329 mertebesine kadar yükselmiş bir müddet sonrada 0.00015 mertebesine doğru inerek sabitlenmiştir. CO, yanma sonrası 0.00137 mertebesine kadar inişli çıkılışlı bir grafik çizerek yükselmiş ve yanma sonunda neredeyse tamamen tükenmiştir. Son olarak  $HO_2$  ise 0,000546 mertebesine kadar kararsız bir şekilde yükselmiş ve yanma sonunda neredeyse tamamen tükenmiştir.

Tablo.4.1. Deneysel ve analiz yöntemle elde edilen basınç verileri.

KMA	Deneysel	Analiz	KMA	Deneysel	Analiz
350	2507580	2414884.4	366	4599190	5007236
351	2573100	2479393.8	367	4472070	4966584.2
352	2634300	2540506.5	368	4337490	4909406.8
353	2770410	2597541.3	369	4197060	4837599.5
354	3095070	3177739.9	370	4052290	4753014
355	3563190	3682550.2	371	3904650	4657448.8
356	4052090	4044851.2	372	3755500	4552636
357	4447120	4312002.7	373	3606070	4440224.3
358	4700780	4516524	374	3457470	4321762.9
359	4830960	4676276.5	375	3310670	4198690.3
360	4881240	4801236.9	376	3166480	4072326.3
361	4887550	4896726.7	377	3025590	3943866.4
362	4868920	4965862.4	378	2888570	3814379.5
363	4832830	5010362.9	379	2755840	3684808.6
364	4781860	5031143.8	380	2627750	3428580.2
365	4717290	5029423.1	381	2504520	3303220.1

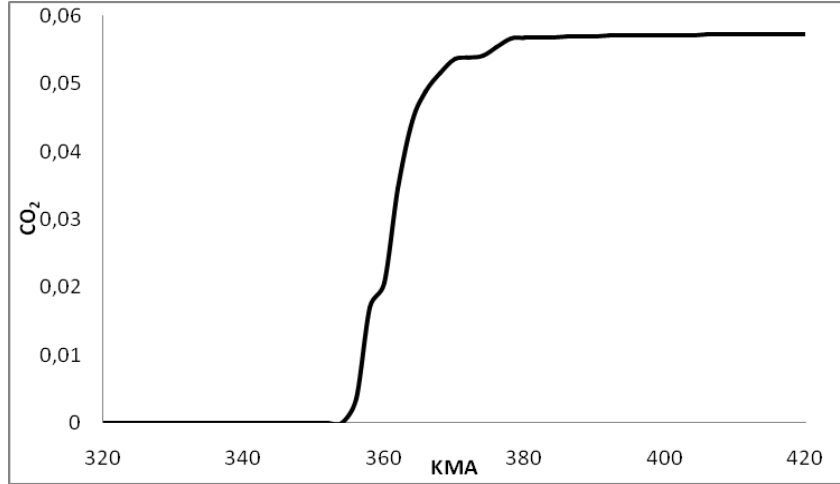


Şekil 4.2.  $C_8H_{18}$ 'in mol oranının KMA'ya göre değişimi. (346, 350, 354, 364 ve 365 KMA)



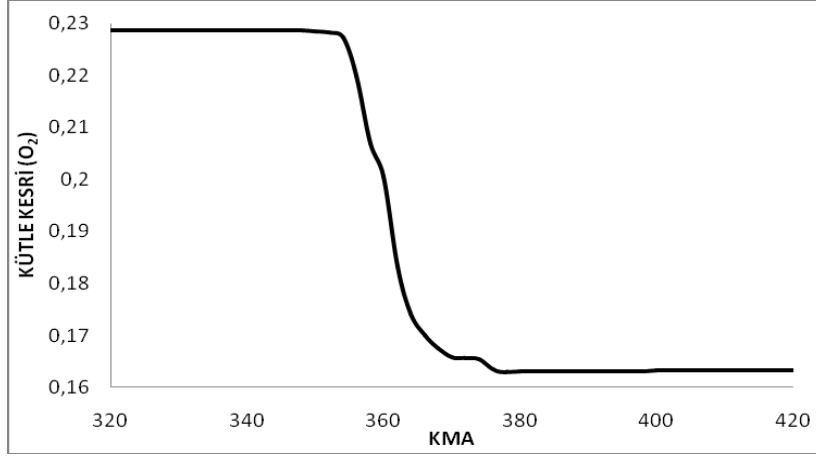
Şekil 4.3.  $C_8H_{18}$ , OH, CO ve  $HO_2$ 'nin kütle oranlarının KMA'ya göre değişimi

Şekil 4.4' de  $CO_2$ 'nin kütle oranının yanma anında hızla artarak 0.05729 seviyesine ulaşır ve sabitlendiği görülmektedir. Elde edilen bu oranın yapılan matematiksel çözümle aynı olduğu görülmüştür.



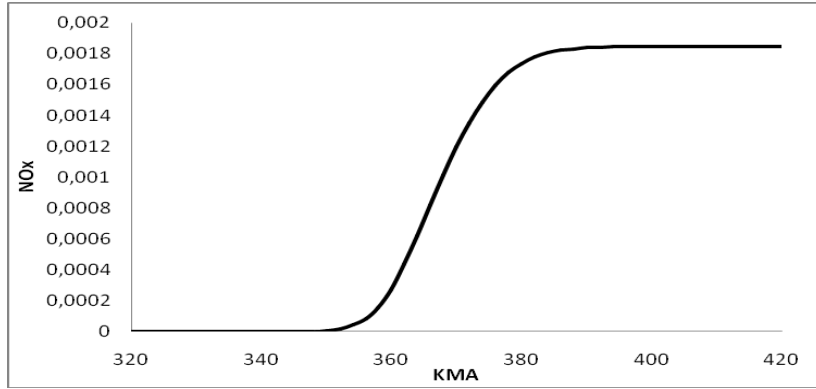
Şekil 4.4.  $CO_2$  kütle oranının KMA'ya göre değişimi.

Şekil 4.5.'de ise  $O_2$ 'nin KMA'ya göre değişimi verilmiştir. Başlangıçta 0.22875 kütle oranı ile karışımda bulunan  $O_2$  yanma sonunda 0.16339 kütle oranına kadar inmiştir. Elde edilen bu veri daha önce yapılan matematiksel çözümle aynı değere sahiptir.



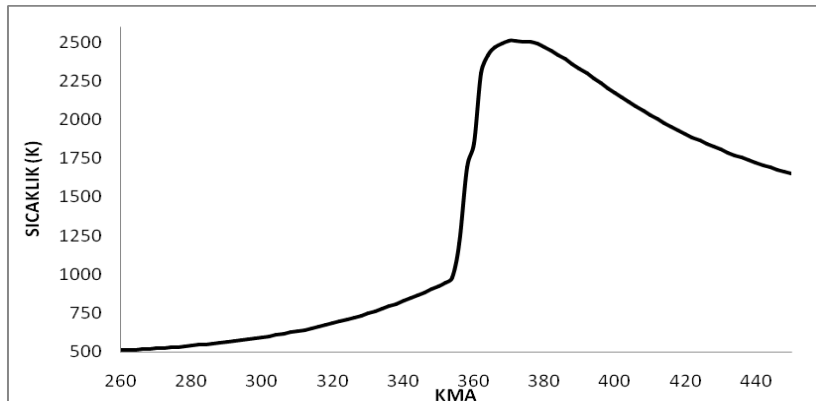
Şekil 4.5. O<sub>2</sub> kütle oranının KMA'ya göre değişimi.

Şekil 4.6'da NO<sub>x</sub> miktarının KMA ya göre değişimi verilmiştir buna göre yanma öncesinde 0 mertebesinde olan NO<sub>x</sub> miktarı yanma sonucu artan sıcaklıklara bağlı olarak hızla artmış ve 0.001845'a kadar yükselmiştir.



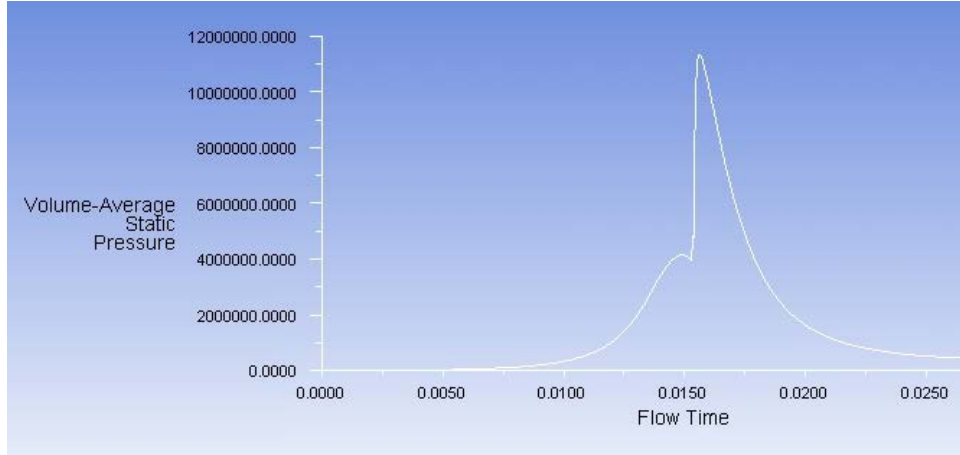
Şekil 4.6. NO<sub>x</sub>'in kütle kesrinin KMA'ya göre değişimi

Şekil 4.7'de sıkıştırma, yanma ve genişleme esnasındaki silindir içi ortalama sıcaklık değerleri verilmiştir. Sıkıştırma esnasında 977 K değerine kadar ulaşan sıcaklık yanma esnasında hızla artarak azami 2500 K değerine kadar çıkmış ve yanma bittikten sonra hızla düşmeye başlamıştır.

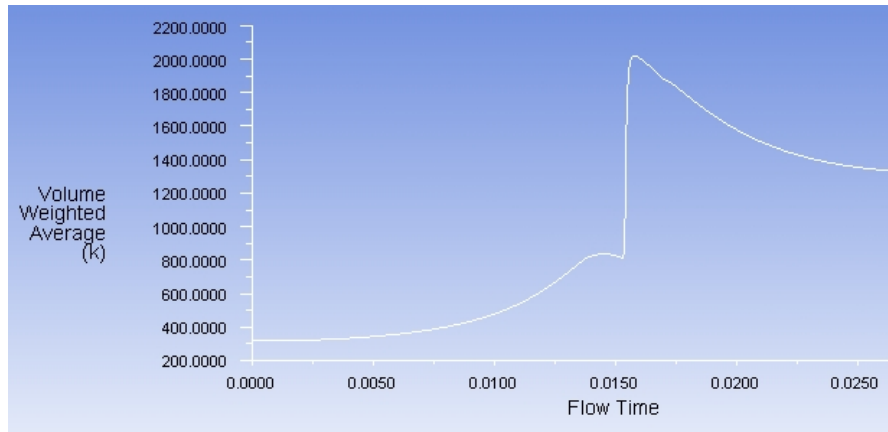


Şekil 4.7. Silindir içi ortalama sıcaklığın KMA'ya göre değişimi

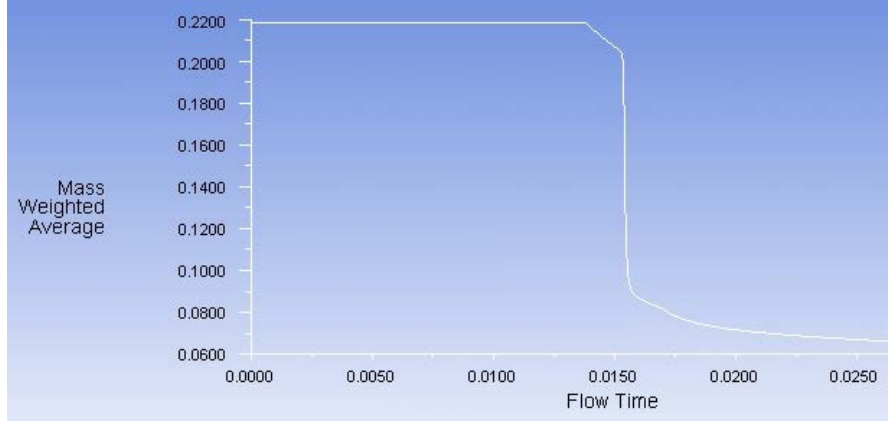
Şekil 4.8-4.10'da Cidar birikintisi olmayan durum için Statik Basıncın değişimi, Statik Sıcaklık değişimi ve oksijen kütle kesrinin değişimi verilmiştir. Aynı parametrelerin deposit oluşumundan nasıl etkilendiği ise Şekil 4.11-4.13'de verilmiştir.



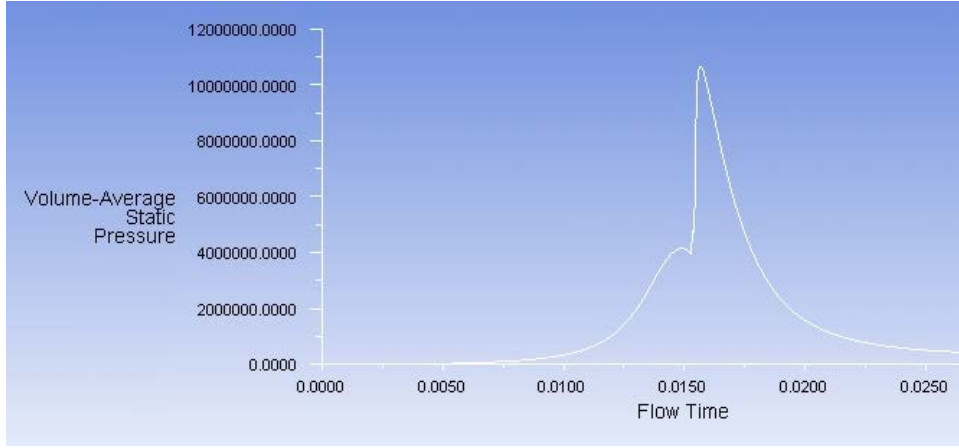
Şekil 4.8. Cidar birikintisi olmayan durum için Statik Basıncın değişimi



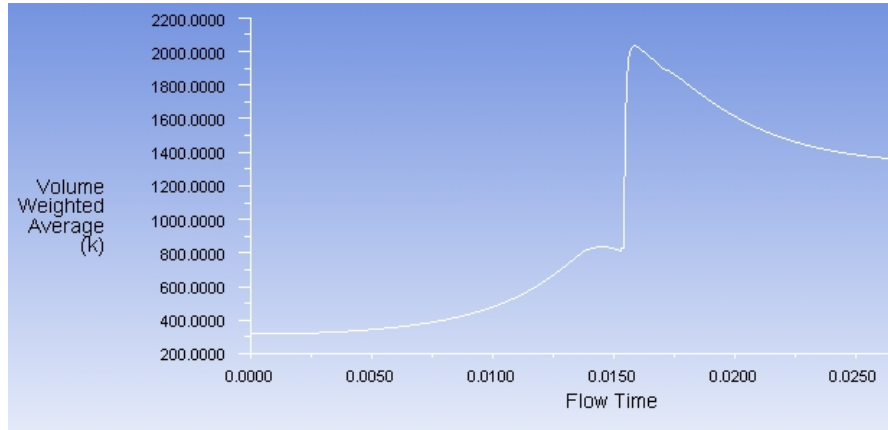
Şekil 4.9. Cidar birikintisi olmayan durum için silindir içi Statik Sıcaklık değişimi



Şekil 4.10. Cidar birikintisi olmayan durum için oksijen kütle kesrinin değişimi

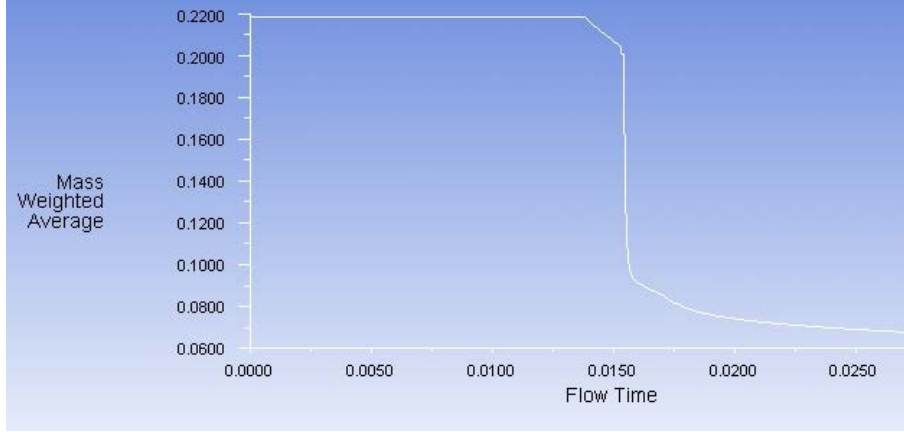


Şekil 4.11. 2 mm Cidar birikintisi olan durum için Statik Basınç değişimi



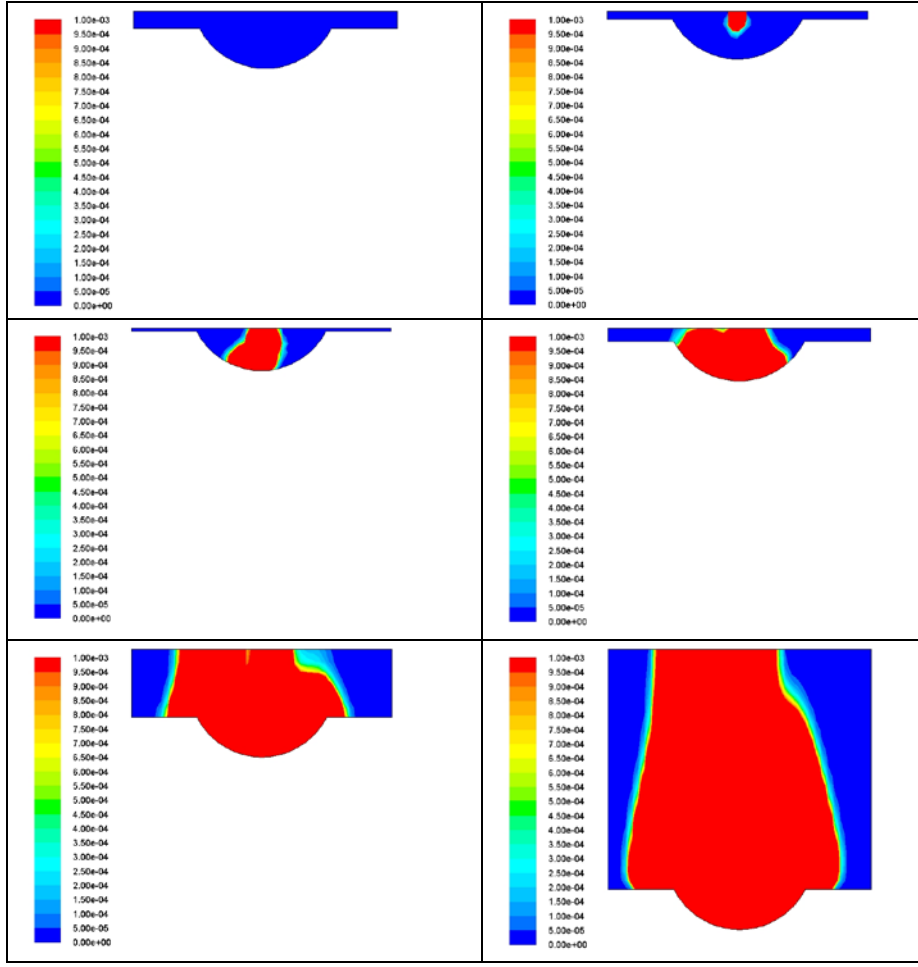
Şekil 4.12. 2 mm cidar birikintisi olan durum için silindir içi Statik Sıcaklığın değişimi





Şekil 4.13. 2 mm cidar birikintisi olan durum için oksijen kütle kesrinin değişimi

2. durumda aynı motor parametreleri, aynı yakıt parametreleri ile cidar birikintisi olan durum için simülasyon yapılmıştır. Burada 2 tabakalı silindir için ısı transferi formülasyonu kullanılarak 5mm gömlek kalınlığına 2 mm cidar birikintisi kalınlığı eklenmiştir ve silindir duvarlarından olan ısı transferini büyük ölçüde azaltan bu durumun motor performans ve verimini de düşürdüğü görülmüştür. Şekil 4.14'te ise  $C_7H_{16}$  mol kesrinin nasıl değiştiğini göstermektedir.



Şekil 4.14. Farklı KMA'lar için  $C_7H_{16}$  mol kesirleri

## Referanslar

ADAMS, K.M., Baker, R.E., Effects of combustion chamber deposits location and composition, CRC Workshop on Combustion Chamber Deposits, Orlando, U.S.A., (1993) pp: 19-37.

CHEVALIER, C., Entwicklung eines detaillierten reaktionsmechanismus zur modellierung der verbrennungsprozesse von kohlenwasserstoffen bei hoch- und niedertemperatur-bedingungen, (Doktora Tezi), University of Stuttgart, (1993).

DALY, D.T., Bannon, S.A., Fog, D.A., Harold, S.M., Mechanism of combustion chamber deposit formation, *SAE paper*, No.941889, (1994).

DUMONT, L.F., Possible mechanisms by which combustion chamber deposits accumulate and influence knock, *SAE Quart.Trans.*, 5, 565-576, (1951).

GIBBS, L.M., Does unleaded gasoline need a deposit control additive, CRC Workshop on Combustion Chamber Deposits, Orlando, U.S.A., (1993) pp: 7-10.

HAYES, T.K., White, R.A., Peters, J.E., The In-situ Measurement of Thermal diffusivity of Combustion Chamber Deposits in a Spark Ignition Engine, *SAE paper*, No.920513, (1992).

HOUSER, K., CRC Workshop on Combustion Chamber Deposits, Orlando, U.S.A., (1993) pp:9-85.

LAUER, J.L., Friel, P.J., Some properties of carbonaceous deposits accumulated in internal combustion engines, *Combust. Flame*, 4, 107, (1960).

MOORE, S.M., Combustion Chamber Deposit Interference Effects in Late Model Vehicles, *SAE Paper*, No. 940385, (1994).

MÜLLER, U.C., Reduzierte reaktionsmechanismen für die zündung von n-heptan und iso-oktan unter motorrelevanten bedingungen, (Doktora Tezi), RWTH Aachen, Germany, (1993).

NAKAMURA, Y., Yonekawa, Y., Okamoto, N., The Effect of Combustion Chamber Deposits on Octane Requirement Increase and Fuel Economy, CRC Workshop on Combustion Chamber Deposits, Orlando, U.S.A., (1993) pp: 199-211.

RUSS, M.J., The effect of combustion chamber deposits in DISI engines, CRC Workshop on Combustion Chamber Deposits, Orlando, U.S.A., (1993) pp:4-31.

SHIPINSKI, J.H., Relationships Between Rates-Of-Injection And Rates-Of-Heat Release In Diesel Engines, (Doktora Tezi), University of Wisconsin, (1967).

SHORE, L.B., Ockert, K.F., Combustion Chamber Deposits - A Radio Tracer Study, *SAE Transactions*, 66, 285-294, (1958).

TAKEI, Y., Uehara, T., Hoshi, H., Okada, M., Effects of gasoline and gasoline detergents on combustion chamber deposit formation, *SAE Paper* No.941893, (1994).

TSUKASAKI, M., Yoshida, A., Ito, S., Nohira, H., Study of mileage related formaldehyde emission from methanol fueled vehicles, *SAE Paper*, No.900705, (1990).

WESTBROOK, C.K. and Dryer, F.L., Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion, *Progress in Energy and Combustion Science*, 10, Issue 1, 1-57, (1984).

YUSMADY, M.A., Masataka, A., Deposition characteristics of diesel and bio-diesel fuels, *Fuel*, 88, Issue 11, 2163-2170, (2009).

YUSMADY, M.A., Masataka, A., The effect of hot surface temperature on diesel fuel deposit formation, *Fuel*, 89, Issue 5, 934-942, (2010).

ZENG, W., Maozhao, X., Ming, J., Numerical investigation on the application of catalytic combustion to HCCI engines, *Chem. Eng. J.*, 127, 81–93, (2007).

**TÜBİTAK**  
**PROJE ÖZET BİLGİ FORMU**

<b>Proje No: 109M019</b>
<b>Proje Başlığı: HCCI Motorlarda Deposit Oluşumunun Kimyasal Kinetik Modellenmesi</b>
<b>Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar:</b> <b>Doç.Dr. Hakan Serhad SOYHAN, Prof.Dr. Cem SORUŞBAY ve K. Ercüment GÜL</b>
<b>Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:</b> <b>Sakarya Üniversitesi, Esentepe kampüsü, 54187, SAKARYA</b>
<b>Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:</b> <b>İstanbul Teknik Üniversitesi</b>
<b>Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 01.05.2009 - 01.05.2010</b>
<b>Öz (en çok 70 kelime)</b> <p>Bu çalışmada dört zamanlı bir motorun bir silindirin içinde gerçekleşen karışım ve yanmanın analizi Fluent ve Chemkin programları kullanılarak yapılmıştır. Bir HCCI motor için elde edilen deneysel çalışma modellenerek yapılan analiz sonucunda elde edilen veriler deneysel veriler ile karşılaştırılmıştır. Yapılan karşılaştırma sonunda, modelleme sonuçlarının deneysel verilerle kabul edilebilir bir uyum gösterdiği görülmüştür. Analizin yeterliliği sunulduktan sonra deneysel olarak ölçülemeyen birtakım kimyasal reaksiyonlar ve yanma ürünlerindeki değişim, yapılan çalışmanın ikinci bölümünde incelenmiştir.</p>
<b>Anahtar Kelimeler:</b> <b>HCCI, depozit, kimyasal kinetik, modelleme</b>
<b><a href="#">Fikri Ürün Bildirim Formu</a> Sunuldu mu? Evet <input type="checkbox"/> Gerekli Değil <input checked="" type="checkbox"/></b> <small>Fikri Ürün Bildirim Formu'nun tesliminden sonra 3 ay içerisinde patent başvurusu yapılmalıdır.</small>
<b>Projeden Yapılan Yayınlar:</b> <p>8-9 Ekim 2009 tarihinde İTÜ Makine Fakültesi'nde "Uluslar arası Yakıtlar ve Motorlarda Yanma (FCE)" konferansı düzenlenmiş ve elde edilen sonuçlar katılımcılarla paylaşılmıştır. Elde edilen son sonuçları paylaşmak üzere 6-7 Ekim 2011'de aynı konferans tekrar edilecektir.</p> <p>"Uluslar arası Yakıtlar ve Motorlarda Yanma (FCE)" konferansı kapsamında bir adet poster yayımlanmıştır.</p>