

SAYISAL SİMÜLASYONLA DİZEL MOTORDA KİRLETİCİ OLUŞUM TAHMİNİ

Altin Dorri

Tirana Polytechnic University, Sheshi “Nene Tereza”, Nr. 4, Tirana, Albania
adorri@fim.edu.al

(Geliş/Received: 08.10.2012; Kabul/Accepted: 25.01.2013)

ÖZET

Bu çalışmada Dizel bir motorun yanma odasındaki termo-akışkan dinamiği alanını (hız, basınç, sıcaklık) araştırmak amacıyla Hesaplamalı Akışkan Dinamiği (HAD) kodları sayesinde sayısal teknik kullanıldı. Diğer bir önemli amaç, bu motorların yanma prosesindeki kirletici oluşumunun tahmin edilmesi ve modellenmesinin olabirliğinin belirlenmesidir. Matematiksel model; kütle, momentum ve enerjinin korunumu denklemlerine dayanır (Favre-Averaged Navier-Stokes denklemleri). Bu denklem takımlarını yaklaştırmak için, ayrıca hal bağıntı denklemleri, Yeniden Normalleştirilmiş Grup Teorisi (RNG), k-epsilon türbülans modeli ve sprey mekanizması modeli eklenmiştir. Bu Dizel motordaki prosesler termo-akışkan doğasının yanı sıra kimyayı da içermesinden dolayı, hem kimyasal tepki simülasyonu hem de kirleticilerin kimyasal modeli için özel bir ilgi söz konusudur. NO_x oluşumu Zeldovich mekanizmasıyla tahmin edilir. Isı oluşumu; çekirdeklenme, yüzey büyümesi, koagülasyon ve oksitlenme prosesine bağlıdır. Simülasyon sonuçları gösteriyor ki; ısı oluşumu yakıt bakımından zengin ve nispeten düşük sıcaklığa sahip bölgelerde görülüyorken, termal NO_x yüksek sıcaklıklarda stokiyometrik karışım oranında görülür.

Anahtar Kelimeler Dizel motor, HAD, kirletici, modelleme, türbülans.

PREDICTION OF POLLUTANT FORMATION IN DIESEL ENGINE THROUGH NUMERICAL SIMULATION

ABSTRACT

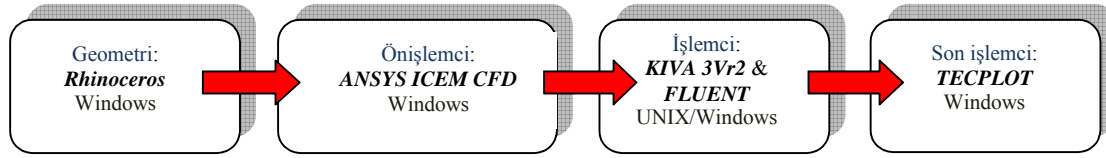
In this paper numerical technique through Computational Fluid Dynamics (CFD) codes was used in order to investigate thermo-fluid-dynamics field (velocity, pressure, temperature) in the combustion chamber of a Diesel engine. Another important objective was the possibility of modelling and prediction of pollutant formation during the combustion process in these engines. Mathematical model was based on the conservation equations of mass, momentum and energy (Favre-averaged Navier-Stokes equations). To close these equations system was add also: state relations equations, Renormalized Group Theory (RNG) k-epsilon turbulence model and spray mechanism model. Since processes in Diesel engine have not only thermo-fluid nature but also chemistry, a special attention was for chemistry models for both chemical reaction simulation and for the chemistry models of pollutants. Formation of NO_x is predicted by Zeldovich mechanism. Soot formation relies on the nucleation, surface growth, coagulation and oxidation process. Result of simulation shown that thermal NO_x is seen at stoichiometric mixture fraction at high temperatures, while soot formation is seen fuel-rich and relatively low-temperature regions.

Keywords: Diesel engine, CFD, pollutant, modelling, turbulence.

1.GİRİŞ (INTRODUCTION)

Avrupa’da Dizel motor, yüksek ısı verimi, düşük işletme maliyeti ve dayanıklılığı nedeniyle otomotiv endüstrisinde itici güç kaynağı olarak kullanılır. Bununla birlikte, pazar istekleri içinde adapte edilme ihtiyacıyla birlikte ağır emisyon kısıtlamaları bu motor için yeni bir tasarım fikrine yol açtı [6]. Petrol

fiyatları ve emisyon düzenlemelerindeki istikrarsızlıklar NO_x , ısı partikülü ve yanmamış hidrokarbonu düşük olan verimli motorlar üretmeye, şirketleri zorluyor. Bu bağlamda, geleneksel yakma sistemlerinin egzoz gazlarına ait daha etkili son işlem sistemleriyle (DeNO_x katalizörleri) uyarlanması olası bir çözümdür.



Şekil 1: Yapılan sayısal simülasyonun akış diyagramı (Flowchart of numerical simulation performed)

Diğer taraftan, ilgi, is emisyonunu ve NO_x 'i azaltmayı amaçlayan yeni yanma sistemlerini geliştirmeye doğru kaymaktadır, böylece egzoz gazlarına ait karmaşık son işlem sistemlerinin kurulmasına gerek kalmayacaktır. Araştırmacıların, uygun maliyetle gelecekteki emisyon standartlarını kısa vadede karşılayacağı için, ikincisi daha çok ilgisini çekti. Hâlbuki uzun vadeli hedef, nerdeyse sıfır kirletici emisyonlu bir motor ULEV (Ultra low Emission Vehicle) gerçekleştirmektir. Çok zaman alan ve pahalı olan deneysel araştırmalara kıyasla bu amaç için günümüzde bilgisayar kabiliyetlerinin artmasıyla HAD (Hesaplamalı Akışkan Dinamiği) simülasyonu daha popüler olmuştur. Bir Dizel motorda yanmanın hesaplamalı modellenmesi kolay bir konu değildir. Çünkü bu işlem motor akışı, yakıt püskürtmesi, karışım oluşumu, kimyasal reaksiyon, türbülanslı kimyasal etkileşim ve kirletici oluşumuyla ilgilidir. Bu amaçla, aşağıdaki gibi birçok yanma modeli geliştirildi: Coherent Flamelet, Classical Flamelet, β – PDF (Probability Density Function) model, Representative Flamelet [4]. Bunların hepsi, Arrhenius bağıntılarına dayanan indirgenmiş veya global kimya modeli kullanır. Yanma modellenmesi için bir alternatif Intrinsic Low Dimensional Manifold (ILDm)' dir. Bu modelde kimyasal reaksiyon şeması iki ilerleme değişkeni CO_2 and H_2O ile temsil edilir [3]. Bu çalışmada bir Dizel motordaki yanma işlemi HAD yazılı sayesinde simüle edildi. Homojen reaksiyonlar ve ILDM kimya modeli sırasıyla, düşük ve yüksek sıcaklık bölgesinde çalışmak için ayarlandı. Zeldovich [9] NO_x ve is oluşum mekanizması NO_x ve is oluşum parçacıklarının uzaysal dağılımı için kullanıldı.

Sayısal simülasyona ait çalışma Şekil 1'deki akış diyagramına göre düzenlendi. Önce geometri ve sonra hesaplama ağı oluşturuldu. Sonraki adımlar, HAD yazılımı sayesinde simülasyon ve sonuçların analizidir.

1.1.Sayısal modelleme (Computational modelling)

Matematiksel model; kütle, momentum ve enerjinin korunumuna dayanır. Favre ortalama alma işlemi kullanarak (yoğunluk ağırlıklı zaman ortalaması) korunum denklemleri aşağıdaki gibi yazılabilir [1]

Toplam kütle balans denklemi,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = \dot{\rho}_i^s \quad (1)$$

Momentum denklemi,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) - \bar{\nabla} p - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{u}_k \right) + \bar{F}_i^s + \bar{\rho} \tilde{g}_i \quad (2)$$

Enerji denklemi şöyle verilir,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\bar{p} \bar{\nabla} \tilde{u}_i + \bar{\sigma} \cdot \bar{\nabla} \tilde{u}_i - \bar{\nabla} J + \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \bar{Q}_c + \bar{Q}_s \quad (3)$$

Hal denklemi için, ideal gaz karışımı kabul edildi.

$$\tilde{\rho} = \frac{\tilde{p} R_0 \tilde{T}}{M} \quad (4)$$

Burada ρ yoğunluk, p basınç, u hız, T sıcaklık, I iç enerji, R_0 universal gaz sabiti, M moleküler ağırlık, \bar{j} ısı akı vektörü, \bar{F}_s püskürtmeden dolayı momentum akış hızı, \bar{g} yer çekimi ivmesi, Q_c Q_s kimyasal kaynak ve püskürtme terimleri, ϵ türbülans kinetik enerjisi k 'nin kayıp hızı, $\bar{\sigma}$ gerilme tensörüdür.

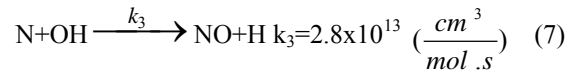
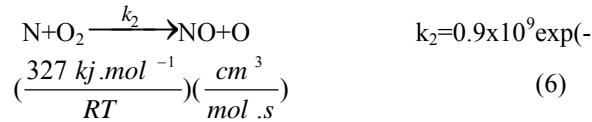
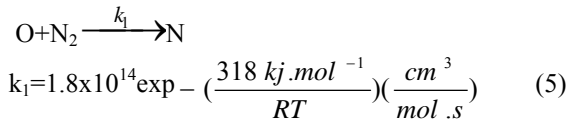
Bu ortalama denklem 2'de ilave bir terim Reynolds gerilmeleri $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ görüldüğünden yanma işlemi simüle etmek için matematiksel gereksinime (bağıntıya) ihtiyaç duyulur.

Bu amaç için türbülans viskozite hipotezi (Boussinesq hypothesis) kullanılarak Reynolds gerilmesini sağlayan türbülans modelleri kullanılır. Birkaç türbülans modeli vardır, fakat Dizel motorlardaki akışlar pistonun hareketinden, yakıt enjeksiyonundan ve yanma işleminden dolayı geçicidir. Bunlar Yeniden Normalleştirilmiş Gruplar modeli (RNG) ile analiz edilebilir [8].

Ayrıca karmaşık bir problem olan yakıt sprey parçacıklarının gaz ile etkileşimini tanımlayan modellere gerek vardır. Damlacık olasılık dağılım fonksiyonunun matematiksel bir fonksiyonu bu fiziksel işlemi temsil eder ve o, Monte Carlo parçacık tekniğine dayanır [2]. Püskürtme modellemesi şu dört

işleme dayanır: Atomizasyon, çarpışma, parçalanma ve buharlaşmadır.

Bu modeller nitrojen oksitlerin ve isin oluşumunu içerir. Her ikisi de solunum ve sağlık problemlerini doğurur. Her ikisi de NO_x olarak bilinen NO ve NO₂, dört farklı mekanizmayla oluşturulur. Termal, hızlandırma (prompt), N₂O ve yakıt bağlı nitrojen mekanizmasıdır. Bu çalışmada Zeldovich [9] tarafından teklif edilen NO_x oluşumunun termal mekanizması kullanıldı [9]. Termal NO az (fakir) yakıtlı yüksek sıcaklık bölgelerinde oluştu. Bu mekanizma üç elemanter reaksiyonla verilir:



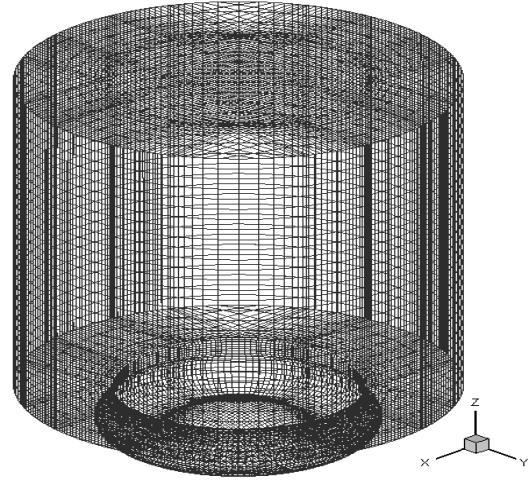
İs veya katı karbon parçacığı Diesel motorlarında eksik yanma sırasında ortaya çıkan bir diğer başlıca kirleticidir. İs oluşmasının tahmini işlemin karmaşıklığı yüzünden başlıca bir sorun olarak durmaktadır [5]. Zengin yakıtlı karışımlarda C₂H₂, C₃H₃, vb. termal ayrışma ürünleri C₆H₆ oluşturur. Daha sonra, polisiklik aromatik hidrokarbonlar (PAH) C₆H₆ ve daha ağır moleküllerden oluşturulur. PAH en muhtemel is belirtisidir. Sonunda, PAH, grafitize yapıları oluşturur. İs oluşumu genellikle üç prosesle tanımlanır: çekirdeklenme, yüzey büyümesi ve oksitlenmedir.

Tablo 1: Motor özellikleri (Engine specification)

Adı	Değer	Birim
Strok hacmi	638	cm ³
Çap	89.9	mm
Strok	100.7	mm
Biyel kolu	220	mm
Sıkıştırma oranı	17.5	---

Yanma işleminde diğer bir sorun türbülanslı kimyasal etkileşimlerdir. Bu amaçla yanma işlemini açıklamak için bir kaç yanma modeli geliştirildi. Bu makalede yanma prosesi iki yanma modeli ile tanımlanmıştır. Önce homojen reaksiyon mekanizması karışımı otomatik ateşleme için kullanılmıştır. Sonra ILDM kimyası kullanıldı (T > 1200 K olduğu zaman) [7].

Simülasyonlar 3500 dev/dk da 150 kW çıkış güçlü 3.2 litrelik bir motorda yapılmıştır. Motorun ana özellikleri Tablo 1'de verilmiştir. Hesaplama geometrisi silindir duvarları, piston başı ve silindir kapağı arasındaki bölgeyi içine alır. Hesaplama ağı Şekil 2 üzerinde gösterildi. İç silindir meşi (çözüm ağı) 164532 hücreden ve 174193 köşe noktasından (vertices) oluşur. Sıkıştırma (klirins) bölgesinde 29 hücre dizisi ve piston oyuğunda düşey yönde 17 hücre dizisi vardır.

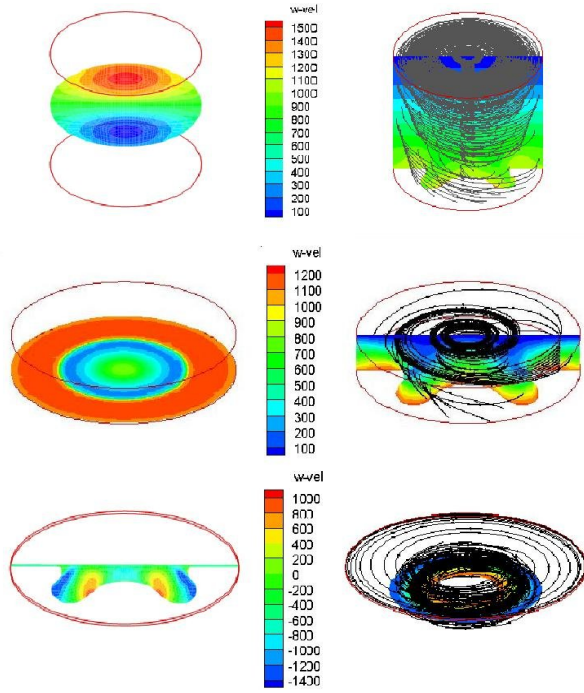


Şekil 2: Hesaplama ağı (Computational grid)

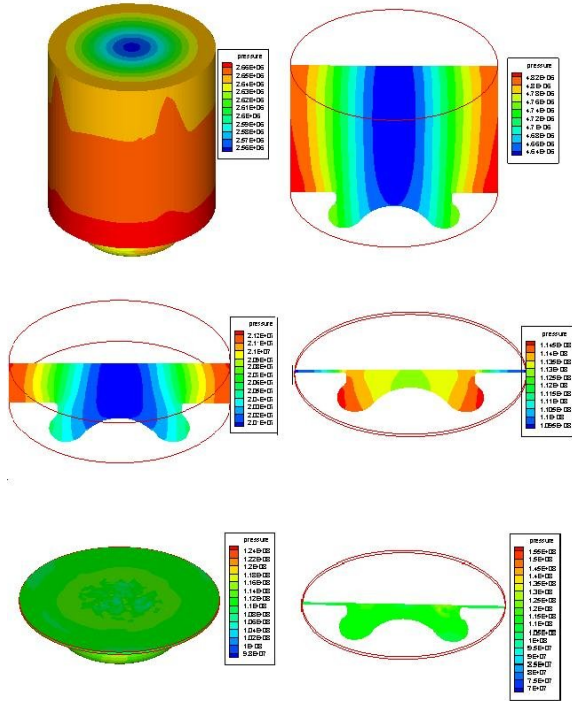
2.SONUÇLAR VE TARTIŞMA (RESULTS AND DISCUSSIONS)

Daha önce de bahsettiğimiz gibi simülasyonun hedeflerinden biri hız, basınç ve sıcaklık gibi termo-akışkan dinamiği alanlarının incelenmesiydi. Bu simülasyon buharlaşma etkilerini karışım oranı dalgalanmaları ve türbülans ölçeğini vb. uygun bir şekilde hesaba katar. Şekil 3'te farklı krank açıları yatay ve düşey kesit düzlemleri için silindir içindeki hız alanları gösterilmiştir.

Hız piston üst ölü noktaya (ÜÖN) yaklaşırken artar ve en yüksek değeri hareketli parça olan pistonu yakındır. Şekildeki türbülansın etkinliğini daha iyi anlamak için akım çizgileri de gösterilmiştir. Yanma meydana gelmeden önce hava yakıt karışma işlemine başlıca katkıyı yapan girdap hareketidir. Şekil 4, değişik krank açılarında basınç değişimini gösterir. En yüksek değer, girdap hareketi ve cidar sıcaklığının en yüksek değeri nedeniyle silindir cidarına yakın ortaya çıkar, ve daha sonra ÜÖN yakınlarında basınç dağılımı daha üniform olur. Yanma başladığı zaman, basınç özellikle merkezi bölgede hızla artar. Alev yayılmasını ve yanmayı daha iyi anlamak için sıcaklık alan dağılımı Şekil 5'te sunulmuştur.



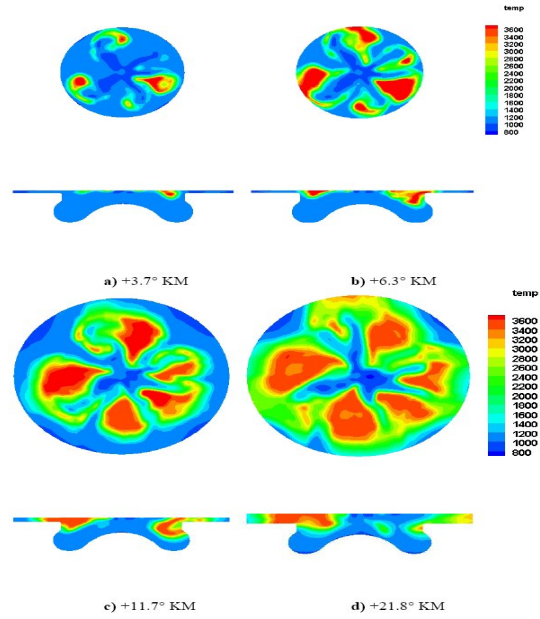
Şekil 3: Farklı krank açıları için hız alanları ve akım çizgileri (Velocity fields and streamlines for different crank angels)



Şekil 4: Farklı krank açıları için basınç alanları (Pressure fields for different crank angels)

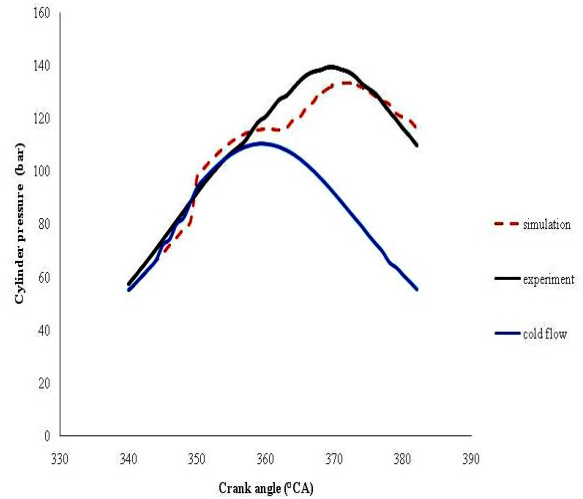
Basınç gibi ilk en yüksek değer silindir cidarına yakındır (359 K hava giriş sıcaklığına göre 659 K sınır şartı ayarlandı). Fiziksel şartlar karşılandığı zaman ateşlemenin karışma oranının stokiometrik değeri yakınında başladığı gösterildi. Ateşlemeden sonra alev yayılması yüzey boyunca ilerledi ve sıcaklık 800 K den 3600 K'e arttı. Yüksek eğim sprej açısından (76°) dolayı alevin küçük bir kısmı piston

oyuğu bölgesi içine yayılır, böylece alevin çoğu yanma odasının üst tarafı üzerinde kalır.



Şekil 5: Farklı krank açıları için sıcaklık alanları (Temperature fields for different crank angels)

Uygulanan CFD modeli doğruluğunu değerlendirmek için, ortalama basınç değeri için sayısal sonuçları üst ölü nokta (TDC) için mevcut deneysel veriler ile karşılaştırıldı ve Şekil 6 'de gösterilmiştir [12].

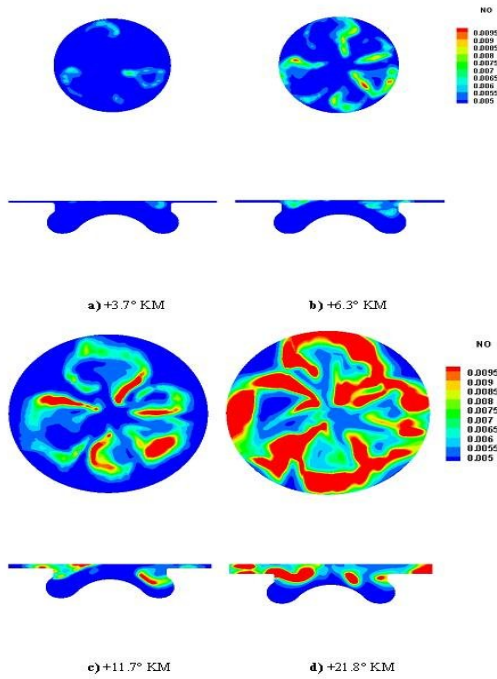


Şekil 6: Simülasyon sonuçlarının deneysel sonuçlarla karşılaştırılması (Comparison of numerical and experimental results for pressure)

Öncelikle, yanma sonrası simülasyon değerleri uyumunu artırmak ve TDC simülasyon sonra 373 °C de basıncı azalır. Daha sonra, simülasyon sonuçları deneysel değere uyuşmaktadır. Simülasyon ve deneyler arasındaki farklar: nümerik model, giriş ve sınır koşulu, türbülans seviyesi, vb gibidir. [12,13] Bu motorun simülasyonunda sadece akışkan dinamiği parametrelerine değil aynı zamanda kirleticilerin oluşmasına özel önem verildi. NO ve is, ana kirletici

olarak belirlendi. Termal NO Zeldovich mekanizması tahmin edildi ve is, fenomenolojik model kullanılarak tahmin edildi. Şekil 7 farklı krank açıları için NO kütle yüzdesini göstermektedir.

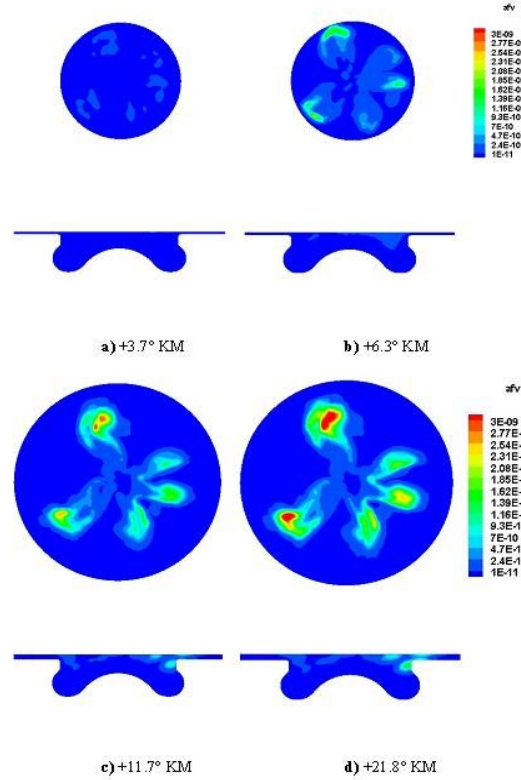
NO'nun oluşumu ateşleme spotlarının olduğu yerde başlar ve o, büyük ölçüde O-atom konsantrasyonu ve stokiometrik bölge yakınında olan en yüksek sıcaklığa göre yönetilir. NO konsantrasyonu yanma başladıktan sonra aniden hızla artar. NO oluşumu daima stokiometrik bölgede ve yüksek sıcaklıkta ortaya çıktı ve o, silindir basıncı arttıkça ve yanma ilerledikçe artar. Genişlemeden dolayı ve soğutucu havayla yüksek sıcaklıklı gazın karışmasından dolayı sıcaklığın azalması NO oluşumunu durdurur ve NO konsantrasyonu nispeten sabit kalır. Yakıt püskürtme yönünde veya yakıtça zengin bölgeler üzerinde NO'nun ortaya çıkmadığı gözlenebilir. [10,11]



Şekil 7: Farklı krank açılarında NO kütle oranı dağılımı (NO mass fraction distribution for different crank angels)

Diğer taraftan, is konsantrasyonu farklı bir seyir gösterir. Çekirdeklenme, koagülasyon ve OH oksidasyonun azalmasıyla is, üretilir. OH konsantrasyonu ateşleme ile ve yüksek yanma sıcaklığı ile artırılır [8]. O, yanmadan sonra hızla artar ve daha sonra koagülasyon ve oksidasyon nedeniyle azalır. Böylece, daha zengin bölgelerde oksidasyon oluşturacak kadar yüksek olmayan sıcaklıklarda, is oluşumunun etkin olduğu görüldü. Şekil 8'de gösterildiği gibi 2500-2800 K'den daha düşük sıcaklıklarda ve zengin yakıtlı bölgelerde is oluşumu ortaya çıkar. Is konsantrasyonu fakir yakıt konsantrasyonu ortaya çıktıktan sonra artmaya başlar. Sıcaklık ve is oluşum alanı karşılaştırıldığında,

yüksek sıcaklık bölgelerinde is üretimi çok sınırlıdır. Üstelik, yüksek NO konsantrasyon bölgelerinde is konsantrasyonunun çok düşük olduğu görüldü.



Şekil 8: Farklı krank açıları için is hacim oranı dağılımı (Soot volume fraction distribution for different crank angles)

3.SONUÇ (CONCLUSION)

Bu çalışmanın amacı, Dizel motorda kirletici oluşumunun tahmini ve termo-akışkan dinamik davranışının her ikisinin simülasyonu için yanma modeli geliştirmektir. Farklı akış parametreleri (hız, basınç, sıcaklık) için sonuçların analizi gösterdi ki, girdap hareketi hava yakıt karışımının hazırlanmasında ve tutuşmanın başlamasında çok önemli rol oynar. Basınç sonuçlarının validasyonu mevcut verilerle karşılaştırılmıştır. Bu karşılaştırma uyuşmanın varlığını göstermiştir. Homojen reaksiyon ve ILDM kimyası kimyasal reaksiyonu yönetmek ve aynı zamanda kirleticilerin konsantrasyonunu tahmin etmek için Navier-Stokes denklemiyle birlikte kullanıldı. Zeldovich mekanizmasıyla NO için ve indirgenmiş is modeli ile is oluşumu için tahmin yapıldı. NO oluşumu, esas olarak, yüksek sıcaklıkta ve stokiometrik bölgeye yakinken gözlemlendi. Zeldovich mekanizmasında daha önce bahsedildiği gibi hız kontrol etmeli reaksiyonun büyük aktivasyon enerjisi nedeniyle, termal NO oluşumu sıcaklığa aşırı derecede duyarlıdır. Is oluşumu modelde tarif edildiği gibi zengin ve düşük sıcaklıklı oksidasyonun oluşmadığı bölgede meydana gelir.

KAYNAKLAR (REFERENCES)

1. Amsden, A. A., O'Rourke, P. J. and Butler T. D., "KIVA II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays. **Los Alamos National Laboratory Report**, LA-11560-MS. Los Alamos, NM", USA. 1989.
2. Bracco, F.V., "Modeling of Engine Spray", **SAE Trans.**, 94, 144-167., 1985.
3. Correa, C., "Combustion Simulations Diesel Engines Using Reduced Reaction Mechanism". **PhD Thesis**, University of Heidelberg", Heidelberg. 2000.
4. Merker, G., Schwarz, Ch., Stiesch G. and Otto, F., "Simulating Combustion and pollutant formation", **Springer**, Germany. 2006.
5. Naydenova, I. I., "Soot Formation Modeling During Hydrocarbon Pyrolysis and Oxidation Behind Shock Wave". **PhD. Thesis, University of Heidelberg**, Heidelberg. 2007.
6. Ogink, R., "Computer Modelling of HCCI Combustion", **Ph.D. Thesis**, Chalmers University of Technology", Göteborg, Sweden. 2004.
7. Ravi, A., "CFD Simulation of Combustion Using Automatically Reduced Reaction Mechanisms: A Case for Diesel Engine". **PhD Thesis**, University of Heidelberg", Heidelberg. 2007.
8. Yakhot, V. and Orzag, S. A., "Renormalization Group Analysis of Turbulence. I. Basic Theory", **Journal of Scientific Computing**, 1, 3. 1986.
9. Zeldovich, Y. B., "The oxidation of nitrogen in combustion and explosions", **Acta Physicochimica**, 21, 577-628.", 1946.
10. Özsezen, A.N. and Çanakçı, M., "Performance and combustion in a direct injection diesel engine fuelled with waste palm and canola oil methyl esters". **J. Fac. Eng. Arch. Gazi Univ.** Vol 24, No 2, 275-284, 2009.
11. Karel, A., "Exhaust emission behaviours at diesel engines". **J. Fac. Eng. Arch. Gazi Univ.** Vol 12, No 1, 71-90, 1997.
12. Dorri, A., "Numerical simulation of thermo-fluid dynamics fields and prediction of pollutants formation in Diesel engines through CFD software". **PhD Thesis**, Polytechnic University of Tirana, Tirana. 2010.
13. Labs, J. E. and Parker, T. E., "A Comparison of Single Shot Diesel Spray Combustion Emissions with Trends Predicted by a Conceptual Model, **Combustion Science and Technology**, 179,1159-1182", 2007.