



T.C.
İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ-CERRAHPAŞA
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ



[YÜKSEK LİSANS TEZİ]

[TOLUEN REFERANS YAKITI KULLANILAN BİR HCCI
MOTORUN CFD SİMÜLASYONUNDA KULLANILMAK ÜZERE
UYGUN KİMYASAL KİNETİK MODELİN TESPİTİ]

[Gülten Gizem KÜÇÜK]

[DANIŞMAN
Doç. Dr. Erman ASLAN]

[II. DANIŞMAN
Doç. Dr. Gökhan ÇOŞKUN]

[Makine Mühendisliği Anabilim Dalı]

[Makine Mühendisliği Programı]

[İSTANBUL-2020]

Bu çalışma, 22.06.2020 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Makine Mühendisliği Anabilim Dalı, Makine Mühendisliği Programında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

Doç. Dr. Erman ASLAN(Danışman)
İstanbul Üniversitesi
Mühendislik Fakültesi

Prof. Dr. Hasan Rıza GÜVEN
İstanbul Üniversitesi
Mühendislik Fakültesi

Prof. Dr. Mesut GÜR
İstanbul Teknik Üniversitesi
Makine Fakültesi

İntihal Programı Beyanı

20.04.2016 tarihli Resmi Gazete’de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince; Bu Lisansüstü teze, İstanbul Üniversitesi’nin aboneli olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Fen Bilimleri Enstitüsü’nün belirlemiş olduğu ölçütlere uygun rapor alınmıştır.

Proje Destekleri

Bu tez, İstanbul Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Yürütücü Sekreterliğinin numaralı projesi ile desteklenmiştir.

Bu tez, numaralı projesi ile desteklenmiştir.

Tezden Üretilmiş Yayınların Künye Bilgileri

Coskun G., Aslan E., Özcan Z., Küçük G.G., *Comparison of different chemical mechanisms applied on a 3D-HCCI engine combustion model*, Proceedings of INCOS 2020, September 2020, Submitted.

ÖNSÖZ

Öncelikle tez konusunu seçerken taleplerimi göz önünde bulundurarak bana yardımcı olan tez danışmanım Sayın Doç.Dr.ERMAN ASLAN'a, çalışma konusunun belirlenmesinde ve çalışmanın hazırlanma sürecinin her aşamasında bilgi ve tecrübelerini paylaşan ve değerli zamanlarını esirgemeyen değerli hocam Sayın Doç Dr. GÖKHAN COŞKUN'a, bu çalışmanın her aşamasında desteğini sunan değerli meslektaşım Sayın ZEKERİYA ÖZCAN'a ve son olarak benden maddi ve manevi desteğini hiçbir zaman esirgemeyip bugünlere gelmemi sağlayan aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Haziran 2020

Gülten Gizem KÜÇÜK



İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖNSÖZ	iv
İÇİNDEKİLER.....	v
ŞEKİL LİSTESİ	vi
TABLO LİSTESİ.....	viii
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ	ix
ÖZET	x
SUMMARY	xii
1. GİRİŞ	1
2. GENEL KISIMLAR.....	4
3. MALZEME VE YÖNTEM.....	17
4. BULGULAR.....	24
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	33
KAYNAKLAR.....	35
EKLER	39
ÖZGEÇMİŞ	40

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa No
Şekil-1: Motorlara göre yanma prensipleri (Benzinli, Dizel ve HCCI)	5
Şekil-2: Chemkin modülünde mekanizma dosyalarının oluşturulması	18
Şekil-3: Yanma odası geometrik modeli	19
Şekil-4: Quadratic sonlu elemanlarla oluşturulan ön ağ yapısı	19
Şekil-5: Setup öncesi ANSYS Workbench proje dosyası	20
Şekil-6: Deneysel basınç verisinin, adaptive ve sabit ağ yapılı çözümlerle karşılaştırılması	21
Şekil-7: Simülasyon öncesi modelin son ağ yapısı	21
Şekil-8: Yanma odasının sabit ağ yapısıyla taranmış görüntüsü	22
Şekil-9: Kimyasal kompozisyon, başlangıç ve sınır koşullarının girilmesi	22
Şekil-10: ANSYS Forte modülünde sonuç görüntüleme	23
Şekil-11: Farklı kinetik indirgenme mekanizmaları için deneysel ve sayısal verilerin silindir içi basınç açısından karşılaştırılması	24
Şekil-12: Farklı kinetik indirgenme mekanizmaları için deneysel ve sayısal verilerin ısı salınım oranları açısından karşılaştırılması	25
Şekil-13: $\lambda=3.5$ için TRF79 vekil yakıtta farklı indirgenme mekanizmalarıyla toluene (C_7H_8) tüketimi	25
Şekil-14: $\lambda=3.5$ için TRF79 vekil yakıtta farklı indirgenme mekanizmalarıyla n-heptan (C_7H_{16}) tüketimi	26
Şekil-15: Sıcak yanma bölgesinde farklı mekanizmalar için karbonmonoksit (CO) emisyonunun gelişimi	26

Şekil-16: Sıcak yanma bölgesinde farklı mekanizmalar için karbondioksit (CO ₂) emisyonunun gelişimi	27
Şekil-17: Farklı giriş sıcaklıklarında Chen ve diğ mekanizmasından alınan nümerik sonuçların deneysel basınç verisiyle karşılaştırılması	29
Şekil-18: Farklı giriş sıcaklıklarında Chen ve diğ mekanizmasından alınan nümerik sonuçların deneysel ısı tahliye oranı değerleriyle karşılaştırılması	29
Şekil-19: Standart giriş ve sınır koşulları için Chen ve diğ mekanizmasında farklı mesh boyutlarının sonuçlara basınç gelişimi bakımından etkisi	30

TABLO LİSTESİ

	Sayfa No
Tablo-1: Propan için örnek kinetik indirgenme mekanizması	11
Tablo-2: Çalışma kapsamında kullanılacak kinetik indirgenme mekanizmaları	16
Tablo-3: Tek Silindirli Ricardo Hydra Motorunun Teknik Verileri	17
Tablo-4: Nihai partikül oranlarının deneysel ve nümerik olarak karşılaştırılması	28
Tablo-5: Nihai partikül oranlarının 450 K giriş sıcaklığı içeren vaka çalışması için deneysel ve nümerik olarak karşılaştırılması	30

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler

Açıklama

λ	: Yakıt-hava karışım oranı
V_d	: Hareketli hacim
V_c	: Boşluk hacmi
b	: Silindir çapı
s	: Piston stroğu
P	: Basınç
V	: Hacim
γ	: Özgöl ısıların oranı

Kısaltmalar

Açıklama

HCCI	:Homojen Dolgulu Sıkıştırma Ateşlemesi (Homogenous Charge Compression Ignition)
AFR	: Hava-Yakıt Oranı (Air-fuel ratio)
RCCI	: Reaksiyon Dolgulu Sıkıştırma Ateşlemesi
CR	: Sıkıştırma Oranı (Compression ratio)
TRF	: Toluen Referans Yakıtı
BBZ	: Bütilbenzen
PAH	: Polycyclic Aromatik Hidrokarbon
CFD	: Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

TOLUEN REFERANS YAKITI KULLANILAN BİR HCCI MOTORUN CFD SİMÜLASYONUNDA KULLANILMAK ÜZERE UYGUN KİMYASAL KİNETİK MODELİN TESPİTİ

Gülten Gizem KÜÇÜK

İstanbul Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Makine Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman : Doç. Dr. Erman ASLAN

II. Danışman : Doç. Dr. Gökhan COŞKUN

Homojen dolgulu sıkıştırma ile ateşlemeli (İng. HCCI) veya kontrollü otomatik ateşleme (KOA), çok yüksek sıkıştırma oranları nedeniyle homojen bir karışımın yanmasının aynı anda tüm yanma odasında gerçekleştiği bir motor konseptidir. İçten yanmalı motor teknolojisi alanında kullanılan ilk modeller, yakıtın oksidasyon kimyasının ayrıntılı bir açıklamasını değil, sadece ilk reaktantları ve nihai ürünleri hesaba katan genel bir reaksiyon dengesini içermekteydi. Bununla birlikte, günümüzde içten yanmalı motorları geliştirmek gittikçe zorlaşmaktadır ve bu nedenle çok hassas modellere ihtiyaç duyulmaktadır. Günümüzde hem akışkanlar mekaniği denklemlerini hem de reaksiyon kimyasını çözmek için en popüler metodoloji, indirgenmiş kinetik mekanizmaların kullanılmasıdır. Kapsamlı bir kinetik mekanizma, yakıtın yanması sırasında olası tüm kimyasal yolları içerecektir. Bu tez kapsamında % 79 tolüen ve % 21 n-heptandan oluşan tolüen referans yakıt (TRF) kullanılarak farklı HCCI yanma çıktıları üzerindeki etkilerini gözlemlemek için farklı kinetik indirgeme mekanizmaları karşılaştırılmıştır. Bu çalışmada, deneysel bir tolüen yanmasını simüle etmek için farklı araştırmacılar tarafından önerilen dört farklı kimyasal indirgeme mekanizması kullanılmıştır ($\lambda = 3.5$). Deneysel ve sayısal verileri karşılaştırmak için yanma odasındaki basınç gelişimi, ısı salınım oranı ve emisyonlar izlenmiştir. Sonuçlar, Wang ve ark. ve Chen ve diğ. mekanizmaları için belirtilen başlangıç koşullarındaki deneysel verilerle çok daha iyi uyumluluk göstermektedir (CR: 14.04, Tin: 440 K, Pin: 2.905 bar). Özellikle, Chen ve ark. mekanizma sıcak yanma bölgesinde kabul edilebilir bir davranış sergilemektedir. Bu nedenle,

yakınsama amacıyla bu mekanizma ile emme sıcaklığının etkisi hakkında parametrik bir çalışma da yapılmıştır.

Haziran 2020, 53 sayfa.

Anahtar kelimeler: HCCI, Yanma modelleme, TRF, Kimyasal indirgenme mekanizmaları



SUMMARY

M.Sc. THESIS

DETERMINATION OF THE PROPER KINETIC MODEL FOR A CFD SIMULATION OF HCCI COMBUSTION ENGINE WITH TOLUENE REFERENCE FUEL

Glten Gizem KK

İstanbul University

Institute of Graduate Studies in Sciences

Department of Mechanical Engineering

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Erman ASLAN

Co-Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Gkhan COŞKUN

Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) or Controlled Auto Ignition (CAI) is the concept for an engine in which the combustion of a homogeneous mixture takes place simultaneously in the entire combustion chamber due to very high compression rates. Early models used in the field of ICE technology did not include a detailed explanation of the fuel's oxidation chemistry but a general reaction equilibrium which only takes the initial reactants and the final products into the account. However, it is becoming more and more difficult to improve the current ICE's, and accordingly very precise models are needed. Today, most popular methodology to solve both fluid dynamics equations and the reaction chemistry is the utilization of reduced kinetic mechanisms. A comprehensive kinetic mechanism would involve any possible chemical path during the combustion of a fuel, except taking the importance of a reaction in circumstances being modelled into the account. In the scope of this study, different kinetic reduction mechanisms are compared in order to observe their effects on different HCCI combustion outputs using toluene reference fuel (TRF) which is composed by %79 toluene and %21 n-heptane. Mainly four different chemical reduction mechanisms, which were proposed by different researchers, used in this study in order to simulate an experimental toluene combustion ($\lambda=3.5$). Pressure development in combustion chamber, heat release rate and emissions are monitored in order to compare experimental and numerical data. Results show

that two mechanisms that are proposed from Wang et al. and Chen et al. show far better compatibility with experimental data at specified initial conditions (CR: 14.04, T_{in} : 440 K, P_{in} : 2.905 bar). Particularly, Chen et al. mechanism demonstrates an acceptable behaviour in hot combustion region. Thus, a parametric study about the effect of intake temperature was also conducted with this mechanism for the sake of convergence.

June 2020, 53 pages.

Keywords: HCCI, Combustion Modelling, TRF, Chemical Reduction Mechanisms



1. GİRİŞ

Yanma, bir yakıt (veya indirgeyici madde) ile genellikle atmosferik oksijen olan bir tür oksidanın, duman olarak adlandırılan bir karışım içerisinde gerçekleşen yüksek sıcaklıklı ekzotermik reaksiyonudur. Yanma her zaman yangına neden olmaz, ancak alev (İng. Flame) bu tip bir reaksiyonun karakteristik göstergesidir. Yanmanın başlaması için bir aktivasyon enerjisinin üstesinden gelinmesi gerekirken, alev kaynaklı ısı reaksiyonun kendi kendine sürebilmesi için yeterli enerjiyi sağlayabilir. Yanma genellikle temel radikal reaksiyonlardan oluşan kompleks bir diziden ibarettir. En basit yanmaya bir örnek olarak hidrojen ve oksijenin roket motorlarına yakıt vermek için yaygın olarak kullanılan bir reaksiyon sonucu su buharına dönüşmesi gösterilebilir. Bu reaksiyon sonucu 242 kJ/mol ısı açığa çıkar ve entalpi (sabit sıcaklık ve basınçta) buna uygun biçimde düşer:



Hava ortamında bir organik yakıtın yanması her zaman ekzotermiktir, çünkü oksijendeki çift bağ diğer çift bağlardan veya tekli bağ çiftlerinden çok daha zayıftır ve bu nedenle yanma ürünleri olarak CO_2 ve H_2O oluşumu sonucu daha güçlü bağların formasyonu serbest enerji açığa çıkarır. Yakıtın içsel bağ enerjisi bu denklemde ufak bir rol oynar, çünkü bu bağ enerjileri yanma ürünlerindeki enerjilere benzerdir; ör. CH_4 'ün bağ enerjilerinin toplamı, CO_2 'nininki ile neredeyse aynıdır. Yanma ısısı, yanma reaksiyonunda kullanılan O_2 'nin molü başına yaklaşık -418 kJ'dir ve yakıtın temel bileşiminden tahmin edilebilir [1].

Hava ortamında katalizörsüz yanma nispeten yüksek sıcaklıklar gerektirir. Tam yanma sürecinde, artık bir yakıt kalıntısı bulunmadığından ve oksidan bileşenden geriye bir şey kalmadığından, bu tip bir reaksiyon stokiometrik (İng. Stoichiometric) olarak tanımlanır. Bununla birlikte, yanma reaksiyonlarında kimyasal dengeye genellikle tam olarak ulaşılamadığı veya karbon monoksit, hidrojen ve hatta karbon gibi yanmamış ürünler kalabildiğinden, tam (veya stokiometrik) yanmanın elde edilmesi neredeyse imkansızdır. Bu nedenle, üretilen kurum veya is genellikle toksiktir ve tam yanmamış veya kısmen oksitlenmiş ürünler içerir. Atmosferik hava ortamında yüksek sıcaklıklarda % 78 azot içeren herhangi bir yanma sonucunda genellikle NO_x olarak adlandırılan azot oksit türevleri oluşacaktır. Bu tip bir

yanmanın ürünleri zararlı bileşenler içereceğinden, son yıllarda kanuni regülasyonlar katalitik konvertör uygulamasını zorunlu kılmaktadır.

Tam veya sitokiyometrik yanma esnasında yakıt oksijen tarafından yakılır ve sınırlı sayıda yanma ürünü açığa çıkar. Bir hidrokarbon oksijen içerisinde yandığında, yanma ürünü olarak öncelikle karbondioksit ve su açığa çıkacaktır. Elementler yandığında, çıkan ürünler giren yakıtların oksitlenmiş halleridir. Hava içerisinde yakıcı (oksidan) eleman oksijen olduğundan, teoride sitokiyometrik bir yanmada azotun reaksiyona girmediği varsayılır. Gerçek durumda ise görece az miktarda da olsa çeşitli azot oksitler (yaygın olarak NO_x türleri) açığa çıkmaktadır.

Bir yakıtın veya kimyasal adıyla hidrokarbonun hava içerisinde sitokiyometrik yanması aşağıdaki şekilde formüle edilebilir:



Bu çalışmada kullanılan vekil yakıt (İng. Surrogate Fuel) %79 Toluene, %21 n-Heptane karışımından oluşan TRF79 kodlu yakıttır. Bu bileşenler için sitokiyometrik denklemler aşağıdaki halleri alır:



Sitokiyometrik yakıt-hava karışımı her tür yakıt için teorik olarak 16.4:1 şeklinde tanımlanır. Yani her bir mol yakıtın yanması için 16.4 mol teorik hava gerekir. Bu karışım oranlarının altında gerçekleşen yanma reaksiyonları eksik yanma (İng. Incomplete Combustion), bu oranlardan fazla hava içeren yanma reaksiyonları ise fakir yanma (İng. Lean Combustion) olarak adlandırılır. Bir karışımın yanıcılığını tespit etmekte anahtar kavram yakıt-hava karışım oranıdır. Motor tekniğinde λ ile sembolize edilen yakıt-hava dengesi aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\lambda = \frac{AFR}{AFR_{stoch}} \quad (5)$$

Bu denklemde AFR (İng. Air-Fuel Ratio; Hava-Yakıt Oranı) hava-yakıt karışımıdır. $\lambda=1$ sitokiyometrik bir karışımı, $\lambda<1$ değerleri yakıtça zengin karışımları, $\lambda>1$ değerleri ise yakıtça fakir karışımları ifade etmektedir. Mevcut çalışmada $\lambda=3.5$ olan yakıtça fakir bir hava yakıt

karışımının analizi söz konusu olacaktır. Dolayısıyla böyle bir yanma sonucunda (3) ve (4) nolu denklemlerdeki yanma ürünlerine ek olarak yanma ürünleri arasında O_2 , NO_x gibi emisyonlar da yer alacaktır. Bu çalışmada $\lambda=3.5$ şeklinde modellenecek bir TRF79 vekil yakıt-hava karışımının HCCI (İng. Homogenous Charge Compression Ignition) tip bir motorda yanmasını sayısal olarak modellemek için kullanılacak en uygun kinetik kimyasal indirgenme modelinin tespiti amaçlanacaktır.



2. GENEL KISIMLAR

Son yıllarda, bilgisayarların nümerik hesap kapasitesi önemli ölçüde artmıştır ve sayısal hesaplama yöntemleri motor tasarım süreçlerinde daha etkili hale gelmiştir. Öte yandan deneysel yöntemler bu alanda önemini halen korurken, deneylerin toplam maliyeti sayısal yöntemlere göre daha da artmaktadır. Yanma modellemesi, motor tasarımının en zorlu süreçlerinden biridir ancak yakıt tüketimini ve emisyonları azaltmak için belki de en etkili olanıdır. Bu bölümde kısaca HCCI motor teknolojisi tanıtılacak, önemli motor karakteristiklerine değinilecek ve kimyasal indirgenme mekanizmalarının teorisine giriş yapılacaktır.

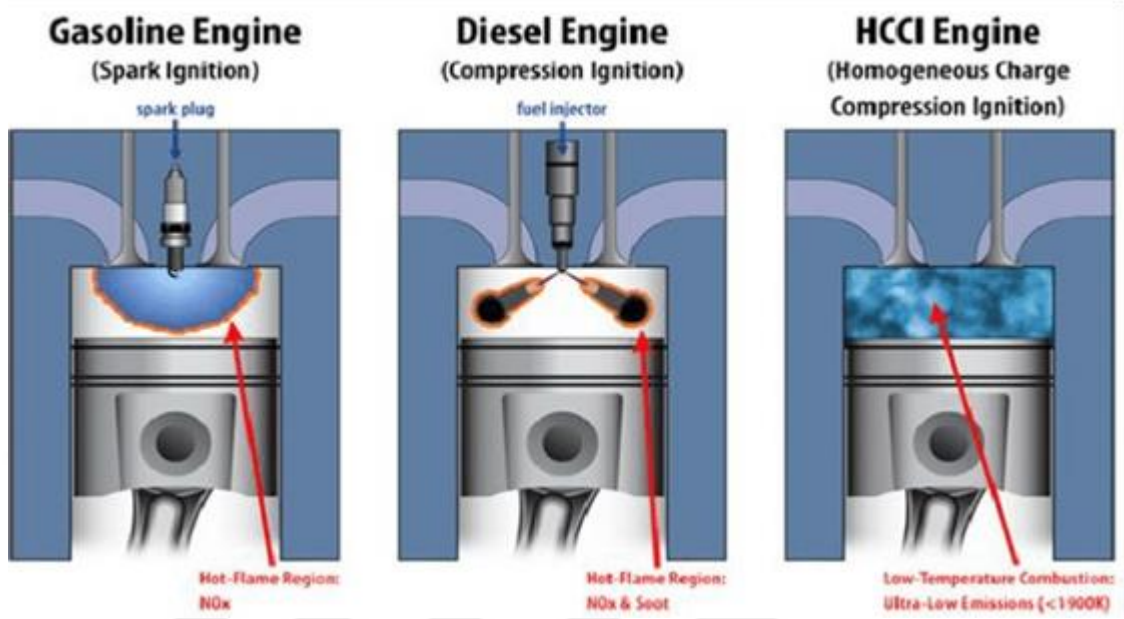
2.1 HCCI MOTORLAR

Homojen dolgulu sıkıştırma ateşlemesi (HCCI), iyi karışmış yakıt ve oksitleyicinin (tipik olarak hava) kendiliğinden tutuşma noktasına kadar yanma odasında sıkıştırıldığı bir içten yanma şeklidir. Diğer yanma şekillerinde olduğu gibi bu ekzotermik reaksiyon, bir motorda işe ve ısıya dönüştürülebilen enerjiyi açığa çıkarır. HCCI tekniği, benzinli motor ile dizel motorların avantajlarını birleştirir. Benzinli motorlar, homojen bir karışımı dışarıdan ateşleme (buji) ile yakarken modern doğrudan enjeksiyonlu dizel motorlar, yüksek sıkıştırma oranlarına çıkarak kendiliğinden ateşlemeyi sağlarlar.

HCCI tekniğinde, yakıt yanma odasına emme zamanı esnasında enjekte edilir. Bununla birlikte, karışımın bir kısmını tutuşturmak için bujiyle ateşleme yerine HCCI bir motor, tüm karışım kendiliğinden reaksiyona girene kadar sıkıştırma ile yoğunluğu ve sıcaklığı yükseltir. Bu tekniğin geliştirilmesinde güdülen temel amaçlar, yakıt tüketimini ve zararlı partikül emisyonlarını azaltmaktır. HCCI bir yanma sürecine tam hakim olabilmek, sürecin mikroişlemcilerle kontrolünü ve ateşleme sürecinin fiziksel olarak anlaşılmasını gerektirir. Doğru HCCI tasarımları, dizel motor benzeri verimlilikle benzinli motor benzeri emisyonlar elde etmektedir.

HCCI motorları görece çok düşük seviyelerde nitrojen oksit emisyonlarını (NO_x) katalitik konvertör olmaksızın elde edebilmektedir. Ancak HCCI motorlar için de hidrokarbon (HC) emisyonları ve karbon monoksit emisyonları, otomobil sanayii regülasyonlarına göre hala iyileştirme potansiyeli içermektedir.

Şekil-1’de üç tip motorun yanma prensipleri görülebilmektedir:



Şekil-1: Motorlara göre yanma prensipleri (Benzinli, Dizel ve HCCI) [2]

Son araştırmalar, farklı yakıtları kombine eden hibrit yakıtların HCCI ateşleme ve yanma oranlarının kontrolünü kolaylaştırabileceğini göstermiştir. Kısaca RCCI veya reaksiyon kontrollü sıkıştırma ateşlemesinin, geniş yük ve hız aralıklarında yüksek verimli, düşük emisyonlu çalışmalar sağladığı gösterilmiştir. [3].

En başından beri bu teknolojinin avantajlarını, dezavantajlarını ve diğer zorluklarını tartışmak için çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Zhao ve diğ., HCCI motorları yakıt açısından daha verimli olduklarından, dizel seviyesindeki sıkıştırma oranlarında ($CR > 15$) çalışabildiklerini, böylece yaygın benzinli motorlardan yaklaşık % 30 (teorik) daha yüksek verimlilik vaat ettiklerini ifade etmişlerdir [4].

Warnatz ve ark. [5] HCCI yanmasının bir başka avantajını açıklar. HCCI, daha homojen bir yakıt ve hava karışımı sağlar ve bu da geleneksel motorlara kıyasla daha temiz bir yanma ile daha az emisyon değeri sağlar. Böyle bir yanma, işlem sırasında maksimum sıcaklıkların düşmesine neden olur ve bu da neredeyse önemsiz NOx emisyonları sağlar [5]

Bu motor hem benzin hem de dizel yakıt ile çalışabilir. Alternatif yakıtlar da HCCI teknolojisi ile uyumludur [6]. Çalışmalar, HCCI motorlarının gaz kesme (İng. Throttling) kaynaklanan

kayıplardan kaçındığını göstermektedir, bu durum verim artışlarına da dolaylı olarak katkı sağlamaktadır [7].

Bu teknoloji ile ilgili en önemli zorluklardan biri kendiliğinden yanmanın (İng. Autoignition) kontrol altına alınmasıdır. Bunun nedeni Otto veya Dizel Motorlardan farklı olarak ateşleme marş motorunun (örn. Enjektör veya buji) olmamasıdır [8]. Bu teknolojinin güç üretim kapasitesi geleneksel yöntemlerden daha düşüktür [9] ve CO / Hidrokarbon emisyonları, nispeten düşük sıcaklıklar ve bitmemiş yanmalara yol açan hızlı yanma gibi kısıtlamalar nedeniyle daha yüksektir [10]. Daha yüksek ısı salınım oranları ve ani basınç yükselmeleri motorun erken yıpranmasına neden olabilir [11].

HCCI bir motorda yanmanın kontrolü benzinli ve dizel gibi diğer içten yanmalı motorlardan daha zordur. Tipik bir benzinli motorda, önceden karıştırılmış yakıt ve havayı ateşlemek için bir kıvılcım kullanılır. Dizel motorlarda, yakıt önceden basınçlandırılmış havaya enjekte edildiğinde yanma başlar. Her iki durumda da yanma zamanlaması kolayca kontrol edilebilir. Bununla birlikte, bir HCCI motorda, homojen yakıt ve hava karışımı sıkıştırılır ve yeterli basınç ve sıcaklığa ulaşıldığında yanma kendiliğinden başlar. Dolayısıyla bu motorlar, ateşleme koşulları istenen zamanlamada gerçekleşecek şekilde tasarlanmalıdır. Dinamik çalışmayı sağlamak için, kontrol sistemi yanmayı tetikleyen koşulları yönetmelidir. Kontrol seçenekleri arasında sıkıştırma oranının (İng. Compression Ratio), gaz karışımının giriş sıcaklığının, basıncının veya yakıt-hava oranının kontrolü yer almaktadır.

Bir HCCI motor için en önemli karakteristiklerden birisi -diğer içten yanmalı motorlarda olduğu gibi- sıkıştırma oranıdır (CR). Bir içten yanmalı motorda sabit sıkıştırma oranı, yanma odasının ve silindirin nispi hacimlerine göre hesaplanır. Benzinli motorlar için CR genelde 8:1 ile 12:1 arasındadır. Daha yüksek sıkıştırma oranları, motorun vuruşta maruz kalmasına ve zarar görmesine neden olabilir [12]. Dizel motorlar benzinli motorlardan daha yüksek sıkıştırma oranları kullanır, çünkü bujinin olmaması, sıkıştırma oranının dizeldeki ateşleme için silindirdeki havanın sıcaklığını yeterince artırması gerektiği anlamına gelir.

Sıkıştırma oranları doğrudan enjeksiyonlu dizel motorlar için genellikle 14:1 ile 23:1 arasında ve dolaylı enjeksiyonlu dizel motorlar için 18:1 ile 23:1 arasındadır. Değişken sıkıştırma oranı teknolojisi de mevcut olmasına karşın içten yanmalı motorların çoğu aşağıda formüle edilen sabit sıkıştırma oranına göre dizayn edilir:

$$CR = \frac{V_d + V_c}{V_c} \quad (6)$$

$$V_d = \frac{\pi}{4} b^2 s \quad (7)$$

$$P_1 V_1^\gamma = P_2 V_2^\gamma \Rightarrow \frac{P_2}{P_1} = \left(\frac{V_1}{V_2} \right)^\gamma \quad (8)$$

Burada sözü edilen geometrik sıkıştırma oranıdır. HCCI tip bir motor için iki farklı sıkıştırma oranı yanma kontrolü bakımından önemlidir. Geometrik sıkıştırma oranı, silindir kapağının üst kısmındaki hareketli bir piston ile değiştirilebilir. Bu sistem daha çok dizel tip uçak motorlarında kullanılır. Etkin sıkıştırma oranı (İng. Effective Compression Ratio) ise, emme valfinin değişken valf çalıştırma yöntemiyle çok geç veya çok erken kapatılması ile geometrik oranın altına indirilebilir. Bu tip uygulamalar pahalı ancak etkilidir [13]. Sıkıştırma oranının HCCI yanması üzerindeki etkisi kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır [14]. Bu çalışmada sıkıştırma oranı 14.04 olarak sabit kabul edilecektir.

Yanma zamanlamasını kontrol etmede bir diğer önemli parametre giriş sıcaklığıdır. En basit sıcaklık kontrol yöntemi olarak giriş sıcaklığını değiştirmek için dirençli ısıtıcılar kullanır, ancak bu yaklaşımın bir döngüden başka döngüye geçene kadar uygulamada yavaş kaldığı gösterilmiştir [15]. Diğer bir teknik hızlı termal yönetimidir (İng. Fast Thermal Management - FTM-). Bu işlem sıcak ve soğuk hava akımlarını karıştırarak emme sıcaklığını değiştirmek suretiyle gerçekleştirilir. Pratikte yanma kontrolü sağlayacak kadar hızlı olduğu gösterilmiştir [16].

Çalışma aralığını genişletmenin veya yanma kontrolünün bir başka yolu, yakıtın kendisini manipüle ederek ateşleme başlangıcını ve ısı tahliye oranını (İng. Heat Release Rate) [17] [18] kontrol etmektir. Bu genellikle aynı motor için birden fazla yakıtı "anında" karıştırılarak gerçekleştirilir. [19] Örnekler arasında ticari benzin ve dizel yakıtların karıştırılması [20] doğal gaz [21] veya etanol kullanılması da yer almaktadır. [22].

2.2 TEMEL KARAKTERİSTİKLER

Bu çalışma kapsamında kullanılan mekanizmaların performanslarının irdelenmesinde de kullanılacak olan HCCI motor karakteristikleri temelde basınç dağılımı ve pik/maksimum basınç ve ısı tahliye oranıdır. Ayrıca motor gücü ve emisyonlar da değinilmesi gereken motor karakteristiklerindendir.

2.2.1 MAKSİMUM BASINÇ VE ISI TAHLİYE ORANI

Tipik bir motorda yanma alev oluşumu yoluyla gerçekleşir. Bu nedenle, herhangi bir zamanda toplam yakıtın sadece bir kısmı yanar. Bu durum düşük maksimum basınçlar ve düşük enerji salınım oranları ile sonuçlanır. Bununla birlikte, HCCI'da yakıt / hava karışımının tamamı çok daha küçük bir zaman aralığında tutuşur ve yanar, bu da konvansiyonel motorlara göre daha yüksek maksimum basınçlar ve yüksek enerji salınım oranları anlamına gelmektedir. Daha yüksek basınçlara dayanabilmek için motor fiziksel anlamda da daha dayanıklı olmalıdır. Bu bir anlamda dezavantaj da oluşturmaktadır. Dolayısıyla yanma oranını ve maksimum basınçları düşürmek için literatürde çeşitli stratejiler önerilmiştir. Örneğin birbirinden farklı tutuşma özelliklerine sahip yakıtların karıştırılması yanma hızını düşürebilmektedir [23]. Başka bir yaklaşım, basıncı ve yanma oranlarını azaltmak için seyreltme (egzoz gazları) kullanımınıdır. [24].

2.2.2 MOTOR GÜCÜ

Konvansiyonel bir motorda yanma odasına daha fazla yakıt sokularak motor gücü artırılabilir. Bu motorlar bu şekilde bir güç artışına dayanabilir, çünkü bu motorlardaki ısı salınım hızı yavaştır. Bununla birlikte, HCCI motorlarında yakıt / hava oranının yakıt bakımından zenginleştirilmesi daha da yüksek maksimum basınçlar ve ısı tahliye oranları ile sonuçlanır. Ek olarak, uygulanan farklı HCCI yanma kontrol stratejileri yakıtın giriş sıcaklığını artırır, dolayısıyla yoğunluğu azaltır ve sonuç olarak yanma odasındaki hava / yakıt yükünün kütlesi düşer. Bu faktörler HCCI motorlarındaki gücü arttırmayı zorlaştırmaktadır.

Bir teknik, farklı kendiliğinden tutuşma özelliklerine sahip yakıtları kullanmaktır (Örneğin bu çalışmada kullanıldığı gibi karışım halindeki vekil yakıtlar). Bu ısı tahliye oranını ve maksimum basınçları düşürür ve yakıt oranının arttırılmasını mümkün kılar. Başka bir yol, sıkıştırılma anında farklı noktaların farklı sıcaklıklara sahip olması ve farklı zamanlarda yanmasının

sağlanması, böylece ısısal salınım oranının düşürülmesi ve gücün arttırılmasını mümkün kılmak için ısısal yükü termal anlamda katmanlı hale getirmektir [25]. Üçüncü yol, motoru sadece kısmi yük koşullarında HCCI modunda çalıştırmak ve daha yüksek yük koşullarında dizel veya benzinli motor gibi çalıştırmaktır [26].

2.2.3 EMİSYONLAR

HCCI motorlar fakir karışımlarla çalıştığı için reaksiyon sırasında oluşan maksimum sıcaklıklar benzinli ve dizel motorlarda karşılaştırıldan çok daha düşüktür. Bu fenomen NO emisyon oluşumunu azaltır.

Ancak yine düşük sıcaklıklar aynı zamanda yanma odası duvarlarının yakınında yakıtın eksik yanmasına neden olur. Bu sebeple HCCI motorlar nispeten yüksek karbon monoksit ve artık hidrokarbon emisyonları üretir. Oksitleyici bir katalizör kullanımıyla, fazladan hava kullanımı sonucu yanma ürünü olarak egzoz gazları arasında yer alan oksijen kullanılarak bu emisyonlar çevreye daha zararsız hale getirilebilir.

2.2.4 VURUNTU KONTROLÜ

Bir benzinli motorda yanma esnasında oluşan alevin önünde kalan yanmamış gazların bir kısmı kendiliğinden tutuştuğunda motor vuruntu yapar. Alev yayıldıkça ve yanma odasındaki basınç yükseldikçe bu gazlar sıkıştırılır. Yanmamış gazların yüksek basıncı ve karşılık gelen yüksek sıcaklığı, kendiliğinden tutuşmalarına neden olabilir. Benzer bir ateşleme olayı HCCI'da meydana gelir. Ancak HCCI burada yöntem olarak teknik bir avantaja sahiptir. Benzinli motordaki ani ateşlemenin yerine HCCI motorda pistonla yapılan sıkıştırma işlemi yanmamış gazlar arasında yüksek basınç farklarının oluşumuna fırsat vermez ve maksimum basınca vuruntu olmaksızın ulaşılmasını mümkün kılar.

HCCI motorlarının yanma ve ısı tahliye oranlarını simüle etmek için ayrıntılı kimyasal indirgenme modelleri gerekir. Bunun nedeni ateşlemenin kimyasal kinetik hareketlere benzin ve dizel motorlara göre çok daha duyarlı olması ve türbülans/sprey veya kıvılcım (İng. Spark) modellerinin yetersiz kalmasıdır. Bir sonraki bölümde kimyasal kinetik indirgenmenin teorisine giriş yapılacak ve alev modelleme yöntemi üzerinde durulacaktır.

2.3 KİMYASAL KİNETİK MODELLER

Alev adı verilen fenomen, küçük ölçeklerde birçok kimyasal reaksiyonun konveksiyon ve moleküler difüzyon etkileşimleri sonucu ortaya çıkar. Bu etkileşimler Navier-Stokes denklemleri temelinde süreklilik, momentum, enerji ve kütle balansları ile izah edilebilir. Bilindiği üzere bu denklemler büyük ölçüde non-lineer diferansiyel denklemlerdir ve spesifik sayısal çözüm teknikleri gerektirmektedirler. Bu tip alev problemlerinin çözümü için gerekli 1-D modeller 1970'lerin başından beri geliştirilmektedir ve günümüzde gayet kabul edilebilir sonuçlar vermektedirler [27]. Bu yanma modellerinin paralelinde, hidrokarbon alevlerinin analizi için ihtiyaç duyulan detaylı kinetik mekanizmalar sürekli olarak iyileştirilmektedir ve sürekli olarak artan sayıda reaksiyon zincirini ve parçacığı içerecek şekilde genişlemektedir.

Örneğin propan türü yakıtların alev modellemesi için 30 adet kimyasal bileşen ve 100 reaksiyon zinciri içeren bir mekanizmanın yeterli kimyasal hassasiyette olduğu bilinmektedir. Ön karışım (İng. Premixed) alevlerin modellemesinde kullanılan temel denklemler aşağıdaki gibidir [27].

Denge denklemleri;

Süreklilik:

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \quad (9)$$

Kütle dengesi:

$$\rho u \frac{dY_i}{dx} = -\frac{dj_i}{dx} + \dot{m}_i \quad (10)$$

Enerji dengesi:

$$\rho u c_p \frac{dy}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \sum_{i=1}^n h_i \dot{m}_i - \sum_{i=1}^n c_p j_i \frac{dT}{dx} \quad (11)$$

Süreklilik denklemiyle entegre edildiğinde:

$$\rho u = \rho_u S_L \quad (12)$$

Burada u indisi, taze, yanmamış karışımdaki koşulları betimlerken s_L ise yanma hızını gösterir. s_L bir özdeğerdir (İng. Eigenvalue), ve çözümün bir parçası olarak belirlenmelidir. Düşük Mach sayısı akışları kabulüyle basınç sabit bir değer olarak kabul edilmiştir.

2.3.2 PROPAN KOMPLEKSİTESİNDEKİ HİDROKARBONLARI KAPSAYACAK ÖRNEK BİR KİNETİK MEKANİZMA

Kompleksiteleri Propan düzeyine kadar olan hidrokarbonları modelleyebilecek örnek bir kinetik mekanizma Tablo 1'de görülebilir. Daha kompleks yakıtlar (örneğin bu çalışmanın konusu olan toluene veya heptane) için daha kapsamlı reaksiyonları içeren ve daha ayrıntılı mekanizmalar bir sonraki bölümde değinileceği üzere mevcuttur. Bu örnek yalnızca bir zincirleme reaksiyonun kinetik modelinin anlaşılması için propan üzerinden literatürde yer alan bir kaynaktan alınmıştır [27].

Tablo-1: Propan için örnek kinetik indirgenme mekanizması

Nr.	Reaksiyon	A mol, cm ³ , s	n	E kJ/mol
1.1 H ₂ /O ₂ Zincir Reaksiyonları				
1f	$O_2 + H \rightarrow OH + H$	2.000E+14	0.00	70.30
1b	$OH + O \rightarrow O_2 + H$	1.568E+13	0.00	3.52
2f	$H_2 + O \rightarrow OH + H$	5.060E+04	2.67	26.30
2b	$OH + H \rightarrow H_2 + O$	2.222E+04	2.67	18.29
3f	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$	1.000E+08	1.60	13.80
3b	$H_2O + H \rightarrow H_2 + OH$	4.312E+08	1.60	76.46
4f	$OH + OH \rightarrow H_2O + O$	1.500E+09	1.14	0.42
4b	$H_2O + O \rightarrow OH + OH$	1.473E+10	1.14	71.09
1.2 H ₂ O Oluşumu ve Tüketimi				
5f	$O_2 + H + M' \rightarrow H_2O + M'$	2.300E+18	-0.80	0.00
5b	$HO_2 + M' \rightarrow O_2 + H + M'$	3.190E+18	-0.80	195.39
6	$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	1.500E+14	0.00	4.20
7	$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	2.500E+13	0.00	2.90
8	$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	6.000E+13	0.00	0.00
9	$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$	3.000E+13	0.00	7.20
10	$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$	1.800E+13	0.00	-1.70
1.3 H ₂ O ₂ Oluşumu ve Tüketimi				
11	$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	2.500E+11	0.00	-5.20

12f	$OH + OH + M' \rightarrow H_2O_2 + M'$	3.250E+22	-2.00	0.00
12b	$H_2O_2 + M' \rightarrow OH + OH + M'$	1.692E+24	-2.00	202.29
13	$H_2O_2 + H \rightarrow H_2O + OH$	1.000E+13	0.00	15.00
14f	$H_2O_2 + OH \rightarrow H_2O + HO_2$	5.400E+12	0.00	4.20
14b	$H_2O + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + OH$	1.802E+13	0.00	134.75
1.4 Yeniden Birleşme Reaksiyonları				
15	$H + H + M' \rightarrow H_2 + M'$	1.800E+18	-1.00	0.00
16	$OH + H + M' \rightarrow H_2O + M'$	2.200E+22	-2.00	0.00
17	$O + O + M' \rightarrow O_2 + M'$	2.900E+17	-1.00	0.00
2. CO/CO ₂ Mekanizması				
18f	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	4.400E+06	1.50	-3.10
18b	$CO_2 + H \rightarrow CO + OH$	4.956E+08	1.50	89.76
3.1 CH Tüketimi				
19	$CH + O_2 \rightarrow CHO + O$	3.000E+13	0.00	0.00
20	$CO_2 + CH \rightarrow CHO + CO$	3.400E+12	0.00	2.90
3.2 CHO Tüketimi				
21	$CHO + H \rightarrow CO + H_2$	2.000E+14	0.00	0.00
22	$CHO + OH \rightarrow CO + H_2O$	1.000E+14	0.00	0.00
23	$CHO + O_2 \rightarrow CO + HO_2$	3.000E+12	0.00	0.00
24f	$CHO + M' \rightarrow CO + H + M'$	7.100E+14	0.00	70.30
24b	$CO + H + M' \rightarrow CHO + M'$	1.136E+15	0.00	9.97
3.3 CH ₂ Tüketimi				
25f	$CH_2 + H \rightarrow CH + H_2$	8.400E+09	1.50	1.40
25b	$CH + H_2 \rightarrow CH_2 + H$	5.830E+09	1.50	13.08
26	$CH_2 + O \rightarrow CO + H + H$	8.000E+13	0.00	0.00
27	$CH_2 + O_2 \rightarrow CO + OH + H$	6.500E+12	0.00	6.30
28	$CH_2 + O_2 \rightarrow CO_2 + H + H$	6.500E+12	0.00	6.30
3.4 CH ₂ O Tüketimi				
29	$CH_2O + H \rightarrow CHO + H_2$	2.500E+13	0.00	16.70
30	$CH_2O + O \rightarrow CHO + OH$	3.500E+13	0.00	14.60
31	$CH_2O + OH \rightarrow CHO + H_2O$	3.000E+13	0.00	5.00
32	$CH_2O + M' \rightarrow CHO + H + M'$	1.400E+17	0.00	320.00
3.5 CH ₃ Tüketimi				
33f	$CH_3 + H \rightarrow CH_2 + H_2$	1.800E+14	0.00	63.00
33b	$CH_2 + H_2 \rightarrow CH_3 + H$	3.680E+13	0.00	44.30
34	$CH_3 + H \rightarrow CH_4$	k_{∞}	2.108E+14	0.00
		k_0	6.257E+23	-1.80
35	$CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	7.000E+13	0.00	0.00

36	$CH_3 + CH_3 \rightarrow C_2H_6$	k_{∞} k_0	3.613E+13 1.270E+41	0.00 -7.00	0.00 11.56
37	$CH_3 + O_2 \rightarrow CH_2O + OH$		3.400E+11	0.00	37.40
38f	$CH_4 + H \rightarrow CH_3 + H_2$		2.200E+04	3.00	36.60
38b	$CH_3 + H_2 \rightarrow CH_4 + H$		8.391E+02	3.00	34.56
39	$CH_4 + O \rightarrow CH_3 + OH$		1.200E+07	2.10	31.90
40f	$CH_4 + OH \rightarrow CH_3 + H_2O$		1.600E+06	2.10	10.30
40b	$CH_3 + H_2O \rightarrow CH_4 + OH$		2.631E+05	2.10	70.92
4.1 C ₂ H Tüketimi					
41f	$C_2H + H_2 \rightarrow C_2H_2 + H$		1.100E+13	0.00	12.00
41b	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H + H_2$		5.270E+13	0.00	119.95
42	$C_2H + O_2 \rightarrow CHCO + O$		5.000E+13	0.00	6.30
4.2 CHCO Tüketimi					
43f	$CHCO + H \rightarrow CH_2 + CO$		3.000E+13	0.00	0.00
43b	$CH_2 + CO \rightarrow CHCO + H$		2.361E+12	0.00	-29.39
44	$CHCO + O \rightarrow CO + CO + H$		1.000E+14	0.00	0.00
4.3 C ₂ H ₂ Tüketimi					
45	$C_2H_2 + O \rightarrow CH_2 + CO$		4.100E+08	1.50	7.10
46	$C_2H_2 + O \rightarrow CHCO + H$		4.300E+ 14	0.00	50.70
47f	$C_2H_2 + OH \rightarrow C_2H + H_2O$		1.000E-1-13	0.00	29.30
47b	$C_2H + H_2O \rightarrow C_2H_2 + OH$		9.000E+12	0.00	-15.98
48	$C_2H_2 + CH \rightarrow C_3H_3$		2.100E+14	0.00	-0.50
4.4 C ₂ H ₃ Tüketimi					
49	$C_2H_3 + H \rightarrow C_2H_2 + H_2$		3.000E+13	0.00	0.00
50	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow C_2H_2 + HO_2$		5.400E+11	0.00	0.00
51f	$C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H$	k_{∞} k_0	2.000E+14 1.187E+42	0.00 -7.50	166.29 190.40
51b	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H_3$	k_{∞}	1.053E+14	0.00	3.39
4.5 C ₂ H ₄ Tüketimi					
52f	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_3 + H_2$		1.500E+14	0.00	42.70
52b	$C_2H_3 + H_2 \rightarrow C_2H_4 + H$		9.605E+12	0.00	32.64
53	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_3 + CO + H$		1.600E+09	1.20	3.10
54f	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$		3.000E+13	0.00	12.60
54b	$C_2H_3 + H_2O \rightarrow C_2H_4 + OH$		8.283E+12	0.00	65.20
55	$C_2H_4 + M' \rightarrow C_2H_2 + H_2 + M'$		2.500E+17	0.00	319.80
4.6 C ₂ H ₅ Tüketimi					
56f	$C_2H_5 + H \rightarrow CH_3 + CH_3$		3.000E+13	0.00	0.00
56b	$CH_3 + CH_3 \rightarrow C_2H_5 + H$		3.547E+12	0.00	49.68
57	$C_2H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_4 + HO_2$		2.000E+12	0.00	20.90

58f	$C_2H_5 \rightarrow C_2H_4 + H$	k_{∞}	2.000E+13	0.00	166.00
		k_0	1.000E+17	0.00	130.00
58b	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_5$	k_{∞}	3.189E+13	0.00	12.61
4.7 C ₂ H ₆ Tüketimi					
59	$C_2H_6 + H \rightarrow C_2H_5 + H_2$		5.400E+02	3.50	21.80
60	$C_2H_6 + O \rightarrow C_2H_5 + OH$		3.000E+07	2.00	21.40
61	$C_2H_6 + OH \rightarrow C_2H_5 + H_2O$		6.300E106	2.00	2.70
5.1 C ₃ H ₃ Tüketimi					
62	$C_3H_3 + O_2 \rightarrow CHCO + CH_2O$		6.000E+12	0.00	0.00
63	$C_3H_3 + O \rightarrow C_2H_3 + CO$		3.800E+13	0.00	0.00
64f	$C_3H_4 \rightarrow C_3H_3 + H$		5.000E+14	0.00	370.00
64b	$C_3H_3 + H \rightarrow C_3H_4$		1.700E+13	0.00	19.88
5.2 C ₃ H ₄ Tüketimi					
65	$C_3H_4 + O \rightarrow C_2H_2 + CH_2O$		1.000E-1-12	0.00	0.00
66	$C_3H_4 + O \rightarrow C_2H_3 + CHO$		1.000E+12	0.00	0.0\$
67	$C_3H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + CH_2O$		1.000E+12	0.00	0.00
68	$C_3H_4 + OH \rightarrow C_2H_4 + CHO$		1.000E+12	0.00	0.00
5.3 C ₃ H ⁵ Tüketimi					
69f	$C_3H_5 \rightarrow C_3H_4 + H$		3.980E+13	0.00	293.10
69b	$C_3H_4 + H \rightarrow C_3H_5$		1.267E+13	0.00	32.48
70	$C_3H_5 + H \rightarrow C_3H_4 + H_2$		1.000E+13	0.00	0.00
5.4 C ₃ H ₆ Tüketimi					
71f	$C_3H_6 \rightarrow C_2H_3 + CH_3$		3.150E+15	0.00	359.30
71b	$C_2H_3 + CH_3 \rightarrow C_3H_6$		2.511E+12	0.00	-34.69
72	$C_3H_6 + H \rightarrow C_3H_5 + H_2$		5.000E+12	0.00	6.30
5.5 C ₃ H ₇ Tüketimi					
73	$n-C_3H_7 \rightarrow C_2H_4 + CH_3$		9.600E+13	0.00	129.80
74f	$n-C_3H_7 \rightarrow C_3H_6 + H$		1.250E+14	0.00	154.90
74b	$C_3H_6 + H \rightarrow n-C_3H_7$		4.609E+14	0.00	21.49
75	$i-C_3H_7 \rightarrow C_2H_4 + CH_3$		6.300E+13	0.00	154.50
76	$i-C_3H_7 + O_2 \rightarrow C_3H_6 + HO_2$		1.000E+12	0.00	20.90
5.6 C ₃ H ₈ Tüketimi					
77	$C_3H_8 + H \rightarrow n-C_3H_7 + H_2$		1.300E+14	0.00	40.60
78	$C_3H_8 + H \rightarrow i-C_3H_7 + H_2$		1.000E+14	0.00	34.90
79	$C_3H_8 + O \rightarrow n-C_3H_7 + OH$		3.000E+13	0.00	24.10
80	$C_3H_8 + O \rightarrow i-C_3H_7 + OH$		2.600E+13	0.00	18.70
81	$C_3H_8 + H \rightarrow n-C_3H_7 + H_2O$		3.700E+12	0.00	6.90
82	$C_3H_8 + H \rightarrow i-C_3H_7 + H_2O$		2.800E+12	0.00	3.60
6.1 CH ₂ OH Tüketimi					

83	$CH_2OH + H \rightarrow CH_2O + H_2$	3.000E+13	0.00	0.00
84	$CH_2OH + O_2 \rightarrow CH_2O + HO_2$	1.000E+13	0.00	30.10
85	$CH_2OH + M' \rightarrow CH_2O + H + M'$	1.000E+14	0.00	105.10
6.2 CH ₃ OH Tüketimi				
86	$CH_3OH + H \rightarrow CH_2OH + H_2$	4.000E+13	0.00	25.50
87	$CH_3OH + OH \rightarrow CH_2OH + H_2O$	1.000E+13	0.00	7.10

$$[M'] = 6.5[CH_4] + 6.5[H_2O] + 1.5[CO_2] + 0.75[CO] + 0.4[O_2] + 0.4[N_2] + 1.0[Diğer]$$

Bu tabloda A değerleri reaksiyonun gerçekleşmesi için öngörülen frekans faktörünü, n değerleri üstel sıcaklık katsayısını, E değerleri ise ilgili reaksiyonun aktivasyon enerjisini temsil etmektedir.

2.3.3 DİĞER BAZI KİNETİK MEKANİZMALAR

Reitz ve ark. tarafından dizel ve n-heptan / tolüen yakıtların yanma döngüsünü ve poliaromatik hidrokarbon üretimini modellemek için bir kimyasal reaksiyon yöntemi geliştirilmiştir. Bu yöntem, HCCI yanmasında tutuşma gecikmesi (İng. Ignition Delay) üzerine deneysel verilerle test edilmiştir [28]. Huang ve diğ. [29], n-bütüldenzen (BBZ) için kapsamlı bir mekanizma ve n-heptan-PAH için daha önce indirgenmiş bir mekanizma temelinde geliştirilen başka bir poliaromatik hidrokarbon (PAH) mekanizması önermiştir. Bu mekanizma bir HCCI motorunda değil, doğrudan enjeksiyonlu tip bir sıkıştırılmalı motorda valide edilmiştir.

Wang ve ark. tarafından, yanma, PAH ve kurum üretimi tahminleri için, indirgenmiş tolüen referans yakıtla (TRF, n-heptan, izo-oktan ve tolüen) 109 çeşit ve 543 reaksiyon içeren polisiklik-aromatik hidrokarbon (PAH) indirgeme mekanizması önerilmektedir. Bu mekanizma ayrıca HCCI motorlarında yanma ve emisyon değerleriyle valide edilmiştir. Toluene varlığı, PAH ve kurum oluşumuna ciddi katkı sağlamaktadır [30].

Chen ve diğ. [31] 5 bileşenli bir benzin vekil yakıtı içeren indirgenmiş kimyasal mekanizma önermişlerdir. Bu aslen GCI tip bir motorda ısı salınım doğası üzerine bir çalışmadır. Benzin Sıkıştırma Ateşlemesi (GCI) aslen, vuruş eğilimini artırmadan maksimum basınç artış oranını (MPRR) azaltabilen ve HCCI'a göre yanma fazını daha iyi kontrol edebilen bir motor tasarımıdır. Hernandez ve diğ. [32] veya Zhang ve diğ. [33] tarafından önerilen mekanizmalar da dikkatle incelenmiş ve daha ileri çalışmalar için aday olabilecek şekilde tasnif edilmişlerdir.

Coşkun ve diğ. [34] daha önce farklı lambda (λ) değerleri için toluen referans yakıtı kullanan bir HCCI motor yanmasının analizini yapmış ve deneysel verileri CFD ve SRM simülasyonları ile karşılaştırmışlardır. Bu çalışmada kullanılan indirgeme mekanizmaları Hatim ve ark. [35] ve Andrae ve ark. [36] tarafından önerilen kapsamlı mekanizmalardır.

Tablo-2, söz konusu mekanizmalardan bu çalışma kapsamında kullanılacak olanları parçacık sayısı ve reaksiyon sayıları, validasyon sıcaklıkları ve basınç aralıkları bakımından özetlemektedir:

Tablo-2: Çalışma kapsamında kullanılan kinetik indirgenme mekanizmaları

İlgili Çalışma	Parçacık Sayısı	Reaksiyon Sayısı	T (K)	P (bar)
Reitz ve diğ. [28]	71	360	700-1450	1-50
Wang ve diğ. [30]	109	543	700-1450	1-50
Chen ve diğ. [31]	1393	5976	750-1100	10-80
Huang ve diğ. [29]	111	542	700-1400	1-50

3. MALZEME VE YÖNTEM

Bu tez kapsamındaki çalışma, HCCI bir motor için ANSYS simülasyon yazılımının Forte ICE modülü kullanılarak yapılan nümerik yanma modellemesini ve buradan alınan sonuçların gerçek bir HCCI motorun TRF79 vekil yakıt için elde edilen deneysel verileriyle karşılaştırılmasını içermektedir. Bu bölümde kısaca deney şartlarından ve uygulanan sayısal yöntemden bahsedilecektir.

3.1 DENEY DÜZENEGİ

Deney sonuçları, İngiltere'deki Shell Laboratuvarı'ndaki tek silindirli Ricardo Hydra tipi test motorlu [34] 'te detayları verilen test düzeneğinden elde edilmiştir. Motorun teknik verileri Tablo-3'te yer almaktadır.

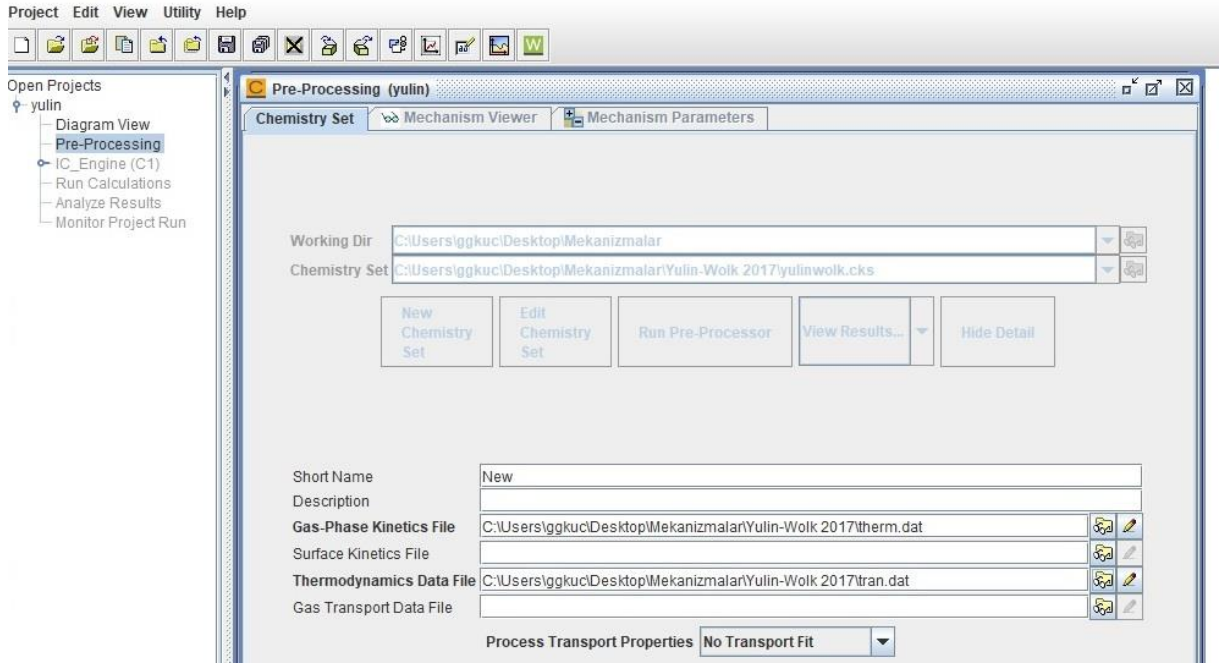
Tablo-3: Tek Silindirli Ricardo Hydra Motorunun Teknik Verileri

Parametre	Değer	Birim
Silindir Çapı	86	mm
Strok	86	mm
Biyel kol uzunluğu	143.5	mm
Sıkıştırma oranı	14.04	—
Devir hızı	1200	dev/dk
Valf sayısı	4	—
Emme valfi açılışı	340 BTDC	Krank açısı
Emme valfi kapanışı	108 BTDC	Krank açısı
Tahliye valfi açılışı	120 ATDC	Krank açısı
Tahliye valfi kapanışı	332 ATDC	Krank açısı

Deneysel düzende piston kafası manipüle edilerek sıkıştırma oranı 14.04'e ayarlanmıştır. Bu kurulumda farklı hava-yakıt karışım oranları test edilmesine rağmen, bu çalışma kapsamında TRF79 için $\lambda = 3.5$ oranı dikkate alınmıştır. Motor devir hızı stabilizasyon için 1200 rpm'de bırakılmıştır.

3.2 NÜMERİK YÖNTEM

Tablo-2’de verilen mekanizmaların kinetik ve termal dataları ilgili literatürde erişime açık olarak sunulmuştur [28-31]. Mekanizmaların yeniden oluşturulup kullanıma hazır hale getirilebilmesi için ANSYS’in kendi kimyasal mekanizma çözücü modülü olan Chemkin programı kullanılmıştır. İlgili mekanizmalar için alınan data dosyaları Chemkin modülünde örnek aşağıda gösterildiği üzere birleştirilerek mekanizma dosyaları (.cks file) oluşturulmuştur:

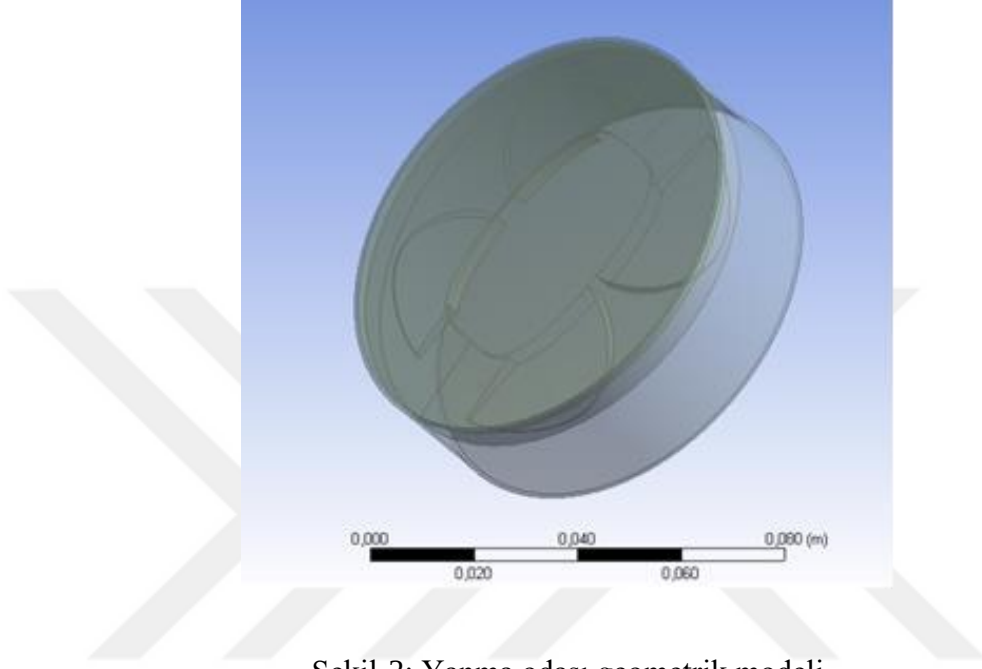


Şekil-2: Chemkin modülünde mekanizma dosyalarının oluşturulması

Kullanılacak tüm mekanizmalar için datalar birleştirilip cks dosyaları hazırlandıktan sonra bu program içerisinde HCCI bir motor için Tablo-3’te sunulan motor teknik verileri ve başlangıç ile sınır koşulları girilerek (IC Engine sekmesinde) tek boyutlu (1D) hesaplamalar da yapılarak mekanizma dosyasının çalışabilir halde olup olmadığı kontrol edilebilir.

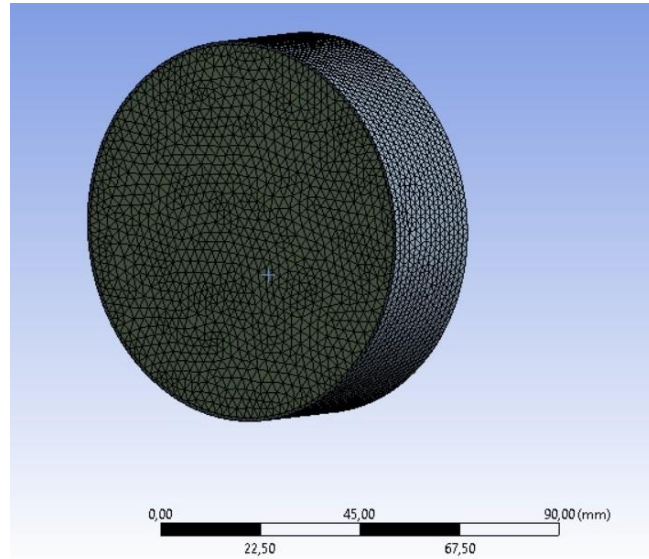
Bu çalışma 3 boyutlu bir yanma analizi olduğundan, ANSYS Workbench modülü kullanılarak mevcut yanma odası geometrisi üzerinden bir ön sonlu eleman ağ yapısı (İng. mesh) oluşturulacak, Forte modülünün ayarlar(setup) kısmında bu ağ yapısıyla taranmış geometride ağ yapısının özellikleri (sıcaklığa göre değişken (adaptive) mesh, sabit mesh gibi) tanımlanarak eleman büyüklüğü, sınır koşulları, başlangıç koşulları, yakıt kompozisyonu, kinetik model gibi tanımlamalar gerçekleştirilip simülasyon aşamasına geçilecektir.

Valf geometrileri çözüm dışında tutulmuştur, çünkü Forte zaten çözümü giriş valfi kapanma süresi ile çıkış valfi açılma süresi arasında simüle etmektedir, bir başka deyişle valf geometrilerinin sonuç üzerinde bir tesiri yoktur. Yanma odasının geometrik modeli Şekil 3'te sunulmaktadır:



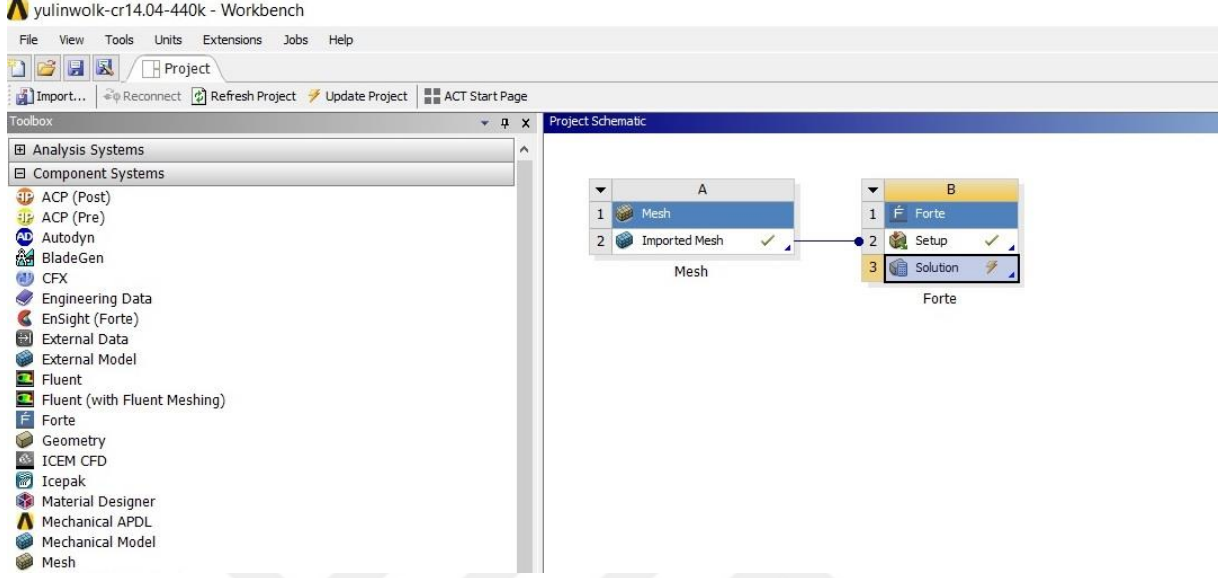
Şekil-3: Yanma odası geometrik modeli

Mevcut geometrik modele forte setup öncesi oluşturulan ön ağ yapısının görseli Şekil-4'te yer almaktadır:



Şekil-4: Quadratic sonlu elemanlarla oluşturulan ön ağ yapısı

Ön ağ yapısı oluşturulduktan sonra ANSYS Workbench proje dosyası aşağıdaki görünümü almaktadır:



Şekil-5: Setup öncesi ANSYS Workbench proje dosyası

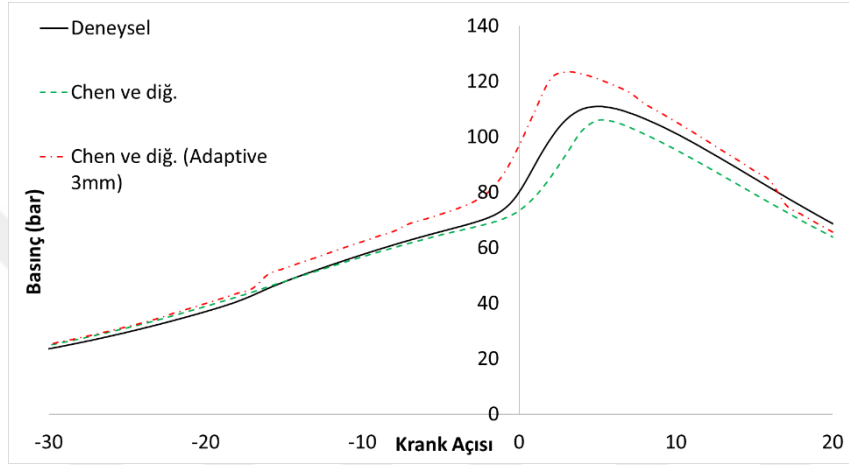
Geometri tanımlandıktan ve ön ağ yapısı oluşturulduktan sonra ANSYS Forte içten yanmalı motor çözüm modülünde yanmayı modellemek için gereken bütün parametreler tanımlanır. Başlangıç sınır koşulu olarak sistem sınırlarında (piston, duvar ve piston kafası) tüm sıcaklıklar 353 K olarak ayarlandı. Giriş valfi kapanma süresindeki basınç için ilk tahmin olarak 2.905 bar belirtildi. Reaksiyon başlangıç sıcaklığı için 380 K olarak literatürden elde edilen verilere göre ayarlanmıştır.

Elde edilen ilk sonuçlar, kullanılan kinetik mekanizmaların hiçbirinin bu koşullar altında deneysel sonuçlara yakınsamadığını göstermektedir. Buna göre, ilk sıcaklık tahmini kademeli olarak artırılmıştır. Bu koşullarda elde edilen sonuçlar, 440 K ($P = 2.905$ bar) tahminin yapılacak çalışmalar için uygun bir temel teşkil ettiğini göstermektedir.

Ağ yapısı için mevcut çalışmaya uygun iki seçenek bulunmaktadır. Birinci seçenek geometrinin her yerinde sabit ölçüdeki (constant mesh) ağ yapısı, ikinci seçenek ise geometrinin çeşitli noktalarında reaksiyon sıcaklığına göre değişkenlik gösteren (temperature adaptive mesh) ağ yapısıdır. Ağ yapısının sonuçlara etkisinin gözlenmesi bakımından, kullanılan mekanizmalar arasında en iyi yakınsadığı tespit edilen Chen ve diğ. [31] mekanizması

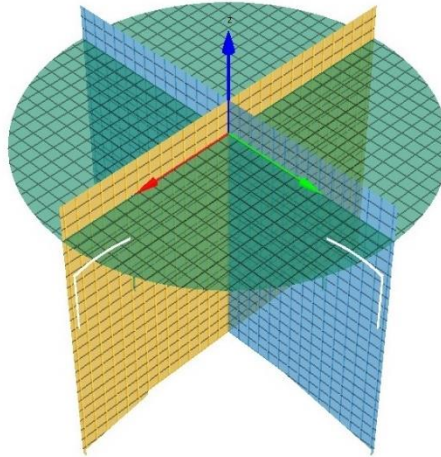
kullanılarak eşit büyüklükteki sonlu elemanlarla (3 mm) hem adaptive hem sabit ağ yapılı için çözümler yaptırılmıştır.

İkinci bölümde belirtildiği üzere HCCI motorda performans yanma odasında basınç gelişimi ve ısı tahliye oranı (HRR) üzerinden izlenmektedir. Adaptive ve sabit ağ yapısına sahip nümerik çözümlerin deneysel veriyle hızlı yanma (İng. Hot Combustion) bölgesindeki ilişkisi Şekil-6'da yer almaktadır.



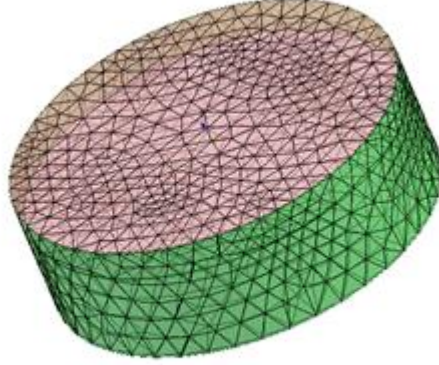
Şekil-6: Deneysel basınç verisinin, adaptive ve sabit ağ yapılı çözümlerle karşılaştırılması

Basınç gelişimi üzerinden görülebileceği üzere sabit meshli nümerik çözüm deneysel sonuçları bu sınır ve başlangıç koşullarında daha iyi temsil edebilmektedir. Dolayısıyla yapılan çözümlere sabit ağ yapısı kullanılarak devam edilmiştir. Sabit ağ yapısı kullanılarak taranan model görüntüsü Şekil-7'de yer almaktadır:



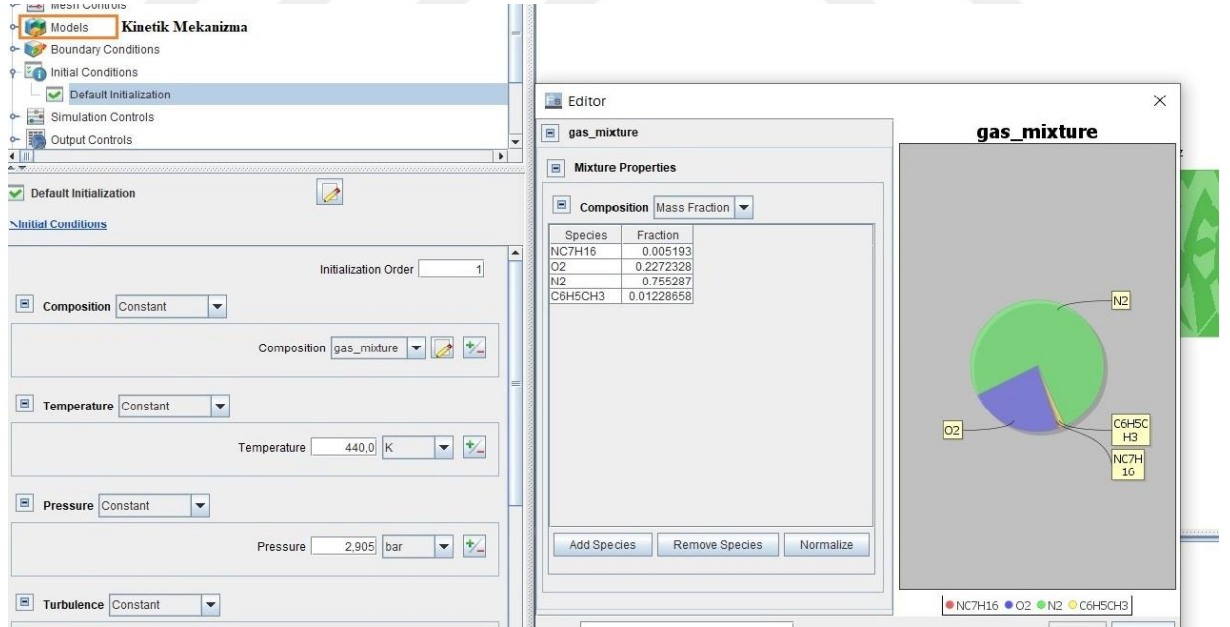
Şekil-7: Simülasyon öncesi modelin son ağ yapısı

Yanma odasının sabit ağ yapısıyla taranmış genel ağ görünümü Şekil-8'deki gibidir:



Şekil-8: Yanma odasının sabit ağ yapısıyla taranmış görüntüsü

Forte simülasyon öncesi ayar ekranında yakıtın kimyasal kompozisyonu ve başlangıç, sınır koşulları aşağıdaki gibi girilmektedir:

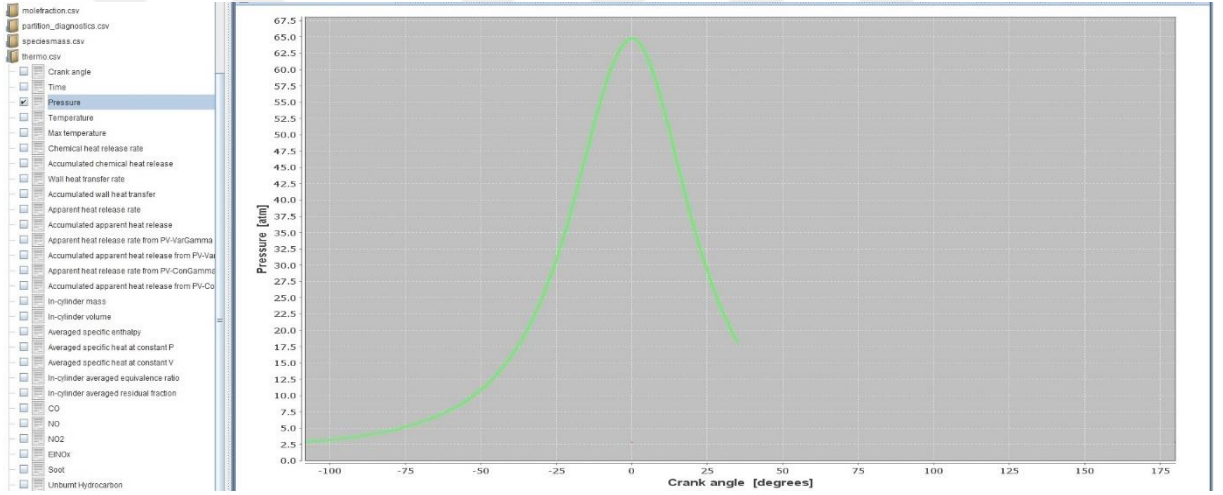


Şekil-9: Kimyasal kompozisyon, başlangıç ve sınır koşullarının girilmesi

Model sekmesinden ilgili alev modeli ve ona uygun kinetik model tanımlanmaktadır. Sınır ve başlangıç koşulları önceki bölümlerde belirtildiği üzere tanımlandıktan sonra simülasyona dair diğer ayarlar (sonuç görüntüleme vs.) yapılarak simülasyon başlatılır.

Tüm sonlu elemanlar yöntemlerinden bilindiği üzere daha sıkı bir ağ yapısı daha yüksek hassasiyet vaat etmekle beraber daha uzun simülasyon süreleri ve daha yüksek maliyet anlamına da gelmektedir. Sabit ağ yapısında sonlu eleman boyutunun sonuçlara etkisi üzerine bir çalışma da yapılmıştır. Sonuçlar bölümünde bu çalışma da ayrıntılarıyla tartışılacaktır.

Son olarak simülasyon esnasında sonuçların takibinin nasıl yapıldığı basınç gelişimi üzerinden Şekil-10'da yer almaktadır.

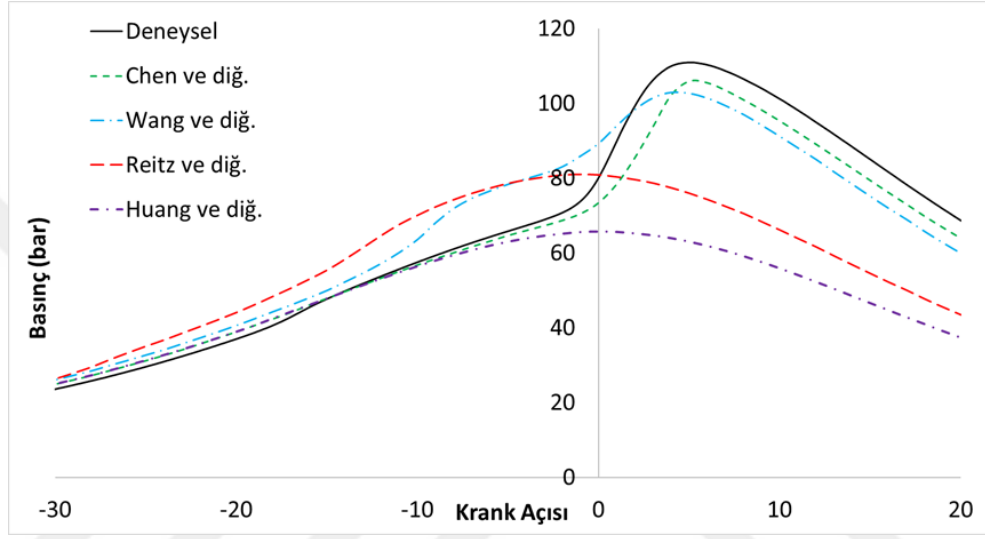


Şekil-10: ANSYS Forte modülünde sonuç görüntüleme

Sonuç görüntüleme aşamasında basınç gelişiminin yanı sıra ısı tahliye oranları, yanmamış hidrokarbon oranları, emisyon oranları gibi pek çok gösterge takip edilebilmektedir. Bulgular kısmında elde edilen sonuçların deneysel düzenden alınan sonuçlarla uyumluluğu tartışılacaktır.

4. BULGULAR

Başlangıçta belirtildiği üzere tüm çalışmalar TRF79 vekil yakıt için $\lambda = 3.5$ hava-yakıt karışım oranında yapılır. 3.1’de bahsedilen deney düzeneğinden toplanan veriler, silindir içi basınç, ısı tahliye oranı (HRR) ve partikül emisyonları açısından farklı kinetik indirgenme mekanizmalarından elde edilen sayısal sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

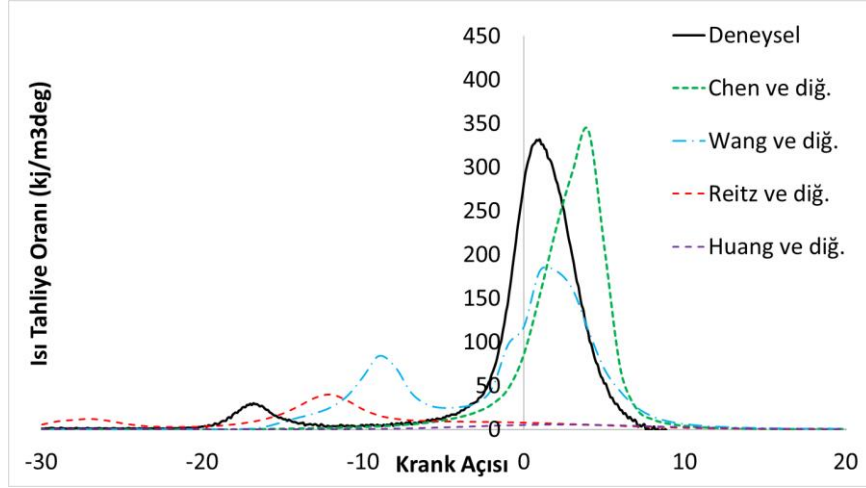


Şekil-11: Farklı kinetik indirgenme mekanizmaları için deneysel ve sayısal verilerin silindir içi basınç açısından karşılaştırılması

Şekil-11, sıcak yanma bölgesindeki deneysel ve sayısal verilerin silindir içi basınç açısından bir karşılaştırmasını göstermektedir.

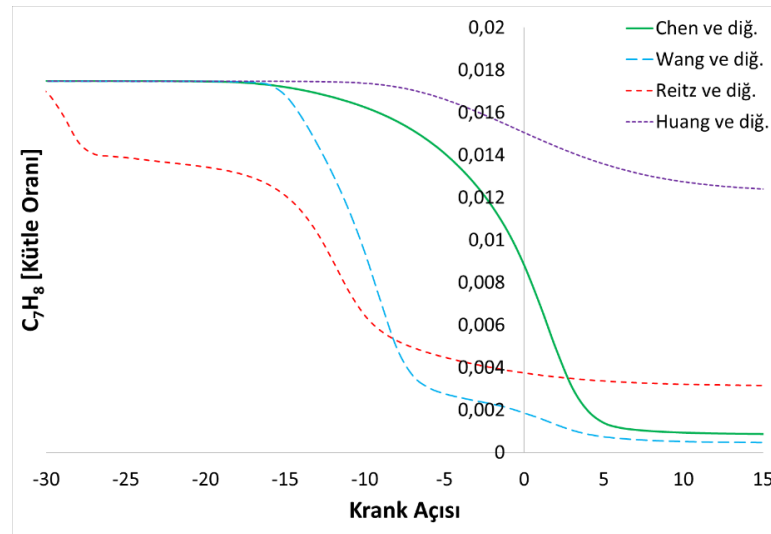
Bu sonuçlardan anlaşılacağı üzere, aynı sınır ve başlangıç koşulları (CR: 14.04, T_{in} : 440 K, P_{in} = 2.905 bar, T_{boun} =353 K), altında denenen dört farklı mekanizmadan Chen ve diğ. [31] ve Wang ve diğ. [30] deneysel verilerle daha uyumludur. Elbette basınç gelişimi tek gösterge kabul edilemeyeceğinden, ısı tahliye oranları (HRR), emisyonlar gibi göstergeler de ele alınarak incelenmiştir.

Şekil-12 ısı salınım oranları bakımından söz konusu dört mekanizmanın deneysel veriyle karşılaştırmasını göstermektedir:



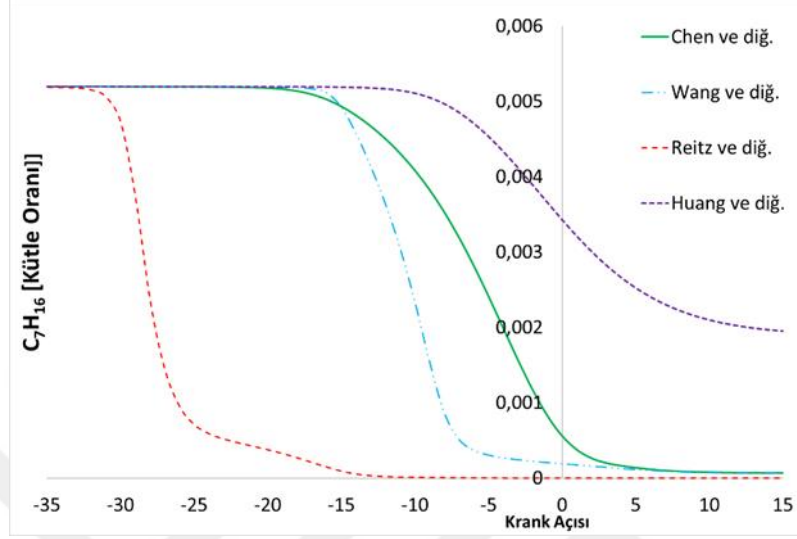
Şekil-12: Farklı kinetik indirgenme mekanizmaları için deneysel ve sayısal verilerin ısı salınım oranları açısından karşılaştırılması

Şekil-12 incelendiğinde, basınç verisinden farklı olarak sıcak yanma bölgesinde ısı tahliye oranları dikkate alındığında Chen ve diğ. [31] mekanizmasının daha da ön plana çıktığı görülmektedir. Chen ve diğ. [31] verili başlangıç ve sınır koşulları altında en uyumlu mekanizma olarak tespit edilmiştir. Buna uygun olarak bu mekanizmayla giriş sıcaklığının etkisini de irdeleyen bir “case study” yapılmıştır. En uygun mekanizmayla yapılan vaka çalışmalarına gelmeden önce farklı mekanizmalarla alınan emisyon değerleri sunulacaktır. Burada deney boyunca emisyonun gelişimiyle ilgili veri mevcut olmadığı için mekanizmalar kendi aralarında kıyaslanmıştır.



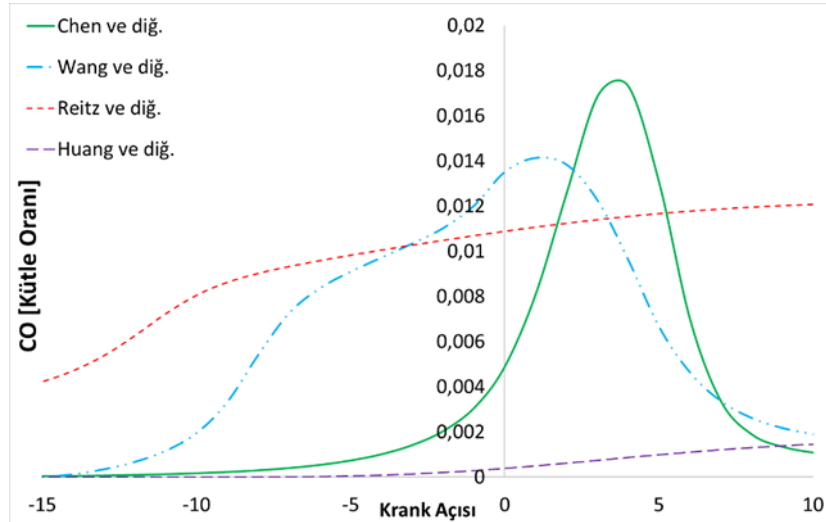
Şekil-13: $\lambda=3.5$ için TRF79 vekil yakıtta farklı indirgenme mekanizmalarıyla toluene (C_7H_8) tüketimi

Sıcak yanma bölgesinde motor krank açısına göre toluene tüketimi Şekil 13'te gösterilmiştir. Benzer şekilde, sıcak yanma bölgesindeki başka bir bileşenin (n-heptan) tüketimi Şekil 14'te gösterilmiştir:



Şekil-14: $\lambda=3.5$ için TRF79 vekil yakıtta farklı indirgenme mekanizmalarıyla n-heptan (C₇H₁₆) tüketimi

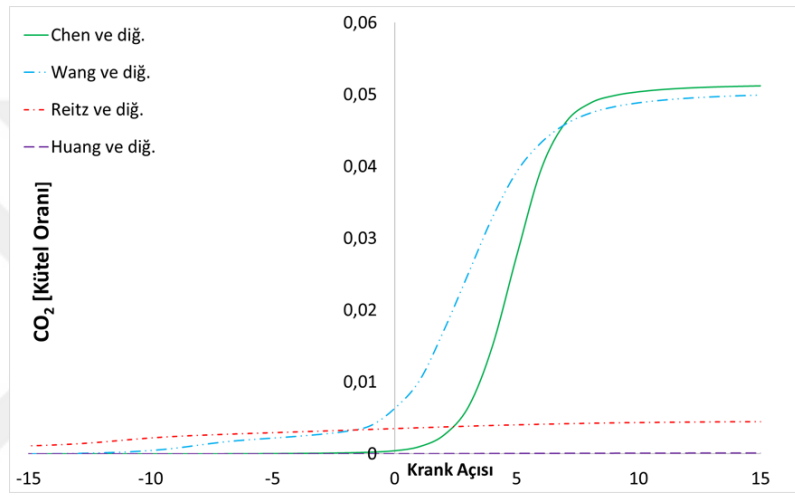
CO ve CO₂ gibi yanma sonucu oluşan partikül emisyonları da bu çalışma kapsamında izlenmiştir:



Şekil-15: Sıcak yanma bölgesinde farklı mekanizmalar için karbonmonoksit (CO) emisyonunun gelişimi

Şekil 15'te farklı mekanizmalar için CO emisyonlarının gelişimini gözlemlemek mümkündür. Daha önce belirtildiği gibi, HCCI yanması hızlı basınç değişikliklerine ve karbon-monoksit oluşumuna neden olan tamamlanamamış reaksiyonlara yol açmaktadır.

CO, deneysel sonuçlara göre yanma ürünlerinden % 0.14 pay almaktadır. Huang ve diğ. [28] mekanizmasını dikkatle incelediğimizde ise sıcak yanma bölgesinde CO emisyonu neredeyse görülmemektedir. Bu bulgu bu mekanizma için basınç ve ısı tahliye oranlarında deneysel veriyle görülen uyumsuzluğu desteklemektedir.



Şekil-16: Sıcak yanma bölgesinde farklı mekanizmalar için karbondioksit (CO₂) emisyonunun gelişimi

Şekil 16, sıcak yanma bölgesindeki CO₂ emisyonlarının gelişimini göstermektedir. CO emisyonlarına benzer şekilde Wang ve Chen diğ. mekanizmaları sıcak yanma bölgesinde benzer davranışlar gösterirken, Reitz ve Huang ve diğ. mekanizmaları ilgisiz bir gelişim sergilemektedir.

Tablo-4 farklı mekanizmalar için deneysel ve sayısal sonuçlar arasındaki ilişkiyi O₂, CO ve CO₂'nin nihai partikül emisyonları açısından göstermektedir. Partikül miktar gelişimi deneysel sonuçta mevcut olmasa da nihai partikül oranları deneysel düzenekte de izlenmiş durumdadır.

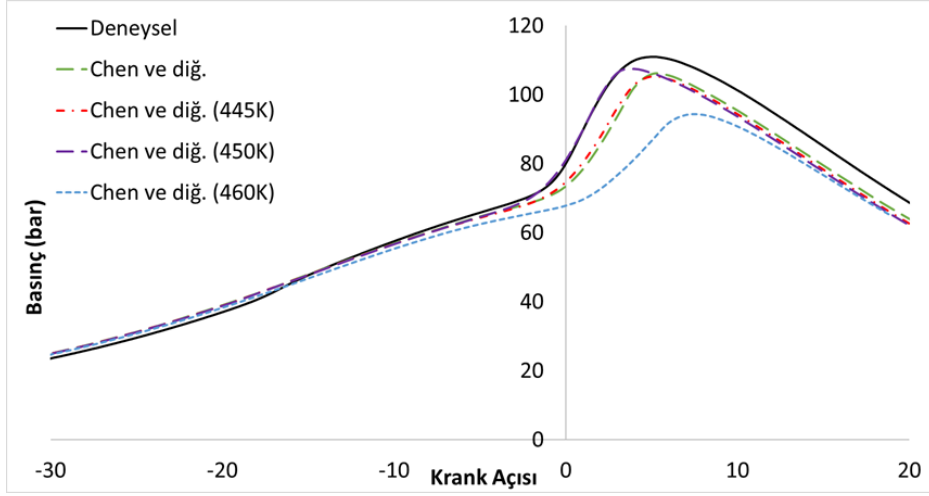
Tablo-4: Nihai partikül oranlarının deneysel ve nümerik olarak karşılaştırılması

	CO	CO2	O2
Deneysel	% 0.14	% 4.10	% 15.78
Chen ve diğ. [31]	% 0.08	% 5.16	% 17.51
Wang ve diğ. [30]	% 0.13	%5.04	%17.55
Reitz ve diğ. [28]	% 1.24	%0.46	%20.89
Hueng ve diğ.[29]	% 0.18	%0.01	%22.66

Verilen tüm sonuçları (Silindir basıncı gelişimi, HRR ve emisyon yüzdeleri) hesaba katarsak, Chen ve Wang ve ark. [30,31] mekanizmalarının bu başlangıç ve sınır koşulları altında sıcak yanma bölgesinde kabul edilebilir bir davranış gösterdiğini söylemek doğru olacaktır. Ancak gerek reaksiyon sayısı, gerek içerdiği partikül miktarı ve yansıttığı sonuçlar bakımından Chen ve diğ. [31] 5 komponentli bir vekil yakıt için önerdiği kinetik mekanizmanın deneysel sonuçlara en duyarlı mekanizma olduğu da aşıkardır.

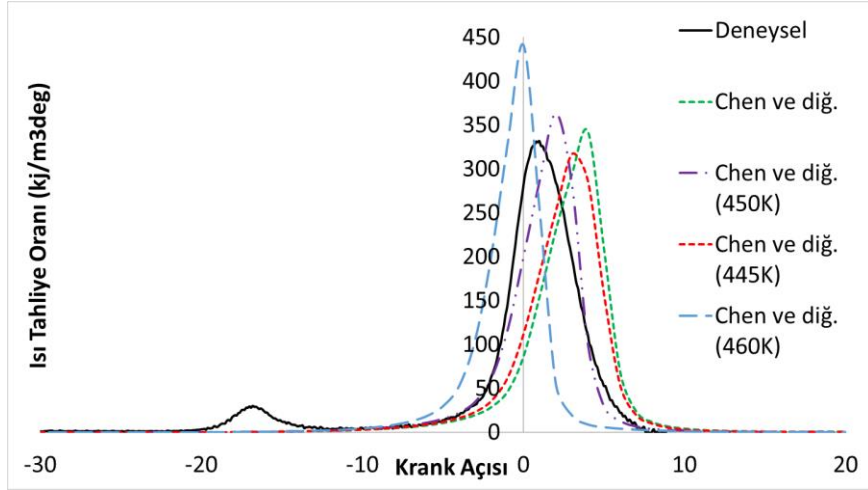
Bu bağlamda bu mekanizma için emme sıcaklığının etkisini irdelemek ve nümerik sonuçları deneyselle daha da yakınsatmanın imkanlarını araştırmak için bazı vaka çalışmaları (İng. Case Study) yapılmıştır.

İkinci bölümde belirtildiği üzere HCCI motorlar için reaksiyon başlangıç sıcaklığı çıktılar açısından ciddi önem arz etmektedir. Bu bağlamda giriş sıcaklığının etkisini görmek için tüm mekanizmalarda standart giriş sıcaklığı tahmini olarak kullanılan 440 K, Chen ve diğ [31] mekanizması için 460 K'e kadar yükseltilmiş ve sonuçlar deneysel çıktılarla karşılaştırılmıştır.



Şekil-17: Farklı giriş sıcaklıklarında Chen ve diğ. mekanizmasından alınan nümerik sonuçların deneysel basınç verisiyle karşılaştırılması

Şekil 17'de gösterildiği gibi, 450 K bu vaka çalışmasında önerilenler arasında en uygun giriş sıcaklığıdır, çünkü deneysel sonuca kıyasla en yakın sıcak yanma basıncı davranışını temsil etmektedir.



Şekil-18: Farklı giriş sıcaklıklarında Chen ve diğ. mekanizmasından alınan nümerik sonuçların deneysel ısı tahliye oranı değerleriyle karşılaştırılması

Farklı giriş sıcaklıklarındaki HRR sonuçları yine Chen ve diğ. [31] için Şekil 18'de sunulmaktadır. Bu sonuçlar da deneysel basınç verisiyle uyumlu görünmektedir. 450 K bu vaka çalışması kapsamında en uygun giriş sıcaklığı gibi görünmektedir.

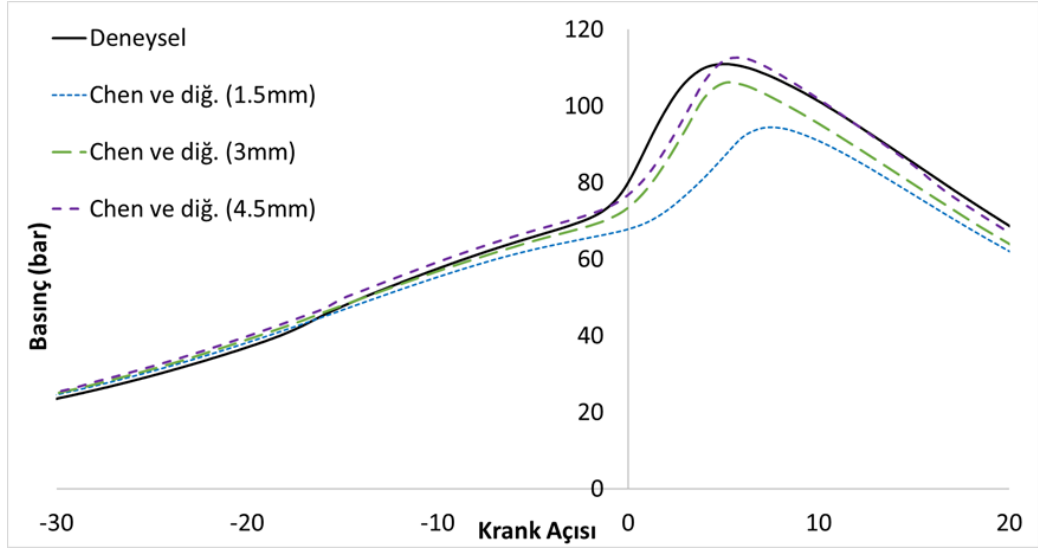
Tablo-5: Nihai partikül oranlarının 450 K giriş sıcaklığı içeren vaka çalışması için deneysel ve nümerik olarak karşılaştırılması

	CO	CO2	O2
Deneysel	% 0.14	% 4.10	% 15.78
Chen ve diğ. (450K)	% 0.09	% 5.20	%17.47

Tablo 5, deneysel sonuçlar ve vaka çalışması için CO, CO2 ve O2 emisyon yüzdelerini göstermektedir. Buna göre emme sıcaklığında yapılan ayarlama nümerik sonuçlarda CO ve O2 değerlerini bir miktar artırırken CO2 emisyonu yüzde 0,04 daha fazla sapmaktadır.

Giriş sıcaklığının etkisi daha az yakınsak konumdaki Reitz ve Huang mekanizmaları için de araştırılmıştır, ancak anlamlı bir değişiklik gözlemlenmemiştir.

Bu bölümde son olarak materyal ve metot bölümünde sözü edilen ağ eleman boyutunun sonuçlara etkisi irdelenecektir:



Şekil-19: Standart giriş ve sınır koşulları için Chen ve diğ mekanizmasında farklı mesh boyutlarının sonuçlara basınç gelişimi bakımından etkisi

Sonlu elemanlar metodunda genel olarak hacmi tarayan eleman sayısı arttıkça sonuçların kıyaslama yapılan noktaya yakınsaması beklenir. Ancak Şekil-18’de bu beklentinin tersine bir sonuç görülmektedir. En “kaba” mesh yapısıyla (4.5 mm) deneysel en yakın sonuçlar elde edilmiştir.

Yalnız bu veriye dayanarak hassasiyet konusunda bir çıkarsama yapmak elbette uygun olmaz. Diğer göstergeler de izlendiğinde deneysel sonuçlarla en tutarlı çıktıların 3 mm ağ yapısıyla elde edildiği görülmüştür. En ince ağ yapısı olan 1.5 mm yaklaşık 4 kat daha fazla hesaplama süresine mal olmasına rağmen temel kabul edilen 3 mm ağ yapısına göre deneysel sonuçlara daha yakın sonuçlar üretmemiştir. 0.75 mm eleman boyutu ile de bazı denemeler yapılmış ancak mal olduğu büyük analiz süresine rağmen sonuçlar sıcak yanma bölgesine ulaşmadan simülasyonlar ıraksama hataları vererek yarıda kesilmiştir. Buradan tüm analizler için baz kabul edilen sabit ağ 3 mm mesh yapısının mevcut denemeler içerisinde makul bir opsiyon olduğu bir kez daha anlaşılmaktadır.

Tüm sonuçlar genel olarak değerlendirildiğinde, Chen ve diğ [31] ve Wang ve diğ [30] kinetik mekanizmaları deneysel verilere genel bir uyum göstermektedir (özellikle Chen ve diğ. mekanizması). Bu sonucun bir nedeni şu olabilir; Chen ve diğ. [31] mekanizmasının valide edildiği şartlar bu çalışma kapsamındaki deney düzeneğine yakın bir HCCI düzeneği kullanmıştır. Wang ve diğ. mekanizmanın HCCI validasyonunda yine benzer koşullar kullanmıştır [30].

Bir başka potansiyel neden mekanizmaların vekil yakıt bileşimleri arasındaki farklılık olabilir. Chen ve diğ. [31] basit iki bileşenli vekil yakıtlardan çok daha fazla olası kimyasal indirgenme yolu (İng. Reduction pathway) içeren 5 bileşenli bir yakıt (yani C_7H_8 , $i-C_5H_{12}$, $i-C_8H_{18}$, $n-C_5H_{12}$, $n-C_7H_{16}$) önermektedir. Örneğin Reitz ve diğ. [28] mekanizması da bir HCCI motoruna karşı valide edilmiştir, fakat kullanılan yakıt bileşimi çok daha az aromatik bileşen içermektedir. (%80 n-heptane %20 toluene). Bu bileşim bu çalışma kapsamında kullanılan TRF79 yakıtının neredeyse tam tersi miktarları içermektedir. Toluene miktarının indirgeme mekanizmalarında PAH oluşumu (İng. polycyclic aromatic hydrocarbon) ve reaksiyon sonrası ürünlerde is/kurum oluşumlarında önemli bir rol oynadığına çeşitli çalışmalarda işaret edilmiştir [30].

Huang ve diğ. [29] mekanizması, vekil yakıtlarda aromatik bir temsilci olarak tolüene alternatif şekilde butilbenzen kullanımını (BBZ) önermektedir. Ancak yüksek toluene içerikli bir vekil yakıtın yanma simülasyonunda butilbenzen öneren bir mekanizmanın kullanımının sonuçları makul bir yere götürmediği verilerden açıkça görülebilmektedir.



5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışma kapsamında, kompozisyonu %79 tolüen ve %21 n-heptan'dan oluşan bir vekil yakıt (TRF79) kullanılarak, farklı HCCI yanma çıktıları üzerindeki etkilerini gözlemlemek için farklı kinetik indirgeme mekanizmaları karşılaştırılmıştır. Bu bağlamda deneysel bir HCCI yanmasını simüle etmek için farklı araştırmacılar tarafından önerilen dört farklı kimyasal indirgeme mekanizması kullanılmıştır ($\lambda = 3.5$ hava-yakıt oranı için).

Elde edilen sonuçlar şöyle özetlenebilir:

- Chen ve diğ. [31] ve Wang ve diğ. [30] mekanizmalarıyla yapılan simülasyonlar, verilen başlangıç ve sınır koşulları altında deneysel verilerle kabul edilebilir bir uyumluluk göstermektedir.
- Mekanizmanın içerdiği parçacık/partikül ve kimyasal reaksiyonların sayısı, o mekanizmanın temsil davranışı üzerinde etkili olmaktadır. En uyumlu kabul edilen Chen ve diğ. [31] diğerlerinden çok daha fazla parçacık ve olası reaksiyon içerir. Bu mekanizmanın uygulanabilir basınç aralığı da daha geniştir ve bu da yüksek basınçlı (sıcak yanma) bölgelerde daha iyi bir uyuma neden olabilir.
- Mekanizmalarda önerilen vekil yakıtın bileşimi, kimyasal indirgeme davranışı üzerinde belirleyici bir rol oynar. Benzer içeriklere sahip yakıtlar, benzer kimyasal indirgenme yollarından geçecektir.
- Yapılarında daha fazla tolüen içeren mekanizmalar deneysel olarak kullanılan TRF79'a daha yakın sonuçlar elde etmektedir.
- 450 K giriş sıcaklığı, Chen ve ark. [31] için yapılan vaka çalışmasında en uygun giriş sıcaklığı olarak belirlenmiştir.
- Kinetik mekanizmanın doğrulama/validasyon metodolojisinin de (HCCI, tutuşma gecikmesi (İng. Ignition Delay), DI vb.) ilgili mekanizmanın deneysel veriye uyumluluğu üzerinde önemli bir etkisi olabilmektedir.
- Örneğin bu çalışmada daha iyi sonuçlar alan iki mekanizma HCCI motorda valide edilmişken, en kötü sonuçları veren Huang ve diğ [29] HCCI motorlarda valide edilmemiş bir mekanizmadır. Reitz mekanizması ise HCCI ile doğrulanmış olmasına rağmen içerdiği olası reaksiyon ve partikül sayısı bakımından geride kalmış olabilir.

Ayrıca bu mekanizmanın kullandığı vekil yakıt kimyasal kompozisyonu da deneysel yakıt kompozisyonuyla uyumsuzdur.

- Sabit boyutlu ağ yapısına kıyasla sıcaklığa göre adaptive/uyarlanabilir ağ yapısı hesaplama süresini ve buna bağlı olarak hesaplama maliyetlerini arttırırken deneysel sonuçlara herhangi bir ekstra yakınsama sağlamamıştır.

Uygun bir yakıt kompozisyonu yeterince geniş bir olası indirgenme reaksiyonu ve partikül sayısı ile birleştiğinde nümerik yöntemle analizin deneysel sonuçları oldukça iyi bir şekilde temsil edebildiği bu çalışmada ortaya konmuştur. Mekanizmanın çalışma aralıklarının (sıcaklık, basınç), validasyon yöntemlerinin de deneysel sonuçlara uyum bakımından önemli olduğu anlaşılmıştır.

Bu alanda gelecek dönemde yapılacak çalışmalar daha farklı kimyasal indirgenme mekanizmalarıyla farklı tip yanma fenomenlerinin analizi üzerine olabilir. HCCI tip bir motorun yanı sıra direk enjeksiyon (DI) tipi sistemler üzerine de bu tip çalışmalar yürütülebilir. Daha geniş çalışma aralıklarına ve farklı tip yakıtlara hitap eden indirgenme mekanizmalarının türetilmeye devam etmesiyle beraber bu alandaki çalışmalar ivme kazanmaya devam edecektir.

KAYNAKLAR

- [1] Schmidt-Rohr, K (2015). Why Combustions Are Always Exothermic, Yielding About 418 kJ per Mole of O₂. *J. Chem. Educ.* **92** (12): 2094–2099.
- [2] Hairuddin, Abdul Aziz & Wandel, Andrew & Yusaf, T.F.. (2013). An Introduction to a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine. *J. Mech Eng. And Sciences*.
- [3] College of Engineering @ The University of Wisconsin-Madison (2010), initiatives in energy, health, nanotechnology, security, and information technology.
- [4] Zhao, Fuquan; Asmus, Thomas W.; Assanis, Dennis N.; Dec, John E.; Eng, James A.; Najt, Paul M. (2003). Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines: Key Research and Development Issues. Warrendale, PA, USA: Society of Automotive Engineers. pp. 11–12. ISBN 0-7680-1123-X.
- [5] Warnatz, Jürgen; Maas, Ulrich; Dibble, Robert W. (2006). Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation (4th ed.). Berlin, Germany: Springer. pp. 175–176. ISBN 3-540-25992-9.
- [6] Dec, John E.; Epping, Kathy; Aceves, Salvador M.; Bechtold, Richard L. (2002). "The Potential of HCCI Combustion for High Efficiency and Low Emissions". Society of Automotive Engineers. 2002-01-1923.
- [7] Baumgarten, Carsten (2006). Mixture Formation in Internal Combustion Engines: Mixture Formation in Internal Combustion Engines. Birkhäuser. pp. 263–264. ISBN 3-540-30835-0.
- [8] Blom, Daniel; Karlsson, Maria; Ekholm, Kent; Tunestål, Per; Johansson, Rolf (2008). "HCCI Engine Modeling and Control using Conservation Principles". SAE Technical Paper 2008-01-0789. SAE Technical Paper Series. doi:10.4271/2008-01-0789.
- [9] Stanglmaier, Rudolf H.; Roberts, Charles E. (1999). "Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI): Benefits, Compromises, and Future Engine Applications". SAE Technical Paper 1999-01-3682. SAE Technical Paper Series. doi:10.4271/1999-01-3682.

- [10] Aceves, Salvador M.; Flowers, Daniel L.; Espinosa-Loza, Francisco; Martinez-Frias, Joel; Dec, John E.; Sjöberg, Magnus; Dibble, Robert W.; Hessel, Randy P. (2004). "Spatial Analysis of Emissions Sources for HCCI Combustion at Low Loads Using a Multi-Zone Model". SAE Technical Paper 2004-01-1910. SAE Technical Paper Series. doi:10.4271/2004-01-1910.
- [11] Peter Gerigk, Detlev Bruhn, Dietmar Danner: Kraftfahrzeugtechnik. 3. Auflage, Westermann Schulbuchverlag GmbH, Braunschweig 2000, ISBN 3-14-221500-X.
- [12] "High Compression!". Popular Science. Bonnier Corporation. 154: 166–172. January 1949. ISSN 0161-7370. Retrieved 14 July 2019.
- [13] Haraldsson, Goran; Hyvonen, Jari; Tunestal, Per; Johansson, Bengt (2002). "HCCI Combustion Phasing in a Multi Cylinder Engine Using Variable Compression Ratio". SAE Technical Paper 2002-01-2858. SAE Technical Paper Series. doi:10.4271/2002-01-2858.
- [14] Aceves, S. M.; Smith, J. R.; Westbrook, C. K.; Pitz, W. J. (1999). "Compression ratio effect on methane HCCI combustion". Journal of Engineering for Gas Turbines and Power. 121(3): 569–574. doi:10.1115/1.2818510.
- [15] Flowers, Daniel L.; S. M. Aceves; J. Martinez-Frias; J. R. Smith; M. Y. Au; J. W. Girard; R. W. Dibble (2001). "Operation of a four-cylinder 1.9 l propane-fueled homogeneous charge compression ignition engine: Basic operating characteristics and cylinder-to-cylinder effects". Society of Automotive Engineers. 2001-01-1895.
- [16] Haraldsson, Goran; Jari Hyvonen; Per Tunestal; Bengt Johansson (2004). "HCCI Closed-Loop Combustion Control Using Fast Thermal Management". Society of Automotive Engineers. 2004-01-0943.
- [17] Controlling Heat Release Using Advanced Fuels, 2011, Wayback Machine.
- [18] Smallbone, Andrew; Amit Bhave; Neal M. Morgan; Markus Kraft; Roger Cracknell; Gautam Kalghatgi (2010). "Simulating combustion of practical fuels and blends for modern engine applications using detailed chemical kinetics". Society of Automotive Engineers. 2010-01-0572.

- [19] Sebastian, Mosbach; Ali M. Aldawood; Markus Kraft (2008). "Real-Time Evaluation of a Detailed Chemistry HCCI Engine Model Using a Tabulation Technique". *Combustion Science and Technology*. 180 (7): 1263–1277. doi:10.1080/00102200802049414.
- [20] Blending practical fuels, 2011, Wayback Machine.
- [21] Natural gas combustion 2011, Wayback Machine.
- [22] Ethanol/gasoline blending 2011, Wayback Machine.
- [23] Mack, J. Hunter; Daniel L. Flowers; Bruce A. Buchholz; Robert W. Dibble (2005). "Investigation of HCCI combustion of diethyl ether and ethanol mixtures using carbon 14 tracing and numerical simulations". *Proceedings of the Combustion Institute*. 30 (2): 2693–2700. doi:10.1016/j.proci.2004.08.136.
- [24] Choi, GH; SB Han; RW Dibble (2004). "Experimental study on homogeneous charge compression ignition engine operation with exhaust gas recirculation". *International Journal of Automotive Technology*. 5 (3): 195–200.
- [25] Sjoberg, Magnus; John E. Dec; Nicholas P. Cernansky (2005). "Potential of Thermal Stratification and Combustion Retard for Reducing Pressure-Rise Rates in Hcci Engines, Based on Multi-Zone Modelling and Experiments". *Society of Automotive Engineers*. 2005-01-0113.
- [26] Yang, Jialin; Todd Culp; Thomas Kenney (2002). "Development of a Gasoline Engine System Using Hcci Technology - The Concept and the Test Results". *Society of Automotive Engineers*. 2002-01-2832.
- [27] Norbert Peters - *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems (Lecture Notes in Physics)* (1993), Springer-Verlag.
- [28] Wang H, Jiao Q., Yao M., Yang B., Qiu L., Reitz RD., Development of an n-heptane/toluene/polyaromatic hydrocarbon mechanism and its application for combustion and soot prediction. *International Journal of Engine Research* 2013; 14: 434-451.
- [29] Huang H., Zhu J., Lv D., Wei Y., Zhu Z., Yu B., Chen Y., Development of a reduced n-heptane-n-butylbenzene-polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) mechanism for engine

combustion simulation and soot prediction. *Energy* 2018; 165: 90-105.

[30] Wang H, Yao MF, Yue Z, Jia M, Reitz RD. A reduced toluene reference fuel chemical kinetic mechanism for combustion and polycyclic-aromatic hydrocarbon predictions. *Combustion and Flame* 2015;162(6):2390-404.

[31] Chen Y., Wolk B., Mehl M., Cheng W.K., Chen J-Y., Dibble R.W., Development of a reduced chemical mechanism targeted for a 5-component gasoline surrogate: A case study on the heat release nature in a GCI engine *Combustion and Flame* 2017; 178: 268-276.

[32] Hernández J.J., Sanz-Argent J., Monedero-Villalba E., A reduced chemical kinetic mechanism of a diesel fuel surrogate (n-heptane/toluene) for HCCI combustion modelling. *Fuel* 2014;133: 283-291.

[33] Zhang J., Zhang Y. Reduced mechanism generation for methanol-based toluene reference fuel with combined reduction methods. *Fuel* 2019; 247: 135-147.

[34] Coskun G., Delil Y., Demir U., Analysis of an HCCI engine combustion using toluene reference fuel for different equivalence ratios—Comparison of experimental results with CFD and SRM simulations. *Fuel* 2019; 247: 217-227.

[35] Machrafi, Hatim & Guibert, Philippe & Cavadias, Simeon & Morin C. (2007). HCCI engine modeling and experimental investigations - Part 1: The reduction, composition and validation of a n-heptane/iso-octane mechanism. *Combustion Science and Technology* – 179. 2561-2580. 10.1080/00102200701486931.

[36] Andrae JCG, Brinck T, Kalghatgi GT. HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semidetailed chemical kinetic model. *Comb. Flame* 2008;155(4):696–712.

EKLER

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler	
Adı Soyadı	Gülten Gizem Küçük
Doğum Yeri	Ş.Urfa
Doğum Tarihi	10.10.1994
Uyruğu	☒ T.C. ☐ Diğer:
Telefon	02124400198
E-Posta Adresi	gultengizem.kucuk@ogr.iu.edu.tr
Web Adresi	

Eğitim Bilgileri	
Lisans	
Üniversite	İstanbul Üniversitesi
Fakülte	Mühendislik Fakültesi
Bölümü	Makine Mühendisliği
Mezuniyet Yılı	Tarih girmek için tıklayın veya dokununuz.

Yüksek Lisans	
Üniversite	İstanbul Üniversitesi
Enstitü Adı	Fen Bilimleri Enstitüsü
Anabilim Dalı	Makine Mühendisliği
Programı	Tezli Yüksek Lisans

Doktora	
Üniversite	
Enstitü Adı	
Anabilim Dalı	
Programı	

Makale ve Bildiriler	
Coskun G., Aslan E.; Özcan Z., Küçük G.G., Comparison of different chemical mechanisms applied on a 3D-HCCI engine combustion model, <i>Proceedings of INCOS 2020</i> , September 2020, Submitted.	