

**HCCI (HOMOJEN ŞARJLI SIKIŞTIRMA İLE ATEŞLEMELİ) BİR
MOTORDA YANMA ANALİZİ**

Şükrü Ayhan BAYDIR

**DOKTORA TEZİ
MAKİNE EĞİTİMİ**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ŞUBAT 2012
ANKARA**

Şükrü Ayhan BAYDIR tarafından hazırlanan “HCCI (HOMOJEN ŞARJLI SIKIŞTIRMA İLE ATEŞLEMELİ) BİR MOTORDA YANMA ANALİZİ” adlı bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. H. Serdar YÜCESU

Tez Danışmanı, Otomotiv Mühendisliği Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Makine Eğitimi Anabilim Dalında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Selim ÇETİNKAYA

Otomotiv Mühendisliği Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. H. Serdar YÜCESU

Otomotiv Mühendisliği Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Halit KARABULUT

Otomotiv Mühendisliği Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Muhammet YÜRÜSOY

Makine Mühendisliği Anabilim Dalı, Afyon Kocatepe Üniversitesi

Prof. Dr. Adnan SÖZEN

Enerji Sistemleri Müh. Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Tarih: 16/02/2012

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Doktora derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Bilal TOKLU

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Şükrü Ayhan BAYDIR

**HCCI (HOMOJEN ŞARJLI SIKIŞTIRMA İLE ATEŞLEMELİ) BİR
MOTORDA YANMA ANALİZİ
(Doktora Tezi)**

Şükrü Ayhan BAYDIR

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Şubat 2012

ÖZET

İçten Yanmalı Motorlarda tasarım ve ürün geliştirmek amacı ile yapılan deneysel çalışmalar hem çok yüksek maliyetlere ulaşmakta, hem de çok zaman almaktadır. Bu çalışmada içten yanmalı motorların modellenmesinde kullanılan açık kaynak kodlu, çok boyutlu sayısal modelleme araçları açıklanmıştır. Farklı programlama dillerinde yazılmış, farklı sayısal modeller/yaklaşımlar içeren KIVA4 ve OpenFOAM kod sistemleri karşılaştırılmıştır.

Caterpillar marka 3401E motor için ilk olarak çok boyutlu model kullanılmıştır. CFD koduyla elde edilen verilerin başlangıç değer olarak kullanıldığı tek bölgeci sayısal modelde yanma sürecinin modellenmesi 29 bileşen ve 52 reaksiyon içeren n-heptan (RON0) mekanizmasının kullanılmasıyla gerçekleştirilmiştir. Yanma aşamaları incelendikten sonra farklı eşdeğerlilik oranlarındaki (0,01-0,5) çalışma sonucunda silindir içi sıcaklık ve emisyon değerine göre 0,3 eşdeğerlilik oranı optimum değer olarak tespit edilmiştir. 0,3 eşdeğerlilik oranında farklı EGR oranlarının (%0-%35) yanma sürecine etkisi incelenmiştir. EGR oranındaki artışa bağlı olarak yanma reaksiyonlarının süresinin uzadığı, silindir içi basınç ve sıcaklık değerlerinin azaldığı tespit edilmiş dolayısıyla sıcaklığa bağlı NO_x emisyonlarının azaltılmasında olumlu bir etki elde edileceği sonucuna varılmıştır.

RON0, RON20, RON40 ve RON60 yakıtlarıyla elde edilmiş olan modelleme ve deneysel verilerle karşılaştırma yapılmıştır. Deneyler, 2200 1/min motor hızında, beş farklı yükte (4, 8, 12, 16 ve 20 Nm) yapılmıştır. Ana referans yakıtlarının (PRF) yanma sürecinin modellenmesi için 6 farklı reaksiyon mekanizması kullanılmıştır. Motor modelleme yöntemlerinden tek bölgeli ve CFD modelleri kullanılmıştır. Tek bölgeli modelleme aracı olarak Chemkin yazılımı, 3 boyutlu geometrinin kullanıldığı CFD modelleme aracı olarak OpenFOAM kodları kullanılmıştır. Ayrıca farklı çalışma parametrelerinin homojen şarjlı sıkıştırma ile ateşlemeli (HCCI) bir motordaki yanma sürecine etkileri nümerik modeller yardımıyla incelenmiştir.

Bilim Kodu : 708.3.026

Anahtar Kelimeler : Yanma, Egzoz emisyonları, Motor tasarımı, KIVA, içten yanmalı motor modelleme, çok boyutlu açık kaynak kodlu sayısal modelleme araçları, HCCI motor, sayısal modelleme, n-heptan yanma süreci

Sayfa Adedi : 169

Tez Yöneticisi : Prof.Dr. H.Serdar YÜCESU

**THE COMBUSTION ANALYSIS ON HCCI (HOMOGEN CHARGE
COMPRESSION IGNITION ENGINE)**

(Ph.D. Thesis)

Şükrü Ayhan BAYDIR

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

February 2012

ABSTRACT

Experimental researches on internal combustion engine for design and product development both cost high and take up long time. In this study, open source multi dimensional modeling tools which are used on internal combustion engine modeling is explained. KIVA4 and OpenFOAM codes including different numerical models/approaches and written with different programming languages were compared

Firstly, a multi-dimensional model was used for Caterpillar 3401E engine. Modeling of combustion process was performed by being used n-heptane (RON0) reaction mechanism which includes 29 species and 52 reactions in a single-zone numerical model in which is used for data being obtained by CFD code as an initial value. After the process of combustion was investigated, 0.3 equivalence ratio was determined as an optimum value, in a consequence of studies were performed at the different equivalence ratios (0.01.-0.5) according to in-cylinder temperature and emission values. The effect of different EGR rates (%0-%35) on combustion process was investigated at 0.3 equivalence ratio. It is confirmed while the combustion reactions took up longer time depending on the rise in EGR ratio, in-cylinder pressure and temperature values were reduced. Consequently, as a

conclusion a positive effect will be obtained on reducing of NO_x emission depending on temperature.

The comparison was performed between data were obtained by the experiments and modeling with used RON0, RON20, RON40 and RON60 fuels. The experiments were performed at 2200 rpm engine speed and five different engine loads (4, 8, 12, 16 and 20 Nm). The 6 different reaction mechanisms were used to model combustion process of primary reference fuels (PRF). The single-zone numerical model and CFD models were used from among of engine modeling methods. Chemkin software was used as a the single-zone numerical model tool and OpenFOAM codes were used as a CFD modeling tool which is used three dimensional geometry. Besides, the effects of the different working parameters on combustion of homogeneous charged compression ignition (HCCI) engine were examined by means of numerical models

Science Code : 708.3.026

Key Words : Combustion, Exhaust emissions, Engine design, KIVA, internal combustion engine modeling, multi dimensional open source numerical modeling tools, HCCI engine, numerical modeling, n-heptane combustion process

Page Number: 169

Adviser : Prof.Dr. H.Serdar YÜCESU

TEŞEKKÜR

Lisans, lisansüstü öğrenim hayatım ve çalışmalarım boyunca engin bilgi birikimi, değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, sosyal yaşantıma yönelik kıymetli yardımlarını esirgemeyen, çalışma disiplini her zaman için örnek aldığım, çalışmamda gösterdiği ilgi ve sabrından dolayı, saygıdeğer hocam ve danışmanım Prof. Dr. H.Serdar YÜCESU'ya, yine kıymetli tecrübelerinden faydalandığım, değerli vakitlerini ayırarak tezime katkıda bulunan tez izleme komitesi üyeleri Prof. Dr. Halit KARABULUT'a ve Prof. Dr. Muhammet YÜRÜSOY'a, tez jüri üyeleri Prof. Dr. Selim ÇETİNKAYA'ya ve Prof. Dr. Adnan SÖZEN'e, Linux işletim sistemi ve KIVA hakkındaki temel bilgileri, deneyimleri ve dökümanlarından yararlandığım Arş. Grv. Dr. Abdurrahman İMREN'e, KIVA ve yanma hakkında temel bilgileri, deneyimleri ve dökümanlarından yararlandığım Arş. Grv. Dr. Alper T. ÇALIK'a, deneysel verilerinden, motor ve HCCI alanındaki tecrübe ve dökümanlarından yararlandığım Arş. Grv. Dr. Özer CAN'a, bilgisayar destekli çizim yazılımlarının formatlarının dönüştürülmesinde bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım Arş. Grv. Özgür VERİM'e, çalışmanın ilk döneminde 07/2008-04 proje kodu ile motor modellemelerinde kullanılan KIVA4 koduna ulaşılmasına imkan veren Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri (BAP) komisyonuna, 108M228 nolu Tübitak projesi kapsamında deneysel ve hesaplama çalışmalarımıza desteklerinden dolayı Tübitak'a, çalışmanın son döneminde Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi'nin (UYBHM), 4001412011 numaralı desteğiyle, paralel hesaplama kaynaklarının kullanılmasını sağlayarak CFD ve kimyasal reaksiyon içeren hesaplamalarıma zaman açısından büyük ivme kazandıran UYBHM hesap ve destek personeline, hesaplamalı akışkanlar dinamiği ile ilgili temel bilgiler, kavramlar ve Türkçe terimler için ders notları ve çalışmalarından yararlandığım Yrd. Doç. Dr. Nilay Sezer Uzol'a, deney ve modellere ait basınç değişimlerinin MATLAB'ın eğri uydurma aracı ile karşılaştırılmasında bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım Yrd. Doç. Dr. Halil AYTEKİN'e, Marmara Üniversitesi kütüphanesindeki konu ile ilgili tezlere ulaşmamı

sağlayan arkadaşım Arş. Grv. Mehmet YUMURTACI'ya, İngilizce çeviriler sırasında bilgilerine danıştığım Okt. Mehmet ÖZCAN'a ve İngilizce öğretmeni kardeşim Elif BAYDIR'a, doktora ve tez süreci hakkında bilgilerine danıştığım Arş. Grv. Dr. Fatih AKSOY'a ve kimya alanında bilgisine danıştığım eşi Yrd. Doç. Dr. Laçine AKSOY'a, yine kimya alanındaki bilgisine danıştığım ve her açıdan destek olan, hiçbir zaman emeğini esirgemeyen vakit ayırmakta zorlandığım nişanlım Arş. Grv. Dr. Ayşegül TÜRK'e, hayatım boyunca maddi ve manevi her yönüyle benim yanımda olan ve destekleyen çok değerli aileme teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	vi
TEŞEKKÜR	viii
İÇİNDEKİLER	x
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	xv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xvi
RESİMLERİN LİSTESİ	xx
SİMGELER VE KISALTMALAR	xxi
1. GİRİŞ	1
2. İÇTEN YANMALI MOTORLARDA AKIŞ VE YANMA MODELLEMELERİ ..	4
2.1. Türbülans Modellerinin Gelişimi	8
2.2. Motorlarda Türbülans	8
2.3. Motorlarda Yanma Modellemesi	10
2.3.1. Sıfır boyutlu yanma modelleri	12
2.3.2. Yarı (sanki) boyutlu yanma modelleri	13
2.3.3. Çok boyutlu yanma modelleri	14
2.4. Motorlarda Akış ve Yanma Modellemesinde Kullanılan Yazılımlar	15
3. HOMOJEN DOLGU SIKIŞTIRMALI ATEŞLEMELİ (HCCI) MOTORLAR ..	17
3.1. HCCI Yanma Sürecini ve Isı Açığa Çıkış Hızını Etkileyen Kilit Parametreler	18
4. HCCI YANMA MODELLEMELERİ	21
4.1. Boyutsuzdan Üç Boyutlu HCCI Yanma Modellemeleri	21
4.1.1. Tek bölge modelleri	22

Sayfa

4.1.2. Çok bölgeli modeller	23
4.2. HCCI Modellerinin Sınıflandırılması	29
5. MODELLEMEDE KULLANILAN KODLAR VE MODELLER	34
5.1. KIVA Kodu.....	34
5.1.1. KIVA kodunun gelişimi	35
5.1.2. KIVA koduyla yapılmış çalışmalar	36
5.1.3. KIVA4 dosya ve özellikleri.....	43
5.1.4. KIVA4 ön işlem (pre-processing)	46
5.1.5. KIVA4’de kinetik reaksiyonların hesaplanması	46
5.1.6. KIVA4 son işlem (post-processing)	49
5.2. OpenFOAM	49
5.3. Chemkin	52
5.3.1. Chemkin kullanımı	54
5.3.2. Chemkin tek bölgeli modelde ısı transferi	54
5.3.3. n-Heptan tek adımlı (global) reaksiyonu	55
5.4. Reaksiyon Mekanizmalarına NO _x Reaksiyonlarının Eklenmesi	56
5.4.1. NO _x reaksiyonları eklenmesinin etkisinin chemFoam ile incelenmesi	56
5.5. Farklı Reaksiyon Mekanizmalarının ve OpenFOAM (chemFoam)-Chemkin Çözücülerinin Karşılaştırılması	57
6. ÖN MODELLEME VE KARŞILAŞTIRMA ÇALIŞMALARI	59
6.1. KIVA4 Koduyla 2 Supaplı Motor Simülasyonu.....	59
6.2. KIVA4 Koduyla Yanma Simülasyonu	60
6.3. KIVA4 ve OpenFOAM Kodlarının Ortak Bir Problemle Karşılaştırılması.....	61

Sayfa

6.3.1. Ön işlem (pre-processing).....	61
6.3.2. Yanma süreci.....	62
6.3.3. Veri işleme (post-processing).....	63
6.3.4. Sayısal sonuçlar.....	63
7. N-HEPTAN YAKITLI HCCI MOTORDA YANMA SÜRECİNİN MODELLENMESİ	69
7.1. Reaksiyon Mekanizması.....	69
7.2. Modelleme Çalışması	73
7.2.1. Çok boyutlu model	73
7.2.2. Tek bölgeli sayısal model.....	74
7.3. HCCI Kimyasal Sürecinin Özeti.....	75
7.4. Sayısal Sonuçlar	76
7.4.1. Eşdeğerlilik oranının gaz sıcaklığı ve CO emisyonu üzerindeki etkisi	77
7.4.2. EGR oranının etkisi.....	80
7.5. HCCI Çok Bölgeli Model.....	83
8. DENEYSEL VERİ VE TEK BÖLGELİ MODEL SONUÇLARININ KARŞILAŞTIRILMASI	85
8.1. N-Heptan Yakıtı İçin Deneysel Veri ve Tek Bölgeli Model Sonuçlarının Karşılaştırılması.....	85
8.1.1. CO emisyonu	89
8.1.2. NO _x emisyonu.....	95
8.1.3. Yanmamış hidrokarbon (UHC) emisyonu	96
8.2. Ana Referans Yakıtlar (PRF) İçin Deneysel Veri ve Tek Bölgeli Model Sonuçlarının Karşılaştırılması	98
8.3. Parametrik Çalışma	100

Sayfa

8.3.1. Simülasyon başlangıcındaki sıcaklık değeri.....	100
8.3.2. Dolgu giriş sıcaklığı.....	101
8.3.3. Silindir cidar sıcaklıkları	102
8.3.4. Sıkıştırma oranı.....	103
9. ANA REFERANS YAKITLAR (PRF) İÇİN DENEYSEL VERİ VE CFD MODEL SONUÇLARININ KARŞILAŞTIRILMASI	104
9.1. Yüksek Başarımlı ve Paralel Hesaplama.....	104
9.1.1. Paralel hesaplama uygulama çeşitleri ve çalışma komutları ..	106
9.2. Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD-CFD)	107
9.3. Ön İşlem (Pre-processing).....	108
9.3.1. Eleman ağı oluşturma	108
9.3.2. Eleman ağı (mesh) ve alan (domain) ayrıklaştırma (decompose)	111
9.4. İşlem (Solving) Sayısal Modeller ve Yöntemler	112
9.4.1. Türbülans modeli	115
9.4.2. Türbülanslı yanma modeli.....	116
9.4.3. CFD için PRF reaksiyon mekanizmaları	117
9.4.4. Courant sayısı.....	118
9.5. Son İşlem (Post-processing)	118
9.6. CFD Model Sonuçları	119
10. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	122
10.1. Sonuçlar	122
10.2. Öneriler	126
KAYNAKLAR	129

Sayfa

EKLER	140
EK-1. Silindirdeki ısı kaybının hesaplanması.....	141
EK-2. Chemkin formatında reaksiyon tanımı	142
EK-3. Reaksiyon Mekanizmaları	144
EK-4. C ₈ H ₁₈ 'in yanma ve NO _x oluşum reaksiyonları için kullanılan eşitlikler	145
EK-5. Deneysel verilerden eş değeri oranının hesaplanması	146
EK-6. Ölçülen deneysel veriler ve model için hesaplanan değerler	148
EK-7. Tek bölgeli model sonuçları.....	150
EK-8. Kullanılan farklı geometriler ve teknik özellikleri	154
EK-9. CFD model örnek çalışma klasörü düzeni	156
EK-10. OpenFOAM'da k-ε Türbülans Modeli	157
EK-11. Kısmi-karışimli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli	159
EK-12. CFD model sonuçları.....	163
EK-13. Tek bölgeli ve CFD model sonuçları.....	166
ÖZGEÇMİŞ	169

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. HCCI modellerinin karşılaştırılması	30
Çizelge 5.1. KIVA4 ve OpenFOAM kodlarının temel farkları.....	51
Çizelge 6.1. KIVA4 yanma modelinin denenmesi	60
Çizelge 6.2. Sayısal modele ilişkin özellikler	61
Çizelge 7.1. Sayısal modele ilişkin özellikler	74
Çizelge 7.2. Bölgelerin yapısı.....	84
Çizelge 8.1. HCCI dönüşümü yapılan deney motoruna ait teknik özellikler .	85
Çizelge 8.2. Deney sırasında ölçülen veriler	86
Çizelge 8.3. Ölçülen verilerden hesaplanan değerler.....	86
Çizelge 8.4. Tek bölgele modele girilen değerler	87
Çizelge 8.5. CO emisyonunun değişimi	90
Çizelge 8.6. Modellerle elde edilmiş maksimum çevrim sıcaklıkları	91
Çizelge 8.7. NO _x emisyonunun değişimi	96
Çizelge 8.8. UHC emisyonunun değişimi	97
Çizelge 8.9. Parametrik çalışma matrisi	100
Çizelge 9.1. Seri ve paralel hesaplama yaklaşımı.....	104
Çizelge 9.2. Anadolu hesaplama sunucu sistemi teknik özellikleri.....	106
Çizelge 9.3. İşlemci sayısı, ayırıklaştırma düzeni.....	112
Çizelge E.1. Woschni korelasyonunda kullanılan sabitler	141
Çizelge E.2. Reaksiyon mekanizmaları.....	144
Çizelge E.3. Elementlerin atom ağırlıkları	146
Çizelge E.4. Standart k-ε türbülans modeli sabitleri	158
Çizelge E.5. Başlangıç Şartları	158

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Türbülans modelleri	7
Şekil 2.2. Silindirdeki girdap ve yuvarlanma hareketi	9
Şekil 2.3. Silindir içerisinde yanma sırasında yanmış ve yanmamış karışımların gösterilmesi	12
Şekil 3.1. HCCI yanma sürecini kontrol yöntemleri	19
Şekil 4.1. Tek bölgeli silindir modeli	22
Şekil 4.2. Karıştırmanın çoklu bölge modelinde hesaba katılması CO ve HC emisyonlarının tahminini daha fazla geliştirmiştir	27
Şekil 4.3. CFD-Chemkin hesaplama akış diyagramı.....	33
Şekil 5.1. Sıra tipi bir motor için ateşlemeden sonra kıvılcım enerjisinin azotoksit konsantrasyonu (g/cm^3) üzerine etkisinin gösterilmesi.....	37
Şekil 5.2. KIVA4 dosya yapısı.....	44
Şekil 5.3. OpenFOAM dosya yapısı.....	50
Şekil 5.4. Chemkin yazılımına göre sıcaklık değişimi	55
Şekil 5.5. Tek adımlı modele eklenen NO_x bileşen ve reaksiyonlarının etkisi.....	57
Şekil 5.6. Farklı reaksiyon mekanizmalarının karşılaştırılması	58
Şekil 6.1. 90° , 180° , 270° , 360° , 450° ve 540° krank açılarındaki silindir için sıcaklık dağılımları	59
Şekil 6.2. KIVA4'e göre silindir içi ortalama basınç ve sıcaklık değişimi ...	60
Şekil 6.3. Basınç ve sıcaklık değişimi	64
Şekil 6.4. Ağ yapısı, basınç ve sıcaklık dağılımı	65
Şekil 6.5. Yanmanın gerçekleştiği durumdaki silindirdeki ortalama basınç ve sıcaklık değişimi.....	66

Şekil	Sayfa
Şekil 6.6. Yanmanın farklı zamanlarda başladığı durumdaki silindirdeki ortalama basınç değişimi	67
Şekil 6.7. Farklı HFK durumdaki silindirdeki ortalama basınç değişimi	68
Şekil 6.8. Farklı sıkıştırma başlangıcı sıcaklıkları için silindirdeki ortalama basınç değişimi	68
Şekil 7.1. Tek bölgeli modelde kullanılmış olan n-heptan reaksiyon mekanizmasının Chemkin formatı görünümü.....	71
Şekil 7.2. Kullanılan n-heptan reaksiyon mekanizmasının Chemkin formatındaki termodinamik özellik bilgi dosyası	72
Şekil 7.3. Çok boyutlu modelde ağ yapısı ve silindir içi sıcaklık dağılımı ..	74
Şekil 7.4. Sıcaklık ve madde konsantrasyonlarının değişimi	76
Şekil 7.5. Dizel motorunda farklı yanma yaklaşımları	77
Şekil 7.6. Farklı eşdeğerlilik oranlarında krank açısına bağlı CO değişimleri.....	78
Şekil 7.7. Farklı eşdeğerlilik oranlarında krank açısına bağlı sıcaklık değişimleri.....	79
Şekil 7.8. Farklı eşdeğerlilik oranlarında krank açısına bağlı ısı kaybı değişimleri.....	79
Şekil 7.9. Farklı eşdeğerlilik oranlarındaki yanma süreleri	80
Şekil 7.10. Farklı EGR oranlarında krank açısına bağlı sıcaklık değişimleri	81
Şekil 7.11. Farklı EGR oranlarında krank açısına bağlı basınç değişimleri.	82
Şekil 7.12. Farklı EGR oranlarında krank açısına bağlı CO değişimleri.....	83
Şekil 7.13. Çok bölgeli model bölge tanımları	83
Şekil 7.14. Tek bölgeli ve çok bölgeli model yaklaşımlarının karşılaştırılması	84
Şekil 8.1. Chemkin diyagram görünüşü	87
Şekil 8.2. Model ve deney verilerine göre basınç değişimi	88

Şekil	Sayfa
Şekil 8.3. Farklı model ve deney verilerine göre basınç değişimi	89
Şekil 8.4. Seiser modeli ve deney verilerine göre silindir içi basınç değişimi.....	89
Şekil 8.5. CO emisyonunun değişimi	90
Şekil 8.6. Modellerdeki maksimum çevrim sıcaklıkları	91
Şekil 8.7. Farklı yakıtlarda eş değerlilik oranına bağlı CO değişimi	93
Şekil 8.8. İzo-oktan yakıtında eş değerlilik oranına bağlı CO değişim	94
Şekil 8.9. Curran vd. PRF Modeli (2004)+NO _x -4N-EGR0-T _{in} =25 °C	95
Şekil 8.10. NO _x emisyonunun değişimi	96
Şekil 8.11. UHC emisyonunun değişimi	97
Şekil 8.12. Tsurushima PRF mekanizması model ve deney basınçları karşılaştırması	99
Şekil 8.13. Simülasyon başlangıcındaki sıcaklık değeri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması	101
Şekil 8.14. Dolgu (yakıt-hava karışımı) giriş sıcaklığı değeri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması	101
Şekil 8.15. Silindir cidar sıcaklık değeri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması	103
Şekil 8.16. Farklı sıkıştırma oranı değerleri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması	103
Şekil 9.1. UYBHM'de çalışan işlerin durumu	109
Şekil 9.2. Üçgen ve dörtgen hücrelerde çarpıklık	110
Şekil 9.3. OpenFOAM CFD hesaplama akış diyagramı	114
Şekil 9.4. İşlemci sayısı ile hesaplama süresi arasındaki ilişki.....	119
Şekil 9.5. Farklı mekanizmalar ve Geometri 5 ile elde edilmiş basınç değişim grafikleri	120
Şekil E.1. Tek adımlı reaksiyon için reaksiyon mekanizması dosyası	142

Şekil	Sayfa
Şekil E.2. Tek adımlı reaksiyon için termo dosyası	142
Şekil E.3. n-heptan yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri emisyon karşılaştırması	150
Şekil E.4. RON20 yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması.....	151
Şekil E.5. RON40 yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması.....	152
Şekil E.6. RON60 yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması.....	153
Şekil E.7. CFD model örnek çalışma klasörü düzeni.....	156
Şekil E.8. PaSR modelinin kavramsal şematik diyagramı	159
Şekil E.9. RON20 yakıtı için deney, Andrae ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması.....	163
Şekil E.10. RON40 yakıtı için deney, Andrae ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması.....	164
Şekil E.11. RON60 yakıtı için deney, Andrae ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması.....	165
Şekil E.12. RON20 yakıtı için deney, Curran, Tsurushima ve Andrae reaksiyon mekanizmalı tek bölgesi ve CFD modelleri emisyon karşılaştırması.....	166
Şekil E.13. RON40 yakıtı için deney, Curran, Tsurushima ve Andrae reaksiyon mekanizmalı tek bölgesi ve CFD modelleri emisyon karşılaştırması.....	167
Şekil E.14. RON60 yakıtı için deney, Curran, Tsurushima ve Andrae reaksiyon mekanizmalı tek bölgesi ve CFD modelleri emisyon karşılaştırması.....	168

RESİMLERİN LİSTESİ**Resim****Sayfa**

Resim 9.1. Anadolu hesaplama sunucu sistemi	105
---	-----

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
Re	Reynolds Sayısı
Nu	Nusselt Sayısı
Pr	Prandtl Sayısı
V_{swirl}	girdap hızı
V_d	kurs hacmi
T_i	başlangıç sıcaklığı
P_i	başlangıç basıncı
V_i	başlangıç hacmi
ϕ	eşdeğerlilik oranı
P	anlık basınç
$P_{motored}$	yanmasız ortamdaki basınç
$\bar{S}_p$	ortalama piston hızı
D	silindir çapı
ρ	gaz yoğunluğu
k	gaz viskozitesi
w	silindir içi ortalama gaz hızı
ϵ	türbülans kinetik enerjisinin yitim oranı
I	özgül iç enerji
K	ısı iletkenlik
t	zaman
p	akışkan basıncı
θ	krank açısı
k	birim kütle için türbülans kinetik enerjisi
g	yerçekimi ivmesi

u	hız
σ	viskoz stres tensörü
h	özüml entalpi
h	ısı transferi katsayısı
A	toplam ısı transferi alanı
T	sıcaklık
h_m	m bileşeninin özüml entalpisi
C_p	sabit basınçtaki özüml ısı sabiti
R_0	üniversal gaz sabiti
W_m	m bileşeninin moleküler ağırlığı
$I_m(T)$	m bileşeninin özüml iç enerjisi
$c_{pm}(T)$	m bileşeninin sabit basınçtaki özüml ısısı
$h_m(T)$	m bileşeninin özüml entalpisi
$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_{\varepsilon 3}$	ampirik sabitler
C_s	püskürtmeden kaynaklanan ampirik sabit
Pr_k	k için türbülans Prandtl sayısı
Pr_{ε}	ε için türbülans Prandtl sayısı
C_{mix}	sabit
μ_{eff}	efektif viskozite
T_{cidar}	ortalama yanma odası cidar sıcaklığı
τ_c	kimyasal zaman
min	dakika
$RR_i(c_i^1)$	laminer kimyasal kaynak terim,
κ	reaksiyon oranı çarpanı
τ	integrasyon adımı
c^1	reaktör çıkışındaki konsantrasyon
c	reaktör içindeki konsantrasyon
c	anlık bileşen molar konsantrasyonu
c^0	reaktör girişindeki konsantrasyon
τ_{mix}	mikro-karışım zaman ölçeği

$f_r(c,T)$	kimyasal kaynak terimi
R	ideal gaz sabiti
ω	kimyasal reaksiyon oranı
T	zaman
c	ileri reaksiyon üssü
d	ileri reaksiyon üssü
k_{br}	geri reaksiyon katsayısı
k_{fr}	ileri reaksiyon katsayısı
k_i	reaksiyon katsayısı, reaksiyon hız sabiti
A_i	sabit ($\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{s}^{-1}$)
E_i	etkinleşme (aktivasyon) enerjisi (cal/mol)
β_i	sıcaklık üssü

Kısaltmalar Açıklama

ADD	adi diferansiyel denklem (ODE)
AÖN	alt ölü nokta
CAD	bilgisayar destekli tasarım (Computer Aided Design)
CAM	bilgisayar destekli imalat (Computer Aided Manufacturing)
CFD	hesaplamalı akışkanlar dinamiği (Computational Fluid Dynamics)
CGS	Cray Graphics Systems
CI	sıkıştırma ile ateşlemeli (compression ignition)
CPU	merkezi işlem birimi (Central Processing Unit)
DES	hibrit metodlar (Detached Eddy Simulations)
DIG	doğrudan benzin enjeksiyonlu (Direct Injection Gasoline)
DISI	doğrudan enjeksiyon kıvılcım ateşleme (direct injection, spark-ignition)
DME	dimetileter
DNS	doğrudan sayısal simülasyon (Direct Numerical Simulation)
EDC	girdap yitim kavramı (Eddy Dissipation Concept)
EGR	egzoz gazı resirkülasyonu (Exhaust Gas Recirculation)

ER	eşdeğerlilik oranı
ERC	motor araştırma merkezi, Wisconsin Üniversitesi, ABD
GDI	benzin doğrudan enjeksiyon (gasoline direct-injection)
GMV	General Mesh Viewer
HC	hidrokarbon (Hydrocarbon)
HCCI	homojen şarjlı sıkıştırma ile ateşleme (Homogeneous Charge Compression Ignition)
HCO	toplam oksijenli hidrokarbonlar
HFK	hava fazlalık katsayısı
İYM	içten yanmalı motor
KA	krank açısı
KDD	kısmi diferansiyel denklem (PDE)
LES	büyük girdap simülasyonu (Large Eddy Simulation)
LLNL	Lawrence Livermore Ulusal Laboratuvarı
MON	motor oktan sayısı (Motor Octane Number)
MPI	mesaj geçiş arayüzü (Message Passing Interface)
NVO	negatif supap bindirmesi (Negative Valve Overlap)
ORNL	Oak Ridge Ulusal Laboratuvarı, ABD
PaSR	kısmi karışimli reaktör (Partially Stirred Reactor)
PCCI	ön-karışım dolgulu sıkıştırmalı ateşlemeli (premixed charge compression ignition)
PFI	port yakıt enjeksiyon (port fuel injection)
PIV	tanecik görüntü hızölçeri (Particle Image Velocimetry)
PPM	milyonda bir (parts per million)
PRF	ana karşılaştırma yakıtları (Primary Reference Fuels)
RANS	Reynolds-ortalımalı Navier-Stokes (Reynolds-averaged Navier-Stokes)
RNG	Renormalization group
RON	araştırma oktan sayısı (Research Octane Number)
RSTM	Reynolds-gerilim türbülans modeli (Reynolds stress turbulence model)
SFTP	güvenli dosya aktarım protokolü (Secure File Transfer Protocol)

SI	buji ile ateşlemeli (Spark Ignition)
SIBS	yarı kapalı (Semi-Implicit) Bulirsh-Stoer metodu
TSDI	iki aşamalı doğrudan enjeksiyon (two-stage direct injection)
UHC	yanmamış hidrokarbon (Unburned Hydrocarbon)
ÜÖN	üst ölü nokta
UYBHM	Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi

1. GİRİŞ

Kimyasal kinetik reaksiyonlarda hesaplama süresi bileşen (specie) sayısının karesiyle orantılı olarak değişir. Örneğin 1000 bileşenli reaksiyon mekanizması yerine 100 bileşenli reaksiyon mekanizması kullanmak hesaplama süresini 100 kat azaltır [1].

Taşıtlarda kullanılmakta olan içten yanmalı motor (İYM)'larda tasarım ve performans geliştirme amacı ile yapılan deneysel çalışmalar hem çok yüksek maliyetlere ulaşmakta, hem de çok zaman almaktadır. Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) (computational fluid dynamics-CFD) için geliştirilmiş yazılım ve kodlar son zamanlarda İYM'lardaki akış, ısı transferi, yanma ve emisyon problemlerinin çözümü için matematiksel modelleme sırasında sıklıkla kullanılmaktadır. Böylece daha tasarım aşamasındayken problemler sebepleriyle beraber görülerek deneme yanılma sürecine girilmeden çözümler geliştirilip tasarım süreci kısaltılmakta ve optimize edilmiş ürünler piyasaya sürülerek rekabet şansı artırılmaktadır [2].

Son yıllarda otomotiv uygulamalarında buji ile ateşlemeli motorlara göre daha düşük özgül yakıt tüketimine ve daha üstün verime sahip olduklarından dolayı dizel motorlar daha çok kullanılmaktadır. Bu avantajlarına rağmen dizel motorların NO_x ve partikül emisyonları uygulamada ciddi çevresel sorunlara neden olmaktadır. Geleneksel dizel motorlarında yakıt silindir içine püskürtüldüğünden dolayı yanma odası içindeki yakıt-hava oranının dağılımı zenginden fakire doğru değişmektedir. Dizel motorlarındaki bu problemleri çözmek için tutuşmadan önce homojen şarjlı yanma odasını sağlayacak ön-karışım dolgulu sıkıştırılmalı ateşlemeli (premixed charge compression ignition-PCCI) motor üzerine, ön-karışımli yakıt olarak doğal gaz, metan, bütan ve benzin kullanan, çok sayıda araştırma gerçekleştirilmektedir [3].

Homojen dolgu sıkıştırma ile ateşlemeli (homogeneous charge compression ignition-HCCI) motorlardaki yanma işlemi, homojen bir karışımın sıkıştırma

yoluyla kendi kendine tutuřturulmasından oluřmaktadır. HCCI yanmada yakıt ve hava, buji ile ateřlemeli (spark ignition-SI) motordaki gibi homojen karıřım oluřturacak řekilde karıřtırılır (dizel motorunda karıřım silindir iindeki hava zerine yakıt pskrtlerek oluřturulduėu iin yerel olarak zengin karıřımdan dolayı partikl emisyonlarına neden olan difzyon yanması oluřmaktadır) ve karıřımın basın ve sıcaklıėı, bir dizel motorundaki (compression ignition-CI) gibi tm karıřım eř zamanlı olarak tepkime yapana kadar sıkıřtırma ile artırılarak kendi kendine ateřleme saėlanır (buji ile ateřlemeli motorda ise karıřımın elektrik gerilimi ile ateřlenmesiyle oluřan yksek alev sıcaklıkları NO_x emisyonlarına neden olmaktadır). Bu bakımdan HCCI tipi yanmanın gnmzde yaygın olarak kullanımda olan buji ile ateřlemeli ve dizel motorların en iyi zelliklerini bir araya toplamıř iyi bir alternatif olduėu dřnlmektedir.

HCCI yanma, motorlarda yakıt tketimini ve egzoz emisyonunu eř zamanlı olarak azaltma potansiyeline sahip olduėundan son zamanlarda ilgi ekmektedir. Ancak ticarileřmesini sınırlayan birkaç problem bulunmaktadır. Ateřleme zamanlamasını kontrol etmek ve yk aralıėını geniřletmek olduka zordur.

Yanma ve emisyon sreleri iin ileri dzeyde tahmin yapabilmek iin neriler, evreye duyarlı teknolojilerin ve yeni nesil tařıtların tasarlandıėı alıřmalardan gelmektedir. Mevcut simlasyon yazılımları, motorların ve diėer endstriyel yanma sistemlerinin karmařık geometrilerini ve detaylı fiziksel srelerini canlandırma yetenekleri bakımından sınırlandırılmıřtır. Artan yakıt ekonomisi ve azalan emisyonlar gibi ynelimler sık sık eliřmektedir, gerekli denge zenli optimizasyon ile gerekleřtirilmelidir. Tasarımcılar, hedeflerini karřılayan optimize edilmiř bir motor tasarımına ulařmak iin eřitli parametreleri piston tepesindeki yanma odası geometrisi, girdap, yakıt enjeksiyon basın ve yakıt enjeksiyon oranı, nozul geometrisi, nozul sayısı, sıkıřtırma oranı, ateřleme zamanı ve enerjisi gibi) gz nne almalıdırlar. Sayısal modeller, sadece bir tasarım alıřması aracı saėlamayıp

ayrıca motor yanma fiziğinin daha anlaşılmasına yol açabilmektedir. Fiziksel süreçler içindeki yeni anlayışlar, onları kaynak alan yeni yollara sebep olabilmektedir [4].

Bu çalışmada HCCI bir motorun bilgisayar modellemesi ile yanma analizi gerçekleştirilmiş, silindir geometrisi, karışım homojenliği, ateşleme gecikmesi, karışım giriş sıcaklığı, karışımın hava fazlalık katsayısı değeri, yakıt bileşimi, EGR değeri vb. farklı parametrelerin CFD kod veya yazılımları ile modellenerek karışımın kendi kendine ateşleme ve yanma sürecine etkileri incelenmiştir.

Elde edilen teorik sonuçların doğruluğunun belirlenmesi, model için gerekli başlangıç şartlarının tespiti ve model sonuçlarının iyileştirilmesi amacıyla kullanılan deneysel veriler Otomotiv Eğitimi Anabilim Dalındaki deney düzeneğinde motor momenti, gücü, silindir içi basınç değişimi, emisyonların ölçümü vs. ile sağlanmıştır.

2. İÇTEN YANMALI MOTORLARDA AKIŞ VE YANMA MODELLEMELERİ

CFD ve diğer bilgisayar destekli tasarım (Computer Aided Design-CAD) / bilgisayar destekli imalat (Computer Aided Manufacturing-CAM) tasarım teknikleri 1980'li yıllarda doğmuş ve hızlı bir şekilde otomotiv firmaları tarafından kullanılmaya başlanmıştır. Belirtilen zaman dilimindeki yavaş bilgisayarlar, gerçeği tam olarak yansıtamayan geometriler ve fiziksel altyapısı yetersiz kodlar, otomotiv sektöründe CFD yöntemlerinin kullanım alanını nispeten kısıtlı tutarken günümüzde bu durumun tamamen değiştiği rahatlıkla görülebilir. Günümüzde dünya çapındaki birçok otomotiv firmasında ve bu firmaların yan sanayinde CFD yöntemleri, tasarım sürecinin bütünleşik bir parçası olan, bir tasarım aracı olarak kullanılmaktadır. Uzun yıllar boyunca yapılan testler ve edinilen tecrübeler firmaları, CFD yöntemlerini daha aktif bir şekilde kullanarak tasarım sürecini kısaltma, simülasyonlar vasıtasıyla herhangi bir ürünü tasarım aşamasındayken optimize etme ve oldukça pahalı ve zaman alıcı olan deneylerin ve prototip üretme işlemlerini minimize etme yoluna yönlendirmiş ve bunun sonucu olarak birçok alanda akış modellenmesi ve ısı transferi konusunda yapılan çalışmaların sayısında büyük bir artış gözlenmiştir. Ayrıca bilgisayar konusundaki gelişmeler ve yüksek performanslı donanıma düşük maliyetlerle sahip olma imkânı milyonlarca elemana sahip modellerle yapılan analizleri günlük bir iş haline getirmiştir [2].

Motorlardaki akışkan akışları, karmaşık geometri, cidar etkileri, girdap, iç ayrılma vb. nedenlerden dolayı daima türbülanslı ve yüksek derecede (yönlere göre farklı özellikler taşımaktadır) anizotropiktir. İçten yanmalı motorlardaki akış, pistonun hareketinden oluşan hızlı sıkıştırma ve genişleme stroklarından dolayı ilave karışıklıklar içermektedir. Bu akış olguları içinde girdap (swirl) önemli ve istenen bir motor tasarım özelliğidir. İYM'lar için girdap, emisyon kontrolü ve daha iyi verim için hava-yakıt karışımını artırmak için kullanılmaktadır. Bu yüzden çeşitli motor tiplerindeki akış alanını doğru şekilde simüle etmek için girdap karakteristiğinin her motor geometrisi için

kısa süreli modifikasyonlar gerçekleştirmeksizin güçlü ve çok yönlü bir türbülans modeli ile tanımlanmış olmasını gerektirir [5].

Türbülanslı yüksek derecede anizotropik motor akışlarını doğru olarak simüle etmek, motor içindeki akış fiziğini doğru olarak yeniden oluşturmak için daha yüksek dereceden türbülans modeli kullanılması gereklidir. Bu amaçla Yang ve arkadaşları tarafından KIVA bilgisayar kodu, Reynolds-gerilim türbülans modelini (Reynolds-stress turbulence model-RSTM) içerecek şekilde modifiye edilmiştir. KIVA kodu ile birleştirilen RSTM, standart türbülanslı akışın düzlemsel ve asimetrik akışları kapsayan test durumları aralığı için ortalama akış özelliklerini ve iki momenti başarılı bir şekilde türetmiştir. Bu durum RSTM'nin motorun çeşitli konfigürasyonlarına uygulanmasında doğru sonuçlar elde edilmesine yardımcı olur. Bu durumlarda RSTM, $k-\epsilon$ modelinden farklı olan hız ve girdap (eddy) viskozite alanları üretir. Mevcut karşılaştırmalar yine de sınırlıdır, deneyler RSTM sonuçlarının daha gerçekçi olduğunu göstermiştir. $k-\epsilon$ modelinin aksine RSTM, türbülans-gerilim anizotropisinden kaynaklanan çoğu yeniden dolaşım yapısını yakalayabilmektedir [5].

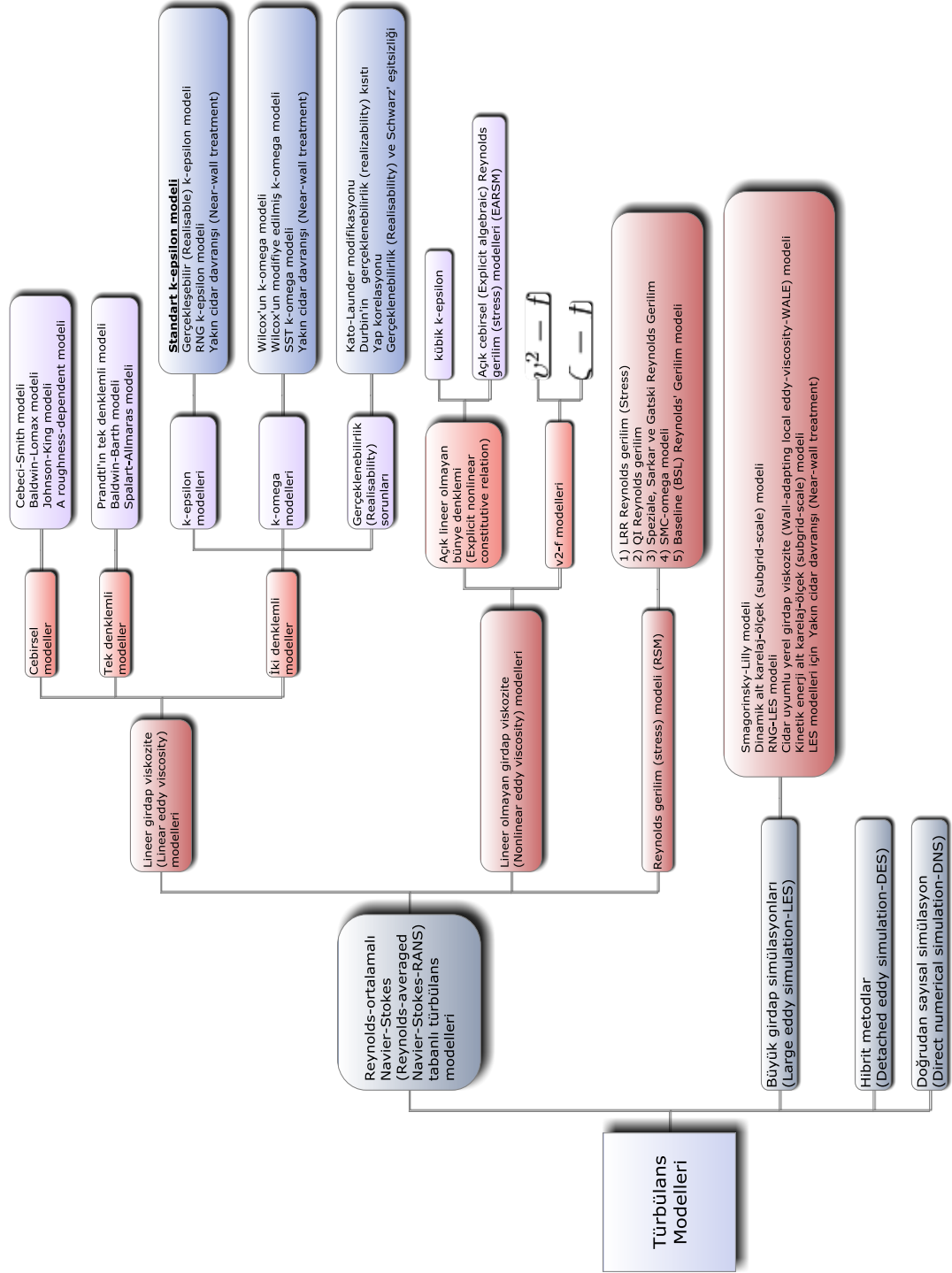
Türbülanslı akışlar üç boyutlu, zamanla değişen, düzensiz akışlardır. Türbülanslı akışlarda zaman ölçekleri ve uzayda uzunluk ölçekleri geniş bir dağılıma sahiptir ve Reynolds sayısı ile artmaktadır. En büyük uzunluk ölçeği hesaplama alanı ile ilgili, en küçük uzunluk ölçeği ise viskoz etkilerin baskın olduğu yerdeki yitime neden olan küçük girdaplarla ilgilidir. Literatürde türbülanslı akışların hesaplamaları için çeşitli modelleme ve simülasyon metodları önerilmiştir:

- doğrudan sayısal simülasyonlar (Direct Numerical Simulations, DNS),
- büyük girdap simülasyonları (Large Eddy Simulations, LES),
- Reynolds-ortalama Navier-Stokes (Reynolds-averaged Navier-Stokes, RANS) çözümleri ve
- hibrit metodlar (Detached Eddy Simulations, DES) [6].

Türbülanslı akışların çözümü için gereken çözüm ağı nokta/hücre sayısının ve dolayısıyla hesaplama maliyetinin Reynolds sayısı ile artış oranı kullanılan simülasyon metoduna bağlıdır. Örneğin bütün türbülans ölçeklerini çözen DNS hesaplama açısından oldukça maliyetlidir, çünkü çözüm ağının en küçük uzunluğu en küçük türbülans büyüklüğündedir. [6]. DNS çözümlerinde aşırı derecede ince, tamamen üç boyutlu ağlar, büyük bilgisayarlar ve çok uzun CPU zamanları gerekmektedir [7]. Günümüz bilgisayarları ile tam ölçekli bir uçak üzerindeki akış gibi mühendislik uygulamalarındaki yüksek Reynolds sayılı türbülanslı akışlar için DNS sonuçları henüz mümkün değildir ve bilgisayarların gelişmesi günümüzde görülen bu olağanüstü hız ile devam etse bile, bu durumun birkaç on yıl daha değişmesi beklenmemektedir [7]. DNS'nin bir altındaki seviye olan LES hesaplamalarında, büyük ölçekler hesaplanırken, küçük ölçeklerin etkisi modellenir, böylece DNS'ye kıyasla daha az ağ nokta sayısı ve daha az hesaplama maliyeti gerekir [6].

Cebirsel, tek denklemlilik, iki denklemlilik ve Reynolds gerilme modelleri dahil olmak üzere günümüzde kullanılan bir çok türbülans modeli vardır. En çok kullanılan üçü $k-\epsilon$ modeli, $k-\omega$ modeli ve $q-\omega$ modelidir. İki denklemlilik türbülans modelleri olarak anılan bu modeller, kütle ve doğrusal momentum (ayrıca çözülmesi gerekiyorsa enerji) denklemleri ile aynı anda çözülmesi gereken iki tane daha transport denklemi getirir. Bir türbülans modeli kullanıldığında, çözülmesi gereken ilave bu iki transport denklemi ile birlikte, giriş ve çıkıştaki türbülans özellikleri için ilave iki tane daha sınır şartı belirtilmelidir [7]. Örneğin $k-\epsilon$ modeli hem k (türbülans kinetik enerjisi- m^2/s^2), hem de ϵ (türbülans yitim (dissipation) hızı- m^2/s^3) belirtilebilir [7,8]. Bu model birçok endüstriyel uygulama için oldukça yeterli bulunmaktadır [8].

Şekil 2.1'de bu çalışma için farklı kaynaklardan tespit edilmiş türbülans modelleri şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Türbülans modelleri

2.1. Türbülans Modellerinin Gelişimi

Türbülans modellemesinin tarihi Leonardo da Vinci'nin ilk çizimlerine kadar gitmektedir. 15. ve 16. yüzyıllarda, da Vinci çizimleri ile türbülanslı akışı tanımlamak için görsel ve tanımlayıcı modeller kullanmıştır. 17. ve 18. yüzyıllarda, Isaac Newton, L. Euler, D. Bernoulli, ve J. D'Alembert gibi bilim adamları Newton'un kanununa uyan sürekli bir ortam temeline dayanan akışkan hareketi için matematiksel model geliştirmeye çalışmışlardır. Ancak viskoz akışlar için hiçbir matematiksel model geliştirememişlerdir. 19. yüzyılda, L.M.H. Navier, J.B. Fourier, B. de Saint Venant ve G.G. Stokes gerilme teorisine ve Fourier'in ısı iletimi teorilerine uyan, viskoz akış ve sürekli ortam temelinde akış hareketi için matematiksel modeller oluşturmaya çalışmışlardır. Türbülanslı akışı ve ısı transferini tanımlayacak bir model bulunmamaktadır. 19. ve 20. yüzyıllarda, O. Reynolds, L. Prandtl, T. Von Karman ve G.I. Taylor sürekli ortam kabulü temeline dayanan, viskoz akış, ortalama akış ve türbülans teorilerine uyan türbülanslı akışkan hareketi için matematiksel model geliştirmeye devam etmişlerdir. Günümüzde de türbülans modellerinin geliştirilmesi halen sürmektedir [9].

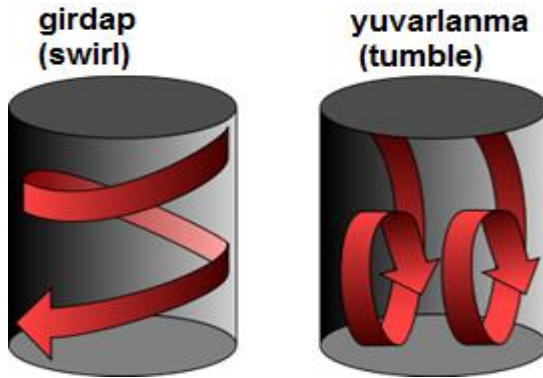
2.2. Motorlarda Türbülans

Silindir içerisindeki hemen hemen tüm akış süreçleri türbülanslıdır. Ancak, köşelerde, yanma odası duvarlarının çok yakınındaki küçük boşluklarda türbülans azaltıldığı için buralardaki akışlar türbülanslı değildir. Türbülans 'difüzyon'u akış alanındaki yerel değişimlerden kaynaklanmaktadır. Bu da momentum, ısı ve kütle transferi oranlarında artışa neden olmaktadır ve İYM'ların çalışması için esastır. Türbülanslı akışlar daima yayınımlıdır (dissipative) [10,11]. Viskoz kayma gerilmeleri (viscous shear stresses), akışkan üzerinde deformasyona neden olmaktadır ve akışkanın türbülans kinetik enerjisinin harcandığından iç enerjisini artırmaktadır. Türbülanslı akışlar, laminar akışların tersine değişken ve karmaşıktır. Türbülanslı bir akışın davranışını tahmin etmek için matematiksel bir modelin kurulması

gerekmektedir. Türbülanslı akışın karakteri ortamına bağlıdır. Akış kararlı değildir ve çevrimler arasında önemli değişimler gösterebilir. Büyük-ölçekli ve küçük-ölçekli türbülans hareketleri akışın tüm davranışını kapsayan önemli faktörlerdir [11].

Çok sayıda motor çevrimi üzerinden istatistiksel ortalamalar doğru ortalama akış şartlarını vermekte, fakat herhangi bir çevrimde kesin olarak akışı tahmin edememektedir. Bu durum silindir basıncı, sıcaklığı, yanma açısı vb. gibi motor parametrelerindeki çevrimsel farklılıkların sonucudur [10].

Silindir içerisinde türbülans emme stroğu sırasında en yüksektir, fakat AÖN yakınında akış debisinin düşmesi ile azalır. Sıkıştırma stroğu sırasında ÜÖN yakınında girdap hareketi (swirl) (Şekil 2.2), sıkışmanın artmasıyla birlikte tekrar artar. Girdap hareketi silindir boyunca daha homojen türbülans oluşmasını sağlar [10].



Şekil 2.2. Silindirdeki girdap ve yuvarlanma hareketi

Ateşleme anında ÜÖN yakınında türbülansın yüksek olması iyi bir yanma performansı için istenen bir durumdur. Türbülanslı akışın, alev cephesini parçalaması ve yayması laminar alevle göre birkaç kat daha hızlıdır. Türbülans ile hava-yakıt karışımının çok kısa sürede olması, kendi kendine tutuşma ve vuruntu olmaması sağlanır. Yerel alev hızı, alevin önündeki türbülansa bağlıdır. Türbülans, yanma işlemi sırasında silindir içerisindeki gazların genişlemesi tarafından takviye edilir. Yanma odasının geometrisi,

maksimum türbülansın üretilmesi ve istenen hızlı yanma için çok önemlidir [10].

HC/hava karışımlarının maksimum laminar yanma hızları 0,5 m/s civarındadır. Merkezinden ateşlenen 100 mm çapındaki bir silindir içerisinde yanma süresi yaklaşık 100 ms civarındadır. Ancak 3000 1/min'de çalışan bir motor için yanma süresi yaklaşık 10 ms'dir. Bu da yanmanın hızlandırılmasında türbülansın doğrudan etkisi olduğunu göstermektedir [12].

Türbülans yoğunluğu (intensity), motor hızının güçlü bir fonksiyonudur. Motor hızı arttıkça, türbülans artmakta ve buharlaşma, karışım ve yanma hızlarını arttırmaktadır. Bunun bir sonucu olarak bütün motor hızlarında aynı yanma süreleri (krank açıları) vardır. Türbülanstaki artış tarafından tamamen değiştirilemeyen bu işlemin bir fazı, ateşleme gecikmesidir. Bu da motor hızı artıkça ateşleme avansı verilmesi ile telafi edilmektedir [10].

Türbülansın olumsuz etkileri de bulunmaktadır. Yanma sırasında yüksek türbülans, yanma odası duvarlarında taşınım ile ısı transferini artırmaktadır. Bundan dolayı ısı kaybı artmakta ve motorun ısı verimi düşmektedir. Başka bir olumsuz etkisi de iki zamanlı motorlarda türbülans dolayısıyla silindire giren taze hava, egzoz gazları ile karışmakta, silindir içerisinde daha çok egzoz gazı bulunmasına neden olmakta ve motorun verimini düşürmektedir [10].

2.3. Motorlarda Yanma Modellemesi

Yanma modellemesi, İYM çevrimlerinin bilgisayarlı simülasyonunda temel unsurlardan birisidir. Motorun çalışmasındaki bütün bileşenler doğrudan yanma sürecini etkilemektedir [12].

Motorların çalışması:

- yanma olgusunun,

- türbülanslı akışkan akışının,
- türbülanslı alev yayılmasının,
- ısıma ile ısı transferinin,
- ateşleme ve sönmenin,
- kirletici oluşumunun,
- cidarlara olan ısı transferinin,
- dizel ve yakıt enjeksiyonlu motorlarda da püskürtme dinamiklerinin birleşimini içermektedir [4].

Bu olgular bir takım zaman ve uzunluk ölçekleri ile karakterize edilmektedir. Aşırı sayısal taleplerden dolayı motor yanma modellemesi yüksek performanslı süper bilgisayarlar olmaksızın çözülemeyecek kadar karmaşık zor problem olarak tanımlanmaktadır. Modellemenin amacı, yeni tasarımların yakıt verimliliği ve emisyonları azaltmayı geliştirip geliştirmediklerinin belirlenmesidir [4].

Yanma üç boyutlu, zamana bağlı türbülanslı akışta, hidrokarbon karışımı içeren yakıt ve yanma kimyasıyla oluşmaktadır. Yanma odaları farklı tasarım şekillerine sahiptirler ve bu tasarımlarda ısı transferini de hesaplamak zordur [12].

Araştırmacılar ve motor tasarımcıları İYM'ların modellerinde dört farklı model kullanmaktadır [4].

- Hava standart çevrim simülasyonu
- Boyutsuz ve yarı boyutlu termodinamik çevrimler
- Boyutsuz ve bir boyutlu modellerin bir kombinasyonu
- Çok boyutlu modeller

Bütün modeller motor verimi, performansını ve emisyonlarını hesaplamak için kullanılırlar. Sıfır boyutlu ve sanki boyutlu modeller tam motor modellerini içerirler, fakat yanma odası geometrisiyle açık bir bağlantı yoktur. Dolayısıyla,

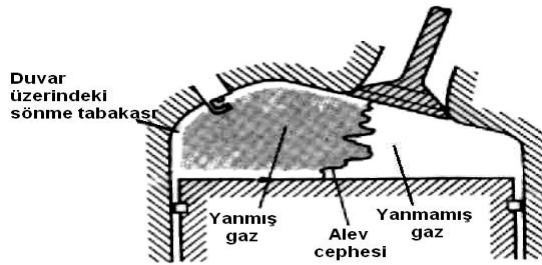
bu modeller motor geliřtirmeyle ilgili parametrik alıřmalarda kullanılırdılar. Yanma odası geometrisi önemli veya oka deėiřtirilmesi gerekiyorsa, ok boyutlu modeller daha ok kullanılmaktadır [12].

2.3.1. Sıfır boyutlu yanma modelleri

Sıfır boyutlu yanma modelleri 'ısının aıėa ıkması' ampirik modelini kullanır. Burada tek baėımsız deėiřken zamandır. Bu yanma modeli ikisi yanmıř gaz ieren řu  blgenin kullanılmasıyla yapılır.

- (i) Yanmamıř gaz
- (ii) Yanmıř gaz
- (iii) Yanma odasının cidarındaki yanmıř gaz - ısı sınır tabaka veya soėutma tabakası

Bu yapı řekil 2.3'de gsterilmiřtir. Yanma blgesi veya alev cephesi yanmıř ve yanmamıř gazları ayırmaktadır.



řekil 2.3. Silindir ierisinde yanma sırasında yanmıř ve yanmamıř karıřımların gsterilmesi

Yanma, Wiebe fonksiyonu ile modellenir:

$$x_{(\theta)} = 1 - \exp \left\{ -a \left[(\theta - \theta_0) / \Delta \theta_b \right]^{m+1} \right\} \quad (2.1)$$

Burada,

θ : krank aısı

$x_{(\theta)}$: θ krank aısında yanmıř ktle miktarı

θ_0 : yanmanın başladığı krank açısı

$\Delta\theta_b$: yanma süresi krank açısı cinsinden

$a=5$, $m= 2$; a ve m değişebilen katsayılarıdır.

Isı transferi Woschni tarafından geliştirilen korelasyon ile hesaplanmaktadır. Korelasyon Nusselt, Reynolds ve Prandtl sayıları cinsinden bilinen bir formdadır.

$$Nu=a Re^b Pr^c \quad (2.2)$$

$a =0,035$, $b=0,8$, $c=0,333$ motor geometrisine bağlı olarak değişebilmektedir.

Bu model motor verimini hesaplamakta kullanıldığı gibi motor emisyonlarını hesaplamak için de kullanılır. Yanmış gazdaki karbon-oksijen-hidrojen konsantrasyonları denge termodinamiği kullanılarak hesaplanabilir [12].

2.3.2. Yarı (sanki) boyutlu yanma modelleri

Bu modeller 'ısının açığa çıkması' modelini türeterek türbülanslı yanma için ayrı birer alt model kullanırlar.

Yarı boyutlu modeller, giriş olarak türbülansın kullanıldığı ve küresel alev cephesi kabulüyle yanma hızını hesaplamaya çalışmaktadırlar. Buji ateşlemeli motorlar için bu basit yaklaşım kütle yanma hızını şöyle vermektedir:

$$\frac{dm_b}{dt} = \rho_u \times A_f \times U_T = \rho_u \times A_f \times \bar{u} \times U_L \quad (2.3)$$

Burada,

ρ_u : Yanmamış gazın yoğunluğu

A_f : Alev cephesinin alanı

U_T : Türbülanslı alev cephesi hızı

ff : Türbülanslı alev faktörü

U_L : Laminer alev cephesi hızı

Bu yaklaşım türbülansa bağlı olarak geliştirilebilir [12].

İYM'ların modellenmesi, simüle edilecek problemin çeşidine bağlı olarak farklı yaklaşımlar takip edilerek yapılabilir. Bir boyutlu (1D) modeller motorun düzensiz koşullarda çalışmasında veya çok sayıda çevrim gerektiren uygulamaların simüle edilmesinde kullanılabilir. Bu modeller daha sonra yapılacak olan tüm motora ait olan simülasyonun sayısal olarak zor bulunan 3 boyutlu kodları için gerekli olan sınır şartlarını verebilmektedir. Bir boyutlu koddan elde edilmiş basınç ve kütle akış oranı üzerine temellendirilmiş 3 boyutlu kod sınır şartı uygulanmaktadır. Araştırmacılar bağlantı (coupling) ara yüzünde akış durumunu hesaplamak için bir absorbe sınır şartları stratejisini benimsemişlerdir [13].

2.3.3. Çok boyutlu yanma modelleri

Çok boyutlu sayısal modellerde karmaşık yanma odası geometrisi, 3 boyutlu bir ağ yapısı ile temsil edilerek kütle, momentum ve enerji korunumu denklemlerinin bu ağ üzerinde ayrıklaştırılmasıyla akışkana ait hız bileşenleri, sıcaklık, basınç vb. büyüklüklere ilişkin zamana ve konuma bağlı hesaplanmaktadır [14]. Yanma modeli için kullanılan farklı yöntemler vardır, bunlar:

Flamelet modelleri; mikroskobik ölçekte alev cephesini laminer olarak kabul eden modeller;

Eddy break-up modelleri; hacimsel reaksiyon hızını birleştiren modellerdir. Bunu yaparken de alev genişliğine bağlı olan alev hızını da kabul eden modellerdir. Eğer akışın çözümü yakınsak değilse, hesaplanan alev cephesinin konumu gerçekçi olmamaktadır.

Olasılık yoğunluk fonksiyonu modelleri; türbülans şiddeti frekansı dağılımını kabul eden modellerdir.

Birleşik (coherent) alev modelleri; alev yüzeyi yoğunluğu ve yerel laminar yanma hızının çarpımını kullanan modellerdir [12].

Çok boyutlu veya CFD modelleri, motorun belirli bir kısmı hakkındaki bir durumun daha doğru ve detaylı analizi için sayısal tekniklerle ilgilenmektedir.

İYM'ların çok boyutlu modellenmesinde ticari paket programların yanı sıra 1985'den beri açık kaynak kodlu KIVA kodları özellikle akademik araştırmalarda yaygın olarak kullanılmaktadır [14,15]. KIVA kodları kullanılarak çeşitli motor geometrilerinin akış alanı içinde zamana bağlı, sıkıştırılabilir, üç boyutlu, iki fazlı, türbülanslı akış ve çok bileşenli reaktif gazların korunum denklemleri çözülmektedir. KIVA kodlarının açık kaynaklı olması nedeniyle incelenen konuya göre altprogramların (subroutine) değiştirilmesi veya yeni modellerin eklenmesi mümkündür [14].

2.4. Motorlarda Akış ve Yanma Modellemesinde Kullanılan Yazılımlar

Matematiksel modeller, daha güçlü bilgisayarların üretilmesiyle motor geliştirilmesinde tasarım ve optimizasyon aracı olarak artan biçimde kabul görmektedir. İYM'daki daha sıkı emisyon standartları, motor tasarımcılarını motordaki karmaşık yanma olgusunun anlaşılması için sayısal araçları kullanma zorunda bırakmıştır. Çok boyutlu bir kod kullanılarak elde edilen sonuçlar, çevrim sayısının bir ortalaması olarak düşünülebilir. Matematiksel bir modeli tasarım aracı olarak kabul etmeden önce deneylerle model sonuçlarının geçerliliğini kanıtlamak gerekmektedir. Genellikle böyle bir çalışma için doğru ve kesin veri sağlamak deney yapanlar için zor bir çalışmadır [16].

Her bir CFD kodu kendine ait avantajlara sahiptir. Bununla beraber kod kullanımının karmaşıklığını azaltmak için, motor simülasyonları için gelişmiş alt modelleri doğrudan ticari kodların içine uyarlamak tercih edilebilir [17].

İYM'larda yanma ve türbülansın sayısal modellemesinde daha üstün mesh üreten ara yüzleri ve mevcut kullanıcı desteklerinden dolayı FLUENT, STAR-CD, CFX, VECTIS, AVL-FIRE, Converge, Phoenix, WAVE, MOTHER, Dymola gibi oldukça pahalı ancak kapsamlı hazır endüstriyel ticari yazılımlar ve çeşitli kodlar kullanılmaktadır. İYM'larda yanma modellemesinde hareketli piston, supaplar, yakıt püskürmesi vb. uygulamalar gerekmektedir. Hareketli meshle çalışan STAR-CD daha az hücre, daha hızlı çalışma ve daha geniş değerlendirme modelleri ile Fluent'den daha iyi olarak yorumlanmaktadır. Endüstriyel yazılımlar kodlardan farklı olarak sadece bir çözücü (solver) değil aynı zamanda geometri, CAD, ön işlem (pre-process) ve son işlem (post-process) adımlarında da destek sağlamaktadır. AMESim, AVL-Boost, GT-POWER, GT-FUEL gibi tek boyutlu simülasyon yazılımları da kullanılmaktadır.

İYM'larda gerçekleşen kimyasal olayların analizini yapmak için yazılmış açık kaynak kod olan KIVA ise ve endüstriyel amaçlı geliştirilmiş paket yazılımlara göre daha ucuz olmasından ve kaynak kodunun uygunluğundan dolayı akademik çevre tarafından kullanılmaktadır. Kodun kapasitesi karmaşık geometrilerin çözümü için sınırlıdır. Ancak kod düzenlendikten sonra simülasyonu başlatacak yazılımın Linux işletim sisteminde bir Fortran derleyicisi yardımıyla "makefile" dosyasında belirlenen sıra ile derlenmesi ve çalıştırılması gerekmektedir. Truegrid gibi yazılımlarla oluşturulmuş mesh yapıları kodda kullanılabilir. EnSight, Ansys ICEM gibi programlar aracılığıyla programın çıktıları görselleştirilebilmektedir.

3. HOMOJEN DOLGU SIKIŞTIRMALI ATEŞLEMELİ (HCCI) MOTORLAR

HCCI, İYM'lerden kaynaklanan kirliliği azaltmak için kullanılacak yeni bir teknoloji olarak önem kazanmaktadır [18]. HCCI motorlar (benzin, dizel, doğal gaz, biyo-yakıtlar ve hidrojen) çeşitli yakıtlarla çalışabilir [19]. HCCI motorlar kullanımda olan buji ile ateşlemeli ve sıkıştırma ile ateşlemeli motorlara göre yüksek termal verim potansiyeline ve düşük NO_x ve is emisyonlarına sahiptir [18].

Yüksek termal verimlik, is emisyonunun meydana gelmemesi ve düşük NO_x emisyonları HCCI motorlara olan ilginin ana nedenleridir. Bu yararlarına rağmen ateşlemenin ve yanmanın doğrudan kontrol edilememesinden kaynaklanan kullanıma yönelik bazı sorunlar ortaya çıkmaktadır. Ayrıca HCCI motorların egzozlarında göreceli olarak daha soğuk silindir bölgelerinden (örneğin boşluklar ve termal sınır tabaka) kaynaklanan yüksek seviyede hidrokarbon (HC) ve karbon monoksit (CO) emisyonları bulunmaktadır [20].

HCCI yanmanın başlıca sorunlarından biri yanma fazının kontrolüdür. Buji ile ateşlemenin veya geleneksel dizel motorların aksine yanma başlangıcını kontrol etmek için doğrudan bir yöntem bulunmamaktadır. Bunun yerine hava-yakıtın kimyasal reaksiyonlarının kinetikleri yanmanın başlamasında etkilidir [21,22].

Bununla beraber HCCI kavramının üretilen motorlarda uygulanmasından önce çözülmesi gereken bazı engeller mevcuttur. Bu problemler HCCI hız-yük aralığının genişletilmesi, tüm çalışma aralığında HCCI yanmasının kontrolü ve yanmamış HC ve CO emisyonlarının minimum hale getirilmesi şeklinde sıralanabilir [19].

HCCI motorlarda yanma, yakıt ve oksidan (genellikle hava) ve artık gazın (bir önceki çevrimden kalan yanma sonucu oluşmuş gaz) uygun bir şekilde karıştırıldıktan sonra sıkıştırılarak kendi kendine ateşlememesinin bir

kontrolüdür. Geliştirme aşamasındaki HCCI motorlar yakıt tüketimini ve günümüz dizel motorların en büyük sorunlarından partikül ve NO_x emisyonlarını da oldukça aşağı çekerek egzoz sistemindeki partikül filtresi, NO_x depolayıcıları gibi (aftertreatment) sistemlere olan ihtiyacı azaltmaktadır.

HCCI'nin ana karakteristiği birkaç yerde eş zamanlı ateşleme olmasıyla yakıt/hava karışımının eş zamanlı olarak yanmasıdır [23].

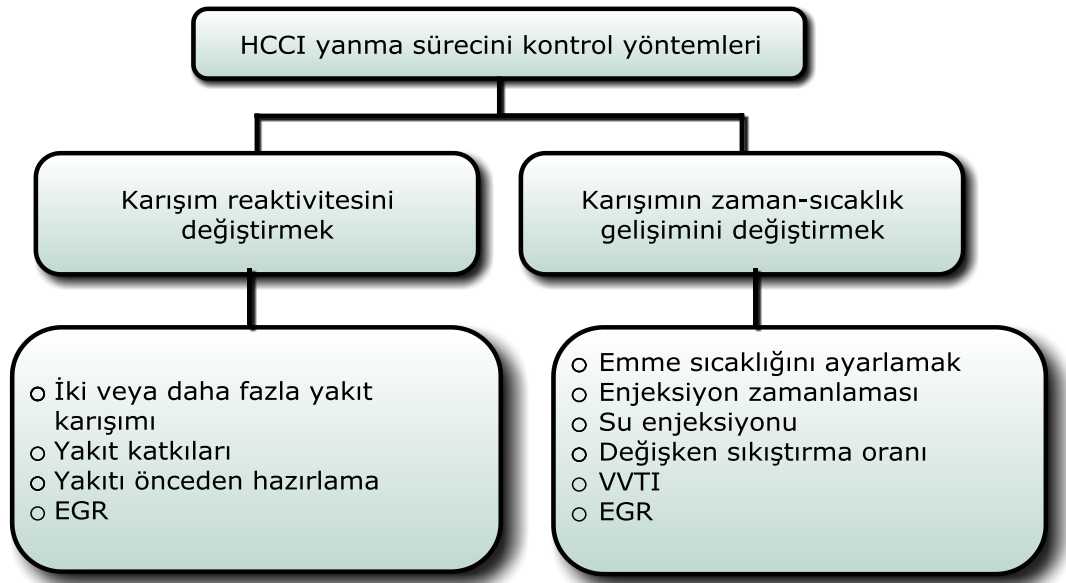
HCCI motorlarda yanma sırasındaki en önemli sorunlardan birini kendi kendine ateşlemenin kontrolünün zorluğu oluşturmaktadır. Çeşitli HCCI yanma mekanizmalarını analiz eden çok sayıda deneysel ve nümerik araştırma gerçekleştirilmektedir [24].

HCCI motordaki kendiliğinden ateşleme, egzoz supabının kapanmasının emme supabı açılmasının ayarlanmasıyla egzoz zamanı esnasında bir kısım sıcak egzoz gazının silindirde bırakılması ile kolaylaştırılabilir. Mahrous ve arkadaşları yaptıkları çalışmada değişken supap zamanlamasının doğrudan enjeksiyonlu bir HCCI motorunun egzoz gazı atımına ve performansına etkilerini bir boyutlu akışkan dinamiği motor çevrim simülasyonu kullanarak incelemişlerdir [19].

3.1. HCCI Yanma Sürecini ve Isı Açığa Çıkış Hızını Etkileyen Kilit Parametreler

İdeal HCCI sürecinde yanma odasında yakıt, hava ve sıcaklığın üniform dağıldığı ve ateşlemenin her yerde aynı anda oluşacağı kabul edilmektedir. Gerçek HCCI çalışmasında farklı hava, yakıt, EGR ve sıcaklık dağılımları vardır ve ateşleme çok boyutlu (zamanda ve konumda) olarak gerçekleşmektedir. Hesaplanan ateşleme sürecindeki homojensizliğin (inhomogeneity) daha fazla tartışılması gerekmektedir [25].

Yanma fazı kontrolü için geliştirilmiş yaklaşımlar, Şekil 3.1’de görüldüğü gibi karışımın özelliklerini ve karışımın maruz kaldığı zaman-sıcaklık değişimini kontrol eden yöntemler olarak ikiye ayrılabilir [26].



Şekil 3.1. HCCI yanma sürecini kontrol yöntemleri [26].

Karışımın zaman-sıcaklık olayını kontrol eden yöntemler, silindir içerisine yakıt enjeksiyon zamanlaması, su enjeksiyonu, emme hava sıcaklığı modülasyonu, değişken sıkıştırma oranı ve değişken supap zamanlamasını içermektedir. Değişken sıkıştırma oranı ve supap zamanlaması gelecek vaat etse de ilave maliyetlere neden olmaktadır. Laboratuar deneylerinde reaksiyon başlangıcını kontrol için en popüler yöntem, emme hava sıcaklığının modülasyonudur. Daha yüksek emme sıcaklıklarında yanma daha erken başlar ancak yanma fazındaki krank-açı aralığı oldukça sınırlıdır [26]. Reaksiyon başlangıcını geciktirmek için su enjeksiyonu bir yöntem olarak denense de çoğunlukla bu yaklaşım yetersiz bulunmuştur [27].

Silindir içindeki dolgu özelliklerini kontrol eden yöntemler, yakıtın veya yakıt-hava oranının değişen özelliklerini ve egzoz gaz resirkülasyonunu (EGR) içermektedir [27].

Yanma sürecini ve ısı açığa çıkış hızını etkileyen parametreler aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

- Dolgunun kendi kendine tutuşma özellikleri
 - Yakıt tiplerine
 - Yakıt konsantrasyonuna (erken, geç veya bölünmüş püskürtmeler neticesinde)
 - İki veya daha fazla yakıtın karışımına
 - Yakıt katkı maddelerine
 - Yakıtın ön hazırlığına
 - Art gaz (ve/veya EGR) oranına ve art gazın reaktifliğine
 - Su püskürtülmesine
 - Basınç artışına (aşırı doldurma yoluyla)
 - Yanma odası yüzeyinin katalitik özellikte kaplı olmasına bağlıdır.
- Dolgu sıcaklığının oluşumu
 - Emme koşullarına (sıcaklık ve basınç değerlerine)
 - EGR ve/veya art gaz miktarına
 - Isıtma bujisine
 - Isı değiştiricisine
 - Termal bariyere
 - Basınç artışına (aşırı doldurma yoluyla)
 - Silindir içi yakıt püskürtme zamanlamasına
 - Su püskürtülmesine
 - Sıkıştırma oranına
 - Yakıtın buharlaşma gizli ısıya
 - Motorun soğutma maddesi sıcaklığına
 - Dolgu ile motor elemanları arasındaki karşılıklı ısı transferine
 - Motorun hızına ve yüküne bağlıdır [28].

4. HCCI YANMA MODELLEMELERİ

4.1. Boyutsuzdan Üç Boyutluya HCCI Yanma Modellemeleri

1975’de Halstead ve arkadaşları tarafından yüksek basınç altında hidrokarbonların kendi kendine ateşlemesi ile ilgili bir matematiksel model geliştirilmiştir. Geliştirdikleri genelleştirilmiş model, yüksek basınç ve sıcaklık şartları altında parafinlerin iki aşamalı kendi kendine ateşlemesinin temel olaylarını simüle edebilmektedir. Modelle, kinetik parametrelerde herhangi bir ayarlama yapılmaksızın düşük basınçlar altında ateşlemenin ve soğuk alevin (cool-flame) temel olayları tahmin edilmektedir [29].

Boyutsuz model, ideal HCCI yanmayı sunmaktadır. Silindirdeki karışım modelde uniform olarak dikkate alınır. İstenilen çalışma aralığı boyunca farklı durumların ateşleme davranışını anlamak için değişen sıkıştırma ve genişleme zamanı için detaylı mekanizmalarla kimyasal kinetik hesaplamalar yapılmaktadır [30].

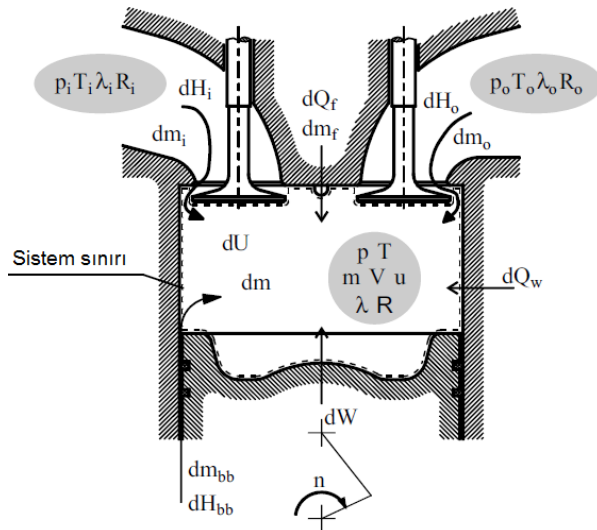
Ayrıca sıkıştırma ve genişleme zamanında yanma odasındaki tüm dolguyu tamamıyla uniform olarak ele alacak tek bölge model ile HCCI motorun yanma karakteristiklerini tahmin etmek için bazı girişimler vardır. Önceki çalışmaların sonuçlarına göre tek bölge model, nispeten daha kısa hesaplama zamanı ile tam kimyasal-kinetik mekanizmaların kullanılmasına imkan veren ve HCCI yanmanın belli temel bakış açılarının araştırılması için yararlı bir araçtır. HCCI üzerine yapılmış olan bu daha önceki araştırmalar, HCCI’nin NO_x ve is emisyonlarını eş zamanlı olarak azaltacak en yararlı yöntemlerden biri olarak önem kazanacağını göstermiştir [3].

HCCI yanmanın anlaşılması ve temel özelliklerinin tanımlanması için çok-boyutlu (multi-dimensional), çok-bölge (multi-zone) ve tek bölge (single-zone) modeller olarak sınıflandırılan çok sayıda model geliştirilmektedir.

4.1.1. Tek bölgeci modeller

Tek bölgeci HCCI yanma modelleri, tekdüze (üniform) sıcaklık, basınç ve gaz bileşimi ile yanma odasının tümünde gazın homojen olduğunun varsayılmasıyla tek bölgeci veya homojen kinetik modeller ile kullanımda olan yakıtlar için kimyasal kinetiklerin detaylı modellenmesine imkan vermektedir [31]. Tek bölgeci model, en verimli olarak ateşleme başlangıcının tahmininde kullanılmaktadır. Bunun nedeni HCCI ile ilgili yakıtlar için var olan güvenilir kimyasal kinetik reaksiyon mekanizmalarıdır. Tek bileşenli yakıtlar ve doğal gaz için çok güvenilir tahminlere imkân veren bu mekanizmaların geçerliliği geniş ölçüde kanıtlanmıştır [32].

Tek bölgeci modelle, başlangıç şartlarının bilinmesi halinde bir HCCI motorda tutuşma yeterli doğrulukta tahmin edilebilir. Ancak Şekil 4.1'de görüldüğü üzere termal sınır tabakalarının ve segman yarıklarının bulunduğu düşük sıcaklık bölgeleri hesaplama katılmadığından tek bölgeci modellerde CO ve yanmamış hidrokarbon (UHC) emisyonları olması gereken değerlerin altında, maksimum basınç değerleri ise olması gereken değerlerin üstünde hesaplanmaktadır [31]. Yanma süresinin, UHC ve diğer bileşiklerin miktarının tahmini için genellikle çok bölgeci simülasyon gerekmektedir [32].



Şekil 4.1. Tek bölgeci silindir modeli [33]

Gaz deęişim süreci, motor parametrelerini ve dolgu özelliklerini etkiler ve bu nedenle HCCI sürecinin kontrolünü tanımlamada önemli bir rol oynar. Deęişken supap zamanlamasının gaz deęişimi üzerindeki etkilerini analiz etmek için genellikle 1 boyutlu modelleme kullanılmaktadır. Genel olarak 1 boyutlu model Chemkin kod paketi ve 1 boyutlu motor simülasyon kodunun birleştirilmesiyle oluşturulmaktadır [34,35].

4.1.2. Çok bölgeli modeller

HCCI yanma süreci, alev yayılımı olmadığından, kimyasal kinetiklerinin kontrolü altındadır. Bu yüzden detaylı bir reaksiyon mekanizmasının kullanılması HCCI yanma analizi için gereklidir. Kapsamlı bir HCCI yanma modeli, akışkanlar mekaniği, ısı transferi ve detaylı kimyasal kinetiklerin birleşimini gerektirir. Basit yakıtlar için HCCI yanmasının incelenmesinde CFD uygulanmaktayken, kullanımda olan yakıtları kapsayan olağan analizler için bu durum hesaplama yükünde aşırı yoğunluk yaratmaktadır.

HCCI motor davranışını simüle etmek için birçok araştırmacı tarafından çok bölgeli model ortaya konulmuştur. Silindir, bölgelere ve termal sınır tabakaya ayrılmıştır. Böylece dolgu sıcaklığının ve yoğunluğunun (konsantrasyonun) daha gerçekçi dağılımı sağlanır [30].

Çok bölgeli model, yine kullarımdaki yakıtlar için detaylı kinetik modellere imkân verirken sıcaklık ve madde dağılımındaki homojensizliği hesaba katarak yukarıda bahsedilen durum için çözüm sağlamaktadır. Üniform olmayan sıcaklık üzerine odaklanmış HCCI yanma sürecinin incelendiği birçok çok bölgeli model önerilmiştir. Bazılarında silindir içerisindeki sıcaklıkla birlikte madde dağılımı da dikkate alınmıştır.

Chemkin çok bölgeli modelde Aceves ve arkadaşları tarafından geliştirilmiş olan hibrid çözüm yaklaşımı kullanılmaktadır. Hibrid yaklaşımda silindir içindeki başlangıçtaki madde dağılımı ve sıcaklığı hesaplamak için reaktif

olmayan akışkanlar mekaniği simülasyonu kullanıldıktan sonra kimyasal kinetiklerin önemli olmaya başladığı anda detaylı bir reaksiyon mekanizması kullanılarak tutuşma, ısı dağılımı ve emisyonların hesaplanması için çok bölgeli model kullanılmaktadır. CFD adımı, çok bölgeli modelde uygun bölgelerin kurulması için önemli olan başlangıçtaki silindir içi sıcaklık ve madde dağılımı bilgisini sağlar. Bu yaklaşım özellikle silindir içindeki artık gazların yüksek seviyelerde olduğu durumlarda yararlıdır. Her bir bölge için başlangıç şartları tanımlandığında çok bölgeli model, maksimum basınç ve emisyonlar için nispeten iyileştirilmiş sonuçlar sağlayabilir. Hibrid yaklaşım, sadece bir seçenek olup çok bölgeli model, emme supabı kapanışından sonra başlayan simülasyonda belirtilen ısı transferi parametrelerinin kullanımıyla CFD sonuçlarından bağımsız olarak da kullanılabilir.

Gaz sıcaklığının silindir içerisindeki dağılımına göre silindir hacmi, hayali bölgelere bölünmüştür. Çok bölgeli modelde her bir bölge, bölgedeki kütlenin korunduğu kapalı homojen reaktör gibi hareket eder. Basıncın tüm bölgelerde aynı olduğu ve tüm bölgelerdeki hacimlerin toplamının o andaki silindir hacmine eşit olduğu varsayılmaktadır. Bölgeler arasında ısı transferi olmadığı kabul edilir. Bölgeler arasındaki tek etkileşim basınç ışıdır, eğer bir bölge içerisinde yanma oluşursa bölge, işi harcamak için diğer bölgeler üzerine genişlemektedir. Bu modelin formülasyonuna ilişkin varsayımlar aşağıda özetlenmiştir.

- Tüm bölgeler aynı basınca sahiptir.
- Bölgeler arasında kütle ve ısı transferi olmaz. Bölgeler arasındaki tek etkileşim sıkıştırma ışıdır.
- Bölgelerin toplam hacmi, tek bölgeli İYM modelinde kullanılmakta olan piston-krank ilişkisi ile hesaplanan silindir hacmine eşit olmalıdır. Bu durum bölge/silindir basıncı tanımlamasının kullanımını kısıtlamaktadır.

Chemkin çok bölgeli model, bölge sıcaklığının, verilen bir sıcaklık-zaman profili ile kısıtlanması veya enerji eşitliğinin çözülmesi ile 2 farklı şekilde tanımlanmasına imkân vererek HCCI yanma simülasyonu için hibrid veya sıralı yaklaşım sağlamaktadır. Hibrid model, kimyasal reaksiyonlardan kaynaklanan ısı dağılımı göz ardı edildiğinde CFD'nin karmaşık geometrilerdeki ısı transferi ve akışkan dinamiği karışımının modellenmesi gücünden yararlanır. Bölge sıcaklık profilleri bir CFD çözümünden sağlanırsa çok bölgeli model, simülasyon *geçiş krank açısına* ulaşmadan önce sıcaklık profillerinden bölge sıcaklıklarını elde edecektir. *Geçiş (transition) krank açısı*, hibrid yaklaşım içerisinde çok bölgeli model kullanıldığında kimyasal kinetiklerin önemli olduğu ve artık çok bölgeli modelin enerji eşitliği ile bölge sıcaklıklarını çözmeye başlamasının gerektiği krank açısının belirtildiği kullanıcı tanımlı bir model parametresidir. Enerji eşitliği çözümüne geçişin (transitioning) çok geç olması, modelin, tutuşma zamanının belirlenmesinde çok önemli olan bazı ilk reaksiyonları kaybetmesine neden olur. Varsayılan olarak, çok bölgeli model, bölge sıcaklıklarını elde etmek için belirtilmiş olan başlangıç krank açısından itibaren enerji eşitliğini çözer.

Gaz karışımı ile silindir cidarları arasındaki toplam ısı transfer oranı, her bir bölgenin cidar ısı transferi oranlarının toplamına eşittir. Bölge cidar ısı transferi oranları, bölge sıcaklığı, bölge cidar ısı transferi katsayısı ve bölge cidar yüzey alanı ile belirlenmektedir. Cidar ısı transferi katsayısı, aynı parametre setinin kullanıldığı EK-1'de gösterilen Woschni korelasyonu ile hesaplanmaktadır. Çok bölgeli model, bölge cidar yüzey alanını, anlık silindir cidar yüzeyinin, kullanıcı tarafından tanımlanmış olan ve simülasyon boyunca sabit kalan bölge yüzey alanı dağılımı ile çarpılmasıyla hesaplamaktadır.

Çok bölgeli model çalışmaları

Fiveland ve Assanis, yanma odasının bir adyabatik çekirdek bölge ve bir termal sınır tabaka olarak bölündüğü 2 bölgeli HCCI simülasyonu oluşturmuşlardır. 2 bölge arasında karıştırma (mixing) dikkate alınmış ve

termal sınır tabaka kalınlığı, tüm motor çevrimi boyunca temel bir ısı transferi modeli kullanılarak hesaplanmıştır [36].

Easley ve arkadaşlarının çok bölgeli modelinde yanma odası 6 bölgeye bölünmüştür. Çekirdekta sabit kütleli adyabatik 3 bölge, 5. bölge ile kütle değişimi yapan dış bölge ve sınır tabakayı temsil eden 1 bölge bulunmaktadır. Termal sınır tabaka, sabit kalınlıkta kabul edilmiştir. Bölgeler arasında kütle ve ısı değişiminin olmadığı düşünülmüştür. Yanma süreci kimyasal reaksiyon seti ve kimyasal kinetikler kullanılarak modellenmiştir. Emme supabı kapanışında yanma odası içerisindeki sıcaklık ve kütle dağılımı önceden tanımlanmıştır. Yapılan çalışmayla boşluk (crevice) bölgelerinin ve sınır tabakanın, HC ve CO emisyonları üzerinde etkisi olduğu gösterilmiştir [37].

Ogink ve Golovitchev tarafından aynı yapı kullanılmıştır. Emme supabı kapanışında tahmini sıcaklık-hacim dağılımı, termal sınır tabaka için sıkıştırma ve genişleme boyunca sabit tutulan bir kalınlık atanmış ve 9 bölge kullanılmıştır. Tüm bölgeler arasında CO ve HC emisyonlarının dağılımını ve büyüklüğünü etkileyecek ısı ve kütle geçişi yoktur [38].

Xu ve arkadaşları tarafından da bölgeler arasında ısı ve kütle iletimi ihmal edilirken Easley ve arkadaşlarınca sunulan düzen ve oluşturdukları model kullanılmıştır. Modelde gerçek değerin altında CO ve gerçek değerin üzerinde HC emisyonları kullanılmıştır [20,39].

Tek veya çok bölgeli model, emme supabı kapanışında belirlenmiş ortalama sıcaklık, karışımın basıncı ve silindir içerisindeki bileşiklerin her bir yoğunluğunu kapsayan başlangıç şartları gerektirir. Bu başlangıç şartlarını bir test motorundan elde etmek zordur. Simülasyon doğruluğu için bu başlangıç şartlarının önemini hesaba katan, detaylı yanma kimyası ve gaz değişim sürecinin ikisini birleştiren 1 boyutlu HCCI çevrim modeli, emme supabı kapanışında ayarlama gerektirmeyen başlangıç şartlarına gerek duymaktadır

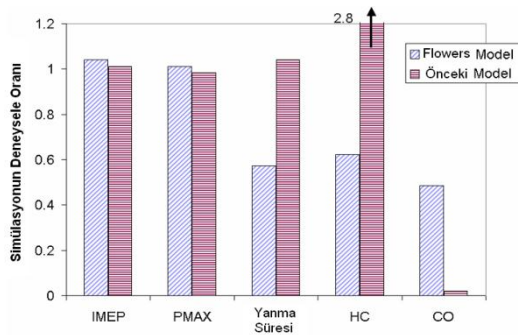
[30].

Simulasyon Yaklaşımları

Geçmişte yapılan bazı araştırmalar detaylı akışkan mekaniği kodu ve detaylı kimyasal kodunun eş zamanlı olarak hesaplanmasının günümüz sayısal kapasitesinin üzerinde olduğunu göstermiştir [22].

Aceves ve arkadaşları (2000), çok boyutlu ve çok bölgeli modellemeyi birlikte kullanmışlardır. Ancak akışkan mekaniği ve kimyayı doğrudan bağlama yerine ayrı, ardışık çok bölgeli model yöntemi geliştirmişlerdir. İlk olarak sıkıştırma esnasında ve ateşlemede kütle-sıcaklık dağılımlarını oluşturmak için KIVA-3V kodu kullanılmış burdan elde edilen veriler giriş değeri olarak yanma sürecini simüle etmede kullanılan 10 bölgeli kimyasal kinetik modele aktarılmıştır. Bölgeler arasında etkileşim yoktur ve ne ısı ne de kütle değişiminin bulunmadığı kabul edilmiştir. 2000 yılında yaptıkları çalışmada HC ve CO emisyonlarının her ikisi de tahminin altında çıkmıştır. 2001 yılında yaptıkları çalışmada incelenen birçok durumda HC emisyonları tahminin üstünde iken CO emisyonları altında çıkmıştır [22,40].

Flowers ve arkadaşları (2003), kimyasal kinetik bir çözücü bağlanmış CFD kodu ile yaptıkları çalışmada karıştırmanın (mixing), HC ve CO emisyonlarının oluşumu üzerindeki önemi gösterilmiştir [41].



Şekil 4.2. Karıştırmanın çoklu bölge modelinde hesaba katılması CO ve HC emisyonlarının tahminini daha fazla geliştirmiştir [41]

HCCI modellemenin ana amacı çok boyutlu bir CFD kodu içinde detaylı kimyasal süreçleri uygulamaktır. HCCI motorda emme süreci, yakıt püskürtme ve silindir içindeki hava hareketi, karışım oluşumunda kritik bir rol oynar. Ateşleme ve yanma sürecini etkileyecek yakıt dağılımında homojensizlik ve karışım sıcaklığı mikroskobik şekilde bulunmaktadır [42]. Yanma süresi boyunca mükemmel bir homojen karışım bulunsa bile türbülans, sıcaklık dağılımını ve silindir içindeki sınır tabaka kalınlığını değiştirecek bir etkiye sahiptir [9,43].

Kimyasal kinetiklerin sıcaklığa olan hassasiyetlerinden dolayı silindir içerisindeki küçük sıcaklık farklılıkları, yanma üzerinde dikkate değer bir etkiye sahiptir. Sonuç olarak ısı ve kütle transferleri ateşlemeden önce dolgu şartının oluşumunda önemlidir. Bu durumda detaylı kimya ile 3 boyutlu CFD, ilgili fizikokimyasal süreçleri elde etmek için uygun bir araçtır ve bu güçlü analitik araç HCCI motor araştırması için büyük bir üstünlük oluşturur [30].

Komninos, yaptığı çalışmayla modifiye edilmiş çok bölgeli HCCI modelinden elde edilmiş sonuçları farklı yük ve doldurma (boost) basınç şartları altında deney ölçümleri ile karşılaştırmıştır. Deney verilerini modeli kalibre etmek için kullanmıştır. Bölgeler, sıcaklık farklılıklarına bağlı olarak ısı, silindir içindeki uniform basıncı sağlamak için bölgelerin yapılandırmasına bağlı olarak kütle değiştirmektedir. Ayrıca model, sekman boşluk bölgelerinin temsil edildiği bir bölgeye sahiptir. Boşluk bölgeleri HC kaynağı olmaktan başka, yüksek sıcaklıkta yanma esnasında efektif sıkıştırma oranını ve kullanılabilir kimyasal enerjiyi düşürmektedir. Kimyasal kinetikler ve Chemkin kütüphaneleri kullanılarak yanmadan kaynaklanan karışım bileşiğinin değişimi NO_x , HC ve CO emisyonlarının oluşumları tanımlanmıştır [20].

Bugünlerde HCCI ateşleme zamanlaması kontrolünde, yanma oranı kontrolünde ve çalışma aralığının genişletilmesinde sorunlarla karşılaşmaktadır [30].

4.2. HCCI Modellerinin Sınıflandırılması

Günümüze kadar HCCI motor modellemek için uygulanmış modellerin 6 kategorisi bulunmaktadır. Bu 6 kategori Çizelge 4.1.'de gerekli hesaplama zamanını esas alan karmaşıklığın artışına göre listelenmiştir. Ayrıca literatürden elde edilen bilgilere göre üstünlükleri, dezavantajları ve uygulamaları karşılaştırmalı olarak listelenmiştir [30].

Ayrıntılı kimyaya sahip boyutsuz (0 boyutlu) tek bölgeli model en düşük sayısal maliyet ile hızlı parametrik çalışmalar için kabul edilmektedir. Ayrıntılı kimyaya sahip yarı (sanki) boyutlu (Quasi-dimensional) çok bölgeli model, piston segmanındaki boşlukları hesaba katabilmesinden dolayı HC ve CO emisyonlarını tespit etme kabiliyetine sahiptir [30].

Yao ve arkadaşları detaylı kimyasal kinetik bir modelle birleştirilmiş 0 boyutlu bir termodinamik model kullanarak dimetileter (DME) ve metanol dual yakıt karışımının HCCI sürecinde karşılaşılan kimyasal reaksiyon mekanizmasını araştırmak için bir sayısal çalışma gerçekleştirmiştir [44].

Ayrıntılı kimyaya sahip 1 boyutlu motor çevrim modeli, HCCI motoru çalışma sürecini, kararlı ve geçici çalışmanın her ikisinde de simüle etmek için uygulanmaktadır ve HCCI motorunun performansının araştırılması için uygundur. Ayrıntılı kimyaya sahip çok bölgeli-çoklu CFD model, emisyon tespiti için uygundur ve ön işlemci olarak CFD kullanımıyla homojensizlik dikkate alınabildiğinden ısı salınım oranı daha doğrudur [30].

Çizelge 4.1. HCCI modellerinin karşılaştırılması [30]

<i>HCCI Model Adı</i>	<i>Üstünlükleri</i>	<i>Dezavantajları</i>	<i>Uygulama Durumları</i>	<i>Gerçekleşme Süresi (dak.)</i>
<i>0D tek bölge, ayrıntılı kimya</i> [Carling-2000, Chen-2002]	En düşük sayısal maliyet	HC ve CO tahmin edilemez	Ateşleme zamanı tahmini, Hızlı parametre çalışmaları	<10
<i>Yarı (sanki) Quasi-boyutlu çok bölge ayrıntılı kimya</i> [Aceves-2000, Fiveland-2002]	Sıcaklık ve konsantrasyon homojensizliği dikkate alınmaktadır.	Her bölgenin başlangıç şartları gerekmektedir.	HC, CO tahmini Isı salınım oranı	$<10^2$
<i>Silindirde 1 boyutlu motor çevrimi ile ayrıntılı kimya</i> [Ogink-2001, Milovanovic-2004, Golovitchev-2003]	Silindir özelliğinin başlangıç şartları yoktur. Motor performansı için parametrik çalışmalar	Yakıt püskürtme, akış ve türbülans, karışım oluşumu dikkate alınmaz	Motor performans tahmin, gaz değişim sisteminin ve VVT stratejilerinin optimize edilmesi	$<10^2$
<i>Ayrıntılı kimya çok bölge ile çoklu CFD</i> [Aceves-2001]	Sıcaklık ve konsantrasyon homojensizliği dikkate alınmaktadır.	Türbülans dikkate alınamaz.	HC, CO tahmini Isı salınım oranı	$<10^3$
<i>Sadeleştirilmiş kimya çoklu CFD</i> [Kong-1992, Kong-1995, Priesching-2003, Patel-2004]	Yakıt püskürtme, akış ve türbülans, karışım oluşumu dikkate alınır.	Basitleştirilmiş yanma	Yanma sisteminin optimizasyonu	$<10^3$
<i>Ayrıntılı kimyali çoklu CFD</i> [Kong-2001, Kong-2002, Wang-2004]	Detaylı kimya ve akışkan dinamikleri, türbülans etkisi, karışım oluşumu ve yanma oranı dikkate alınır.	En yüksek sayısal maliyet	HC, CO, NO _x tahmini, HCCI fizikokimyasal süreç çalışmaları, yanma optimizasyonu	$10^3 \sim 10^5$

Wang ve arkadaşları detaylı kimyasal kinetikleri sırasıyla 0 boyutlu tek bölgeli model, 1 boyutlu motor çevrim modeli ve 3 boyutlu CFD modele uygulamıştır. Simülasyon ve deneyler doğrudan enjeksiyonlu, dört zamanlı, benzinli bir HCCI motorda gerçekleştirilmiştir. HCCI parametrelerinin ayrışık etkisini (isolating effect) araştırmak için yüksek araştırma oktan sayısına sahip benzinli, 0 boyutlu model geliştirilmiştir. İki aşamalı doğrudan enjeksiyonlu (TSDI) ve negatif supap bindirmeli (NVO) benzinli HCCI motorunda gaz değişim sürecini ve doğrudan enjeksiyon stratejisini araştırmak için yüksek araştırma oktan sayısına sahip 1 boyutlu motor çevrim model geliştirilmiştir [30].

Yanma odasında kendi kendini ateşleme noktalarının dağılımının analizi yardımıyla 2 bölgeli HCCI yanmada ateşleme kontrol mekanizmasını araştırmak için yüksek araştırma oktan sayısına sahip 3 boyutlu motor çevrim modeli geliştirilmiştir. Geliştirilen 3 modelin geçerliliği deneylerle onaylanmıştır. Simülasyon sonuçları HCCI motorda yanma ve kirlenici oluşumunu etkileyen süreçlere detaylı bir bakış sağlamıştır [30].

HCCI'nin iki önemli problemi ateşleme zamanlamasının kontrolü ve yüksek yük genişlemesinin çözümü için İki aşamalı doğrudan enjeksiyonlu (TSDI) yakıt stratejisi ve iki bölgeli HCCI yanma benimsenmiştir [30].

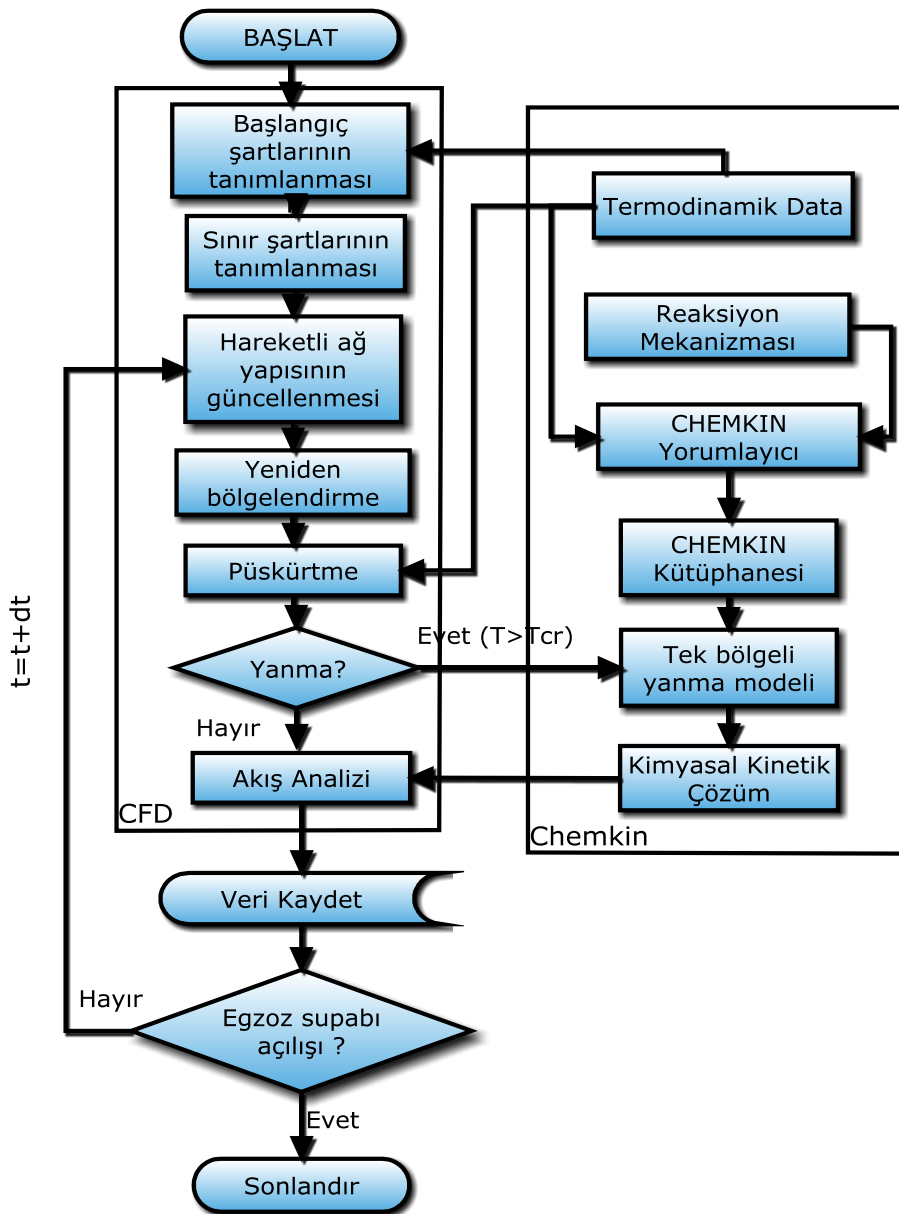
Ohashi ve arkadaşları CFD hesaplamalarını gerçekleştirmek için KIVA ve VECTIS kodlarını kullanmışlardır. Hesaplanan ateşleme gecikmesi değerlerinin ölçümler elde edilen değerlerle karşılaştırıldığında yeterince doğru olduğu düşünülmektedir. İlk olarak Curran'ın reaksiyon mekanizmasındaki bileşiklerin ve reaksiyonların sayılarını azaltmış, Arrhenius katsayısının ayarlanması için genetik algoritma kullanılmıştır. Reaksiyon hesaplamaları 3 boyutlu CFD kodları olan VECTIS ve KIVA'ya uyarlanmıştır. Gerçek motor çalışma durumu için azaltılmış ve optimize edilmiş reaksiyon mekanizmaları ve 3 boyutlu CFD kodları test edilmiştir [25]. İzo-oktanda farklı yakıt hava oranları için hesaplanmış ateşleme gecikmesinin eğimi geleneksel

supap zamanlaması ile ölçülmüş değerle uyuşmaktadır. Hesaplamalardaki salınan ısı değeri, deneysel ölçülen değerden çok az farklı çıkmıştır. Dahili EGR ve dahili EGR+doldurma (boost) da ateşleme zamanlaması ölçülen değerle aynıdır. 3 boyutlu hesaplamalar, deneysel ölçümlerle bulunamayan ateşleme konumunu da gösterebilmektedir [25].

Wang ve arkadaşları (2006), yardımcı enjeksiyonlu doğrudan benzin enjeksiyonlu HCCI motorun sayısal incelemesini, çok boyutlu sayısal akışkan dinamiği kodu ve detaylı kimyasal kinetiklerle gerçekleştirmiştir. 3 boyutlu CFD kodu için AVL FIRE yazılımı, detaylı kimyasal kinetikler içinse Golovichev'in izo-oktan oksidasyon mekanizması kullanılmıştır. Doğrudan enjeksiyonlu HCCI motorun deneysel verileri ile 3 boyutlu CFD-kimyasal model doğrulandıktan sonra 2 aşamalı enjeksiyon stratejili benzin doğrudan enjeksiyon HCCI motorunun emme, püskürtme, yanma ve emisyon oluşumunu simüle etmek için çalıştırılmıştır. Kullanılan modeller, karmaşık, çok boyutlu geometrilerde emme akış yapısını, püskürtme atomizasyonunu, damlacık buharlaşmasını ve gaz fazı kimyasını hesaba katmaktadır. Hesaplanan sonuçlar, ikinci enjeksiyon ile oluşan zengin bölgenin çevresinin ilk tutuştuğunu sonrasında zengin bölgenin tutuştuğunu bununda ilk enjeksiyon ile oluşmuş olan fakir karışım bölgesinin çevresini tutuşturacak başlangıç olduğunu göstermiştir. İki bölgeli HCCI'nin sıralı (ardışık) yanmaya yol açtığı bu durumun tutuşma zamanlamasını ve yanma oranını kontrol edilebilir hale getirdiği tespit edilmiştir. İki aşamalı enjeksiyonla HCCI yük aralığının genişletilebileceği ancak zengin bölge çevresindeki şiddetli yanmanın hafifçe yüksek NO_x emisyonlarına neden olacağı tespit edilmiştir [1].

Şekil 4.3'de CFD ve Chemkin bağlantılı hesaplama akış diyagramını göstermektedir. HCCI motordaki kimyasal bileşenler, püskürtme ve yanma için önceden tanımlanmış olmalıdır. FIRE yazılımındaki hesaplama kaynak terimleri FORTRAN formatındaki kullanıcı altprogramlarının derlenmesiyle kullanıcının ulaşabileceği şekilde tamamen açık kaynaktır.

Hem kimyanın hem de akış türbülansının etkilerini hesaba katmak için FIRE'da, CHEMKIN kütüphanesine bağlanarak örneğin homojen reaksiyon çözebilen bir kimya çözücüsü bulunmaktadır. Her bir zaman adımının başlangıcında her bir sayısal hücre için 1 tek bölgeli reaktör modeli çağrılmakta, böylece detaylı reaksiyon mekanizması hesaba katılmaktadır [1]. Şekildeki bağlantıya benzer şekilde CFD yazılımı olarak KIVA kodu da Chemkin yazılımıyla birleştirilmektedir.



Şekil 4.3. CFD-Chemkin hesaplama akış diyagramı [1]

5. MODELLEMEDE KULLANILAN KODLAR VE MODELLER

5.1. KIVA Kodu

KIVA, özellikle İYM'lar üzerinde doğrudan kullanıma sahip bir koddur. KIVA püskürtme kimyasal reaksiyonlu akımlarda geçici rejimde, 3 boyutlu, çok fazlı, çok bileşenli koddan meydana gelmiştir ve Los Alamos Ulusal Laboratuvarı'nda (ABD) yazılmıştır. Kod, düşük hızlardan süpersonik hızlara kadar olan akımlarda, tüm laminar ve türbülanslı rejimlerde çalışabilmektedir. Olası partikül metodu ile sıvı spreylerinin buharlaşması, tanecik çarpışmaları ve aerodinamik parçalanma hesaplanabilir. Kod, her ne kadar İYM'lar için yazılmış olsa bile, kodun modüler olmasından dolayı kimyasal reaksiyonları içeren çeşitli hidrodinamik problemlerini de çözebilmektedir. Fakat en yaygın olarak otomotiv alanında kullanılmaktadır [45].

Fiziği çok fazla içeren KIVA analizleri, motorun bir silindirindeki akışkan dinamiğinin, yakıt püskürtme dinamiğinin, yanma ve kirlenici oluşum reaksiyonlarının ve ısı transferinin birleşimidir. Yazılım motor tasarımcılarına gerçek bir motor yapmaksızın motor geometrisindeki değişikliklerin etkilerini görmelerine imkân verir. Kullanıcı yanma sürecini canlandırmak için sonuçları bir bilgisayar grafik paketi ile birleştirebilir. Kullanıcı yakıt-hava karışımının ilk olarak nasıl ateşlendiğini, alevin ilk ateşleme noktasından nasıl büyüdüğünü, yanma odası boyunca nasıl yayıldığını görebilir. Optimum motor koşulları için azotoksit veya zararlı emisyonların seviyelerinin tahminleri elde edilebilir [4].

Aynı zamanda akış yollarının, supap ve piston hareketi ile ayrılmış olduğu, her bir parçanın diğeri ile fiziksel temas halinde olduğu zamanda, motor silindirindeki yanma yanı sıra emme ve egzoz manifoldlarındaki hesaplamaları eş zamanlı başlatmaya olanak veren, emme ve egzoz akışlarının ikisini de ele almaktadır. Yeni sürümünde araştırmacılar ve otomotiv endüstrisi, hesaplamalarla gerçek deney verileri arasında iyi bir uyuma olduğunu göstermişlerdir. Böylece yeni sürüm, otomotiv endüstrisinin artırılmış yakıt

verimliliğine ve azaltılmış emisyonu sahip araçların tasarımlarında kullanılabilecektir [4].

64 bitlik linux işletim sistemleri (opensuse 11.0 ve ubuntu tabanlı caelinux) ve bu sistem üzerinde çalışan fortran yazılım dili derleyicisi (intel fortran 64 bitlik 11.0.083) ve gerekli sanal kütüphaneler (gcc, g++, gnu make) kurulmuş, net üzerinden güncellemeleri ve ayarlamaları yapılmıştır. Makefile ve fortran derleyicisi kullanılarak KIVA4 kodları derlenmiş ve oluşan yazılım çalıştırılmıştır.

5.1.1. KIVA kodunun gelişimi

1985’de ilk ortaya çıktığından bu yana KIVA yazılımları çok boyutlu yanma modellemeleri için kullanılan sayısal akışkan dinamiği yazılımları içinde en yaygın kullanılanı olmuştur.

1989’da KIVA II’nin ve geliştirilmiş sayısal çözüm algoritmasının sunulmasıyla dünya çapındaki ilgi büyümüştür. Ancak yine de her iki versiyon da karmaşık sınır şartları içeren herhangi bir uygulama veya karmaşık motor geometrileri için oldukça yetersizdir.

1993’de KIVA-3’e bir blok-yapısal ağ (block-structured mesh) eklenmiş ve yazılım, silindir duvarındaki giriş ve çıkış portlarını içeren modelleme geometrileri için kullanışlı bir araca sahip olmuştur.

Mart 1997’de KIVA-3V’ün sunulmasıyla, supapların hareket etmesi mümkün hale gelmiştir. KIVA, silindirde supap ve portları olan 2 ve 4 zamanlı herhangi tasarımın sanal olarak motor çevrim hesaplamalarının uygulanabildiği bir yazılım olarak olgunlaşmıştır. KIVA-3V, port yakıt enjeksiyon (PFI) ve doğrudan enjeksiyon kıvılcım ateşleme (DISI) veya benzin doğrudan enjeksiyon (GDI) motorlar, büyük veya küçük silindirli dizeller üzerine çalışmalarda uygulanmaktadır. Programın yetenekleri, karmaşık geometrileri,

kimyasal reaksiyonları, sıvı püskürtmeleri ve cidar tabakaları içeren diğer çeşitli uygulamalar için de ilgi çekici yapmaktadır [15].

1999'da sürülen KIVA-3V2'nin ikinci sürümü, 1997'den itibaren geçen iki yıl içinde koda eklenmiş olan düzeltme ve özellikleri içermektedir. Yakıt enjeksiyonlu motorlardaki araştırmalar için bölünmüş bir enjeksiyon seçeneği eklenmiştir. Yeni bir altprogram yakıtın gaz ve sıvı fazlarının yerlerini izlemekte ve yanma için enerji dengesini çalıştırmaktadır. Veri ve emisyonlar izlenmekte ve çıktı alınabilmektedir. Parçacık temelli sıvı-cidar tabaka modeline yapılan eklemeler, modeli bir parça daha tamamlamıştır [15].

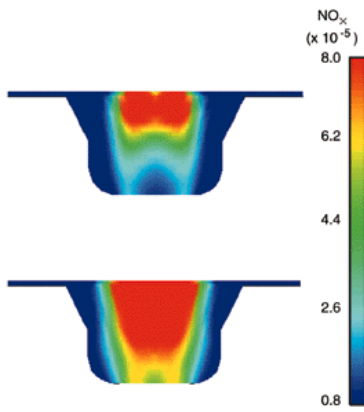
KIVA'nın orijinal yazarları dışında, yeni alt modeller Wisconsin Üniversitesinin Motor Araştırma Merkezi gibi gruplar tarafından geliştirilmektedir. ORNL'deki girişimler de yüksek derecede doğru buji ateşleme, ısıma ısı transferi ve türbülans modelleri ekleme yolundadır [4].

5.1.2. KIVA koduyla yapılmış çalışmalar

KIVA modellerinin en büyük kullanıcılarından biri başlangıcından beri gelişimi ile yakından ilgilenmiş olan General Motors şirkettir. Sadece Cummins Engine, Ford, Chrysler, Caterpillar ve John Deere gibi motor üreticileri değil aynı zamanda kömür yakılan kazanları yapan ve kullanan diğer şirketlerde KIVA'nın kullanıcıları arasındadır. Birleşik devletlerde kömür, elektriğin %56'sını ve toplam enerji ihtiyacının %17'sini karşılamaktadır. KIVA, yeni nesil kazanların geliştirilmesinde gerekli olan kömürün yanma modellemesi için kullanılmaktadır [4].

Azotoksit (NO_x) emisyonları asit yağmurlarını ve fotokimyasal dumanı büyük ölçüde oluşturduğundan ABD'de son yirmi yıl boyunca NO_x kontrolü önemli bir ulusal sorun haline gelmiştir. Günümüz teknolojileri NO_x emisyonlarını kontrol etmek için ya sıcaklığı, silindirde kalma zamanını, stokiyometriyi kontrol etmek için yanma bölgesini düzenlemektedir ya da yanma sonrası

NO_x molekülü ile reaksiyona giren azot ve su oluşturan indirgen maddeler kullanmaktadır. Diğer çözümler emisyon üzerindeki giriş parametrelerinin etkilerinin çalışılmasıyla geliştirilebilir ve bunun yapımında KIVA modeli yararlı olabilir. Kıvılcım enerjisi gibi bazı giriş parametrelerinin kontrolünde teknolojik zorlukların olacağı dikkate alınmalıdır. ORNL'deki bir kıvılcım kontrol deneyi, emisyonlar üzerindeki giriş kıvılcım enerji karakteristiklerinin etkilerini incelemek için KIVA kullanan yeni görüşü temel almaktadır [4].



Şekil 5.1. Sıra tipi bir motor için ateşlemeden sonra kıvılcım enerjisinin azot oksit konsantrasyonu (g/cm^3) üzerine etkisinin gösterilmesi [4]

Yanma ve emisyon süreçleri için ileri düzeyde tahmin yapabilmek için öneriler, çevreye duyarlı teknolojilerin ve yeni nesil taşıtların tasarlandığı çalışmalardan gelmektedir. Mevcut simülasyon yazılımları, motorların ve diğer endüstriyel yanma sistemlerinin karmaşık geometrilerini ve detaylı fiziksel süreçlerini canlandırma yetenekleri bakımından sınırlandırılmıştır. Artan yakıt ekonomisi ve azalan emisyonlar gibi yönelimler sık sık çelişmektedir, gerekli denge özenli optimizasyon ile gerçekleştirilmelidir. Tasarımcılar, hedeflerini karşılayan optimize edilmiş bir motor tasarımına ulaşmak için çeşitli parametreleri piston tepesindeki yanma odası geometrisi, girdap, yakıt enjeksiyon basınç ve oranı, nozul geometrisi, nozul sayısı, sıkıştırma oranı, ateşleme zamanı ve enerjisi gibi) göz önüne almalıdırlar. Sayısal modeller, sadece bir tasarım çalışması aracı sağlamayıp ayrıca motor yanma fiziğinin daha anlaşılmasına yol açabilmektedir. Fiziksel

süreçler içindeki yeni anlayışlar, onları kaynak alan yeni yollara sebep olabilmektedir [4].

Bella ve arkadaşları yaptıkları çalışmada endüstriyel problemleri çözümüne gelecekte uygulamak için 3 boyutlu (3D) ve 1 boyutlu (1D) kodların birleşiminin sayısal uygulamasına odaklanmıştır. Çalışmada 3 boyutlu olarak KIVA3V kodunu, bir boyutlu olarak kendi geliştirdikleri 1D yazılımı kullanmışlardır. Standart KIVA kodu ile geliştirdikleri tek boyutlu gaz dinamik kodu arasındaki bazı bağıntıların yapılma imkânı gösterilmiştir [13].

Sterno ve arkadaşları yüksek hızlı, tek silindirli, doğrudan enjeksiyonlu bir dizel motorunun is-duman emisyonunu incelemek için sayısal bir çalışma gerçekleştirmiş. Güncel KIVA sayısal akışkanlar mekaniği kodu ve standart buharlaştırma modeli yardımıyla deneysel yönelimin tahmin edilebileceği gösterilmiştir. Özellikle yüksek hız koşullarında, uygun olmayan hava/yakıt karışımının belirtisi, ısı yayılım analizlerinin oranları yardımıyla görülmüştür. Bu uyuşmazlığı azaltmak için KIVA dağılma ve buharlaşma modellerine iyileştirmeler yapılmıştır. Modifiye edilen modellerin sonucu olarak atomize olan sıvı jetin dağılımında düzelmeler görülmüştür. Böylece etkileyici karışım oranları ve duman emisyonları tahmin edilmiştir. Motor test sonuçları, is-duman emisyonlarının, yanma odasına çarpma ve nozul delik sayısı gibi nozul-enjektör memesi parametrelerine duyarlı olduğunu göstermiştir. Yakıt-hava karışımının ve kimyasal kinetik etkilerin is-duman oluşumunun oranını kontrol ettiğine inanılmaktadır. Çalışmada, CFD kodu KIVA kodunun güncellenmiş sürümü, KIVA-3VR2, buhar kütle ve momentum bağıntısının gaz fazına daha iyi betimlemesine yardımcı olmak için modifiye edilmiştir. Amaç daha güçlü bir model türetilerek daha kesin hava/yakıt karışımını betimlemek ve böylece tek silindirli, yüksek hızlı dizel motorun emisyonlarını tahmin etmektir. Orijinal KIVA'nın emisyonlar, kümülâtif ısı salınımı ve ısı salınım oranlarında gözlenmiş olan uyuşmazlıklardan dolayı yüksek hızlı, yoğun püskürtmelerin, karışımının daha iyi bir betimlemesinin yapılması için

özellikle KIVA'nın dağılım ve buharlaştırma modellerinde iyileştirmeler yapılmıştır [46].

KIVA3V kodu, dizel motorlarında yanma simülasyonları için türbülans, gaz/duvar ısı transferi, püskürme dağılım ve çarpışma, ateşleme, yanma, NO_x ve is-duman modelleri gibi alt modellerle bütünleştirilmiştir. Türbülans, “standart k- ϵ modeli” kullanılarak modellenmektedir. Ateşleme gecikmesi, Kong ve arkadaşları tarafından tanımlanmış çok adımlı “Shell modeli” kullanılarak tahmin edilmektedir. Silindir basıncı, ısı yayılım oranı, kümülâtif ısı yayılımı ve is-duman ve NO_x emisyonlarına göre KIVA yardımıyla tahmin edilen detaylı sonuçlar, deneysel olarak elde edilmiş verilerle karşılaştırılmış ve 1000 1/min ve 4200 1/min çalışma şartları için kayıt yapılmıştır [46].

İki motor hızı ve iki enjektör tipi ile çalışan tek silindirli dizel motorun deneysel olarak ölçülen silindir basıncı ve emisyon verileri ile birlikte termodinamik olarak türetilmiş olan ısı yayılım oranları KIVA3V CFD yazılımı kullanılarak oluşturulmuş simülasyonlarla karşılaştırılmıştır. Emisyonların deneysel yönelimleri KIVA yardımıyla tahmin edilmiş, bununla birlikte tüm simülasyonlarda egzoz supabı açılışındaki is-duman ve NO_x ölçümlerinin büyüklükleri sırasıyla fazla ve düşük çıkmıştır. Düşük hızlara ait ısı yayılım tahminleri deneysel türetilenlerle iyi uyuma gösterse de yüksek hız durumlarında bazı çelişkiler görülmüştür. Tamamıyla etkili bir tahmin aracı olarak kullanmadan önce kütle ve momentum bağıntıları için bu yeni modelleme tekniklerinin gerçek motor test sonuçlarına uygulanması ile modellere olan güvenin artırılmasıyla daha geçerli olması gerekmektedir [46].

Buji ile ateşlemeli motorlarda ısı transferi, enerji dönüşümü açısından en önemli bakış açısidir. Katı cidar üzerindeki sıcak noktaların yerleşimi, daha iyi bir soğutma sistemi tasarlamak için bir destek olarak kullanılabilir. Katı cidarlar ve yanma odası arasındaki hızlı geçici ısı akısı, kararsız termal ortamın etkilerinin anlaşılması için incelenmelidir. Motorun katı kısmına olan ısı iletimi eşitliğini çözmek için KIVA kodu içine sayısal bir model geliştirilmiş

ve uygulanmıştır. Modifiye edilmiş KIVA kodunu test etmek için 5.4 litre V8 Ford motoru kullanılmıştır. İYM'da hava yakıt karışımı, kimyasal reaksiyondan mekanik iş üretilen bir ortamdır. Yanma sonucu oluşan ısının uzaklaştırılmasındaki yetersizlik sonucu motorda daha yüksek termal gerilmeler oluşur. Geliştirilmiş bir soğutma sistemi termal gerilmeleri azaltarak motorun kullanım ömrünü uzatır. Yanma ürünlerinden silindir cidarlarına olan hızlı geçici rejimde ısı akışı ve soğutma kanallarına olan geçici rejimde ısı kaybı İYM'da ısı transferi sürecini etkileyen en önemli faktörlerdir. Hareket eden piston ve supaplardan dolayı bu tür bir uygulamanın kararlı durum koşullarına asla ulaşamayacağına dikkat edilmelidir. KIVA kodu içindeki modelin iyileştirilmesi, katı ve sıvı fazların ikisine de sıvı-katı ara yüzünde enerji dengesinin uygulanması ile gerçekleştirilmiştir [47].

Urip ve arkadaşları yaptıkları “İYM’lar için kararsız termal sınır şartlarında ısı iletiminin sayısal incelenmesi” isimli çalışmada ısı iletimi eşitliğini çözmek için sayısal bir model geliştirmiş ve geçerliliğini kanıtlamıştır [48].

Das ve arkadaşları doğrudan benzin enjeksiyonlu bir motordaki silindir içi akış üzerine sayısal ve deneysel çalışma yapmıştır. Bir motorun akış alanının incelenmesi, doğrudan benzin enjeksiyonlu (Direct Injection Gasoline-DIG) yanma sisteminin geliştirilmesinde önemli bir role sahiptir. Çalışma için deneysel tanecik görüntü hızölçeri (Particle Image Velocimetry-PIV) ile birlikte KIVA-3V çok boyutlu kodu kullanılmıştır. İlk olarak aynı konum vektör matrisi kullanılarak deneysel tanecik görüntü hızölçer sonuçları ile KIVA-3V simülasyon sonuçları karşılaştırılmıştır. Tanecik görüntü hızölçeri ölçüm yöntemi ve KIVA-3V CFD kodu, DIG motorda silindirdeki karışım hareketinin incelenmesinde kullanılmıştır. Tanecik görüntü hızölçeri veri analizlerinde kullanılan araç sadece CFD karşılaştırılması için veri sağlamaya yardım etmemiş aynı zamanda örnekleme zamanını da oldukça düşürmüştür. Kodda kullanılan sayısal modeller, deneyde gözlenmiş olan yönelimleri doğru tahmin etmiş böylece parametrik çalışmalar için bu tarz kodların kullanımının güvenilirlik seviyesini artırmıştır. Supap düzlemlerinde gözlenmiş olan bazı

eliřkilerin, deney motorunun geometrisinin simlasyondakine birebir benzememesinden kaynaklandıęı řeklinde yorumlanabilir. Bu farklılık, motor paraları arasındaki mekanik aşınmadan kaynaklanmaktadır. alıřma, DIG motordaki silindir ii akıř karakteristiklerinin anlařılmasında bir ara olarak ok boyutlu modellemenin kullanılabilirlięini gstermiřtir [16].

Bianchi ve arkadaşları emme ve sıkıřtırma strokundaki hesaplamalar iin STAR CD'yi, pskrtme ve yanma tahmini iin de KIVA'yı kullanarak STAR CD ve KIVA motor simlasyonlarını birleřtirmiřtir [49].

Kong ve arkadaşları bir pskrtme ve yanma model ktphanesi geliřtirmiř ve eřitli motor CFD kodları iine uyarlamıřtır. Modeller, Wisconsin niversitesinin Motor arařtırma merkezindeki KIVA kodu temel alınarak geliřtirilmiřtir. Sunulan alıřma, modellerin STAR CD kodu iine uyarlanmasını tarif etmektedir. Motor arařtırma merkezinin modelleri ve STAR CD kullanımına ait ilk sonular sunulmuřtur. Modern fiziksel ve kimyasal alt modellerin, uygun bir ara yz iřlemi yardımıyla CFD motor kodlarının iine kolaylıkla yerleřtirilebileceęi gsterilmiřtir. Geliřtirilen motor silindir modellerinin ana amacı gerekleřtirilecek motor tasarımı ařamasında gereki motor simlasyonlarına imkan vermektir. alıřmada Wisconsin niversitesinin motor arařtırma merkezinin KIVA programı iin geliřtirdięi model ve ticari CFD yazılımı STAR CD iinde kullanılmıř ve daha nce yapılan bir deney simle edilmiřtir. Montgomery ve Reitz'nin 1996'daki deney verileri ile modelin tahminleri makul bir uyurřma gstermiřtir. Fakat modelde piston-segman yarıęı dikkate alınmadıęı iin silindir basıncının sayısal tahmini llenden fazla ıkmıřtır. Ayrıca simlasyonda kararsız cidar ısı transferi modeli de kullanılmamıřtır. Isı ve trblans modellerinin, yanma tahminlerini nemli bir řekilde etkiledięi bilinmektedir. Ayrıca segman ağız aralıęı akıřı, Rayleigh-Taylor pskrtme daęılması, nozul akıř etkileri ve kararsız ısı transferi gibi dięer modellerin de uyarlanması arařtırılmaktadır [17].

Han ve arkadaşları bir dizel motorunda çoklu enjeksiyon kullanarak is-duman ve NO_x emisyon mekanizmasını azaltmak için çok boyutlu hesaplamalar gerçekleştirmiştir. Deneysel sonuçlara göre yüksek basınçlı, çoklu enjeksiyonlarda (her bir güç çevrimi için iki veya daha fazla enjeksiyon yapan enjektör sistemi) tek seferde enjeksiyon yapanlara göre daha az is-duman ve NO_x emisyonu ortaya çıkmaktadır. Çoklu enjeksiyona sahip bir dizel motoru için çok boyutlu hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Farklı enjeksiyon düzenleri ve zamanlamaları dikkate alınmıştır. Tahmin edilen silindir basıncı, ısı yayılım oranı, is-duman ve NO_x emisyonları ölçülen değerlerle karşılaştırılmıştır. Modeller üzerinde düzeltmeler yapıldıktan sonra tahmin ve ölçüm arasında uyumlar elde edilmiştir. Düzeltmeler, RNG (Renormalization group) $k-\epsilon$ türbülans modeli kullanımını, yeni bir cidar ısı transferi modelinin uyarlanmasını, nozul çıkışındaki yakıt jetinin büzülmesini modelleyecek nozul boşalma katsayısının tanımlanmasını içermektedir. Hesaplamalara dayanılarak çoklu enjeksiyon kullanarak emisyonları azaltmak önerilmiştir [50].

Uludoğan yaptığı çalışmada doğrudan enjeksiyonlu bir dizel motorunda motor hızının yanma sürecine ve emisyonlarına etkisini modellemiştir. Önceki çalışmalar, doğrudan enjeksiyonlu bir dizel motorunda hava hareketinin, yanma sürecini ve bundan dolayı emisyonları da etkilediğini göstermektedir. Çalışmada motor hızının, emisyonlar, motor gücü, motor ve egzoz sıcaklıkları üzerine olan etkilerini incelemek için çok boyutlu bir bilgisayar kodu kullanılarak motor hızlarının geniş bir aralığındaki çalışma simüle edilmiştir. Sonuçlar daha yüksek motor hızlarında hava-yakıt karışımı daha iyi geliştiği için yakıtın daha çabuk tükendiğini, daha kısa yanma süresinin, is ve NO_x oluşumu için daha az zaman verdiğini ayrıca daha iyi gelişen yakıt-hava karışımının yakıt bakımından zengin bölgeleri azalttığı için de is ve NO_x emisyonlarını düşürdüğünü göstermiştir. Ayrıca çalışma, çok boyutlu modellerin kullanımının yanma sürecini anlamaya yardımcı olduğunu göstermektedir [51].

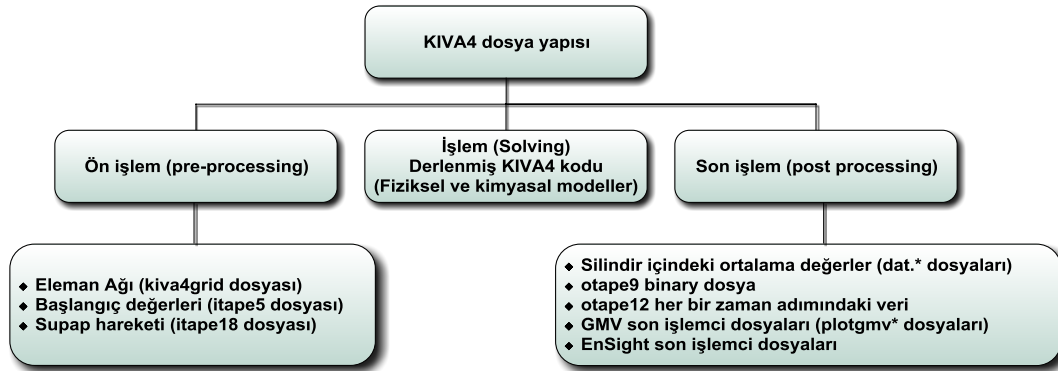
Uludođan ve arkadaşları yaptıkları alıřmada dođrudan enjeksiyonlu dizel motoru emisyonlarını azaltmak iin oklu enjektrler ve blnmř enjeksiyon kullanımını arařtırmıřtır. Dřk emisyon seviyelerini sađlarken dizel motorunun g yođunluđunu artırma yntemlerini arařtırmak iin sayısal modelleme kullanılmıřtır. nceki deneysel alıřmalar, dođrudan enjeksiyonlu dizel motorlarında enjeksiyon oranı profillerinin ve enjektr yapılarının partikl ve NO_x emisyonlarında ve performansta nemli roller oynadıđını gstermektedir. Bununla beraber sistematik alıřmaların ve pskrtme atomizasyon mekanizmasının, karıřımın oluřum ve dađılımının ve sonrasında pskrtme/pskrtme ve pskrtme/girdap etkileřimindeki yanma srelerinde ve akıř yapılandırmalarının anlařılmasında bir bořluk vardır. alıřmada blnmř enjeksiyonlar ve oklu enjektr yapılarının, dizel motoru emisyonları zerine etkileri ok boyutlu bir bilgisayar kodu kullanılarak sayısal olarak incelenmiřtir. Daha iyi yakıt-hava karıřımının etkilerinin arařtırmak iin farklı enjektr konumlarında, pskrtme ynlerinde oklu enjektrler kullanılmıř ve arpma aıları alıřılmıřtır. Pskrtme ve yanma odası arasındaki etkileřim de sistematik olarak incelenmiřtir. Dřk emisyon seviyelerini sađlarken, dizel motorunun g yođunluđunu artırmak iin oklu enjektrlerin kullanım potansiyeli ortaya ıkarılmıřtır [52].

5.1.3. KIVA4 dosya ve zellikleri

KIVA kodları alıřılacak duruma uygun biimde dzenlendikten sonra, alıřma klasr iindeki KIVA3d klasrnde bulunan fortran dilinde yazılmıř 111 altprogramın makefile dosyası iinde belirtilen fortran derleyicisinin (intel fortran derleyicisi) komutu (ifort) ile derlenerek alıřtırılabilir bir KIVA4 yazılımı oluřturulur.

Hazırlanan yazılımın alıřması iin problemin giriř kořullarının tanımlandıđı bir “itape5” dosyasının, problemin geometrisinin, mesh veya grid yapısının bulunduđu “KIVA4grid” dosyasının, supap hareketinin belirtildiđi “itape18”

dosyasının aynı klasörde bulunması gereklidir. KIVA4 dosya yapısı Şekil 5.2'de gösterilmektedir.



Şekil 5.2. KIVA4 dosya yapısı

itape5 dosyasında probleme bağlı olarak motor geometrisi ve çalışma şartları, numerik model sabitleri ve çıktı kontrolüne ilişkin aşağıda belirtilen özellikler ve bunların değerleri bulunmaktadır.

Çıktı aralıklarına ilişkin ayarlar, hesaplamanın sonlandırılması için çevrim sayısına veya krank açısına göre ayarlar, silindir geometrisi ile ilişkili değerler, motor devri, simülasyonun başlangıç zamanındaki krank açısı değeri, motor zamanı, 2 veya 3 boyutlu mesh yapısı ile ilgili bilgiler, kütle, momentumun, basınç iterasyonunun, ısı difüzyonunun, türbülans kinetik enerjisi difüzyonunun (k) ve epsilon (ϵ) difüzyonunun kapalı çözümlerindeki müsaade edilen bağıl hata değerleri, silindir, kapak ve piston sıcaklıkları, sabit sıcaklık veya adyabatik cidar için değer, kinetik reaksiyonların hesaplamasının başlangıç sıcaklığı, denge reaksiyonlarının hesaplanmasının bitirileceği sıcaklık değeri, ateşlemeye başlangıç zamanı veya krank açısı değeri, ateşleme bölgesinin konumu, enjektör nozullarının sayısı ve parçalı enjeksiyon için çevrim başına enjeksiyon sayısı, zamana veya krank açısına bağlı enjeksiyona başlangıç süresi, püskürtülecek madde miktarı, tanecik sayısı ve püskürtme karakteristiği, yakıt damlacıklarının giriş sıcaklığı, yakıt damlacıklarının dağılma ve buharlaşma modelleri için değerler, enjektör

memesinin konum ve açı bilgileri, yakıttaki bileşik sayısı, reaksiyonlarda kullanan maddelerin moleküler ağırlıkları, oluşum entalpisi, yakıtın oksidasyon reaksiyonu için stokiometrik katsayı değerleri, başlangıç noktası basınç, sıcaklık ve türbülans kinetik enerjisi yoğunluk değerleri, karışımın başlangıç noktasındaki eşdeğerlilik oranı, başlangıç sırasında silindirde bulunan maddelerin miktarları, kinetik reaksiyon sayısı ve bu reaksiyonlarda kullanılacak katsayılar, denge reaksiyon sayısı ve bu reaksiyonlarda kullanılacak katsayılar, supaplar için sayı, boyut, sıcaklık, açı ve hareket değerleri, is hesaplaması için gerekli katsayı ve ayar değerleri, ortam sıcaklık ve türbülans kinetik enerjisi (k) değerleri, deneysel verilerden elde edilmiş krank açısına bağlı karter ve egzoz portundaki basınç değerleri.

KIVA4 kodu ile hazırlanan yazılımın çalışması için problemin giriş koşullarının tanımlandığı, problemin geometrisinin, ağ veya grid yapısının bulunduğu, supap hareketinin belirtildiği dosyalar düzenlenmiştir. Giriş koşullarının tanımlandığı dosyada probleme bağlı olarak motor geometrisi ve çalışma şartları, nümerik model sabitleri ve çıktı kontrolüne ilişkin aşağıda belirtilen özellikler ve bunların değerleri bulunmaktadır.

itape18 dosyasında her bir krank açısına bağlı olarak cm biriminden supap hareket miktarı belirtilmektedir.

Yanma olayının olduğu durumlarda kullanılan “datahk” dosyasında 12 adet (O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , H , H_2 , O , N , OH , CO , NO , HO_2) bileşiğin janaf termokimyasal tablolarından alınmış sıcaklığa bağlı entalpi değerleri bulunmaktadır.

KIVA3d klasörü içindeki “fuelib.f” dosyasında yakıt veya püskürtme amaçlı kullanılan 41 adet bileşenin termofiziksel özellikleri saklanmaktadır. Bu özellikler moleküler ağırlık, oluşum entalpisi, gaz difüzyon katsayısı, sıcaklığa bağlı entalpi değerleri, buharlaşma gizli ısı değerleri, sıcaklığa bağlı buhar basınçları, sıcaklığa bağlı sıvı viskoziteleri, sıcaklığa bağlı yüzey gerilimleri,

sıcaklığa bağlı termal geçirgenlik değerleri, sıcaklığa bağlı sıvı yoğunlukları değerleridir.

5.1.4. KIVA4 ön işlem (pre-processing)

KIVA4’de mesh oluşumu makefile dosyasının kullanımıyla k3prepd klasörlerinde bulunan 54 adet altprogramın fortran derleyicisi ile derlenmesiyle oluşturulan k3prepd programı ile hazırlanmaktadır. “Converter.f” kodunun derlenmesi ve çalıştırılmasıyla k3prepd tarafından hazırlanmış olan KIVA3’ün mesh formatındaki itape17 dosyası KIVA4’de kullanılan KIVA4grid formatına dönüştürülür. Esnek olmayan ve kullanımı zor olan k3prepd ön işlemci ile göreceli olarak daha basit ağ yapılarını üretmek yeterli değildir. ANSYS-ICEM gibi uyumlu ağ yapısı üreten yazılımlar kullanılmaktadır.

5.1.5. KIVA4’de kinetik reaksiyonların hesaplanması

KIVA yazılımında yakıtın yanması sırasında 4 adet kinetik reaksiyon hesaplanmaktadır. Yakıtın (sıvı yakıt olarak benzin-C₈H₁₇) yanması için sadeleştirilmiş tek adımlı oksidasyon reaksiyonu (Eş. 5.1) kullanılmaktadır. NO_x oluşumu için genişletilmiş Zeldovich mekanizması (Eş. 5.2 - Eş.5.4) kullanılmaktadır.



KIVA3 kodunda yakıtın oksidasyon reaksiyonundaki katsayılar, Westbrook ve Dryer’in 1984 yılındaki “hidrokarbon yanmasının kimyasal kinetik modellemesi” adlı makalelerinden alınmıştır [53].

Reaksiyon hız sabiti ile sıcaklık arasındaki ilişki Arrhenius tarafından bulunmuştur.

$$k_i = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) \quad (5.5)$$

k_i , reaksiyon katsayısı diğer bir ifadeyle reaksiyon hız sabiti,

A_i , sabit (birimi $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$),

E_i , etkinleşme (aktivasyon) enerjisi (birimi (cal/mol),

β_i , sıcaklık üssü,

R , ideal gaz sabiti ($8,314 \text{ J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$, $1985,89 \text{ cal}/(\text{mol K})$ [54])

T , sıcaklık (K).

Bu denklem yardımıyla belli sıcaklıktaki reaksiyon hız sabiti bilinen reaksiyonun başka bir sıcaklıktaki hız sabiti hesaplanabilir [31,55,56].

İleri reaksiyon katsayısı, genelleştirilmiş Arrhenius formülü ile hesaplanmaktadır. C_8H_{17} yakıtı için kullanılan sıcaklığa bağlı katsayıları Eş. 5.6'da yazılmıştır.

$$k_{fr} = 4,6 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{15106}{T}\right) \quad (5.6)$$

Reaksiyon tek yönlü olduğu için geri reaksiyon katsayısı :

$$k_{br} = 0 \quad (5.7)$$

$$\omega = k_{fr} \left[\frac{\rho_{yakıt}}{W_{yakıt}} \right]^{0,25} [\text{O}_2]^{1,5} \quad (5.8)$$

KIVA3V-R2 kodunda Zeldovich mekanizmasında ileri-geri reaksiyon oranı katsayılarının hesaplanmasında Heywood tarafından geliştirilen bağıntı kullanılırken KIVA4 kodunda 103173 nolu Nasa teknik notunda kullanılan katsayılar kullanılmaktadır.

Heywood'un bağıntısı kullanılarak $T=2000 \text{ K}$ sıcaklığındaki ileri reaksiyon

katsayıları hesaplandığında sırasıyla,

Eş. 5.2 için;

$$k_{1-fr} = 7,6 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{38000}{T}\right) \quad (5.9)$$

$$k_1 = 4,258 \times 10^5 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad (5.10)$$

Eş. 5.3 için

$$k_{2-fr} = 6,4 \times 10^9 \exp\left(-\frac{3150}{T}\right) \quad (5.11)$$

$$k_2 = 2,6497 \times 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad (5.12)$$

Eş. 5.4 için;

$$k_{3-fr} = 4,1 \times 10^{13} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad (5.13)$$

Eş. 5.2 nolu reaksiyondaki N_2 molekülünün 3 kat güçlü bağından kaynaklanan yüksek aktivasyon enerjisi (yaklaşık 38000 J), 2 reaksiyonda yaklaşık 3000 J, 3.reaksiyonda yaklaşık 400 J, sadece yüksek sıcaklıklarda bu reaksiyonun yeterince hızlı olmasına neden olmaktadır. Yüksek sıcaklık gerekliliğinden dolayı bu reaksiyona *termal NO* denilmektedir [57].

k_1 , reaksiyon oranı katsayısının k_2 ve k_3 e göre çok daha düşük olmasından dolayı 1.reaksiyon (Eş. 5.2), Zeldovich mekanizmasının en yavaş adımıdır. Bu yüzden termal NO oluşumu göreceli olarak daha yavaş bir süreçtir [57].

6 adet denge reaksiyonu hesaplanmaktadır.



5.1.6. KIVA4 son işlem (post-processing)

KIVA3V yazılımında veri işleme (postprocessing) için k3post altprogramları kullanılmaktadır. Ancak birçok uygulamada bu altprogramın iş makinalarında ve unix tabanlı yüksek performanslı makinalarda sonuçları görselleştirmek için kullanılan CGS (Cray Graphics Systems) kütüphanelerine bağımlılığı nedeniyle ve kullanım kolaylıklarından dolayı ticari son işlemciler (Tecplot, EnSight, Fieldview, GMV vb.) kullanılmaktadır. Bu yüzden KIVA4 kodunda da k3post altprogramları kaldırılmıştır. EnSight yazılımı üreticilerince KIVA4grid dosyasını ve çıkış dosyasını kendi formatlarına dönüştüren kodlar hazırlanmıştır.

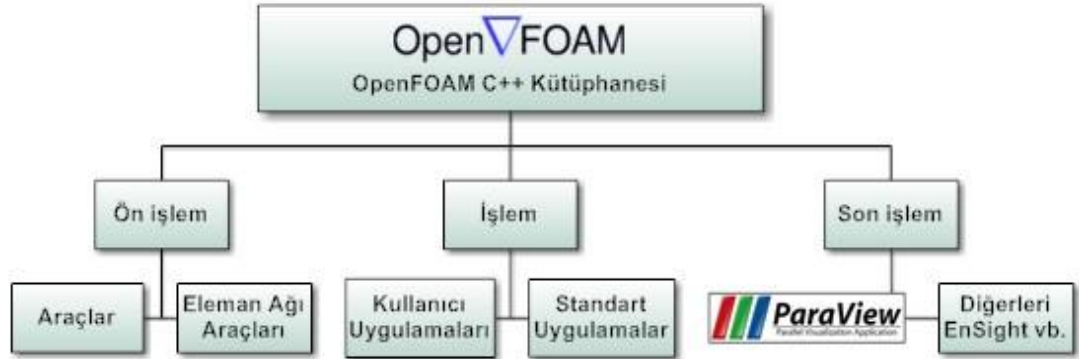
Kodun çalışması sırasında oluşturulan “dat.*” dosyaları (dat.dynamic, dat.inject, dat.thermo, dat.turb) krank açısına bağlı olarak emisyon, enjeksiyon, ortalama basınç, sıcaklık, yoğunluk, hacim, kütle verileri gibi önemli bilgileri içeren özel çıktı dosyalarıdır. Yapılan simülasyon denemelerine ait grafiklerin oluşturulmasında kullanılan veriler bu dosyalardan alınmaktadır. Kodun çalışması sonrasında oluşan “otape12” dosyası mesh verisi hariç simülasyonla ilgili tüm bilgileri içeren genel çıktı dosyasıdır.

Kodun çalışması sırasında oluşturulan “plotgm*” dosyaları GMV yazılımında kullanılabilecek özel ağ yapısı (mesh) dosyalarıdır. Yapılan simülasyon denemelerine ait resimlerin ve animasyonların oluşturulmasında kullanılan veriler bu dosyalardan alınmaktadır.

5.2. OpenFOAM

Overture, OpenFOAM gibi açık kaynak kodlu ücretsiz CFD kodları da üniversiteler ve araştırma kurumları tarafından doğruluğu ve güvenilirliğinden dolayı tercih edilmektedir.

OpenFoam, İngilizce “Open Field Operation and Manipulation” ifadesini temsil etmektedir. Bu ücretsiz, açık kaynak kodlu, CFD aracının yetenekleri sadece kimyasal reaksiyonlar, türbülans ve ısı transferi içeren karmaşık akışkan akışlarını simüle etmekle sınırlı olmayıp aynı zamanda katı dinamiği, elektromanyetik ve hatta finansal problemlerin hesaplanabilmesini sağlamaktadır. OpenFOAM, sayısal ayrıklaştırma tekniklerinden fiziğin kullanımını ayarıştıran, nesne yönelimli yazılım aracı (object-oriented software toolkit) olduğundan CFD araştırmalarını kolaylaştırır. Yapısal olmayan eleman ağı ile çalıştığından dizel motorları gibi karmaşık geometrileri kullanabilir. Yardımcı kütüphanesi, popüler CFD kodlarının örneğin KIVA, FLUENT, STAR-CD vb., eleman ağı dosyalarını dönüştürebilen çeşitli arayüzler sağlamaktadır. OpenFOAM’da motor problemleri ile ilgili olarak üç çözücü (solver) bulunmaktadır [58]. OpenFOAM dosya yapısı Şekil 5.3’de gösterilmektedir.



Şekil 5.3. OpenFOAM dosya yapısı

Genel CFD problemlerinin çözümü için geliştirilen sistemde bulunan çeşitli çözücülerden örneğin “engineFoam”, buji ile ateşlemeli motor için, “dieselFoam”, reaktif veya reaktif olmayan dizel püskürtme/enjeksiyon için, “dieselEngineFoam” dizel motorların reaktif akışlarını simüle etmek için kullanılmaktadır. Ayrıca “reactingFoam”, “chemFoam” kimyasal reaksiyonların çözümü için kullanılmaktadır. Chemkin 3 formatındaki termodinamik ve reaksiyon veri dosyaları OpenFOAM formatına dönüştürülebilmektedir.

OpenFOAM'ın, motor problemlerinin çözümünde kullanılması hala başlangıç aşamasındadır. Varolan bir çok fiziksel modelin OpenFOAM koduna entegre edilmesi ve sistematik olarak geçerli olması gerekmektedir. Motorlardaki hareket eden supaplar gibi hareketli eleman ağının karmaşık topolojik değişiklikleri ile ilgili sorunlar daha fazla çaba gerektirmektedir. Buna ek olarak OpenFOAM'ın güçlü işlevselliklerini değerlendirebilmek için nesneye yönelik programlama ve CFD alanında profesyonel bilgi ve yetenek gerekmektedir. Bu durum, motor simülasyonlarında OpenFOAM'ın yaygın uygulamaları sınırlandırabilir [58].

Çizelge 5.1'de her iki koda ait genel özellikler gösterilmektedir. KIVA4 kodu ücretli bir kod olduğundan genel kullanıcılar tarafından pek kullanılmazsa da motor modelleme çalışmalarında yaklaşık 30 yıllık bir geçmişe sahip bu kod akademik çevre tarafından sıklıkla kullanılmaktadır.

Çizelge 5.1. KIVA4 ve OpenFOAM kodlarının temel farkları

	KIVA4	OpenFOAM
İşletim sistemi	Linux-Unix	Linux, Unix, Sınırlı olarak Windows
Derleme Dili	Fortran	C++
Son işlemci	GMV	GMV, Paraview
Ön İşlemci (Sayısal ağ oluşturma)	KIVA3 meshlerinin dönüştürülmesi, ANSYS ICEM CFD 12.1, Truegrid	Ansys, CFX4, Fluent, gambit, gmsh, ideas, KIVA3, msh, netgen 4.4, Star-cd Samm, Star-cd v4 ve tetgen
Dönüştürme kodlarıyla desteklenen görsel çıktı formatları	EnSight	Fluent, EnSight, Fieldview, GMV, VTK ve Star-cd-Smap
Döküman desteği	yok	var

KIVA kodu ticari amaçlı bir yazılım olarak görülmediğinden ve genel kullanıcılara açık olmadığından kullanımda olan CFD programları ile etkileşimi oldukça sınırlıdır. Basit mesh yapılarının oluşturulabilmesi ile birlikte Ansys, CFX4, Fluent, gambit, gmsh, ideas, KIVA3, msh, netgen 4.4, STAR-CD Samm, STAR-CD v4 ve tetgen yazılımları ile hazırlanmış mesh formatları OpenFOAM formatına dönüştürülebilmektedir.

Grafiksel çıktılar için EnSight, Fieldview 9 ve Paraview yazılımları için gerekli modüller bulunmaktadır. Veri çıktıları için OpenFOAM verileri Fluent, EnSight, Fieldview, GMV, VTK ve STAR-CD-Smap formatlarına dönüştürülebilmektedir. Kod sürekli olarak geliştirilmekte ve yıllık olarak yeni versiyonu kullanıcılara sunulmaktadır.

5.3. Chemkin

Yapılan motor modellemelerinde özellikle yanma sürecinin modellenmesinde KIVA kodu yetersiz kalmaktadır. KIVA kodunda yakıt tek bir bileşikten oluşmakta ve bir oksidasyon reaksiyonu ile yanmaktadır. Gerçekte ise yakıtların sayısız bileşikten oluşmasından dolayı sayısız reaksiyon ve ara bileşikler oluşmakta, model sonuçlarının doğruluğunun artırılması için çeşitli yakıt mekanizmaları geliştirilmekte ve kullanılmaktadır.

Chemkin, Senkin, SAGE, STAR/KINetics, HCT (Hydrodynamics, Chemistry and Transport) karmaşık akış simülasyonlarında kullanılan kimyasal kinetik simülasyon kodları ve yazılım paketleridir. Gaz-katı arayüzlü homojen etkileşimli, kimyasal ve reaksiyonel akış simülasyonlarının çözümünde tercih edilmektedir. Malzeme süreçleri, yanma ve kimyasal üretimlerinde kullanılan, akış, ısı transferi ve kimyasal uygulamalarda çözümler sunmaktadır. Ayrıca bu kodlar ve yazılımlar İYM'ların simülasyonu için hazırlanmış KIVA kodu gibi kodlar veya STAR-CD gibi ticari yazılımlarla birlikte kullanılmaktadır. HCCI yanma modellenmesi üzerine yapılan çalışmalar incelendiğinde dolgunun içeriğine, silindir içi sıcaklık, basınç vb. şartlara bağlı olarak gerçekleşen

kimyasal reaksiyonlar sonucu meydana gelen kendi kendine ateşleme sürecinin ve emisyon oluşumunun anlaşılmasında, sunulmakta olan çeşitli reaksiyon ve bileşiklerin modellenmesinde bu tür kod ve yazılımlar kullanılmaktadır.

Chemkin, bu alandaki ilk yazılımlardan biri olduğu için reaksiyon mekanizması ve bileşiklerin sıcaklık bilgisi gibi verileri içeren dosyaların formatları için Chemkin formatı ortak bir standart haline gelmiştir.

HCCI yanmanın anlaşılması ve temel özelliklerinin tanımlanması için geliştirilen modeller, çok-boyutlu (multi-dimensional), çok-bölgeli (multi-zone) ve tek bölgeli (single-zone) modeller olarak sınıflandırılmaktadır. HCCI motor davranışını simüle etmek için birçok araştırmacı tarafından çok bölgeli model ortaya konulmuştur. Silindir, bölgelere ve termal sınır tabakaya ayrılmıştır. Böylece dolgu sıcaklığının ve yoğunluğunun (konsantrasyonun) daha gerçekçi dağılımı sağlanır. Çok boyutlu modeller için KIVA veya OpenFOAM kodları, tek ve çok bölgeli modeller için de Chemkin, açık kaynak kodlu alternatifi Cantera veya OpenFOAM içindeki reactingfoam kodu kullanılabilir.

Tek bölgeli veya çok bölgeli model, emme supabı kapanışında belirlenmiş ortalama sıcaklık, karışımın basıncı ve silindir içerisindeki her bir bileşiğin yoğunluğunu kapsayan başlangıç şartları gerektirir. Bu başlangıç şartlarını bir test motorundan elde etmek zordur. Simülasyon doğruluğu için bu başlangıç şartları KIVA kodu gibi İYM'ların modellenmesinde kullanılan kod veya yazılımlardan sağlanmaktadır. Yapılan çalışmalar incelendiğinde farklı yaklaşımlar bulunmaktadır. KIVA kodu ve Chemkin kodları birleştirilerek yanma sürecinde etkileşimli çalıştırılarak yapılan modeller ile yanma başlangıcına kadar KIVA kodu, devamında Chemkin, yanma sonunda yine KIVA kodunun kullanıldığı modeller kullanılmaktadır.

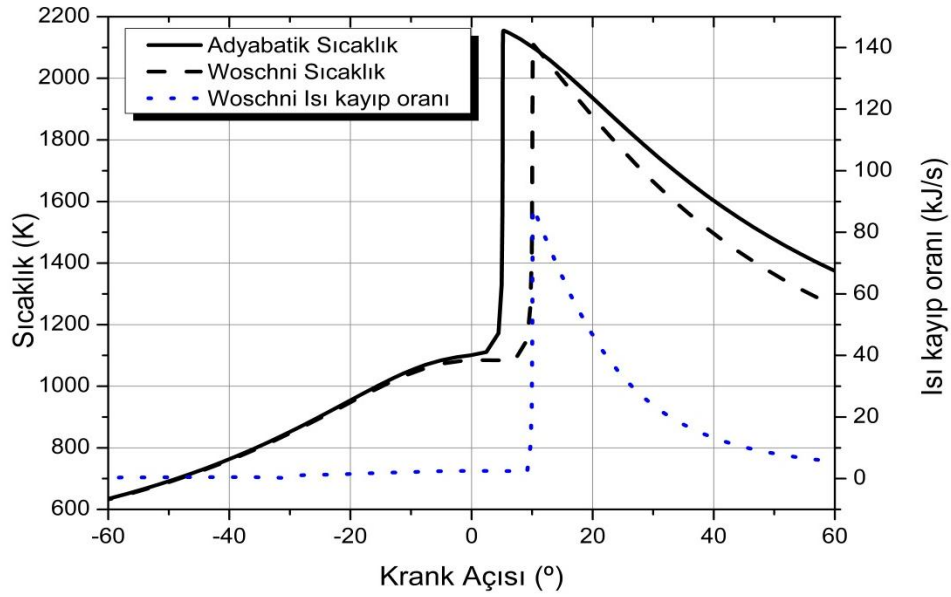
5.3.1. Chemkin kullanımı

Chem.inp veya mech.inp dosyalarında reaksiyon kinetikleri ve stokiyometri belirtilmektedir. Chemkinde reaksiyon oranları için standart Arrhenius ifadesi kullanılmaktadır.

5.3.2. Chemkin tek bölgeli modelde ısı transferi

Chemkin yazılımında ilk olarak sıkıştırma oranı 16,5:1 olan yakıt olarak doğalgaz kullanan bir motorda tek bölgeli bir modelleme çalışması yapılmıştır. Önceki çalışmalardan elde edilen sonuçlara göre tek bölgeli model, nispeten daha kısa hesaplama zamanı ile tam kimyasal-kinetik mekanizmaların kullanılmasına imkan veren ve HCCI yanmanın belli temel bakış açılarının araştırılması için yararlı bir araçtır. Doğalgazda ana bileşen metan olduğundan dolayı yanma sürecinin tanımlanmasında Berkeley Üniversitesi tarafından 54 bileşen ve 325 reaksiyon içeren GRI-Mech 3.0 [59] reaksiyon mekanizması kullanılmıştır. GRI-Mech, doğalgaz (CH_4) yanmasını modelleme için tasarlanmış, optimize edilmiş, konusunda geçerliliği kabul görmüş ve yaygın olarak kullanılan bir mekanizmadır.

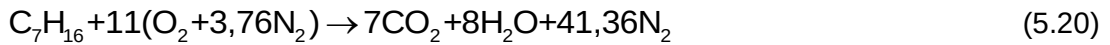
Silindir içindeki ısı transferinin etkisinin görülmesi için ilk olarak silindirin adyabatik olduğu model, daha sonra silindirden cidarlara ısı transferinin olduğu ve bu ısı kaybının EK-1’de gösterilen Woschni bağıntıları ile hesaplandığı model kullanılarak karşılaştırma yapılmıştır. Şekil 5.4’de ısı transferinin silindir içi sıcaklığa etkisi görülmektedir.



Şekil 5.4. Chemkin yazılımına göre sıcaklık değişimi

5.3.3. n-Heptan tek adımlı (global) reaksiyonu

n-heptanın, oksijenle reaksiyona girmesi sonucunda Eş. 5.20 ortaya çıkacaktır.



Eğer yakıtın oksidasyonu için tek adımlı (global) basit bir reaksiyon kullanılması durumunda reaksiyon Chemkin yazılımında EK-2’de görülen formatta belirtilir.

İleri reaksiyon katsayısı (k_i), Eş 5.21 yardımıyla hesaplanır.

$$k_i = 5e + 8 \exp\left(-\frac{15780}{8,314T}\right) \quad (5.21)$$

Kimyasal reaksiyon oranı ($\dot{\omega}_i$), Eş 5.22 yardımıyla hesaplanır.

$$\dot{\omega}_i = \frac{d[\text{ürün}]}{dt} = -k_i \times [C_7H_{16} \text{derişimi}]^{0,25} \times [O_2 \text{derişimi}]^{1,5} \quad (5.22)$$

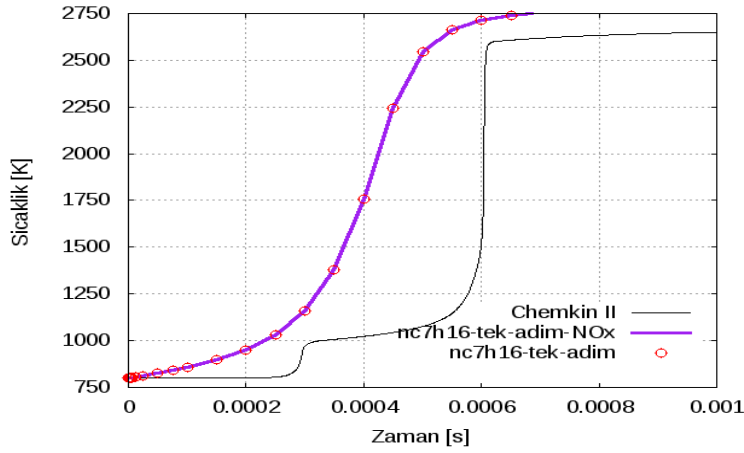
5.4. Reaksiyon Mekanizmalarına NO_x Reaksiyonlarının Eklenmesi

Yanma sırasında gerçekleşen sayısız reaksiyonun modellendiği reaksiyon mekanizmaları, çalışmada kullanılmış olanlar EK-3’de belirtilmiştir, Chemkin [60] yazılımı ile yapılmış olan tek bölgeli modellemelerde ve OpenFOAM kodları ile yapılmış olan çok boyutlu CFD modellemelerinde kullanılmıştır. Bazı reaksiyon mekanizmalarında NO_x emisyonları için reaksiyonlar bulunmamaktadır. Bundan dolayı kullanılan reaksiyon mekanizmalarına GRI-Mech 3.0 [59] reaksiyon mekanizmasından NO oluşumu ile ilgili veriler eklenmiştir. n-heptan yanması ile ilgili reaksiyon mekanizmalarının bileşenler kısmına N, N₂O, NO, NO₂ bileşenleri, reaksiyonlar kısmına NO oluşumu ile ilgili 12 reaksiyon ve termo-kimyasal özelliklerinin saklandığı “termo.dat” dosyalarına da yeni eklenen bileşenlerin özellikleri eklenmiştir. Örneğin tek adımlı n-heptan reaksiyonunda reaksiyon sayısı 1’den 13’e bileşen sayısı 5’den 16’ya çıkmıştır.

5.4.1. NO_x reaksiyonları eklenmesinin etkisinin chemFoam ile incelenmesi

chemFoam, kimya problemleri için tasarlanmış bir OpenFOAM çözücüsüdür. Diğer kimya çözücüleri (Chemkin) ile bir karşılaştırma sağlamak amacıyla tek hücreli (bölgeci-cell) durumda kullanılmak üzere tasarlanmıştır. Tek hücreli eleman ağı çözücünün çalışma anında oluşturulmaktadır. Alanlar yine çalışma anında, başlangıç şartlarından oluşturulmaktadır [61].

Sabit basınç altında yaklaşık, 50 bar basınç ve 800 K sıcaklık, 0,090909 (1 mol nC₇H₁₆/11 mol hava) nC₇H₁₆, 3,76 N₂, 1 O₂ mol oranlarında (mole fractions), laminar türbülans başlangıç şartlarında hesaplanmış zamana bağlı sıcaklık değişimleri Şekil 5.5’deki grafikte gösterilmektedir.

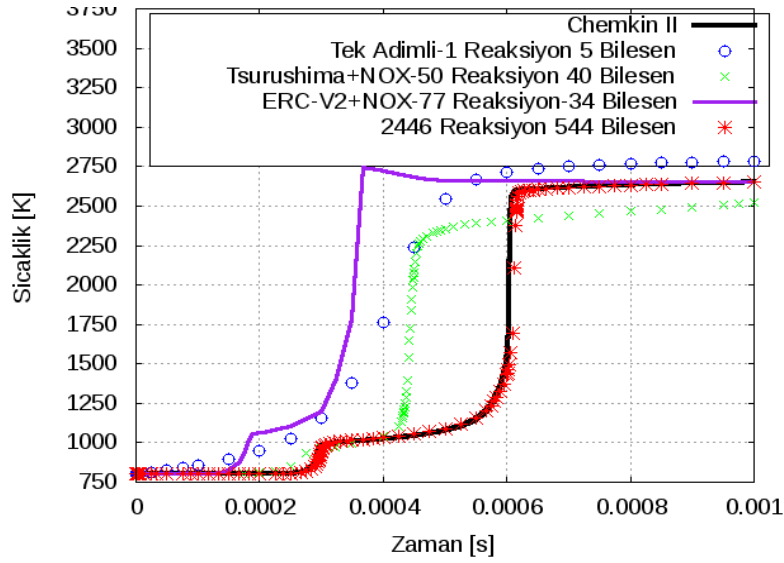


Şekil 5.5. Tek adımlı modele eklenen NO_x bileşen ve reaksiyonlarının etkisi

Şekil 5.5'deki grafikten görüldüğü üzere NO_x emisyonu için eklenmiş olan bileşen ve reaksiyonlar, n-heptan'ın zamana göre sıcaklık değişim profilini etkilememektedir.

5.5. Farklı Reaksiyon Mekanizmalarının ve OpenFOAM (chemFoam)-Chemkin Çözücülerinin Karşılaştırılması

Karşılaştırmada kullanılmış olan farklı reaksiyon mekanizmalarına ait özellikler EK-3'de gösterilmektedir. n-heptan yanması ile ilgili geliştirilmiş farklı (basit, indirgenmiş ve detaylı) reaksiyon mekanizmalarının OpenFoam çözücüsü ile elde edilmiş zamana bağlı sıcaklık değişimleri Şekil 5.6'daki grafikte gösterilmektedir.



Şekil 5.6. Farklı reaksiyon mekanizmalarının karşılaştırılması

Grafikte aynı detaylı kimyasal mekanizmanın (bileşen sayısı 544, reaksiyon sayısı 2446, Lawrence Livermore Ulusal Laboratuvarı (LLNL) geliştirilmiş n-heptan mekanizması) [62] iki farklı çözücüde (OpenFOAM ve Chemkin II kodları) kullanılması durumunda sonuçlar üzerindeki uyum (sırasıyla kırmızı * ve siyah düz çizgi) görülebilmektedir.

Detaylı n-heptan mekanizması ile tek adımlı mekanizmanın arasında farkın maksimum 0,00025 s olduğunu düşünürsek 2200 1/min de 3,3° krank açısına denk gelen bir sapma ile karşılaşacağımız ortaya çıkmaktadır.

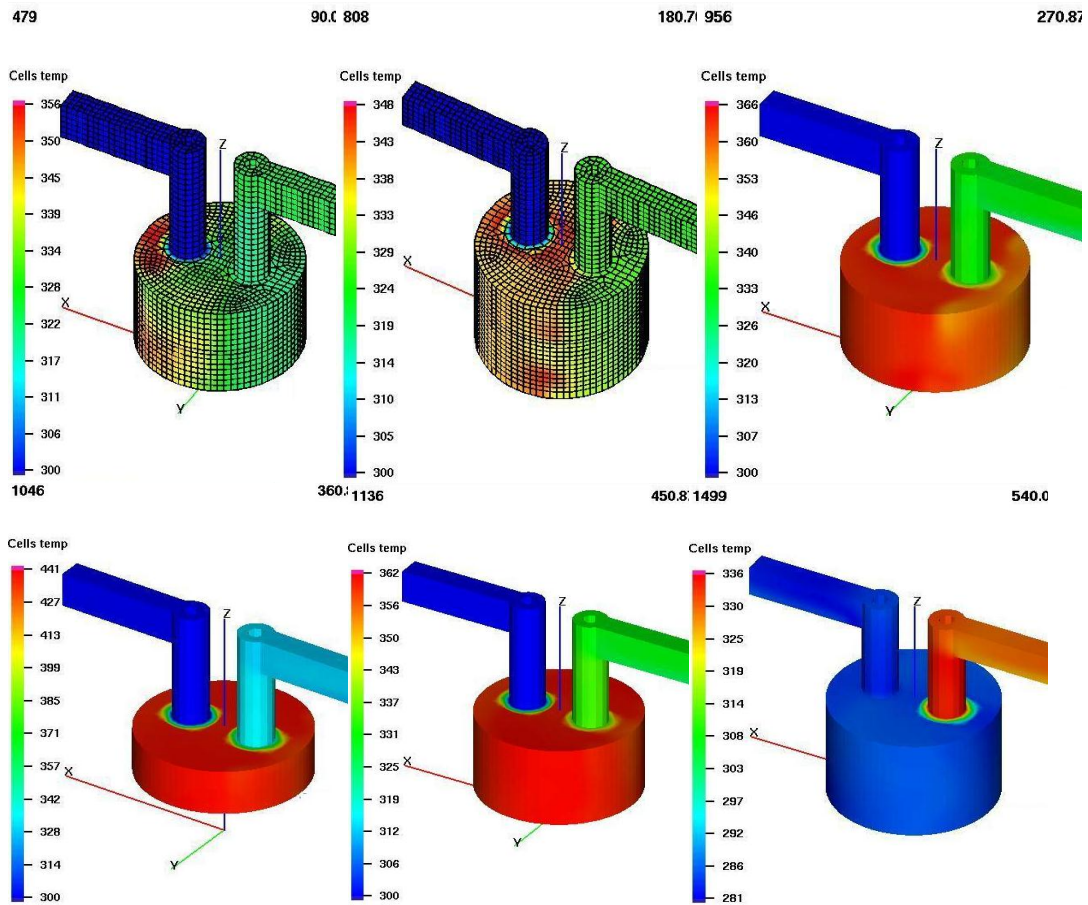
0,0002-0,0004 s zaman aralığındaki n-heptan'ın düşük sıcaklık yanması olarak adlandırılan süreçte detaylı kimyasal mekanizmaya en yakın değişimi Tsurushima indirgenmiş reaksiyon mekanizması [63] göstermiştir. Ancak ani yanmanın gerçekleştiği yüksek sıcaklık sürecinde ise yaklaşık 0,00018 s'lik (2200 1/min de 2,3° krank açısı) bir sapmanın gerçekleştiği görülebilmektedir.

6. ÖN MODELLEME VE KARŞILAŞTIRMA ÇALIŞMALARI

6.1. KIVA4 Koduyla 2 Supaplı Motor Simülasyonu

Çalışma için 2 supaplı motora uygun eleman ağı (grid) ve giriş dosyaları belirlenmiş ve gerekli düzenlemeler yapılarak elde edilen sayısal verilerin gerçek verilere yaklaştırılmasına başlanmıştır.

İlk olarak krank açısı 0° (ÜÖN)'den 540° 'ye kadar kısım modellenmiş ve 90° 'lik aralıklarla görselleştirme için gerekli ayrıntılı çıktılar alınmıştır. KIVA kodunun çalıştırılması ile elde edilmiş modelin detaylı sonuçları belirtilen krank açılarında GMV programı aracılığı ile Şekil 6.1'de görüldüğü gibi görselleştirilmiştir.



Şekil 6.1. 90° , 180° , 270° , 360° , 450° ve 540° krank açılarındaki silindir için sıcaklık dağılımları

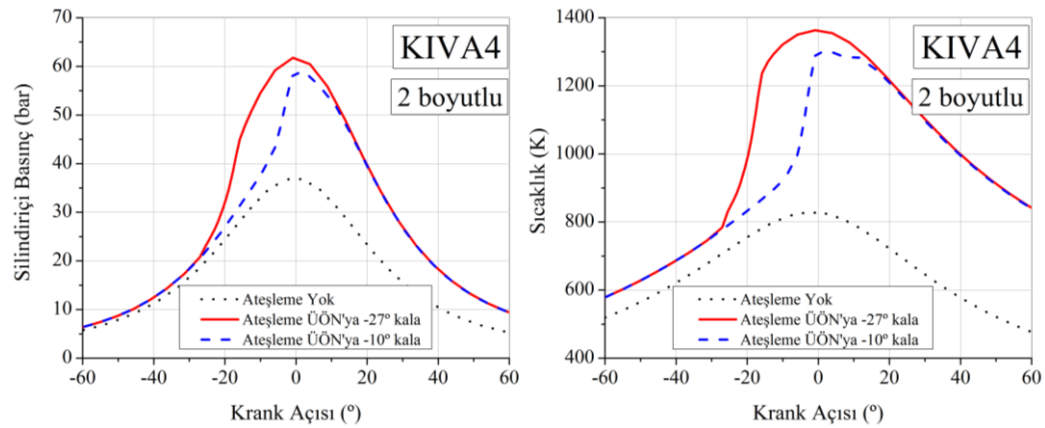
Şekil 6.1’de 1000 1/min de çalışan, 2 supaplı, 4 zamanlı, bir benzin motoruna ait silindir içi sıcaklık dağılımının krank açısına bağlı olarak değişimi görülmektedir. Benzer şekilde silindir içindeki basınç, yoğunluk, türbülans kinetik enerjisi (k) ve hız dağılımları da görselleştirilebilmektedir.

6.2. KIVA4 Koduyla Yanma Simülasyonu

Modelleme çalışmalarında özellikle yanma sürecinde hesaplama ağırlığından dolayı ön çalışmalarda 3 boyutlu geometriler yerine daha kısa zamanda çözüm sunan 2 boyutlu geometriler kullanılmaktadır. Çizelge 6.1’de özellikleri verilen bir benzin motorundaki basınç ve sıcaklık değişimi Şekil 6.2’de gösterilmektedir.

Çizelge 6.1. KIVA4 yanma modelinin denenmesi

Kullanılan kod	KIVA4	Model adı	2 boyutlu 1/2-derece benzin motorunda yanma
Biyel boyu	16,269 cm	Silindir çapı	9,843 cm
Kurs	9,55 cm	Sıkıştırma oranı	11:1
Boşluk	0,181934 cm	Motor devri	1600 1/min
Yakıt	İzo-oktan	Ateşleme başlangıcı	-27°
Ateşleme süresi	9,6° (1 ms)	Enjeksiyon başlangıcı	-52°
Enjeksiyon süresi	12,672°	Simülasyon aralığı	-180°, +720°



Şekil 6.2. KIVA4’e göre silindir içi ortalama basınç ve sıcaklık değişimi

6.3. KIVA4 ve OpenFOAM Kodlarının Ortak Bir Problemle Karşılaştırılması

Modelleme kodlarını karşılaştırmak amacı ile benzer geometri ve aynı motor karakteristiklerine sahip 4 zamanlı benzinli bir motor 3 boyutlu olarak modellenmiştir. Modele ait bazı özellikler Çizelge 6.2'de gösterilmektedir.

Çizelge 6.2. Sayısal modele ilişkin özellikler

Kullanılan kod	KIVA4	OpenFOAM	Supap sayısı	4
Zaman, silindir	4 Zamanlı, tek silindirli,		Sıkıştırma oranı	~9,38:1
Biyel boyu	14,7 cm		Silindir çapı	9,2 cm
Kurs	8,5 cm	8,423 cm	Boşluk yüksekliği	0,115 cm
Yakıt	İzo-oktan (iC_8H_{18})		Motor devri	1600 1/min
Hava fazlalık katsayısı	0,8-1,2		Türbülans modeli	Standart k- ϵ modeli
Simülasyon başlangıcındaki (-112° KA) sıcaklık ve basınç	303 K-350 K, 100 kPa		Simülasyon başlangıcındaki cidar, silindir kapak, piston sıcaklıkları	430 K, 450 K, 450 K
Silindir içindeki karışımın ağırlık yüzdesi (HFK=1 iken)	$Y_{iC_8H_{18}}$	0,059137565100	Simülasyon aralığı	-112°, +110° (ÜÖN:0° KA)
	Y_{CO_2}	0,207075373350	Emme supabı kapanması (KA)	-114°
	Y_{N_2}	0,719796022207	Egzoz supabı açılması (KA)	112°
	Y_{CO_2}	0,009327581536	Emme supabı açılması (KA)	332°
	Y_{H_2O}	0,004663457807	Egzoz supabı kapanması (KA)	392°

Yakıtın hava ile emme manifoldunda karıştırılarak homojen bir şekilde silindire alındığı kabul edilmiş ve bu şekilde modellenmiştir.

6.3.1. Ön işlem (pre-processing)

OpenFOAM kodunda kullanılan ağ yapısı KIVA-3V kodunun 4 supaplı örneğinden dönüştürülmüştür. Modelin geometri ve çalışma ayarları

yapıldıktan sonra “engineFoam” çözücüsü çalıştırılmıştır.

6.3.2. Yanma süreci

KIVA4 kod sistemindeki altprogramlar ve giriş dosyaları çalışılacak duruma uygun biçimde düzenlendikten sonra bir fortran derleyici ile derlenerek çalıştırılabilir bir yazılım oluşturulmuştur.

Yakıt olarak her iki kod sistemi için buji ateşlemeli motor modellemesinde sıklıkla kullanılmakta olan izo-oktan-(C_8H_{18}) kullanılmıştır. KIVA kodunda yanma sırasında 4 adet kinetik reaksiyon hesaplanmıştır. Yanma için sadeleştirilmiş tek adımlı oksidasyon reaksiyonu kullanılmıştır. NO_x oluşumu için genişletilmiş Zeldovich mekanizması kullanılmaktadır.

Westbrook ve Dryer tarafından önerilmiş olan reaksiyon oranı parametreleri, yakıtın oksidasyon reaksiyonunda kullanılmıştır [33,53].

KIVA3V-R2 kodunda Zeldovich mekanizmasındaki ileri-geri reaksiyon oranı katsayılarının hesaplanmasında Heywood tarafından geliştirilen bağıntılar kullanılırken KIVA4 kodunda 103173 nolu Nasa teknik notunda belirtilen katsayılar kullanılmaktadır. Reaksiyon katsayıları genelleştirilmiş Arrhenius formülü ile hesaplanmaktadır. C_8H_{18} 'in yanma ve NO_x oluşum reaksiyonları için kullanılan eşitlikler EK-4’de belirtilmiştir.

OpenFOAM kodunda yanmanın modellenmesi için 2 denklemlilik Weller modeli [64] ve JANAF tabloları kullanılarak hesaplanan termodinamik özellikler kullanılmaktadır [65]. Emisyon oluşumu için hazır bir çözücüsü olmayıp “engineFoam” çözücüsü ile birlikte yanma sürecindeki kimyasal reaksiyonların çözümünde kullanılan “reactingFoam” çözücüsünün birlikte düzenlenmesi ile sonuç alınabilir.

6.3.3. Veri işleme (post-processing)

KIVA4 sonuçlarının görselleştirilmesi için Los Alamos ulusal laboratuvarlarınca geliştirilmiş olan GMV (General Mesh Viewer-Versiyon 4.5) yazılımı kullanılmıştır. Grafiksel veriler ise dat.thermo dosyasından sağlanmıştır.

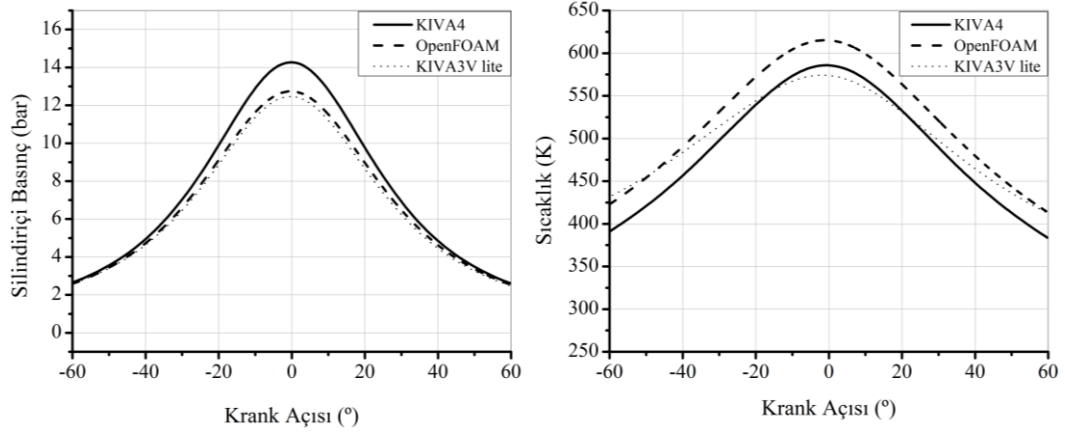
OpenFoam modellerinden elde edilen veriler yine kod sistemi içinde bulunan birkaç komutla CFD alanında yaygın kullanılan ticari veya ücretsiz yazılımlara uygun olarak dönüştürülebilir. OpenFOAM sonuçlarının görselleştirilmesi için Paraview yazılımı kullanılmıştır. Bu çalışmada kullanılmış olan grafiksel veriler ise logsummary.* dosyalarından sağlanmıştır.

Motor geometrisi, sayısal ağ yapısı, düğüm noktaları hakkında bilgi içeren KIVA3 eleman ağı dosyası OpenFOAM formatına dönüştürülmüş, modellerin geometri ve çalışma şartları tanımlanarak çalıştırılmıştır. Şekil 6.3'de KIVA4 ve OpenFOAM kodlarıyla elde edilen sıcaklık ve basınç değişimi sonuçları gösterilmektedir.

6.3.4. Sayısal sonuçlar

Hava çevrimi

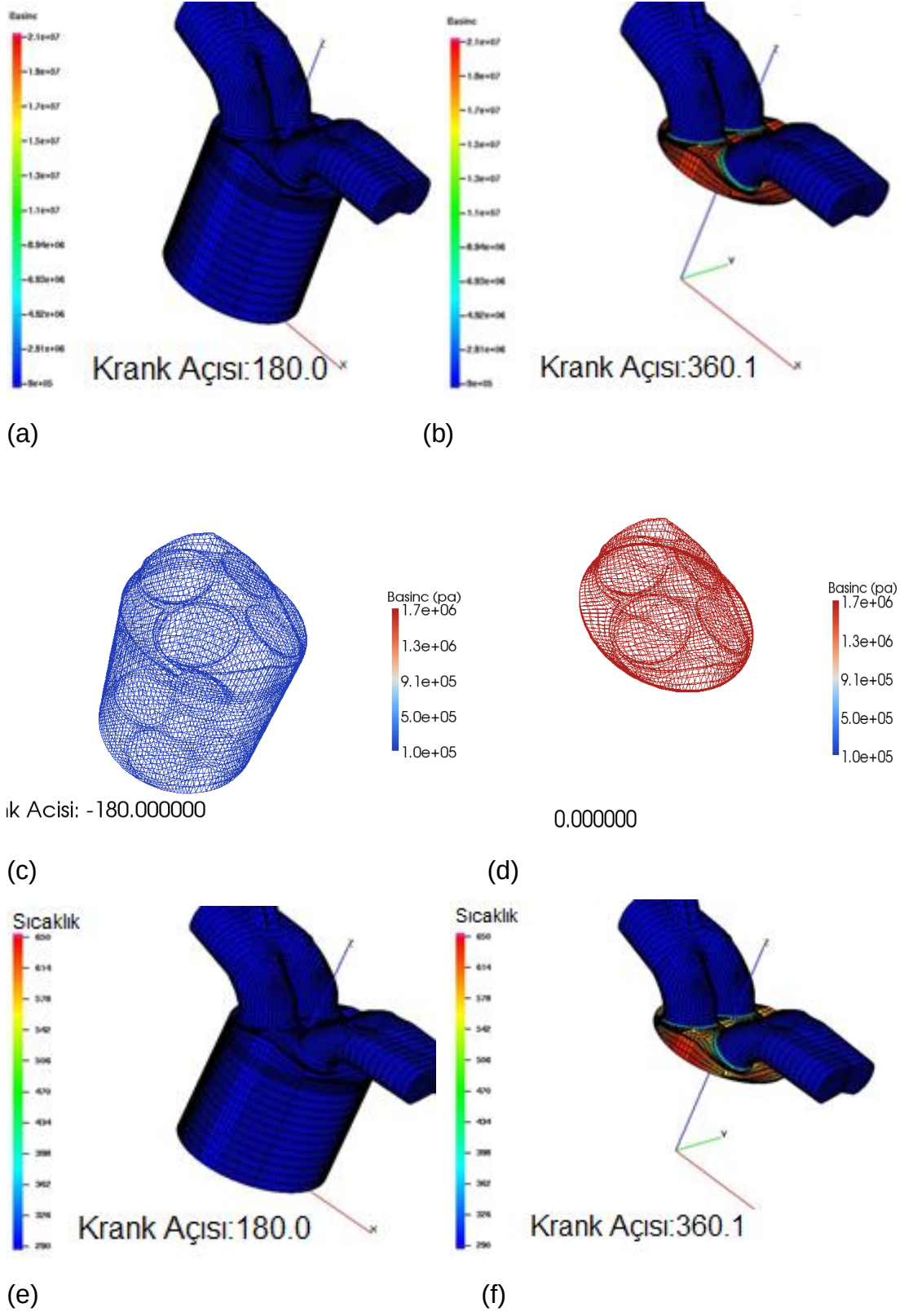
İlk olarak aynı geometri ve çalışma şartları düzenlenerek KIVA4 ve OpenFOAM kodları kullanılarak ateşlemenin olmadığı durumdaki silindirdeki basınç ve sıcaklık değişimi Şekil 6.3'de gösterilmiştir.



Şekil 6.3. Basınç ve sıcaklık değişimi

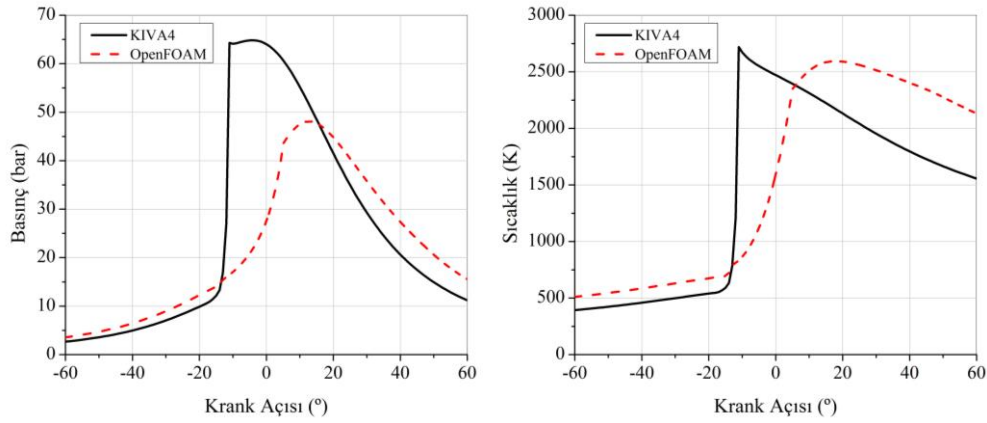
Şekil 6.4'de, özellikleri Çizelge 6.2'de verilmiş olan motorun sırasıyla KIVA4 ve OpenFOAM kodları ile elde edilmiş AÖN'da ve ÜÖN'daki ateşleme olmaksızın silindir içi basınç ve sıcaklık dağılımları ve ağ yapıları gösterilmiştir. KIVA kodunda basınç birimi olarak dyn/cm^2 , OpenFOAM kodunda Pa birimi kullanılmaktadır.

Şekil 6.4a ve 6.4b'de KIVA koduna göre sırasıyla alt ölü nokta (180°) ve sıkıştırma sonunda üst ölü nokta (360°) daki dyn/cm^2 birimi ile silindir içi basınç dağılımı, Şekil 6.4c ve 6.4d'de OpenFOAM koduna göre sırasıyla alt ölü nokta (-180°) ve üst ölü nokta (0°) daki pascal birimi ile silindir içi basınç dağılımı, Şekil 6.4e ve 6.4f'de KIVA koduna göre sırasıyla alt ölü nokta (180°) ve üst ölü nokta (360°) daki Kelvin birimi ile silindir içi sıcaklık dağılımı gösterilmektedir. Her iki modelde yanma olmadığı için ÜÖN'da görülen basınç ve sıcaklık değerleri düşüktür.



Şekil 6.4. Ağ yapısı, basınç ve sıcaklık dağılımı

Ateşlemenin ÜÖN'ya 15° kala gerçekleştiği durumdaki KIVA4 ve OpenFOAM kodları ile elde edilmiş silindirdeki ortalama basınç ve sıcaklık değişimi Şekil 6.5'de gösterilmiştir.



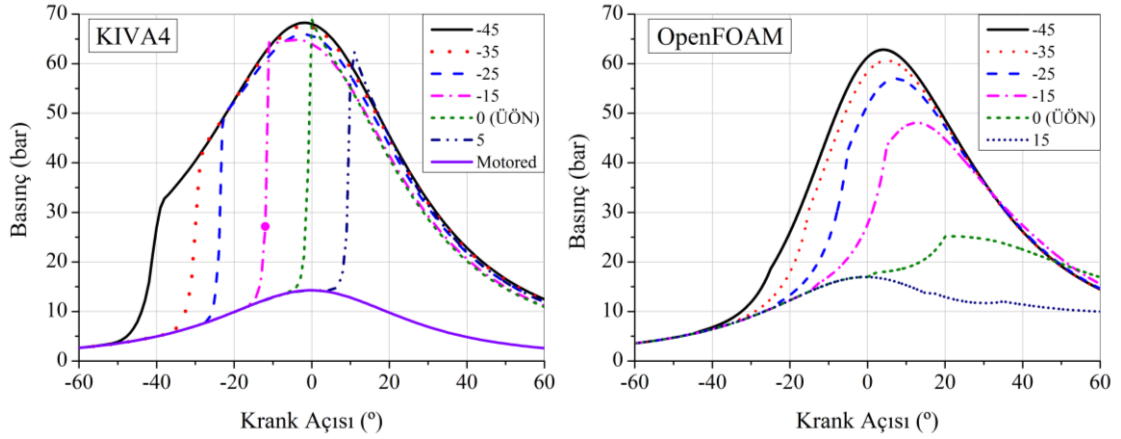
Şekil 6.5. Yanmanın gerçekleştiği durumdaki silindirdeki ortalama basınç ve sıcaklık değişimi

OpenFOAM koduyla yapılmış olan yanma modellenmesindeki sıcaklık artışı makul iken basınç artışı sıkıştırma sonu basıncını geçememiştir. Her iki kodda silindir içerisindeki basınç değişiminin ve maksimum basınç noktasının ayarlanması için gerekli ayar parametreleri üzerine çalışılmıştır. Yanma sürecinin olmadığı çalışmada her iki kodda nicelik olarak farklı ancak benzer sıcaklık ve basınç değişimleri ortaya çıkmıştır.

Yanma başlangıç noktasının etkisi

Ateşlemenin 6 farklı krank açısı değerinde gerçekleştiği durumdaki basınç ve sıcaklık değişimleri incelenmiştir. Sırasıyla KIVA4 ve OpenFOAM kodlarından elde edilen verilere göre silindirdeki ortalama basınç değişimi Şekil 6.6'da gösterilmiştir. Sıcaklık değişimi de basınç değişimine paralel olarak gerçekleşmiştir. KIVA4'ün grafiğinde görüldüğü üzere ateşleme noktalarının farklı olmasına rağmen maksimum basınç ve sıcaklık değerlerinin birbirine yakın olması gibi gerçekçi olmayan sonuçlar muhtemelen sayısal modellerdeki parametrelerden birinin düzenlenmemiş olmasından

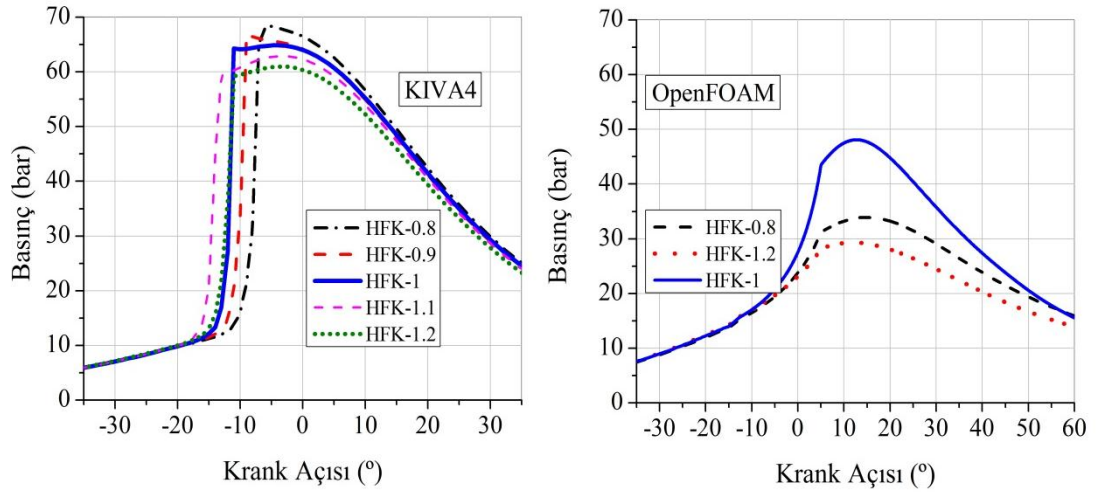
kaynaklanmış olabilir. OpenFOAM grafiği ise daha anlamlı bir sonuç göstermektedir.



Şekil 6.6. Yanmanın farklı zamanlarda başladığı durumdaki silindirdeki ortalama basınç değişimi

Hava fazlalık oranının etkisi

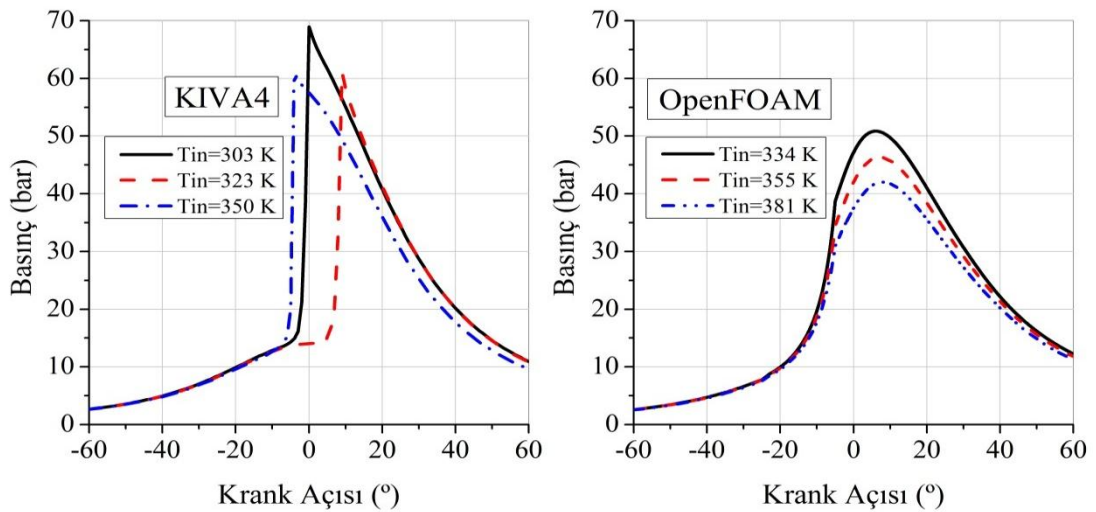
Ateşlemenin ÜÖN'ya 15° kala gerçekleştiği modelde hava fazlalık katsayısının (HFK) farklı olması durumundaki basınç ve sıcaklık değişimi incelenmiştir. Sırasıyla KIVA4 ve OpenFOAM kodlarından elde edilen verilere göre silindirdeki ortalama basınç değişimi Şekil 6.7'de gösterilmiştir. Modelden elde edilen verilere göre HFK değeri arttıkça, karışım fakirleştikçe silindir içi ortalama basıncın değeri azalmaktadır. Sıcaklık değişimi de basınç değişimine paralel olarak gerçekleşmiştir.



Şekil 6.7. Farklı HFK durumdaki silindirdeki ortalama basınç değişimi

Sıkıştırma zamanı başlangıç sıcaklığının etkisi

Ateşlemenin ÜÖN'da gerçekleştiği KIVA modelinde emme zamanı sonundaki sıcaklığın 3 farklı derecede olması durumundaki basınç ve sıcaklık değişimi incelenmiştir. Şekil 6.8'de sırasıyla KIVA4 ve OpenFOAM kodlarıyla elde edilmiş model sonuçları gösterilmektedir. KIVA4 modelinden elde edilen verilere göre 3 farklı durumda silindir içindeki ortalama basınç en yüksek 303 K'lik sıkıştırma öncesi sıcaklığa sahip durumda gerçekleşmiştir. Sıcaklık değişimi de basınç değişimine paralel olarak gerçekleşmiştir.



Şekil 6.8. Farklı sıkıştırma başlangıcı sıcaklıkları için silindirdeki ortalama basınç değişimi

7. N-HEPTAN YAKITLI HCCI MOTORDA YANMA SÜRECİNİN MODELLENMESİ

7.1. Reaksiyon Mekanizması

HCCI'de yanma başlangıcı sırasıyla dolgu bileşimi ve sıkıştırma süreci boyunca reaksiyona giren bileşenlerin basınç ve sıcaklık gelişimlerine bağlı olan reaksiyon oranları gibi bölgesel kimyasal kinetiklerce kontrol edilmektedir [66]. Yanma sırasında meydana gelen kimyasal reaksiyonları daha gerçekçi modellemek için reaksiyon modelleri geliştirilmekte deneylerle geçerlilikleri kanıtlanmaktadır. Yanma kimyasının doğru tanımlanması ile hesaplama süresini ve bilgisayar hafıza kullanımını azaltmak için gerekli olmayan ara bileşiklerin ve reaksiyonların elenmesi ile sağlanmaktadır [67]. Detaylı reaksiyon modellerinin sayısal çözümlerinin daha hızlı yapılabilmesi amacıyla sadeleştirilmiş mekanizmalar, azaltılmış kimyasal modeller olarak adlandırılmaktadır. Azaltılmış modellerde kendi kendine ateşleme zamanı tahmini mükemmel ve çok boyutlu modellere uyarlanabilirlik yüksek iken detaylı kimyasal reaksiyon sürecini değerlendirme yetersiz kalmaktadır. Detaylı kimyasal kinetik modeller ile kritik reaksiyon yollarının tanımlanması mümkündür. Dual yakıtların ve yakıt katkılarının HCCI yanma üzerine etkileri araştırılmaktadır. Son yıllarda detaylı reaksiyon mekanizması incelemeleri küçük yakıt moleküllerinden (CH_4 , CH_3OH , C_2H_2) daha büyük HC moleküllerine doğru genişlemiştir.

Oktan sayısının tespitinde referans yakıt olarak kullanılmasından, dizel yakıtına yakın özelliklerinden ve setan sayısından (~55) dolayı n-heptan ($\text{n-C}_7\text{H}_{16}$) üzerinde birçok araştırma gerçekleştirilmektedir [66,67]. Genellikle dizel yakıtının kendi kendine tutuşma eşleniği (surrogate) olarak kullanılmaktadır. n-heptan HCCI motorda kolayca kullanılabilir. Ancak çok kolay tutuşur ve yanma fazı oldukça ileridedir. Saf n-heptan ile HCCI çalışma rejimi erken tutuşma ve yüksek yakıt/hava eşdeğerlilik oranlarında vuruntulu yanma ile sınırlanmıştır [68]. Ayrıca düşük, orta ve yüksek sıcaklık şartlarında

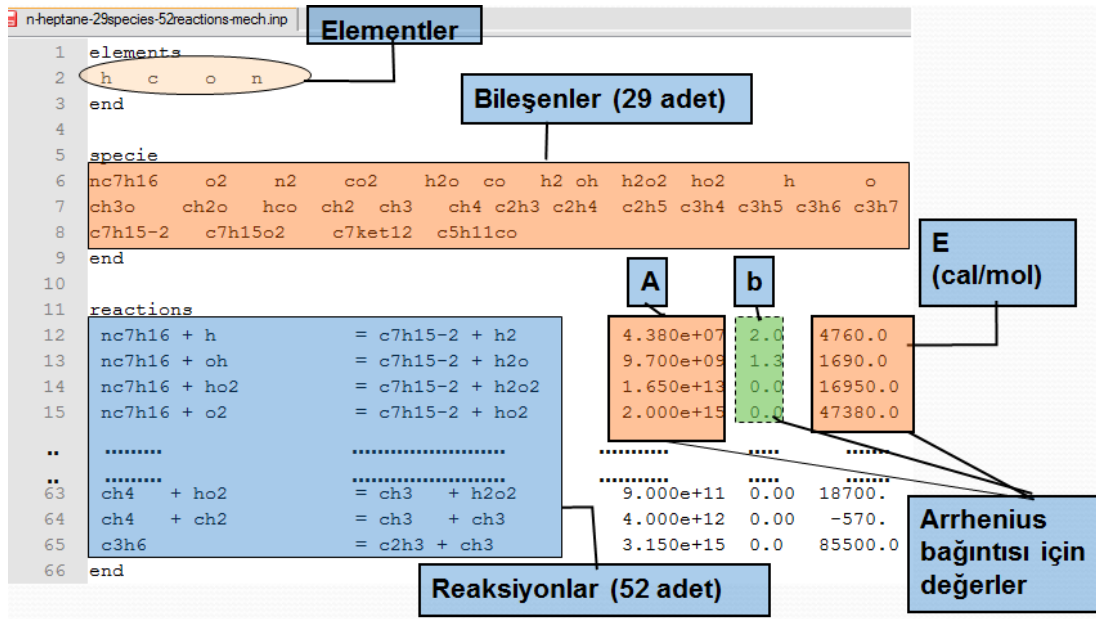
n-heptan oksidasyonu için detaylı kimyasal-kinetik mekanizmalar mevcuttur. CFD simülasyonlarında kullanılabilecekleri şekilde bileşik ve reaksiyon sayısı bakımından azaltılmış birkaç model bulunmaktadır [69].

Curran ve arkadaşları (1998) tarafından, akış reaktörleri, şok tüpleri ve hızlı sıkıştırma makinelerindeki n-heptan oksidasyonunun incelenmesi için detaylı bir kimyasal kinetik mekanizması geliştirilmiştir. Farklı teknikler kullanan farklı yazarlarca belirtilen geniş çaplı deneysel verilerle hesaplanan sonuçlar karşılaştırılarak mekanizmanın geçerliliği test edilmiştir. Hesaplanan ve ölçülen sonuçlar çok iyi uyuşurken önerilmiş olan önemli reaksiyon yolları ve kimyasal oran ifadeleri doğru olarak sunulmuştur [62]. 2000 yılında Pitz, mekanizmayı n-heptan kimyasını simüle etmek için doğruluğunu bozmayacak derecede basitleştirmiştir. Golovitchev (2000) hassasiyet analizi ile katkısı küçük olan reaksiyonları elerken aynı zamanda yakıtın içindeki C ve H atomlarının sayısını yanma ürünlerindeki sayı ile aynı tutarak daha sade bir mekanizma geliştirmiştir. Kendi kendine ateşleme gecikmesi sürelerini hesaplama da kullanılan mekanizma, ölçülen şok tüpü deneysel verileri ile karşılaştırılmış ve bunun sonucunda ateşleme gecikmesi tahminlerinin iyileştirilmesi için bazı reaksiyon oranları ayarlanmıştır. Patel ve arkadaşları (2004), dizel HCCI tipi motordaki yanmada yaygın olan kimyasal kinetikleri modellemek için Golovitchev'in mekanizmasını, xsenkplot, senkin ve genetik algoritma optimizasyon yöntemiyle sadeleştirerek 29 bileşen içeren 52 reaksiyonlu bir mekanizmaya indirgemişlerdir [70]. Geliştirilmiş n-heptan mekanizmaları EK-3'de listelenmiştir.

Bilgisayar ortamında yanma modellerinde kullanılan sayısız reaksiyondan etkisi az olan reaksiyonların elenmesi ve daha baskın olan reaksiyonlar hakkındaki verilerin deneysel verilerle yenilenmesi ve oluşturulan reaksiyon mekanizmalarının yine deneylerle test edilerek bazı katsayılarının değiştirilmesiyle birlikte gerçek verilere yaklaştırılmasıyla geçerliliğinin artırılması çalışmaları devam etmektedir. Daha doğru model sonuçları için daha kapsamlı reaksiyon mekanizmaları gerekmesi daha güçlü bir bilgisayar

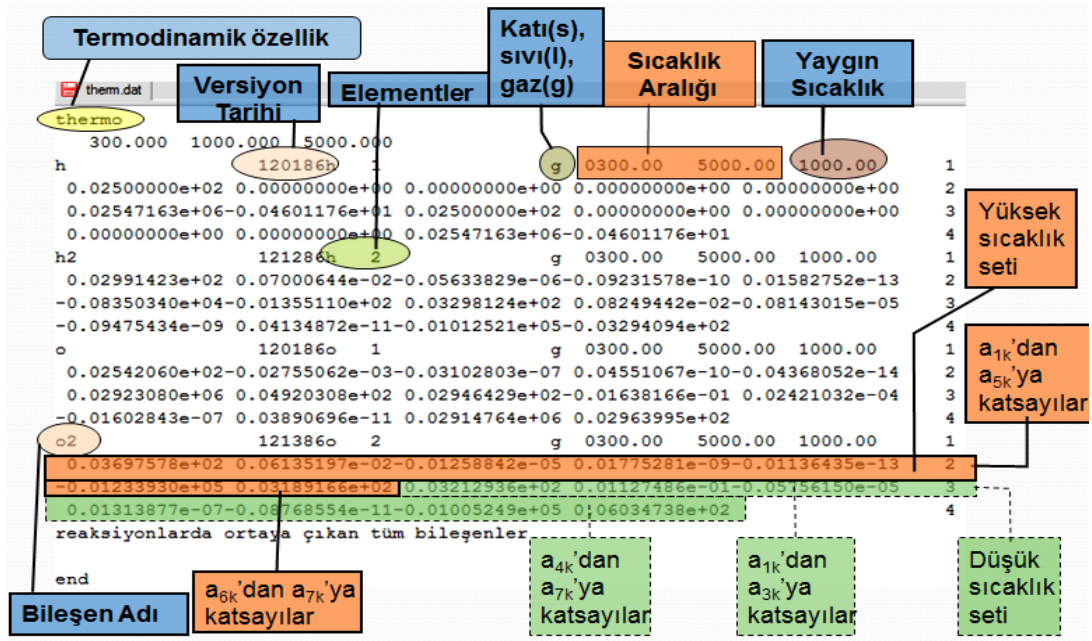
donanımı gerektirmektedir. Bu yüzden geçerliliği kanıtlanmış detaylı reaksiyon mekanizmalarının sadeleştirilmesiyle daha az bileşik ve reaksiyon içeren dolayısıyla daha az hesaplama gerektiren çeşitli azaltılmış reaksiyon mekanizmaları geliştirilmektedir.

Bu çalışmada hesaplama süresini azaltmak için diğer reaksiyon mekanizmalarına göre daha az hesaplama yükü gerektiren Patel ve arkadaşları tarafından Wisconsin-Madison Üniversitesi'nin motor araştırma merkezince geliştirilmiş olan ERC mekanizması olarak adlandırılan n-heptan mekanizması [70] tek bölge modelle kullanılmıştır. Kullanılan 29 bileşenli, 52 reaksiyonlu, reaksiyon mekanizması [70] Şekil 7.1'de gösterilmektedir.



Şekil 7.1. Tek bölge modelde kullanılmış olan n-heptan reaksiyon mekanizmasının Chemkin formatı görünümü

Tek bölge HCCI modelinde kullanılan reaksiyon mekanizmasındaki bileşenlerin sıcaklığa bağlı termodinamik özellikleri Şekil 7.2'de gösterilen NASA polinomlarından hesaplanmaktadır.



Şekil 7.2. Kullanılan n-heptan reaksiyon mekanizmasının Chemkin formatındaki termodinamik özellik bilgi dosyası

Termodinamik bağıntılar kullanılarak alev sıcaklığı ile birlikte ısı dağılımı miktarı da tahmin edilebilir.

NASA polinom katsayıları (a_{ik}), özgül ısı (c_p), entalpi (H) ve entropi (S)'nin hesaplanmasında kullanılmaktadır.

- Bileşen için sabit basıncındaki molar ısı kapasitesi (C_{pk}^o), Eş. 6.1 ile hesaplanmaktadır: (erg / (mol K))

$$\frac{C_{pk}^o}{R} = a_{1k} + a_{2k}T_k + a_{3k}T_k^2 + a_{4k}T_k^3 + a_{5k}T_k^4 \quad (6.1)$$

- Bileşen için entalpi (H_k^o), Eş. 6.2 ile hesaplanmaktadır: (erg / mol)

$$\frac{H_k^o}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2}T_k + \frac{a_{3k}}{3}T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4}T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5}T_k^4 + \frac{a_{6k}}{6} \quad (6.2)$$

- Bileşen için entropi (S_k^o), Eş. 6.3 hesaplanmaktadır: (erg / (mol K))

$$\frac{S_k^o}{R} = a_{1k} \ln T_k + a_{2k} T_k + \frac{a_{3k}}{2} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4} T_k^4 + a_{7k} \quad (6.3)$$

C_p , H ve S üzerindeki $^\circ$ işareti standart durumu (1 atm basınç) belirtmek için kullanılmıştır.

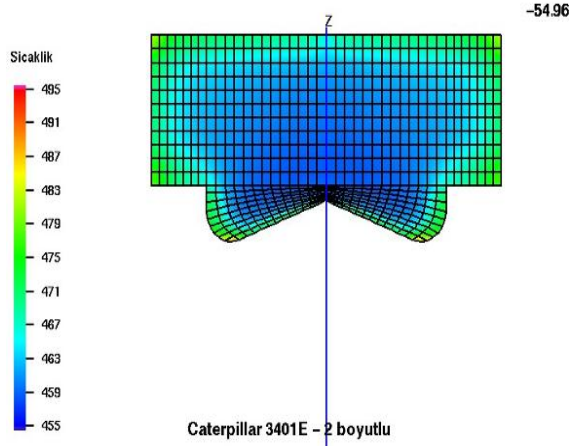
7.2. Modelleme Çalışması

HCCI sayısal çalışmalarında sıklıkla kullanılmakta olan Caterpillar 3401E motoru, yanma modelinde kullanılacak daha gerçekçi başlangıç değerlerinin tespit edilebilmesi için İYM'ların çok boyutlu modellenmesinde yararlanılan kodla emme supabı kapanışından ÜÖN'ya $54,96^\circ$ kalaya kadar modellenmiştir. 2 boyutlu CFD modelinden elde edilen verilerin başlangıç değeri olarak kullanıldığı tek bölgeli sayısal model ile egzoz supabı açılışına kadar yanma olayı incelenmiştir. Dizel yakıtına benzer özelliklerinden dolayı n-heptan yakıt olarak kullanılmıştır.

7.2.1. Çok boyutlu model

HCCI modunda çalışma için yakıt-hava karışımının silindir içinde homojen olması gerekmektedir. Farklı silindir içi doğrudan enjeksiyon zamanlaması ve farklı enjeksiyon açıları ile yapılan ön çalışmada yakıtın hava ile istenen derecede homojen karışmadığı görülmüştür. Bu yüzden ideal HCCI motor çevriminde olduğu gibi yakıtın hava ile emme manifoldunda karıştırılarak homojen bir şekilde silindire alındığı kabul edilerek ve bu şekilde modellenmiştir.

Karışımın piston hareketi ile sıkıştırıldığı 2 boyutlu model sonucunda (ÜÖN'dan $54,96^\circ$ önce) silindir içindeki sıcaklık dağılımı ve ağ yapısı Şekil 7.3'de gösterilmektedir. Bu noktadaki verilerin başlangıç değeri olarak kullanıldığı yanma simülasyonu için tek bölgeli model kullanılmıştır.



Şekil 7.3. Çok boyutlu modelde ağ yapısı ve silindir içi sıcaklık dağılımı

Çizelge 7.1’de özellikleri belirtilmiş dizel motoru 2 boyutlu olarak Los Alamos Ulusal Laboratuvarınca geliştirilmiş olan KIVA4 [71] kodu ile emme supabı kapanışından ÜÖN’ya 54,96° kalaya kadar modellenmiştir.

Çizelge 7.1. Sayısal modele ilişkin özellikler

Motor marka-model	Caterpillar 3401E SCOTE	Zaman, silindir sayısı	4 Zamanlı, Tek silindirli
Sıkıştırma oranı	16,1:1	Silindir hacmi	2440 cm ³
Silindir hacmi	2440 cm ³	Silindir çapı	137,2 mm
Biyel boyu	261,6 mm	Kurs	165,1 mm
Yakıt	n-heptan (nC ₇ H ₁₆)	Boşluk yüksekliği	1,57 mm
Yanma odası geometrisi	Pistonda keskin kenarlı kraterli meksika şapkası	Cidar sıcaklığı T _{cidar}	400 K
Motor devri	1600 1/min	Gönderilen yakıt miktarı	162,2 mg/çevrim
2 boyutlu model simülasyon aralığı	-147° KA-(Emme supabı kapanması) -55°KA	Tek bölge model simülasyon aralığı	- 55° KA +135° KA (Egzoz supabı açılması)
2 boyutlu model başlangıç- (-147 °KA) sıcaklık ve basınç	303 K, 156 kPa	Tek bölge model başlangıç-(-55 °KA) sıcaklık ve basınç	464,132 K, 723,870 kPa

7.2.2. Tek bölge sayısal model

KIVA4 koduyla gerçekleştirilen simülasyonun bittiği noktadaki ortalama

basınç ve sıcaklık değerleri, CHEMKIN-PRO 15082 [60] yazılımında tek bölge modelde ERC n-heptan mekanizması ile kullanılarak egzoz supabı açılışına kadar yanma süreci incelenmiştir. Chemkin veri giriş formatı, reaksiyonların, oran parametrelerinin, termodinamik veri ve bileşiklerin transport özelliklerinin tanımlanmasında standart haline geldiğinden dolayı bu yazılım kullanılmıştır [72].

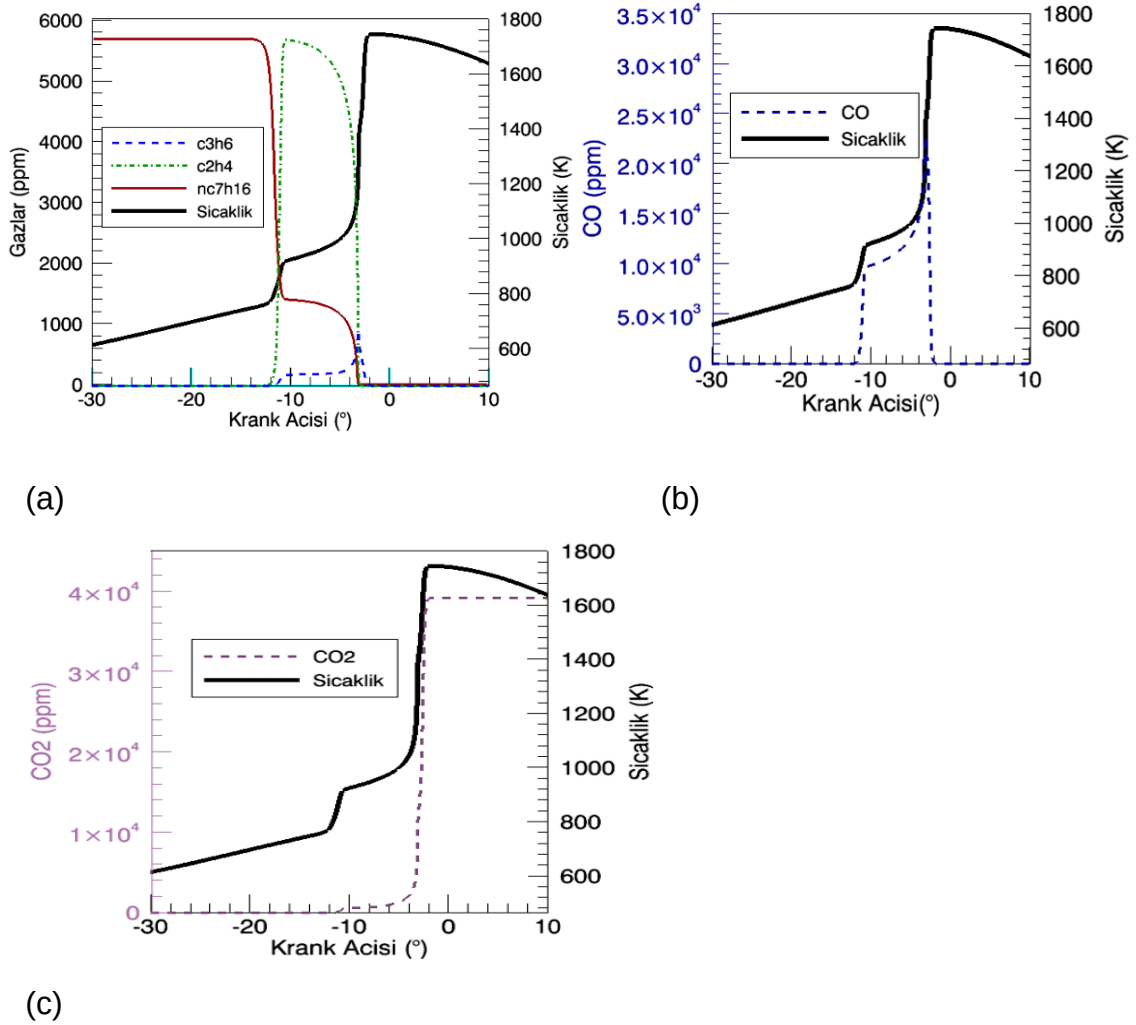
7.3. HCCI Kimyasal Sürecinin Özeti

Şekil 7.4'de krank açısına bağlı olarak silindir içi sıcaklık ve madde konsantrasyonlarının değişimi gösterilmektedir. Yakıt buharı, C_2H_4 ve C_3H_6 gibi ara bileşiklere ayrılmaktadır (Şekil 7.4-a). Ayrışma süreci genellikle bir miktar ısı çekmektedir.

Daha sonra ara bileşikler, ayrışma sürecinde çekilen ısıdan daha fazla ısı açığa çıkararak ve gaz sıcaklığını hafif artırarak CO ve H_2O 'ya dönüşmektedir [73]. Ateşlemenin ilk aşamasının sonucu olarak dikkate değer miktarda CO oluşmaktadır [74].

Şekil 7.4-b'de silindir içindeki CO miktarının artışına bağlı olarak sıcaklığın artışı gösterilmektedir. n-heptanın ayrışmasıyla oluşan ara bileşiklerin (C_2H_4 ve C_3H_6 gibi) tüketilmesinden sonra CO'nin oksidasyonu gerçekleşmektedir.

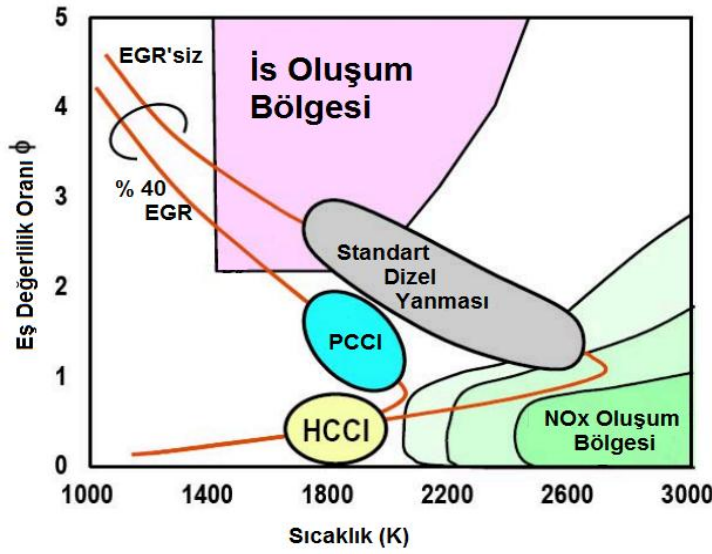
Şekil 7.4-c'de görüldüğü gibi ÜÖN'ya 3 derece kala, sıcaklık 1200 K'e yaklaşırken ateşleme meydana gelmektedir. Bu esnada gerçekleşen hızlı reaksiyonlar sonucunda büyük miktarda CO_2 ve H_2O bileşikleri oluşmakta ve ısı dağılımının büyük kısmı gerçekleşmektedir [73]. ÜÖN'ya 2 derece kala maksimum sıcaklık 1744 K olmaktadır. Bu noktadan sonra hacim artışı ve ısı kaybına bağlı olarak sıcaklık değeri azalmaktadır.



Şekil 7.4. Sıcaklık ve madde konsantrasyonlarının değişimi

7.4. Sayısal Sonuçlar

Şekil 7.5’de dizel motorlarında farklı yanma yaklaşımları ile elde edilmiş is ve NO_x emisyonlarının yanma odası sıcaklığı ve karışımın eş değeri oranı ile olan ilişkisi görülmektedir. Her iki emisyon oluşum bölgesinden yanma odasındaki gaz sıcaklığının seçimi ile kaçınılır [75]. Yapılan modelleme çalışmasında HCCI çalışma şartlarının oluşturulması için dizel geometrili motora eşdeğerlik oranı düşük, homojen, yakıt-hava karışımı emme zamanında alınmıştır. Eşdeğerlik oranı ve EGR oranları ile silindir için sıcaklığı, NO_x oluşum sınırının altında tutulmuştur.



Şekil 7.5. Dizel motorunda farklı yanma yaklaşımları [75]

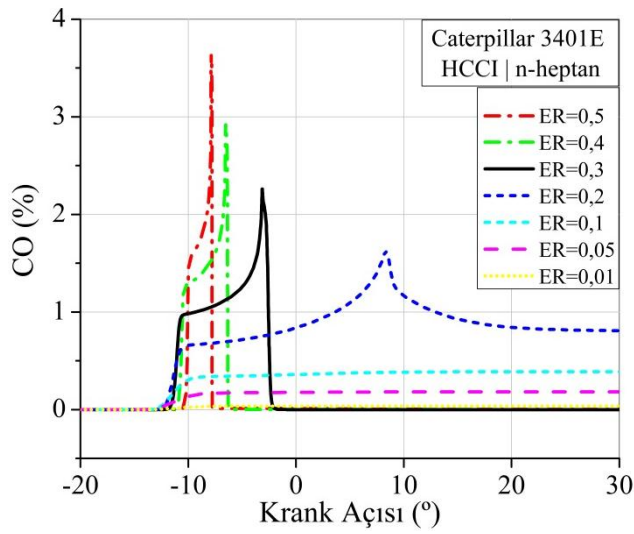
7.4.1. Eşdeğerlilik oranının gaz sıcaklığı ve CO emisyonu üzerindeki etkisi

İdeal HCCI motor çevriminde önceden karıştırılmış gaz halindeki yakıt ve hava çok düşük eşdeğerlilik oranı ile yanma odasına girmektedir. Eşdeğerlilik oranının, yakıtın fakir alevlenebilirlik sınırından oldukça düşük olmasından dolayı alevin yayılması mümkün değildir. Homojen ancak fakir karışım piston hareketi sonucu meydana gelen sıkıştırma ile ateşlenir. Ateşleme tüm yanma odası boyunca aynı şekildedir.

Karışımın çok fakir olmasından ($0,2 \leq \phi \leq 0,4$) dolayı yanma sıcaklığı önemli miktarda NO_x üretebilecek sıcaklıktan çok düşüktür. Karışım fakir ve gaz halinde olduğundan is ve yanmamış hidrokarbon üretilmez. Fakir karışımı sıkıştırma ile ateşlemek için kullanılan daha yüksek sıkıştırma oranları (~15-20) daha iyi termodinamik verim sağlamaktadır [32].

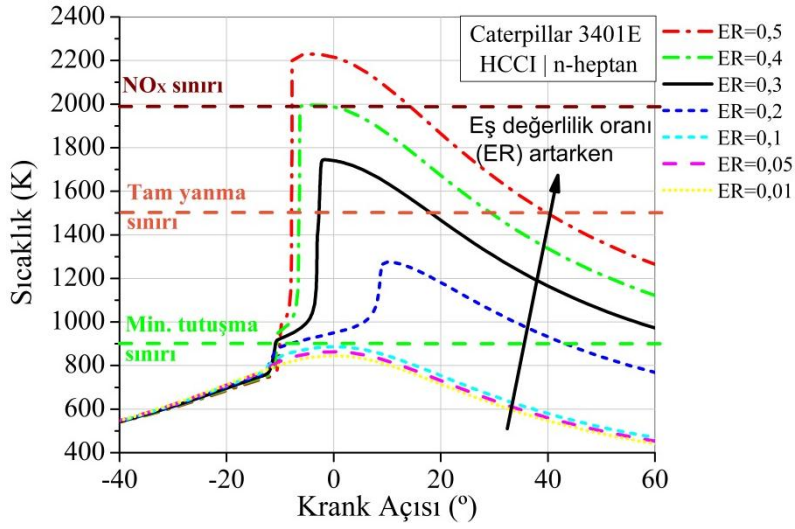
Yakıt-hava eşdeğerlilik oranının yanmaya olan etkisinin belirlenmesi için farklı eşdeğerlilik oranları altında kimyasal reaksiyon sonucu ortaya çıkan CO emisyonu ve silindir içi sıcaklık değişimi incelenmiştir. Yanma süreci

sonrasındaki CO emisyonu varlığı eksik yanmanın olduğunu göstermektedir. 0,01 ve 0,5 aralığındaki 7 farklı eşdeğerlilik oranında yapılan çalışma sonucunda yakıt-hava karışımının aşırı fakir olduğu 0,05, 0,01, 0,1 ve 0,2 oranlarında eksik yanma göstergesi CO emisyonu görülmüştür (Şekil 7.6). Bu yüzden 0,2 eşdeğerlilik oranının üstü tam yanma sınırı olarak belirlenmiştir. Karışım fakirleştikçe yanma hızının düştüğü CO emisyonunun oluşum ve ayrışma hızının düşüşünden anlaşılmaktadır.



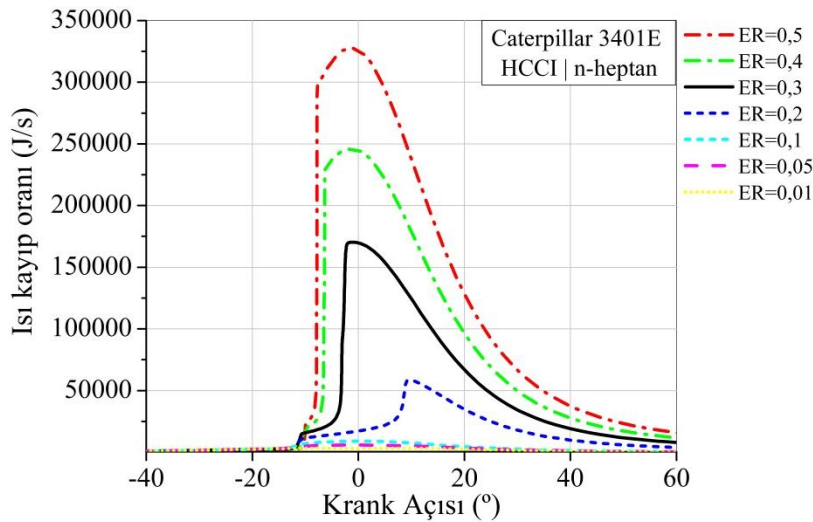
Şekil 7.6. Farklı eşdeğerlilik oranlarında krank açısına bağlı CO değişimleri

Farklı eşdeğerlilik oranlarında krank açısına bağlı silindir içi sıcaklık değişimi incelendiğinde eş değeri oranı yaklaşık olarak 0,4 iken NO_x emisyonuna etkisi Şekil 7.7'de gösterilmiş olan silindir içi maksimum sıcaklığının 2000 K'e yakın olduğu görülmüştür. Bu yüzden 0,3 eşdeğerlilik oranı NO_x sınırı olarak belirlenmiştir. Eş değeri oranının 0,4 ve 0,5 olduğu durumlarda silindir içi sıcaklığının NO_x oluşum sınırının üzerinde olduğu (0,4 için ~1996 K, 0,5 için ~2230 K) tespit edilmiştir. Eşdeğerlilik oranındaki artışa bağlı olarak ateşleme ÜÖN'dan daha önce meydana gelmektedir.



Şekil 7.7. Farklı eşdeğerlilik oranlarında krank açısına bağlı sıcaklık değişimleri

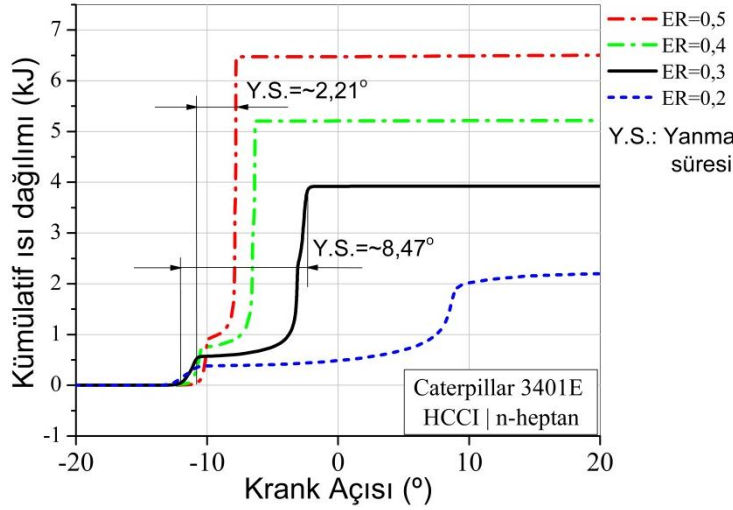
Şekil 7.8'de farklı eş değeri oranları için ısı kayıp oranları görülmektedir. Silindirden cidarlara olan ısı kaybı EK-1'de gösterilen Woschni tarafından geliştirilen korelasyon ile hesaplanmıştır. Eş değeri oranı artarken ısı dağılımı daha erken, çevrimin maksimum sıcaklık ve basınç değerleri daha yüksek gerçekleşmektedir [76].



Şekil 7.8. Farklı eşdeğerlilik oranlarında krank açısına bağlı ısı kaybı değişimleri

Eş değeri oranı artıkça tutuşma zamanı daha erken olmaktadır. Yanma

süresi, yanma sıcaklığına bağlıdır. Eşdeğerlilik oranı artarken karışım zenginleşir, silindir iç sıcaklığı artar, yanma süresi kısalır [76]. Eşdeğerlilik oranına bağlı olarak yanma süresindeki değişim Şekil 7.9'da gösterilmektedir.



Şekil 7.9. Farklı eşdeğerlilik oranlarındaki yanma süreleri

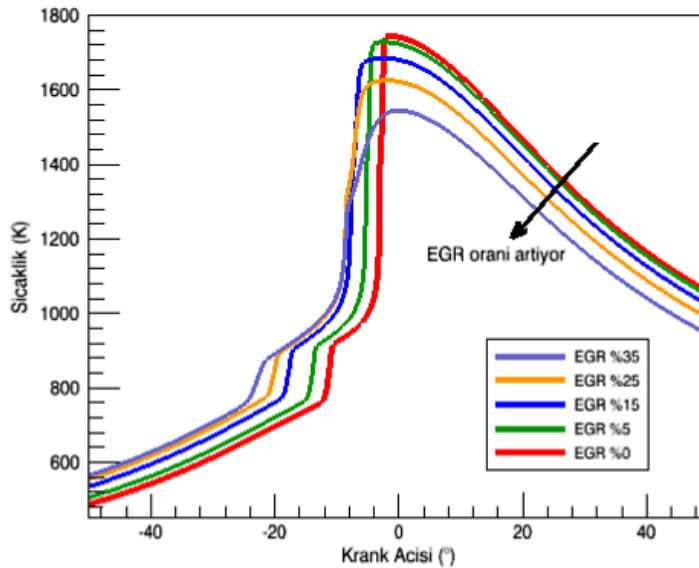
7.4.2. EGR oranının etkisi

Machrafi, n-heptan, izo-oktan ve toluen karışımı için geniş HCCI çalışma aralığındaki çoklu-bileşik kinetik mekanizmasının geçerliliğini deneysel olarak incelemiştir. 62 reaksiyon ve 49 bileşen içeren mekanizma yardımıyla hesaplanan basınç, ısı dağılımı, ateşleme gecikmesi ve CO₂ emisyonu, bir HCCI motorundan elde edilmiş deneysel veri ile karşılaştırılmıştır. Farklı EGR oranları, EGR sıcaklıkları, giriş sıcaklıkları ve eşdeğerlilik oranları içinde mekanizmanın geçerliliği incelenmiştir [77].

EGR ilavesi, ısı (ısı değişimi, cidarlara ısı kayıp, EGR oranı, karışım kalitesi ve EGR sıcaklığı), seyreltme ve kimyasal olmak üzere üç etki içermektedir. Isıl faktör, EGR'nin yüksek sıcaklığı ile ateşleme gecikmesini azaltarak ateşlemeyi iyileştirmektedir. Seyreltme ile CO₂, N₂ ve H₂O tutuşma gecikmesini artırmaktadır. O₂ konsantrasyonunun artmasıyla yakıt oksidasyon reaksiyonu iyileşmekte ve bundan dolayı yakıtın kendi kendine tutuşma

reaksiyonları hızlanmaktadır [77].

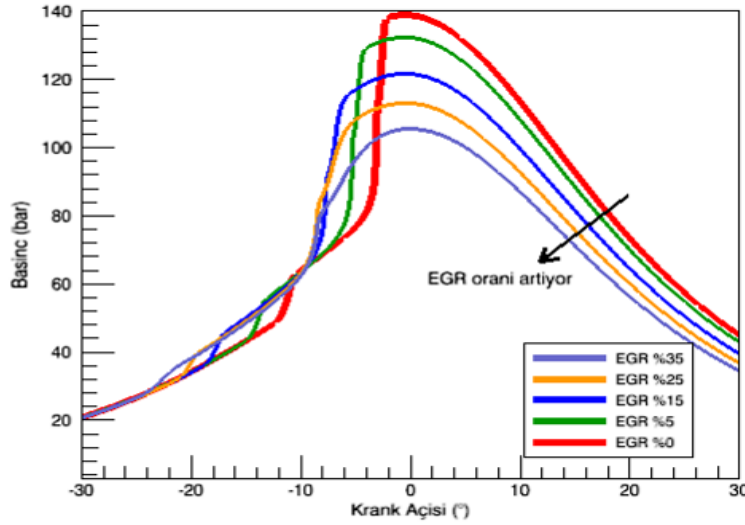
EGR oranının yanmaya etkisinin incelenmesi için aynı eşdeğerlilik oranlarında farklı EGR değerlerinin silindir içi sıcaklık, basınç ve CO emisyonu değişimine etkisi incelenmiştir. Şekil 7.10'da görüldüğü üzere EGR oranını artmasıyla maksimum sıcaklık değerinin düşmesinden dolayı NO_x sınırı olarak belirlenmiş olan 0,3 eşdeğerlilik oranında %0-%35 arasında 5 farklı EGR değerinde model çalıştırılmıştır. EGR oranın artışıyla sıcaklık değerleri azaldığından dolayı NO_x emisyonun azaltılmasında olumlu etkiler beklenilmektedir.



Şekil 7.10. Farklı EGR oranlarında krank açısına bağlı sıcaklık değişimleri

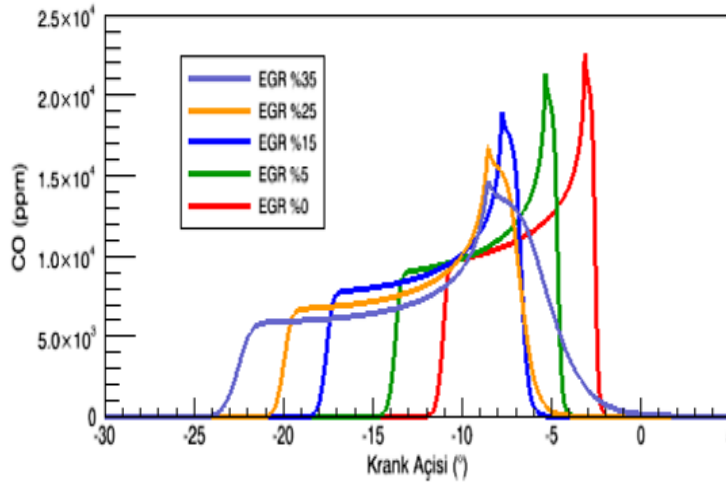
EGR oranına bağlı olarak silindir içi basınç değişimi Şekil 7.11'de görülmektedir. EGR tatbik edilmediğinde (EGR %0) maksimum silindir içi basınç elde edilmektedir, EGR oranının artışına bağlı olarak da silindir içi basınç azalmaktadır. Silindir maksimum basıncının azalması ortalama çevrim basıncının azalmasına sebep olacak, bunun sonucu olarak da çevrim başına elde edilen net iş azalarak motor performansında düşüş meydana gelecektir. Fakat diğer yandan silindir içi maksimum basıncının azalması, sıcaklığın da azalmasına sebep olduğundan özellikle NO_x emisyonları üzerinde olumlu bir

etki oluřturacaktır.



Şekil 7.11. Farklı EGR oranlarında krank açısına baėlı basınç deėişimleri

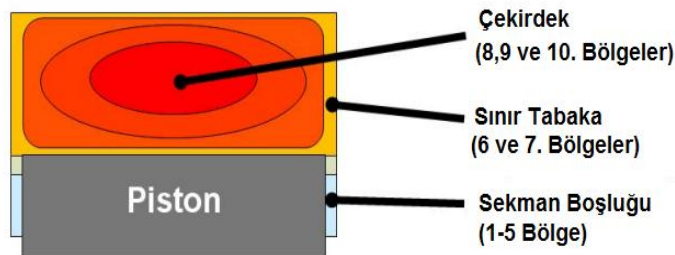
EGR oranındaki artışla sıkıştırma öncesi silindir içi basınç ve sıcaklığın artacağı bu durumda yanma süresini azaltacağı düşünülebilir. Ancak Şekil 7.12’de gösterilen farklı EGR oranındaki CO emisyonunun deėişimlerinden anlaşılacağı üzere EGR oranının artmasıyla CO bileşimi daha uzun süre görülmekte bu durum yanma reaksiyonlarının nispeten daha yavaş gerçekleştiğini göstermektedir. EGR’nin karışımı seyreltme etkisinden dolayı yanma süresinin daha fazla olduğu düşünülmektedir. EGR oranının artışına baėlı olarak sıkıştırma zamanında sıcaklık deėerleri artışının daha erken ve daha yüksek olduğu görülmektedir (Şekil 7.10) bundan dolayı CO oksidasyon reaksiyonunun daha erken gerçekleşmiş olabileceği düşünülmektedir.



Şekil 7.12. Farklı EGR oranlarında krank açısına bağlı CO değişimleri

7.5. HCCI Çok Bölge Model

Çalışmada tek bölge modelde kullanılmış olan n-heptan mekanizması ve motor geometrisi ile ilgili bilgiler kullanılarak çok bölge model incelenmiştir. CFD kodundan elde edilen sıcaklık profilinin kullanıldığı hibrid model yerine sadece çok bölge model kullanılmış ve enerji eşitliği simülasyonun başlamasıyla kullanılmıştır. Silindir içi Çizelge 7.2'deki özelliklerle Şekil 7.13'de temsili olarak gösterildiği gibi 10 adet hayali bölgeye bölünmüştür.

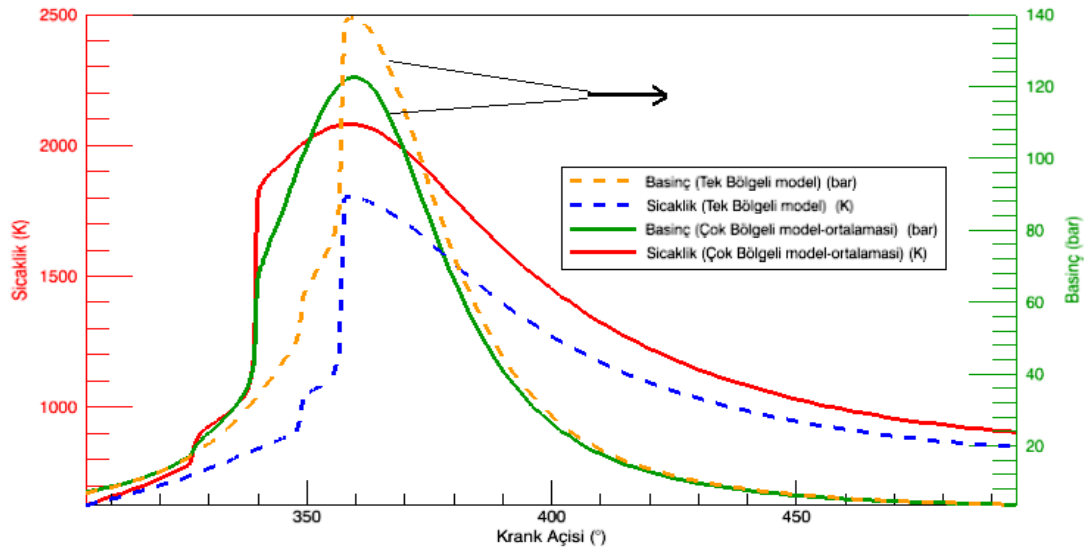


Şekil 7.13. Çok bölge model bölge tanımları

Çizelge 7.2. Bölgelerin yapısı

Bölgeler	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Kısım	Sekman Boşluğu					Sınır Tabaka		Çekirdek		
Kütle dağılımı %	2	1	1	1	2	5	10	18	25	35
Bölge yüzey alanı dağılımı %	7	2	2	2	3	6	9	16	22	31

Şekil 7.14'de aynı geometrik özellikleri, giriş değerlerini, kimyasal mekanizmayı kullanan tek bölge ve çok bölge modellerin krank açısına bağlı olarak basınç ve sıcaklık değişimi görülmektedir.



Şekil 7.14. Tek bölge ve çok bölge model yaklaşımlarının karşılaştırılması

8. DENEYSEL VERİ VE TEK BÖLGELİ MODEL SONUÇLARININ KARŞILAŞTIRILMASI

8.1. N-Heptan Yakıtı İçin Deneysel Veri ve Tek Bölgeli Model Sonuçlarının Karşılaştırılması

Elde edilen teorik sonuçların doğruluğunun belirlenmesi, model için gerekli başlangıç şartlarının tespiti ve model sonuçlarının iyileştirilmesi amacıyla kullanılan deneysel veriler Otomotiv Eğitimi Anabilim Dalındaki deney düzeneği (motor momenti, gücü, silindir içi basınç değişimi, emisyonların ölçümü vs.) ile sağlanmıştır. Çizelge 8.1’de kullanılan deney motoruna ait özellikler gösterilmektedir.

Çizelge 8.1. HCCI dönüşümü yapılan deney motoruna ait teknik özellikler

Motor marka-model	Antor 6LD 400	Motor tipi	Doğrudan enjeksiyonlu, dizel
Zaman, silindir sayısı	4 zamanlı, tek silindirli	Sıkıştırma oranı	18:1
Kurs hacmi (cm ³)	395	Silindir çapı (mm)	86
Kurs (mm)	68	Biyel boyu(l) (mm)	118
Yanma odası geometrisi	asimetrik oyuk piston	Motor devri (1/min)	2200
Yakıt	n-heptan (nC ₇ H ₁₆)	Püskürtme basıncı (bar)	180
Emme supabı kapanması	-154,5 °	Egzoz supabı açılması	159°
Maksimum motor gücü	5,4 kW (3000 1/min)	Maksimum moment	19 Nm (2200 1/min)
Püskürtme avansı	ÜÖN’den 24° önce	Chemkin I/r oranı	3,470588235
Simülasyon aralığı	-154,5 °, +159° (ÜÖN:0°)	Emme man. giriş sıcaklığı	25° C, 298 K
Cidar sıcaklığı (T _{cidar})	340-400 K		

Çizelge 8.2’de 5 farklı yükte gerçekleştirilmiş deney sırasında ölçülen değerler gösterilmektedir. Karışıklık olmaması için 2010 yılında yapılmış olan ilk n-heptan deneyleri için deney numarası A1’den A5’e kadar verilmiştir.

Çizelge 8.2. Deney sırasında ölçülen veriler

Deney No	Yük (N)	Ortalama Efektif basınç imep(bar)	Yakıt tüketimi		Hava tüketimi (l/min)	Emme Supabı Kapanma anındaki silindiriçi basınçları (bar)
			g/min	mg/çevrim		
A1	4	1,44974	8,47241	7,7021	328	1,01731
A2	8	2,2259	9,01673	8,197	329	1,05200
A3	12	2,6773	9,44271	8,5842	333	1,07025
A4	16	3,1507	9,93969	9,03609	334	1,06800
A5	20	3,6449	11,0047	10,0042	334	1,03840

Deneyler sırasında alınan ölçüm verilerinin modele giriş verisi olarak kullanılmasından önce EK-5’de gösterildiği gibi bazı hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Model giriş verisi olarak kullanılan hesaplama sonuçları Çizelge 8.3’de gösterilmektedir.

Çizelge 8.3. Ölçülen verilerden hesaplanan değerler

Deney No.	Yük (N)	Hava Yoğunluğu (kg/m ³)	Tüketilen Hava Kütlesi (g/çevrim)	Tüketilen Yakıt Kütlesi (g/çevrim)	Hava/Yakıt Oranı H/Y	Hava fazlalık katsayısı HFK
A1	4	1,189475	0,35468	0,007702	46,04919	3,046476
A2	8	1,230035	0,367892	0,008197	44,88119	2,969204
A3	12	1,251369	0,378824	0,008584	44,1299	2,919501
A4	16	1,248743	0,379164	0,009036	41,96105	2,776016
A5	20	1,214134	0,368655	0,010004	36,84987	2,437876

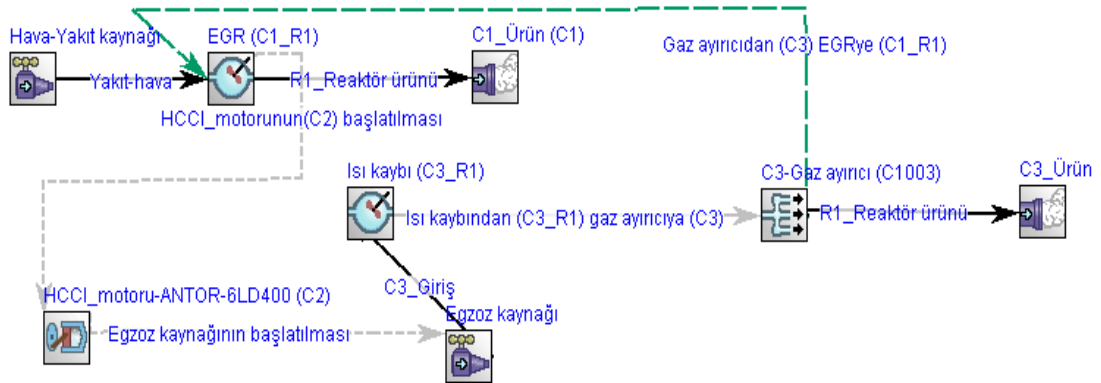
Daha sonra yapılmış olan n-heptan (RON0), RON20, RON40 ve RON60 yakıtlı deneylerin ölçülen verilerinin ve bu verilerle EK-5 belirtildiği gibi hesaplanmış model giriş verisi olarak kullanılan sonuçlarının tamamı EK-6’da gösterilmektedir.

Hesaplanan eş değerlilik oranı ve silindire olan toplam madde girişi Chemkin [60] programına girilmiştir. Hesaplanan değerler Çizelge 8.4’de gösterilmiştir.

Çizelge 8.4. Tek bölgeli modele girilen değerler

Deney No	Yük (N)	Eş değeri oranı ER=1/HFK	Chemkin toplam madde geçişi (g/s)
A1	4	0,328248	6,643668
A2	8	0,336791	6,894972
A3	12	0,342524	7,102477
A4	16	0,360228	7,116998
A5	20	0,410193	6,942089

Şekil 8.1’de tek bölgeli modellemede kullanılan sistemin diyagramı gösterilmektedir. Kesik çizgi ile gösterilen kısım EGR sisteminde emme manifolduna olan kısmi gaz geçişini göstermekte olup modellemede EGR kullanılmamıştır. EGR (C1_R1) ile gösterilen kısım emme manifoldu olup yakıt, hava ve gerekirse egzoz gazları burada karıştırılmaktadır. C2 ile gösterilen İYM özellikleri için deneylerde kullanılmış olan ANTOR-6LD400’ün özellikleri girilmiştir. Isı kaybı (C3_R1) ile gösterilen kısım egzoz manifoldu olmaktadır.

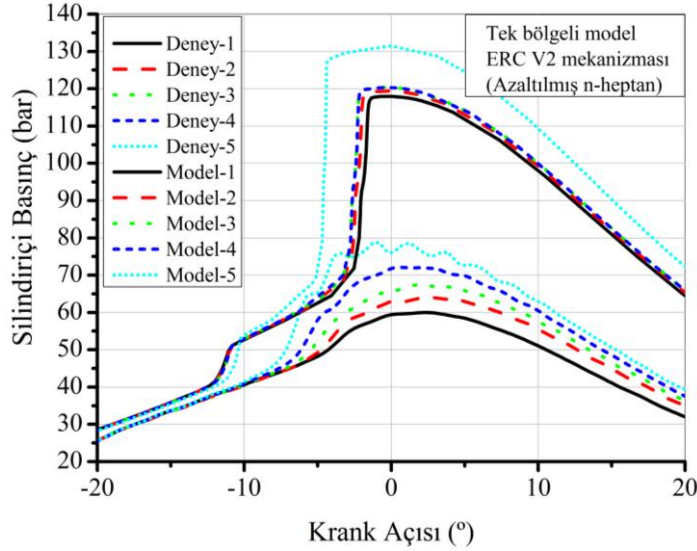


Şekil 8.1. Chemkin diyagram görünüşü

Çevrim boyunca olan ısı transferi EK-1’de gösterilen Woschni tarafından geliştirilen korelasyon ile hesaplanmaktadır.

İlk olarak EK-3’de belirtilmiş olan reaksiyon mekanizmalarından daha az bileşen ve reaksiyon içeren Patel ve arkadaşlarınca geliştirilmiş olan ERC n-heptan oksidasyon mekanizmasının kullanıldığı tek bölgeli model sonuçları ile deney verileri karşılaştırılmıştır.

Ancak Şekil 8.2’de görüldüğü üzere modelin silindir içi basınç değişimi deney verilerinin çok üzerindedir.

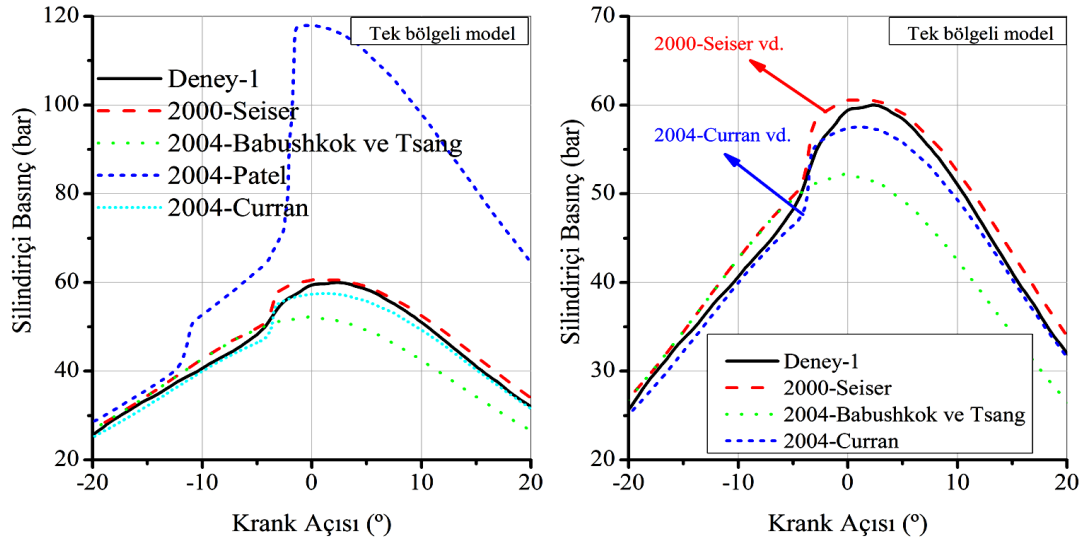


Şekil 8.2. Model ve deney verilerine göre basınç değişimi

Bu yüzden EK-3’de özellikleri belirtilen, ilk kullanılan reaksiyon mekanizmasına göre daha fazla bileşen ve reaksiyon içeren, n-heptan oksidasyonu ile ilgili geliştirilmiş farklı reaksiyon mekanizmaları ile model yeniden kullanılmıştır.

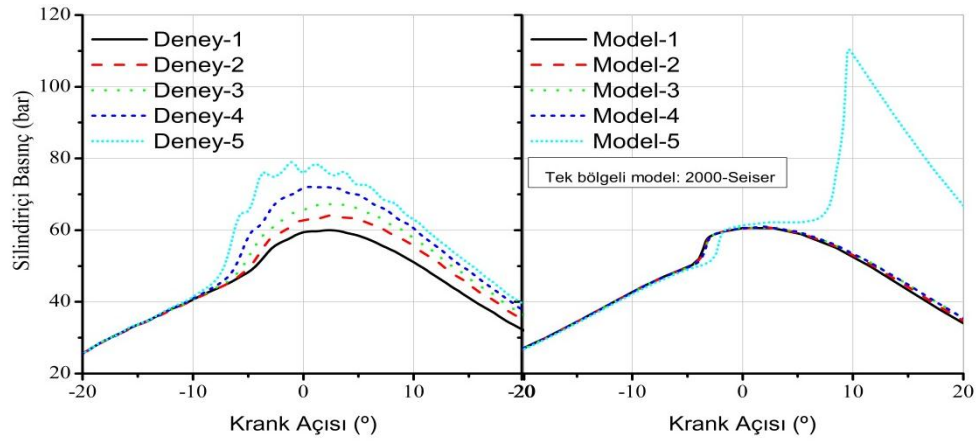
Curran ve arkadaşlarınca 2002 yılında ana karşılaştırma yakıtları (Primary Reference Fuels-PRF) için geliştirilmiş olan reaksiyon mekanizmasının [78], 2004 yılındaki gözden geçirilmiş 2. versiyonu kullanılmıştır. Aynı reaksiyon mekanizması daha önce başka HCCI motor simülasyon çalışmalarında da kullanılmıştır [79,80].

Farklı reaksiyon mekanizmaları ile Deney-1’deki şartlar tekrar modellendiğinde ve modellerin deney verisine çok daha yakın sonuçlar verdiği görülmüştür. Şekil 8.3’de görüldüğü üzere Seiser vd. tarafından geliştirilmiş reaksiyon mekanizmalı model diğerlerine göre daha eski tarihli olmasına rağmen deney verisine en yakın sonuçları vermiştir.



Şekil 8.3. Farklı model ve deney verilerine göre basınç değişimi

Seiser vd. tarafından geliştirilmiş reaksiyon mekanizmasının kullanıldığı modelle deney verileri karşılaştırılmıştır. Şekil 8.4'de görüldüğü üzere karışım zenginleştikçe model ve deney verisi arasındaki farkın arttığı görülmüştür.

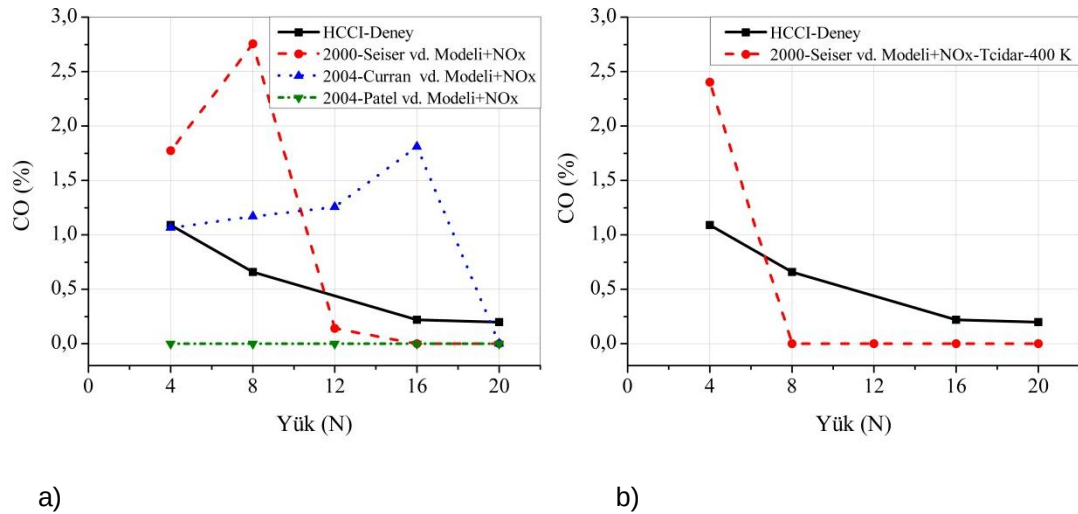


Şekil 8.4. Seiser modeli ve deney verilerine göre silindir içi basınç değişimi

8.1.1. CO emisyonu

Karışımın fakirleşmesi (daha düşük eş değeriilik oranları) ile CO ve HC emisyonları artmaktadır. Daha yüksek yükteki çalışma koşulları için deneysel ve sayısal çalışmalarla sekman yarığı ve silindir cidarlarına yakın kısımların bu emisyonlarda etkin olduğu tespit edilmiştir.

CO emisyonunun değeri silindirdeki eksik yanmayı belirtir. Eksik yanma oldukça düşük sıcaklıklarda meydana gelmektedir. Özellikle CO'den CO₂'e dönüşüm reaksiyonları yanma sıcaklığına duyarlıdır. Şekil 8.5-a'da ve Çizelge 8.5'de aynı HCCI modelinde farklı n-heptan reaksiyon mekanizmalarının kullanımıyla elde edilmiş model ve deney sonuçlarındaki CO emisyonları gösterilmektedir. Şekil 8.5-b'de modelin silindir cidar sıcaklığı 340 K'den 400 K'e çıkarılmış durumdaki sonuçlar gösterilmektedir. Modelin cidar sıcaklığının artırılmasıyla Seiser modelindeki CO değişimi deney verilerindeki değişime yaklaştırmıştır.



Şekil 8.5. CO emisyonunun değişimi

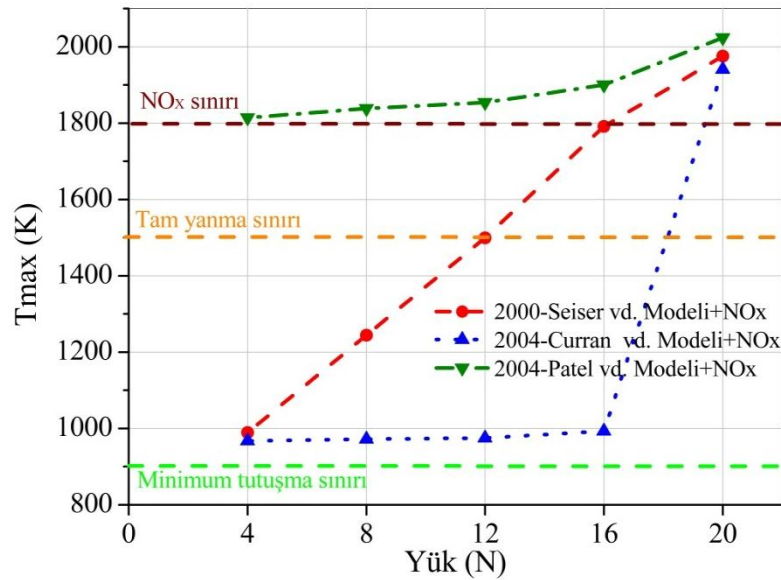
Çizelge 8.5. CO emisyonunun değişimi

Yük (N)	CO (%)					
	Dizel-Deney	HCCI-Deney	2000-Seiser vd. Modeli+NO _x	2000-Seiser vd. Modeli+NO _x -T _{cidar} =400 K	2004-Curran vd. Modeli+NO _x	2004-Patel vd. Modeli+NO _x
4	0,0532	1,09077	1,77435	2,4019	1,0668	<u>4,49E-06</u>
8	0,05341	0,65755	2,75427	<u>0,00185</u>	1,16902	<u>4,71E-06</u>
12	Veri yok	Veri yok	<u>0,13992</u>	<u>2,72562E-5</u>	1,25532	<u>4,87E-06</u>
16	0,06036	0,21989	<u>7,55E-06</u>	<u>7,22787E-6</u>	1,8095	<u>5,38E-06</u>
20	0,06796	0,19743	<u>9,18E-06</u>	<u>9,02307E-6</u>	<u>1,21E-05</u>	<u>7,14E-06</u>

Grafikten ve çizelgeden görüldüğü üzere aynı deney ve model şartları kullanılmasına rağmen farklı reaksiyon mekanizmaları ile elde edilmiş olan

CO emisyon değerlerindeki farklılık oldukça fazladır. Bu farklılığın nedeninin anlaşılması için CO oluşumu reaksiyonun doğrudan bağlantılı olduğu yanma sıcaklığı değişimi incelenmiştir. Çizelgede maksimum çevrim sıcaklıkları 1500 K'in üzerinde olan değerler italik ve altı çizgili olarak belirtilmiştir.

Şekil 8.6'da ve Çizelge 8.6'da aynı HCCI modelinde farklı n-heptan reaksiyon mekanizmalarının kullanımıyla elde edilmiş model sonuçlarındaki maksimum sıcaklık değerleri gösterilmektedir.



Şekil 8.6. Modellerdeki maksimum çevrim sıcaklıkları

Çizelge 8.6. Modellerle elde edilmiş maksimum çevrim sıcaklıkları

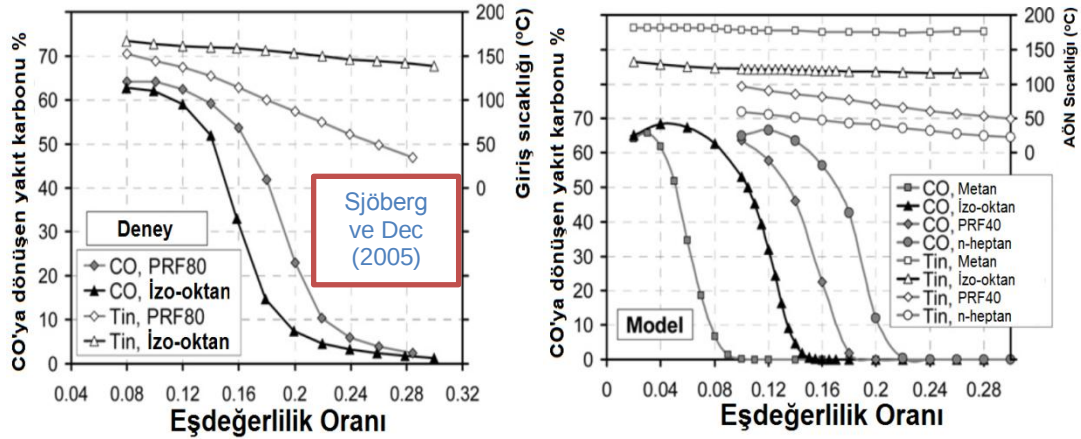
Yük (N)	Maksimum Çevrim Sıcaklıkları- T_{max} (K)		
	2000-Seiser vd. Modeli+NO _x	2004-Curran vd. Modeli+NO _x	2004-Patel vd. Modeli+NO _x
4	989,5854	<u>967,5606</u>	1814,209
8	1244,593	971,6645	<i>1838,11</i>
12	1499,168	974,9172	<i>1853,735</i>
16	1791,479	993,1725	<i>1900,343</i>
20	1975,812	<i>1941,056</i>	<i>2023,614</i>

Aynı deney ve model şartları kullanılmasına rağmen farklı reaksiyon mekanizmaları ile elde edilmiş olan maksimum sıcaklık değerlerindeki farklılık oldukça fazladır. Bu durum emisyon değerlerini doğrudan etkilemektedir.

Sjöberg ve Dec, sıkıştırma oranı 18:1, 1200 1/min'de izo-oktan yakıtlı bir motor için CO emisyonları açısından en yüksek sıcaklık değerinin minimum 1500 K olması gerektiğini ortaya koymuşlardır [81,82]. Tepe (maksimum) sıcaklığı 1500 K'in altında olan çalışmalarda OH seviyesinin aşırı düşük olmasından dolayı CO oksidasyonu tamamlanmamaktadır. Bundan dolayı Şekil 8.6'da 1500 K değeri tam yanma sınırı olarak adlandırılmıştır. Ayrıca aynı çalışmalarda bu tepe noktasının yakıt tipinden ve kendi kendine tutuşma özelliklerinden bağımsız olduğunu tespit etmişlerdir. Bu durum CO oksidasyonu sürecinin son aşamalarının yakıtın moleküler yapısından bağımsız olarak gerçekleşmesinde kaynaklanmaktadır.

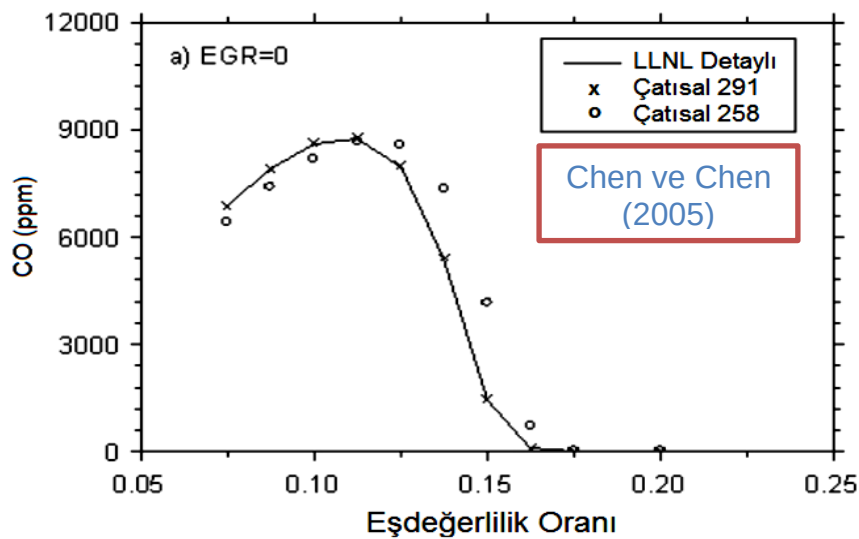
Çizelge 8.5 ve Çizelge 8.6 tekrar incelendiğinde 1500 K altındaki koşullarda CO emisyonlarının yüksek olduğu görülmektedir. Bu sıcaklık değerinin üzerindeki koşullarda CO emisyonları sert bir şekilde düşmektedir.

Sjöberg ve Dec, 2005'de benzer şekilde tek bölgeli modelle yaptıkları HCCI simülasyonunda Curran ve arkadaşlarınca geliştirilmiş olan PRF reaksiyon mekanizmasını kullanmıştır. Deneysel verilerle karşılaştırıldığında CO emisyonlarının başlangıcının daha aşamalı olmasını sekman yarığı boşluğu ve ısı sınır tabakadan kaynaklanan ısı dağılıma bağlamışlardır [79]. Şekil 8.7'de eş değerlilik oranının değişimine bağlı olarak deney sonuçları ve aynı model farklı yakıtlar (metan, izo-oktan, PRF40, PRF80, n-heptan) ile elde etmiş oldukları CO emisyonunun değişimi görülmektedir.

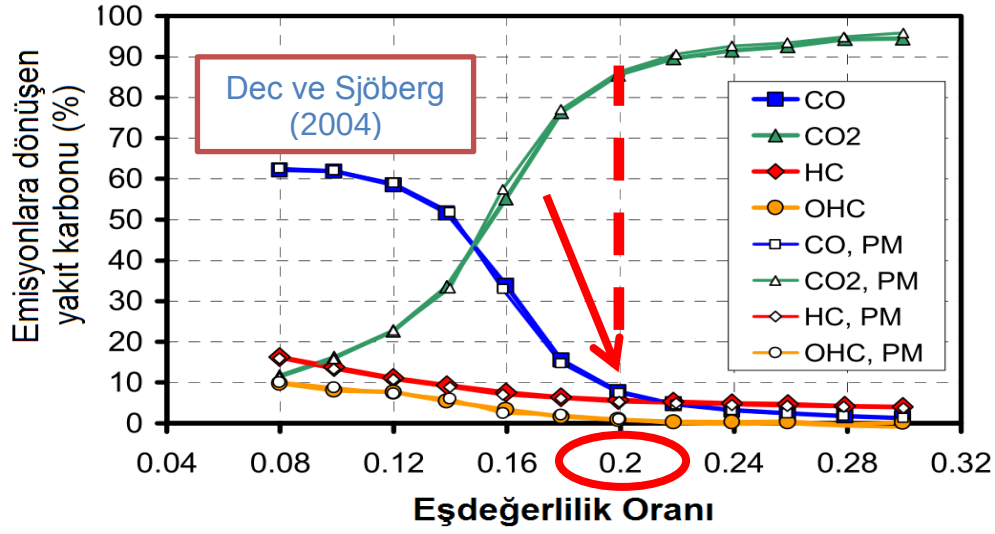


Şekil 8.7. Farklı yakıtlarda eş değeriilik oranına bağlı CO değişimi [79]

Chen ve Chen (2005), izo-oktan yakıtı ile 1800 1/min'de, 16:1 sıkıştırma oranında, CO ve UHC emisyonlarını öngörmek için tek bölge HCCI modelinde EGR'siz ve EGR'li ($EGR=0,3$), 0,075-0,25 eş değeriilik aralığında modellemeler yapmıştır [83]. Şekil 8.8-a'da eş değeriilik oranının değişimine bağlı olarak farklı modellerle elde etmiş oldukları CO emisyonunun değişimi görülmektedir [83]. Deney verileri ile karşılaştırmada kullanılmış olan Seiser modelindeki sonuca benzer şekilde CO emisyonu eş değeriilik oranı artışı ile artarken, tepe noktaya ulaştıktan sonra eş değeriilik oranı artışıyla birlikte azalmıştır.



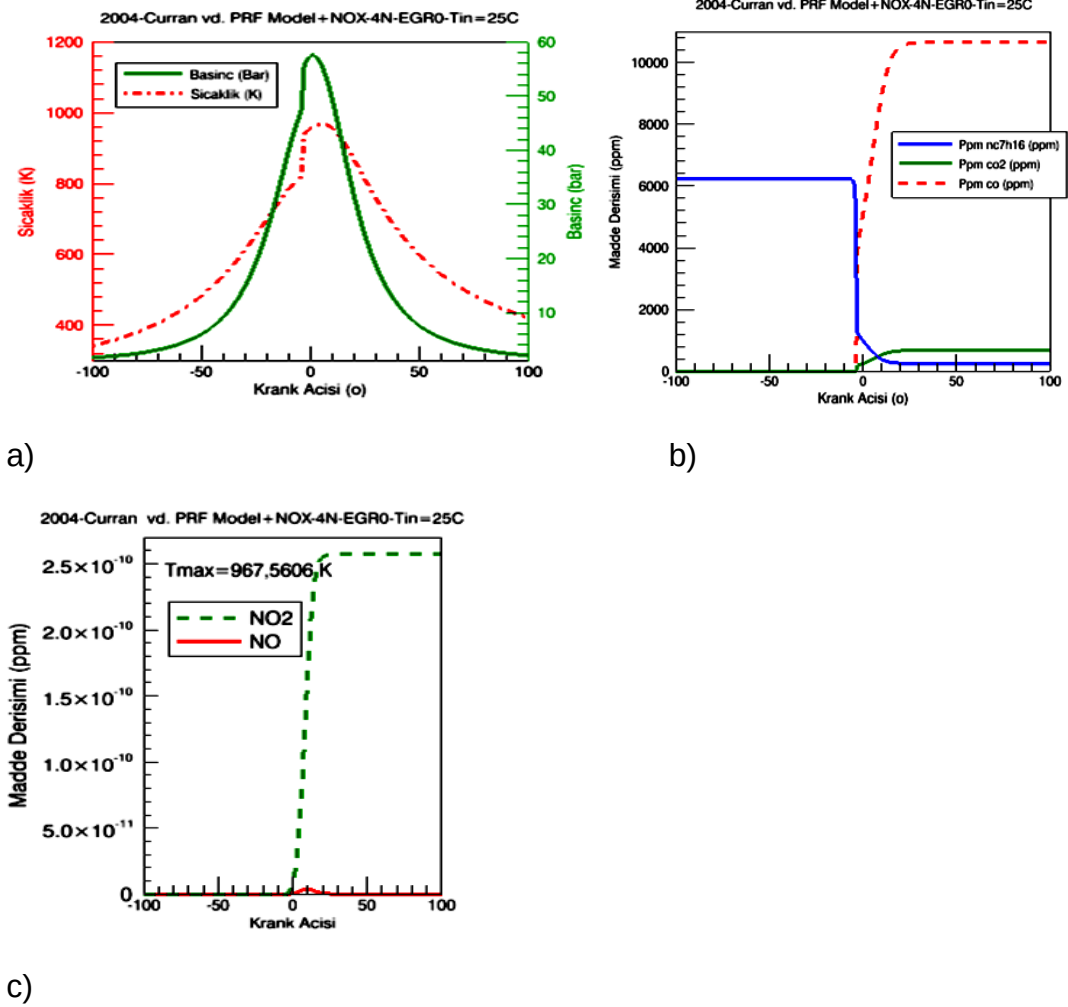
a)



b)

Şekil 8.8. İzo-oktan yakıtında eş değeri oranına bağlı CO değişim [80,83]

Çizelge 8.6'daki değerlere bakıldığında diğer değerlere göre en düşük tepe sıcaklık değeri 4N yük altında Curran ve arkadaşlarınınca geliştirilmiş olan reaksiyon mekanizmasının kullanıldığı modelle elde edilmiştir. Bu model sonucunda silindir içinde yanmanın gerçekleşip gerçekleşmediğinin belirlenmesi için basınç, sıcaklık, nC_7H_{16} , CO, CO₂, NO ve NO₂ değişimleri incelenmiştir. Şekil 8.9-a'da silindir içi basınç ve sıcaklık değişimi görülmektedir. ÜÖN'ya 6 derece kala yanmanın başlaması basınç ve sıcaklık değerlerinde ani bir artışa neden olmuştur. Şekil 8.9-b'de ise düşük sıcaklıktan dolayı ara reaksiyonlar sonucu oluşan CO'nun CO₂'e dönüşemediği görülmektedir. CO emisyonu kadar NO_x emisyonları da silindir içi sıcaklıkla doğrudan ilişkilidir. Şekil 8.9-c'de genel olarak NO_x şeklinde adlandırılan NO ve NO₂ emisyonlarının değişimi gösterilmiştir. Silindir içi maksimum sıcaklık 967,56 K olduğundan bu emisyon değerinin ppm cinsinden $2,5 \times 10^{-10}$ gibi sıfıra yakın değerlerde oldukları görülür.

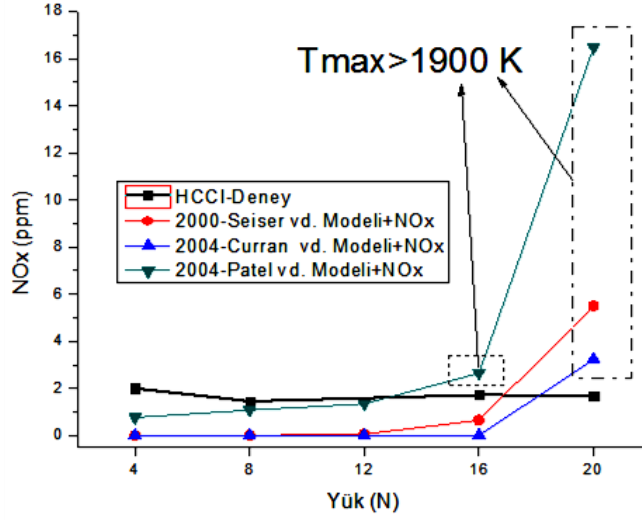


Şekil 8.9. Curran vd. PRF Modeli (2004)+NO_x-4N-EGR0-T_{in}=25 °C

8.1.2. NO_x emisyonu

Modellemenin bittiği, egzoz supabının açıldığı, 159^o'deki NO ve NO₂ bileşenlerinin değerleri toplanarak modelinin NO_x değeri olarak deneysel verilerle karşılaştırılmıştır.

Şekil 8.10'da ve Çizelge 8.7'de aynı HCCI modelinde farklı n-heptan reaksiyon mekanizmalarının kullanımıyla elde edilmiş model ve deney sonuçlarındaki NO_x emisyonları gösterilmektedir. Çizelgede maksimum çevrim sıcaklıkları 1900 K'in üzerinde olan değerler italik ve altı çizgili olarak belirtilmiştir.



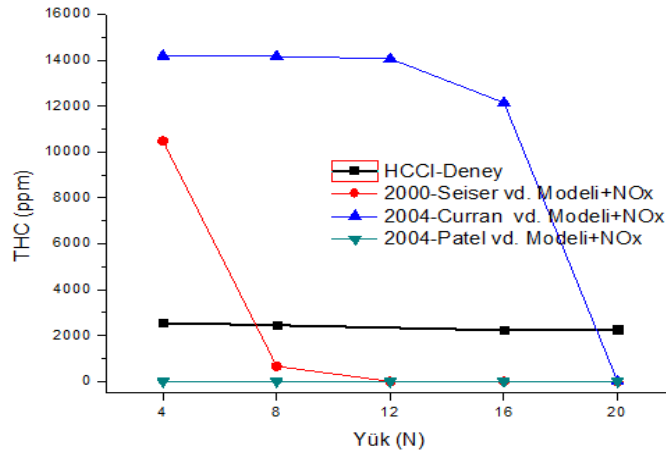
Şekil 8.10. NO_x emisyonunun değişimi

Çizelge 8.7. NO_x emisyonunun değişimi

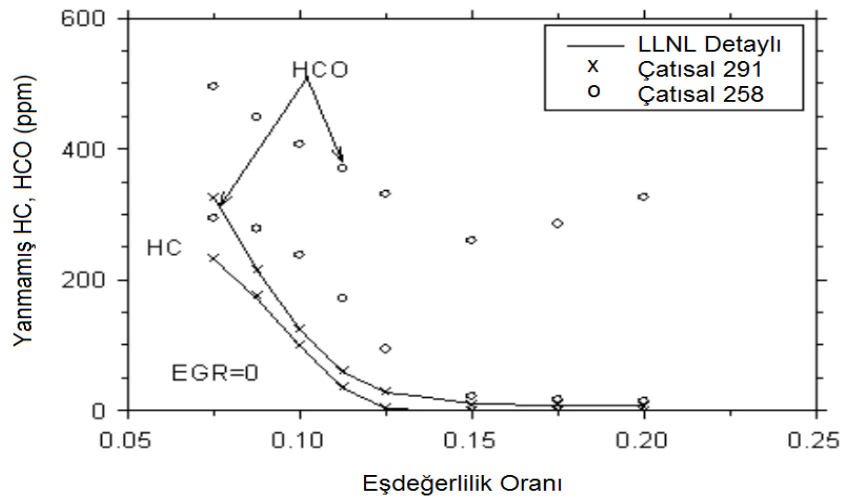
Yük (N)	NO _x (ppm)				
	Dizel-Deney	HCCI-Deney	2000-Seiser vd. Modeli+NO _x	2004-Curran vd. Modeli+NO _x	2004-Patel vd. Modeli+NO _x
4	59,19623	2,00267	2,71E-09	2,57E-10	0,7706
8	63,88124	1,45193	4,32E-05	3,68E-10	1,0755
12	Veri yok	Veri yok	0,05719	4,90E-10	1,3429
16	83,05684	1,72295	0,64509	2,44E-09	<u>2,64692</u>
20	91,62312	1,70313	<u>5,504</u>	<u>3,22698</u>	<u>16,4783</u>

8.1.3. Yanmamış hidrokarbon (UHC) emisyonu

Şekil 8.11-a'da ve Çizelge 8.8'de aynı HCCI modelinde farklı n-heptan reaksiyon mekanizmalarının kullanımıyla elde edilmiş model sonuçlarındaki UHC değerleri gösterilmektedir. Şekil 8.11-b'de eş değerlik oranının değişimine bağlı olarak farklı modellerle, Chen ve Chen (2005), tarafından elde edilmiş olan UHC ve HCO (toplam oksijenli hidrokarbonlar) emisyonlarının değişimi görülmektedir [83]. Deney verileri ile karşılaştırmada kullanılmış olan Seiser modelindeki sonuca benzer şekilde UHC emisyonu eş değerlilik oranı artışı ile azalmıştır.



a)



b) [83]

Şekil 8.11. UHC emisyonunun değişimi

Çizelge 8.8. UHC emisyonunun değişimi

Yük (N)	THC (ppm)		UHC (ppm)		
	Dizel	HCCI-Deney	2000-Seiser vd. Modeli+NO _x	2004-Curran vd. Modeli+NO _x	2004-Patel vd. Modeli+NO _x
4	1251,559	2543,263	10473,21	14194,45	5,87E-14
8	1314,825	2446,2	663,004	14173,7	4,95E-15
12	Veri yok	Veri yok	3,03E-05	14066,01	3,29E-14
16	1451,566	2227,386	2,23E-15	12147,9	1,39E-13
20	1388,986	2263,044	1,83E-19	6,47031	3,33E-14

8.2. Ana Referans Yakıtlar (PRF) İçin Deneysel Veri ve Tek Bölge Model Sonuçlarının Karşılaştırılması

Ana referans yakıtları (n-heptan ve izo-oktan-primary reference fuel-PRF) ile deneyler gerçekleştirilmiş olduğundan EK-3 (tek bölge modellerde kullanılmış olan PRF reaksiyon mekanizmaları)'de gösterilen bu yakıtlar için geliştirilmiş olan kimyasal reaksiyon mekanizmalarının kullanıldığı tek bölge model sonuçları ile deney verileri karşılaştırılmıştır.

n-heptan ve izo-oktan karışımlarının kimyası büyük moleküler ağırlığa sahip harmanlanmış yakıtların bir çok özelliğini barındırmaktadır. n-heptan reaktif düz zincirli bir parafin iken izo-oktan daha az reaktif dallanmış zincir parafindir. Her bir yakıt oldukça zengin kompleks kimya sergiler, yüksek sıcaklıklarda yanma sürecine hakim olan yakıt ayrışma reaksiyonları düşük sıcaklıklarda ise alkil radikallerinin O_2 'ye eklenmesi ve takip eden izomerizasyon reaksiyonları baskın olmaktadır [84].

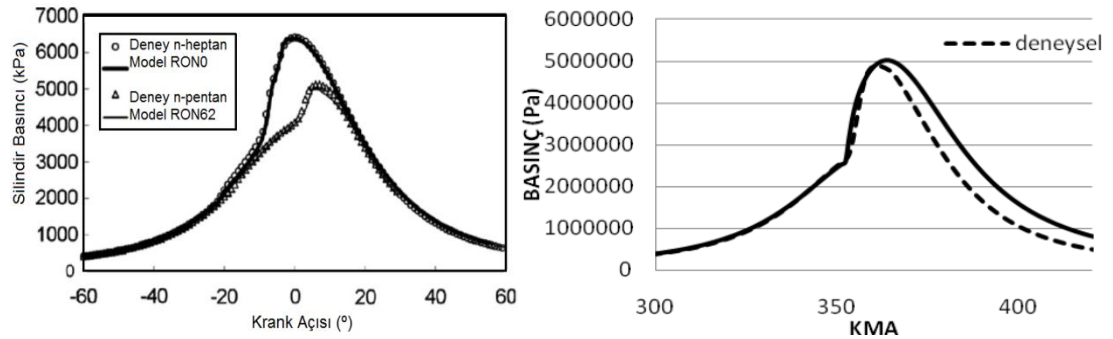
Curran ve arkadaşları yapmış oldukları çalışmada, harmanlanmış benzin için oktan referans ölçeğinin tanımlanmasında kullanılmakta olan n-heptan ve izo-oktan, primer referans yakıtları için detaylı bir kimyasal kinetik mekanizması geliştirmiştir [84].

Tsurushima, HCCI yanmada kullanılması için ana referans yakıtlara göre 33 bileşen ve 38 reaksiyon içeren çatısal bir kinetik model geliştirmiştir. Şok tüpü tutuşma gecikmesi verisi, bir HCCI motorundaki gaz örnekleme deneylerinden sağlanan ara profiller yeni PRF modeli geliştirmek ve geçerli kılmak için kullanılmıştır. Geçerli olan sonuçlar Şekil 8.12-a'da görüldüğü üzere deney verileri ile iyi bir uyuma göstermiştir [63].

Coşkun ve arkadaşları, dört zamanlı, bir motorun silindirindeki karışım ve yanma analizini Fluent ve Chemkin yazılımlarını kullanarak gerçekleştirmiştir. Bir HCCI motordan elde edilmiş deneysel ölçümler yanma analizinin

geçerliliği için kullanılmış, analiz sonuçları deney sonuçlarıyla iyi bir uyuşma göstermiştir. Daha sonra deneyler sırasında ölçümü mümkün olmayan bazı yanma parametrelerinin hesaplanması için simülasyonlar genişletilmiştir. Çalışmada analiz için Tsurushima tarafından HCCI yanması için geliştirilen mekanizma kullanılmıştır. Kurşunsuz benzinle yapılan deney için analizde sadece izo-oktan hesaba katılmıştır. Emisyon değerlerine yönelik bir karşılaştırma gerçekleştirilmemiştir. [85].

Şekil 8.12-a'da n-heptan ve n-pentan yakıtlarıyla yapılmış HCCI deneylerinin silindir basıncı değerleri ile Tsurushima tarafından geliştirilmiş PRF mekanizması ile sıfır boyutlu hesaplama ile elde edilmiş değerlerin karşılaştırılması görülmektedir. Şekil 8.12-b'de Coşkun ve arkadaşlarınca deneysel ve analiz yöntemlerle elde edilen basınç değişiminin karşılaştırılması görülmektedir.



a) [63].

b) [85].

Şekil 8.12. Tsurushima PRF mekanizması model ve deney basınçları karşılaştırması

Şekil 8.12'den görüldüğü üzere deney ve model sonuçları oldukça uyushmaktadır. Geliştirilmiş olan PRF modelinin HCCI simülasyonu için Stokiyometrikden fakir karışımlara yeterli doğruluğa sahip olduğu sonucuna varılmıştır [63]. Şekil 8.12-b'de görülen yanma sonrasındaki farklılık, yanma sonrası oluşan yüksek basınç nedeniyle supaplardan gerçekleşen kaçakların göz ardı edilmesinden kaynaklanmış olduğu şeklinde yorumlanmış, azami

basıncın biraz düşük olması ve yanma esnasında görülen küçük farklılığın yaklaşım metotlarındaki hesaplama hatalarından kaynaklandığı düşünülmüştür [85].

Deneylerde kullanılan PRF yakıtları (n-heptan-RON0, RON20, RON40, RON60) için deneysel veri ve tek bölgeli model sonuçlarının karşılaştırılması ile ilgili silindir içi basınç değişimi ve CO, CO₂, ve NO_x emisyonları karşılaştırma grafikleri EK-7’de gösterilmektedir.

8.3. Parametrik Çalışma

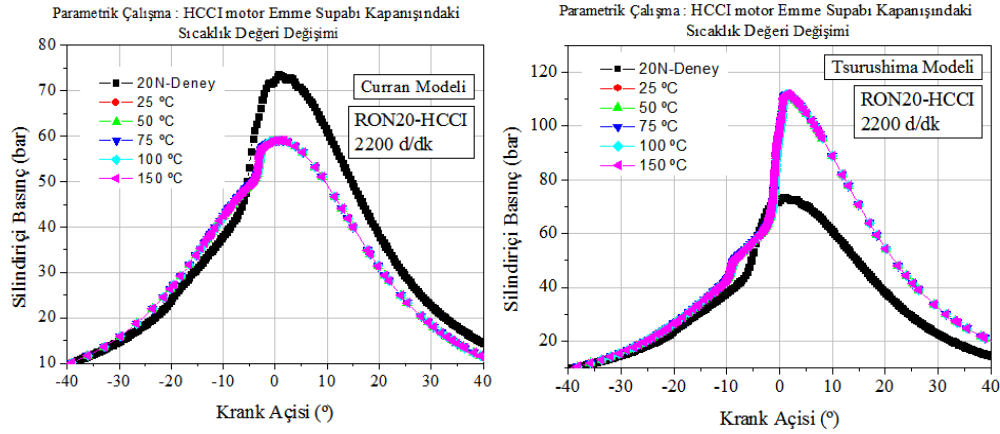
Deney ve model sonuçlarındaki farklılıklardan dolayı deneye ilişkin ölçüm değeri olmayan ancak modelde kullanılan bazı kabullerin sonuçları ne şekilde etkilediğinin belirlenmesi için parametrik çalışma yapılmıştır. Çizelge 8.9’da parametrik çalışma matrisi görülmektedir.

Çizelge 8.9. Parametrik çalışma matrisi

Simülasyon Başlangıcındaki Sıcaklık Değeri (°C)	Dolgu Giriş Sıcaklığı (°C)	Silindir Cidar Sıcaklıkları (K)	Sıkıştırma Oranı
<u>25-150</u>	25	400	18
25	<u>25-150</u>	400	18
25	25	<u>400-700</u>	18
25	25	400	<u>14-22</u>

8.3.1. Simülasyon başlangıcındaki sıcaklık değeri

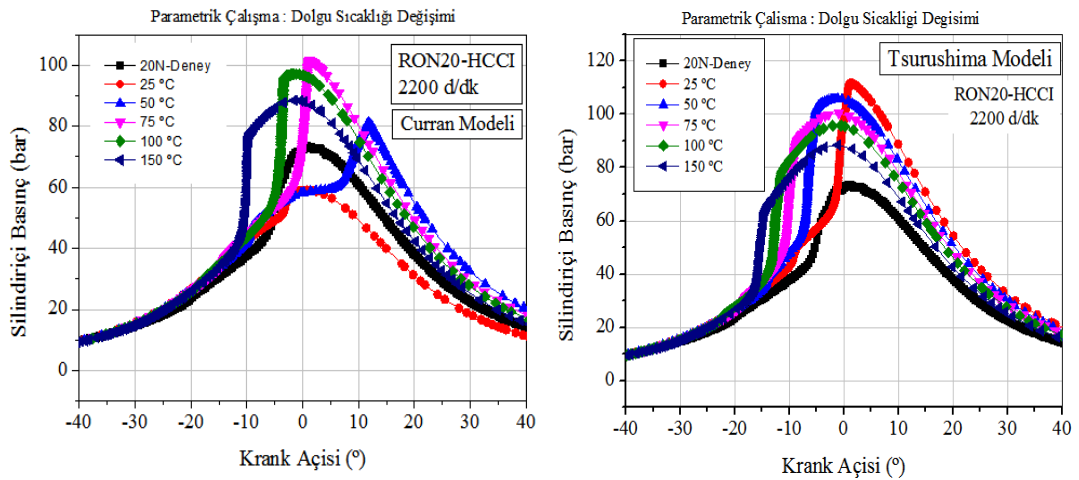
Simülasyon başlangıcındaki, emme supabı kapanışındaki, silindir içi sıcaklık değerinin model sonuçlarına etkisinin incelenmesi için 5 farklı sıcaklık (25 °C, 50 °C, 75 °C, 100 °C, 150 °C) değeri ile parametrik çalışma yapılmıştır. Şekil 8.13’de görüldüğü üzere değiştirilen parametrenin sonuçlar üzerinde göz ardı edilebilecek zayıf bir etkiye sahip olduğu tespit edilmiştir.



Şekil 8.13. Simülasyon başlangıcındaki sıcaklık değeri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması

8.3.2. Dolgu giriş sıcaklığı

Dolgu (yakıt-hava karışımı) giriş sıcaklığı değerinin model sonuçlarına etkisinin incelenmesi için 5 farklı sıcaklık (25 °C, 50 °C, 75 °C, 100 °C, 150 °C) değeri ile parametrik çalışma yapılmıştır. Şekil 8.14'de görüldüğü üzere farklı 2 kimyasal kinetik modelde farklı nicelik değerlerine rağmen aynı eğilim gözlenmiştir. Dolgu giriş sıcaklığının artışı ile tutuşma daha erken gerçekleşmektedir. Curran modeline göre 75 °C, Tsurushima'nın modeline göre 25 °C'nin üzerindeki değerlerde silindir içi maksimum basınç değeri de düşmektedir.



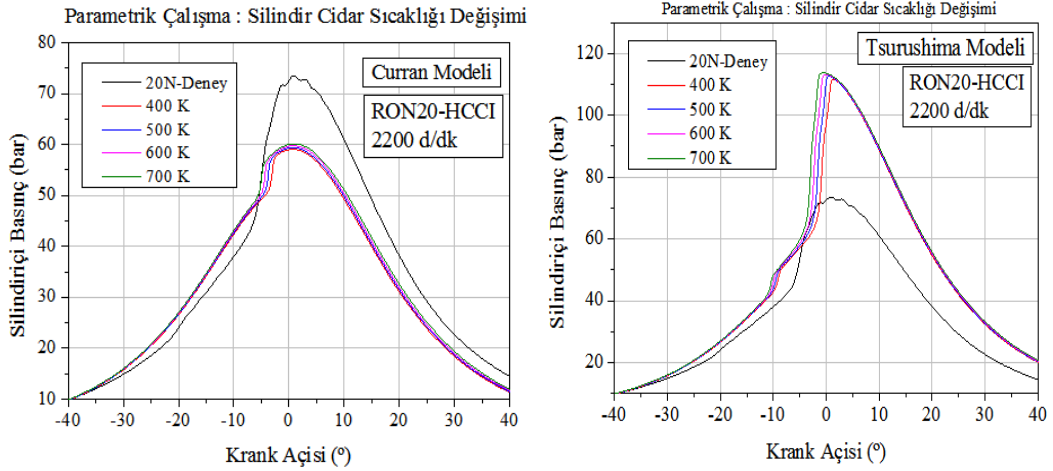
Şekil 8.14. Dolgu (yakıt-hava karışımı) giriş sıcaklığı değeri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması

8.3.3. Silindir cidar sıcaklıkları

Ortalama yanma odası cidar sıcaklığı (T_{cidar}), motor devrine, yüke, eş değeri oranına (Φ), yanma başlangıcına, dolgu hareketine, dolgu giriş sıcaklığına, cidar malzemesine, soğutucu ve yanma sıcaklıklarına bağlıdır. Cidar sıcaklığını tahmin etmek oldukça karmaşık görünmektedir [86]. Genel olarak tüm çalışma şartları için 350 K, 650 K gibi sabit bir değer seçilmektedir [87]. Cheung ve Heywood [86], daha iyi bir uyuma ulaşmak için cidar sıcaklığında rastgele bir değer yerine deneysel olarak elde edilmiş, aşağıda tanımlanan, eş değeri oranına bağlı olan cidar sıcaklıklarını kullanmışlardır.

$\Phi < 0,833$ için	$T_{\text{cidar}} = 400 \text{ K},$
$0,833 < \Phi < 0,9$ için	$T_{\text{cidar}} = 425 \text{ K},$
$0,9 < \Phi$ için	$T_{\text{cidar}} = 450 \text{ K}.$

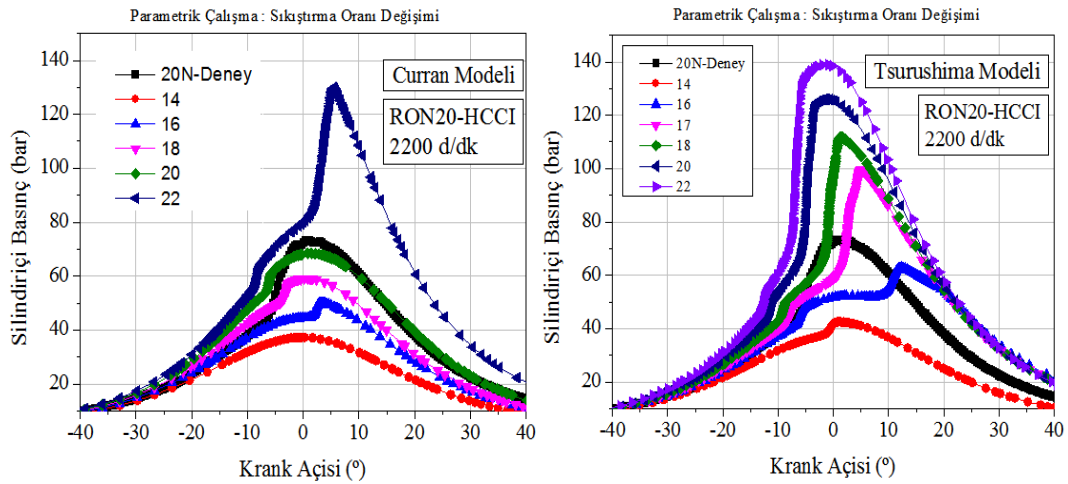
Silindir cidar sıcaklık değerinin model sonuçlarına etkisinin incelenmesi için 4 farklı sıcaklık (400 K, 500 K, 600 K, 700 K) değeri ile parametrik çalışma yapılmıştır. Şekil 8.15'de görüldüğü üzere farklı 2 kimyasal kinetik modelde farklı nicelik değerlerine rağmen aynı eğilim gözlenmiştir. Değiştirilen parametrenin sonuçlar üzerinde göz ardı edilebilecek zayıf bir etkiye sahip olduğu tespit edilmiştir. Cheung ve Heywood'a göre yüksek devirlerdeki daha kısa çevrim zamanından dolayı ısı transferi daha düşük olmaktadır. Böylece yüksek devirlerde cidar sıcaklığındaki değişim yanan kütle oranı üzerinde daha az etkiye sahiptir [86].



Şekil 8.15. Silindir cidar sıcaklık değeri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması

8.3.4. Sıkıştırma oranı

Sıkıştırma oranı değerinin model sonuçlarına etkisinin incelenmesi için 6 farklı (14, 16, 17, 18, 20, 22) değer ile parametrik çalışma yapılmıştır. Şekil 8.16'da görüldüğü üzere farklı 2 kimyasal kinetik modelde farklı nicelik değerlerine rağmen aynı eğilim gözlenmiştir. Sıkıştırma oranı artışı ile çevrimin maksimum basıncı artmakta, tutuşma daha erken gerçekleşmektedir.



Şekil 8.16. Farklı sıkıştırma oranı değerleri için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri karşılaştırması

9. ANA REFERANS YAKITLAR (PRF) İÇİN DENEYSEL VERİ VE CFD MODEL SONUÇLARININ KARŞILAŞTIRILMASI

Günümüz dünyasında bilişim teknolojilerinin sunduğu hızlı hesaplama ve büyük veri hacimlerini depolama ve işleme gücü tüm bilim ve teknoloji alanlarında bir devrim yaratmış, geçmişte ele alınamayan karmaşıklıkta problemler çözümlenmeye, tasarımlar gerçekleştirilmeye başlamıştır. Bu gelişmelerin sonucu olarak yüksek başarımlı hesaplama ve veri depolama çağdaş araştırmanın zorunlu araçları haline gelmişlerdir [88].

9.1. Yüksek Başarımlı ve Paralel Hesaplama

Yüksek Başarımlı Hesaplama, çözülmesi oldukça zor olan ve gerekli hız, hafıza ve saklama alanı açısından yüksek bilgisayar gücü gerektiren problemlerin süper bilgisayarlarda, paralel hesaplama programlama dillerinin de yardımı ile çözülmesidir. Paralel hesaplama, bir problemin parçalara ayrılarak paralel bilgisayar öbeklerinde birden fazla işlemciye dağıtılması, işlemciler arası gerekli haberleşmenin Mesaj geçiş arayüzü (Message Passing Interface-MPI) gibi paralel hesaplama dilleri kullanılarak yapılması ve uygun paralel programlama algoritmaları ile hesaplanmasıdır [6].

Çizelge 9.1’de hesaplama adım sayısına göre seri ve paralel hesaplamanın karşılaştırılması basit bir toplama işlemi ile gösterilmiştir.

Çizelge 9.1. Seri ve paralel hesaplama yaklaşımı [89]

Adım Sayısı	Seri Hesaplama (1 işlemci)	Paralel Hesaplama (2 işlemci)
1	1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6 + 7 + 8	1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6 + 7 + 8
2	<u>3</u> + 3 + 4 + 5 + 6 + 7 + 8	<u>3</u> + 3 + 4 + 5 + 6 + <u>15</u>
3	<u>6</u> + 4 + 5 + 6 + 7 + 8	<u>6</u> + 4 + 5 + <u>21</u>
4	<u>10</u> + 5 + 6 + 7 + 8	<u>10</u> + <u>26</u>
5	<u>15</u> + 6 + 7 + 8	<u>36</u>
6	<u>21</u> + 7 + 8	
7	<u>28</u> + 8	
8	<u>36</u>	

Seri kısımda 1 işlemci ile seri hesaplamanın çalışma prensibi gösterilmektedir. Her bir adımda tek bir toplama işlemi yapılmaktadır. Paralel kısımda ise 2 işlemci ile herbir adımda iki işlem yapılmaktadır. Böylelikle aynı problem iki kat daha hızlı çözülmektedir [89].

Paralel bilgisayarlar ve yüksek başarılı paralel hesaplamalar yardımı ile akışkanlar mekaniği alanındaki oldukça karmaşık akış problemlerinin hesaplamalı akışkanlar dinamiği yöntemleri kullanılarak çözümü günümüzde mümkün olabilmektedir [6].

HCCI yanma simülasyonu için 3 boyutlu bir geometri ile CFD ve kimyasal reaksiyon çözümleri gerçekleştirilmiştir. Karmaşık ve uzun süreli hesaplama süreci için daha yüksek kapasiteli donanıma ihtiyaç bulunmaktadır. Bu çalışmadaki simülasyonlar için Ulusal Yüksek Başarılı Hesaplama Merkezi'nin (UYBHM) Öğrenci Araştırma Desteği Programına başvuru yapılmış doktora çalışması için 3 yıl süre ile 15 GB'lık toplam disk kaynağı ve 10000 CPU-saatlik CPU kaynağı tahsisi sağlanmıştır. Resim 9.1'de doktora öğrencileri için tahsis edilmiş olan çalışmadaki hesaplamaların yapıldığı sunucu sistemi, Çizelge 9.2'de ise bu sunucu sistemine ilişkin teknik özellikler görülmektedir.



Resim 9.1. Anadolu hesaplama sunucu sistemi [90]

Çizelge 9.2. Anadolu hesaplama sunucu sistemi teknik özellikleri [90]

Sistem adı	ANADOLU (HP ProLiant DL360 G5)
İşlemci tipi	Intel Xeon 2.33 GHz (5140 iki-çekirdek, E5345 dört-çekirdek)
Hesaplama düğümü sayısı	192
Hesaplama çekirdeği sayısı	1004
Bellek mimarisi	Dağıtık
Düğüm bellek miktarı	8 GB (iki-çekirdekli sunucularda) 16 GB (dört-çekirdekli sunucularda)
Düğüm disk miktarı	2 X 60 GB RAID1 + 60 GB
Performans ağ bağlantısı	InfiniBand 20 Gbps
İşletim Sistemi	CentOS 5.4 x86_64

Kärrholm (2008)'un çalışmasında olduğu gibi bu çalışmada da kullanıcı taleplerini yerine getirmesinden ve geniş kapsamı ile yeni modeller geliştirmeye olanak sağlamasından dolayı OpenFOAM kodu seçilmiştir. Ayrıca diğer kodlarla (KIVA 4 gibi) karşılaştırıldığında OpenFOAM'da ne yapıldığını bilmemek oldukça zordur. OpenFOAM'ın en büyük avantajı kodun tamamlanmış paralelleştirmesidir. OpenFOAM'da yazılmış olan tüm çözücüler, kod temel seviyede paralelleştirildiğinden, kolaylıkla paralel işlemcilerle çalıştırılabilir [91].

Hesaplamalarda kullanılan OpenFOAM'ın UYBHM sistemine entegre şekilde kurulması konusunda çalışmalar devam etmekte olup, teknik destek ekibiyle yapılan görüşmelerle henüz test aşamasında olan OpenFOAM-2.0.x sürümü için gerekli ayarlamalar gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarda kullanılacak olan yazılım ve kütüphanelerinin kaynak kodları sisteme SFTP dosya transferi ile gönderilmiş ve derlenmiştir.

9.1.1. Paralel hesaplama uygulama çeşitleri ve çalışma komutları

Aşağıda en çok kullanılan paralelleştirme uygulamalarından bahsedilmiştir.

MPICH, MPICH2: Ücretsiz ve açık kaynak kodlu MPI uygulamasıdır.

LAM-MPI: OpenMPI projesini temel alan ve ondan türemiş MPI uygulamasıdır. Ücretsiz ve açık kaynak kodludur [89].

SUN /ORACLE MPI: Sun High Performance Cluster Toolkit olarak bilinmektedir. Spark mimarisinde çalışmak için tasarlanmış ücretli MPI uygulamasıdır [89].

OpenMPI: Açık kaynak kodlu ve ücretsiz bir başka mpi uygulamasıdır [89]. Bu tez çalışmasında kişisel bilgisayarda kullanılan MPI uygulamasıdır. OpenMPI, Ubuntu işletim sisteminin yazılım merkezinden indirilmiştir. Örneğin aşağıdaki komut, OpenMPI aracılığıyla, 3 işlemci kullanarak OpenFOAM'da kendi derlediğimiz dizelim2012 uygulamasını çalıştırabilir.

```
mpirun -np 3 dizelim2012 -parallel > log &
```

Ancak bu komut öncesinde decomposePar komutu ile eleman ağı ve alan 3 parçaya ayrılmalıdır.

INTEL MPI: İntelin kendi ürettiği mimarilerdeki işlemciler üzerinde çalışması için geliştirdiği MPI uygulamasıdır [89]. Bu çalışmada UYBHM sisteminde uzaktan kullanılan MPI uygulamasıdır. Aşağıda bu çalışma için UYBHM hesaplama kuyruğuna gönderilen, gerçekleştirilen 14 işlemci ile paralel hesaplama için kullanılan örnek komut gösterilmektedir.

```
bsub -P hhssia -q pgrad -a intelmpi -m anadolu_quad -n 14 -o %J.out -e  
%J.err mpirun.lsf dizelim2016Andraemass -parallel
```

Yine bu komut öncesinde decomposePar komutu ile eleman ağı ve alan 14 parçaya ayrılmalıdır.

9.2. Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD-CFD)

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği simülasyonlarında bir bütün olarak ele alınması gereken adımlar şunlardır: ön-işleme (pre-processing), hesaplama

(computation) ve ard-işleme (post-processing). Ön-işleme adımı, probleme uygun geometrinin tanımlanması ve katı modelleme yazılımları ile oluşturulması, geometriye uygun hesaplama alanının belirlenmesi, yapısal veya yapısal olmayan çözüm ağının çözüm ağı üretme (grid generation) yazılımlarıyla oluşturulması ve son olarak bu çözüm ağının akış çözücüyeye uygun formatta hazırlanması işlemleri vardır. Hesaplama adımı, uygun sayısal yöntemler, uygun algoritmalar ve uygun sınır koşullarının seçilmesi ile hesaplama alanı ve çözüm ağı üzerinde akış çözücüler (flow solver) kullanılarak hesaplamalar yapılır. Ard-işleme adımı ise hesaplama adımı elde edilen sayısal çözümün yani verilerin analiz edilmesi, ard-işleme yazılımları ile uygun şekilde çizgi grafikler, eş değer eğrileri, üç boyutlu görüntü ve animasyonlar ile görüntülenmesi ve yorumlanması işlemleri yapılır [6]. Ticari CFD yazılımlarının çoğunun, akış alanı analizini grafiksel olarak hızlı bir şekilde yapmak üzere tasarlanmış yüklü son işlemcileri vardır. Ayrıca bu amaç için kullanılabilen ve tek başına çalışan son işlemci yazılım paketleri de vardır [7]. Örneğin, paraView, EnSight.

9.3. Ön İşlem (Pre-processing)

9.3.1. Eleman ağı oluşturma

OpenFoamda bulunan 3 boyutlu geometriye sahip KIVA 3 formatındaki eleman ağı (mesh-otape17) dosyası sırasıyla openFoam ve Fluent formatına dönüştürüldükten sonra Fluent, Ansys ICEM ve ANSA yazılımları ile x, y, z koordinatlarında ölçeklendirilerek gerekli dizel motor geometrisi elde edilmiştir. EK-8'de hesaplamalarda kullanılan geometriler ve teknik özellikleri görülmektedir.

```

sbaydir@ags1:~
login as: sbaydir
Access denied
sbaydir@ags1:~$ s password:
Last login: Fri Dec  2 13:54:47 2011 from 10.1.1.127
#####
##          ULUSAL YUKSEK BASARIMLI HESAPLAMA MERKEZİ          ##
##          LOGIN SUNUCULARI          ##
##          http://uybhm.itu.edu.tr ~ destek@uybhm.itu.edu.tr  ##
##          ##          ##
##          Degerli Kullanicilarimiz;          ##
##          ##          ##
##          Guncel duyurulara wiki sayfamÄz olan          ##
##          http://wiki.uybhm.itu.edu.tr adresinden ulasabilir, ##
##          herhangi bir problemle karsilastiginizda          ##
##          "destek@uybhm.itu.edu.tr" adresine mail atarak          ##
##          yardım talebinde bulunabilirsiniz.          ##
##          ##          ##
#####
bjo[sbaydir@ags1 ~]$ bjobs -a
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT TIME
248932 sbaydir RUN   pgrad   ags1       8*d181    *-parallel Nov 22 19:08
252744 sbaydir RUN   pgrad   ags1       4*d158    *-parallel Dec  2 13:56
252187 sbaydir EXIT  pgrad   ags1       4*d188    *-parallel Dec  1 12:02
[sbaydir@ags1 ~]$

```

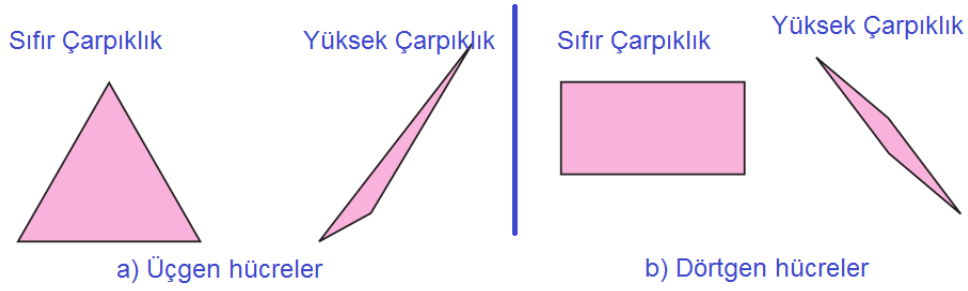
Şekil 9.1. UYBHM'de çalışan işlerin durumu

Şekil 9.1'de UYBHM gönderilmiş hesaplama işlerinin durumu görülmektedir. 22 Kasım'da 8 işlemciye gönderilmiş olan Geometri 1'in kullanıldığı işin 2 Aralık tarihinde hala çalışmakta olduğu görülmektedir. Geometri 1'in günler süren hesaplamalarından sonra Geometri 2'de hesaplamaları hızlandırmak amacıyla düzenlenmiş 45 derecelik dilim eleman ağı kullanılmıştır.

Seçilen ağın türüne bakılmaksızın (yapılandırılmış veya yapılandırılmamış, dörtgen veya üçgen vb.) güvenilir CFD çözümleri için en kritik konu ağı kalitesidir [7].

CFD'de en önemli eleman ağı ölçütleri şunlardır: [92]

- Çarpıklık (Skewness)
 - Hexa, Tri ve Quad için: 0,8'den daha az olmalı
 - tetrahedral için : 0,9'dan daha az olmalı



Şekil 9.2. Üçgen ve dörtgen hücrelerde çarpıklık [7]

Şekil 9.2’de görüldüğü üzere eşkenar üçgen ve dikdörtgenin çarpıklığı sıfır olup, yüksek oranda şekli bozulmuş olan üçgenin ve dörtgenin çarpıklığı yüksektir.

- En-boy oranı (Aspect Ratio)
 - 40’dan daha az olmalı, ancak bu özellik akış karakteristiklerine bağlıdır.
 - şişkin tabakalarda (inflation layers) 50’den fazlası tolere edilebilir.
 - En boy oranı çok büyük olan hücreler de sorun yaratabilir [7].
- Hücre büyüklüğü değişimi
 - 1 ve 2 arasında olmalıdır [92].
 - Hücre büyüklüğündeki ani değişimler CFD yazılımında hesaplama veya yakınsama güçlüklerine yol açabilir [7].

Düşük eleman ağı kalitesi hatalı çözüme veyahut yavaş yakınsamaya neden olabilir [7,92]. Bazı uygulamalar önerilen değerden daha düşük çarpıklık değeri gerektirebilir [92].

EK-8’de verilen CFD’de kullanılmış olan geometrilerin özelliklerine yukarıda belirtilen kriterlerden en-boy oranına göre bakıldığında Geometri 1 ve Geometri 2’nin bu kriterin dışında olduğu görülmektedir. Bu yüzden Geometri 1-2 eleman ağlarının çok karmaşık yapıya sahip olması ve hesaplama yükünün azaltılması için ANSYS workbench yazılımı ile daha basit

geometriler geliştirilmiş, kullanılmıştır.

Hızlı sıkıştırılmalı makine hesaplamasından elde edilen tecrübeye göre CFD-Chemkin hesaplaması için 10000 hücreye kadar sahip eleman ağları kabul edilebilir durumdadır [93]. Yapılandırılmamış bir ağ yerine yapılandırılmış bir ağ kullanmak suretiyle çoğu durumda hücre sayısı minimize edilebilir, ancak hesaplama bölgesinin şekline bağlı olarak yapılandırılmış ağ her zaman en iyi tercih değildir [7]. Bu kritere göre sadece Geometri 4 ve Geometri 5 ile kabul edilebilir CFD-kimya hesaplamaları yapılabilir. Sonuç olarak CFD hesaplama için eleman ağı kalite ölçütleri ve eleman sayısına göre EK-8’de verilen CFD’de kullanılmış olan geometrilerden en basiti olan Geometri 5 ile paralel işlemcilerde CFD hesaplamaları gerçekleştirilmiştir.

9.3.2. Eleman ağı (mesh) ve alan (domain) ayrıklaştırma (decompose)

Hesaplamayı paralelleştirmek için system klasörüne `decomposeParDict` dosyası eklenmiştir. Dosyadaki “*numberOfSubdomains*” parametresi ayrıştırılacak çalışmanın alt hesaplama alanı sayısını belirtmekte ve genellikle çalışmanın çözümünde kullanılacak olan işlemci sayısına karşılık gelmektedir. Farklı çalışmalarda işlemci sayısının çözüm zamanına etkisinin incelenmesi için bu değer 2 ile 14 arasında değiştirilmiştir. Alan ayrıklaştırma (decompose) yöntemi olarak simple, hierarchical, metis ve manual yöntemlerinden x,y,z yönlerinde belirtilen sayıya göre bölme yapan *simple* seçilmiştir. Örneğin (2 1 1) ifadesine göre sadece x yönünde alan 2’ye bölünmüş ve sadece 2 (*numberOfSubdomains* 2) işlemci kullanılmıştır. (4 3 2) ifadesine göre ise alan yatay düzlem x yönünde 4, y yönünde 3 parçaya, dikey düzlem z yönünde ise 2 parçaya, hesaplama yükünün dağıtılması için eleman ağı-geometri toplamda 24 parçaya ayrılmış ve 24 (*numberOfSubdomains* 24) işlemci kullanılmıştır. `decomposePar` komutu ile eleman ağı ve alanlar ayrıştırılmakta, komut tek işlemcide çalışmakta ve yaklaşık 0,01 s’de hesaplamaları işlemcilere dağıtma işi tamamlanmaktadır. Bu paralelleştirme sürecinde orjinal eleman ağı verisi hesaplanmakta,

yüzeyler, noktalar, hücreler işlemcilerle dağıtılmakta, her bir işlemci için yeni eleman ağları oluşturulmaktadır. Yapılan motor modelleme çalışmalarında düşey düzlem z eksenini doğrultusunda her hangi bir bölümlenme yapılmamıştır. Çizelge 9.3’de işlemci sayısının hesaplama süresine etkisinin incelendiği durumda işlemci sayısına bağlı olarak yapılmış ayırıklaştırma düzeni görülmektedir.

Çizelge 9.3. İşlemci sayısı, ayırıklaştırma düzeni

Yakıt	RON 20	Model Adı	Andrae-2009-PRF+3 Boyutlu OpenFOAM CFD				
İşlemci sayısı	2	4	6	8	10	12	14
Deney No	6	6	7	8	9	10	6
Yük (N)	4	4	8	12	16	20	4
decomposePar	<1 dakika	<1 dakika	<1 dakika	<1 dakika	<1 dakika	<1 dakika	<1 dakika
decomposePar x,y,z	2,1,1	2,2,1	3,2,1	4,2,1	5,2,1	4,3,1	7,2,1

9.4. İşlem (Solving) Sayısal Modeller ve Yöntemler

Sonlu hacim metodu (The finite volume method) motor CFD kodlarında, örneğin açık kaynak kodlu olan KIVA ve OpenFOAM ve diğer ticari CFD yazılımlarında, en yaygın sayısal yaklaşımdır. Popülaritesi iki bakımdan kaynaklanmaktadır: doğasında olan formülasyonun niceliklerin (örneğin kütle, momentum, enerji ve bileşenler) korunumunu sağlama alması ve ayrıca *yapısal olmayan* (unstructured) *eleman ağları* için kolayca formüle edilmeye imkân vermesi. Sonlu hacim metodu, bir diverjans terimi içeren bir kısmi diferansiyel denklemdeki (PDE-KDD) hacim integrallerini diverjans teoremi kullanarak yüzey integrallerine dönüştürür ve kaynak terimler doğrudan hacim-integral olabilir. Yüzey integrasyondan sonra bu terimlerin her bir sonlu hacminin yüzeylerindeki akılar olarak değerlendirilmesi sağlanır. Çünkü bir kontrol hacmine giren akıların değerleri, onların çıkış değerlerinin, korunumlarının garantilenebilmesine özdeştir [58].

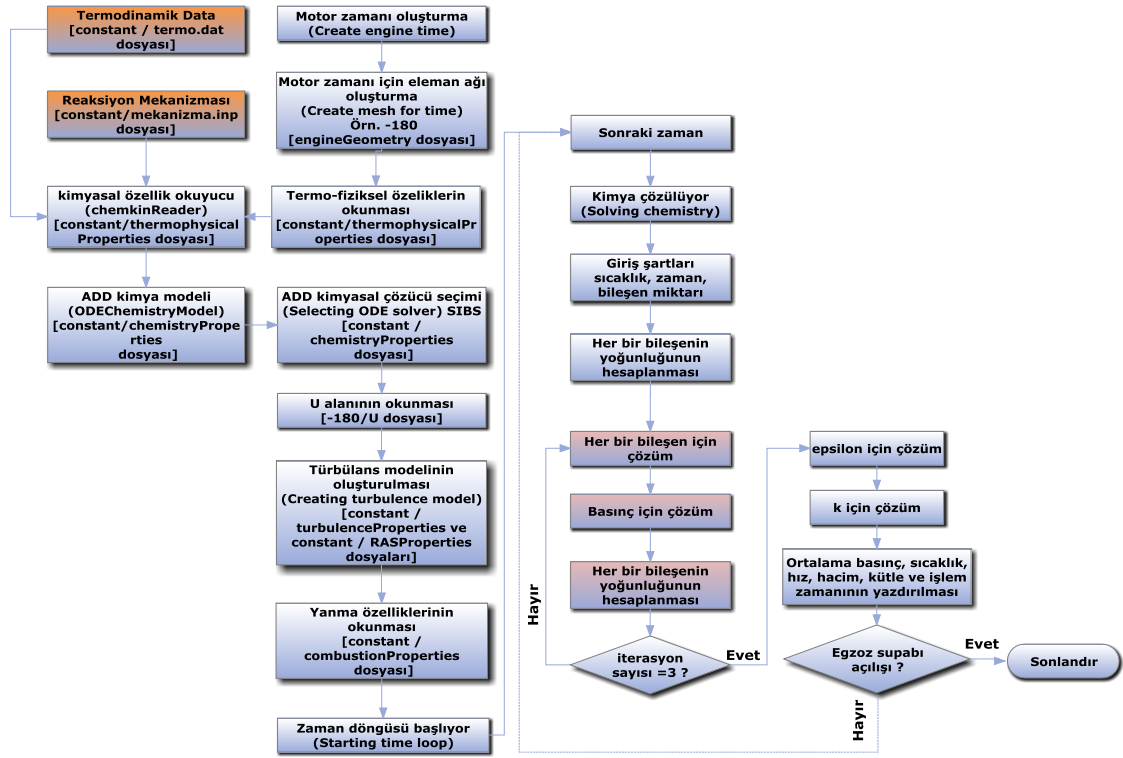
Sonlu fark metodu temel kısmi diferansiyel denklemleri hem zaman hem de konumda ayırıklaştırır (diskritize eder). Bu durum KDD’lerin türevleri yerine

yaklaşık olarak eş değer fark bölümler koyar. Bu metodun hatalarının iki kaynağı bulunmaktadır, birincisi ondalık niceliklerin bilgisayar tarafından yuvarlanmasından dolayı gerçekleşen *yuvarlama hatası* (round-off error) ve ikincisi türevleri ifade etmek için yüksek dereceli terimler atılırken kullanılan fark bölümlerinden kaynaklanan *kesme hatası* (truncation error). Yüksek dereceli farklar (differences) kullanmak kesme hatasını azaltmaya yardımcı olur ancak *sayısal kararlılık* (numerical stability) şartı daha katı bir hale gelir. Açık (explicit) fark düzeni, yakınsamayı (convergence) korumak, Courant şartını karşılamak için daha küçük zaman adımları (time-steps) gerektirir. Bu yüzden genellikle kapalı (implicit) düzenler kullanılmaktadır [58].

Sonlu eleman metodu, KDD'lerin çözümlerinin elde edilmesi için standart integrasyon teknikleri kullanılarak adi diferansiyel denklem (ADD-ODE) eşitliklerine dönüştürülmesine dayanmaktadır. Motor gövdelerinin yapısal analizinde daha çok uygulaması bulunur, öncelikle korunum çözümlerini sağlama almak özel özen gerektirdiği için nadiren motor akışlarını çözmek için kullanılmaktadır [58].

Dizel motorlarının karmaşık silindir içi fiziksel ve kimyasal süreçleri, yukarıda belirtilen temel yaklaşımların kullanımı ve türbülanslı akışı, püskürtme enjeksiyonu, damlacık buharlaşmasını, yanmayı, kirletici oluşumunu ve ısı transferini tanımlayan yakın bağlantılı alt model serisinin kullanımı ile çözülebilir [58].

Bu çalışmada dieselEngineFoam çözücüsünün kodlarından püskürme (enjeksiyon, spray) işlemi ile ilgili altprogramlar ve fonksiyonlar iptal edilmiş, reaksiyondaki bileşenlerin krank açısına göre değişim değerlerinin yazılması için çıktı dosyalarını yazan kodlar eklenmiştir. Şekil 9.3'de OpenFOAM CFD hesaplama akış diyagramı gösterilmektedir.



Şekil 9.3. OpenFOAM CFD hesaplama akış diyagramı

Hesaplamalar basitten karmaşığa gidecek şekilde gerçekleştirilmiştir. İlk olarak 3 boyutlu geometride basit tek adımlı heptan yanması denenmiş daha sonra NO_x oluşumunun incelenebilmesi için ilgili bileşen ve reaksiyonlar eklenmiş ve daha sonrasında ise çalışma azaltılmış/indirgenmiş reaksiyon mekanizmalarından, daha fazla bileşen, reaksiyon içeren, doğruluğu ve hesaplama yükü daha fazla olan detaylı reaksiyon mekanizmalarının kullanımına yönelmiştir.

Kimyasal reaksiyon eşitliklerini çözmek için bir stiff adi diferansiyel denklem çözücü gereklidir [91]. Bu çalışmada adi diferansiyel denklem çözücüsü olarak OpenFOAM'daki, yaklaşılacak çözümün Richardson ekstrapolasyonunu temel alan, yarı kapalı (Semi-Implicit) Bulirsh-Stoer metodu (SIBS) [94,95] seçilmiştir. Çözücünün her bir zaman adımıdaki ADD'leri çözmesi ve zaman adımının sonundaki bileşen konsantrasyonlarını tanımlaması gerekir [91]. Örneğin 338 reaksiyonlu, 83 bileşenli bir reaksiyon mekanizmasını düşünecek olursak, bu reaksiyon mekanizması her bir zaman aralığında, her

bir hücre içinde çözülecek 83 adet ADD sistemine sahiptir. Tüm bileşenleri içeren reaksiyon olmadığından sistemdeki bazı eşitlikler uygulanamayacaktır ancak teorik olarak sistem toplamda 28054 (338x83) ADD içermektedir [91].

CFD model örnek çalışma klasörü düzeni EK-9'da gösterilmektedir. chemistryProperties dosyasındaki *initialChemicalTimeStep* parametresi için 1e-10 değeri yerine 1e-07 değeri, kimyasal çözücü parametresi olarak adı diferansiyel denklem, yakınsama toleransı katsayısı (eps) 1e-04 değeri yerine 5e-02 değeri kullanılmıştır. Türbülans/yanma etkileşimi için kısmi karışımli reaktör modeli (Partially Stirred Reactor, PaSR) kullanılmıştır.

9.4.1. Türbülans modeli

İYM'lardaki silindir içi akışlar, türbülanslı sıkıştırılabilir akışlardır. Türbülanslı akışları simüle etmek için farklı karmaşıklık seviyeleri ile bir çok türbülans modeli önerilmiştir. Motor uygulamalarında Reynolds Ortalama Navier Stokes (RANS) modelleri en çok rastlanan türbülans modelleridir. [96]. RANS denklemleri ortalama hızlar (u,v,w) için hareket denklemleridir. Türbülans değişimleri Reynolds gerilmeleri (-p_{uv}, -p_{u2}, ...) yardımıyla momentum hareketine etki eder. Bir türbülans modeli, Reynolds gerilmelerinin ve türbülanslı akışların özel bir ortalamasıdır. Akış oranını, basınç dağılımlarını ve sürüklenme katsayılarını hesaplamayı araştıran mühendisler için türbülans modelinin temel amacı, herhangi bir Reynolds gerilmesini iyi hesap etmesidir. Eğer türbülanslı hareket diğer kuvvetlere nazaran ihmal ediliyorsa o zaman yüksek kalite türbülans modeli gereksizdir. Diğer taraftan kayma gerilmesinin hesabının önemli olduğu temel akışlar vardır (Örneğin sınır tabaka ayrılması) bu tip akışlar için yüksek kalitede türbülans modeli gerekir [97]. RANS modelleri, özellikle Launder ve Spalding (1974) tarafından önerilmiş olan k-ε modeli [98] ve onun türevleri, CFD'nin motor alanına ilk uygulanmasından bu yana motor simülasyonlarında kullanılmaktadır [96]. Türbülanslı akışa ait CFD çözümleri, yalnızca hesaplamalarda kullanılan türbülans modelinin uygunluğu ve geçerliliği kadar iyidir [7]. Örneğin Laminer akışlara CFD

uygularken ağı inceltmek suretiyle simülasyonun fiziksel doğruluğu çoğunlukla iyileştirilirken; türbülanslı CFD analizlerinde inceltilmiş bir ağ daha iyi sayısal doğruluk sağlarken, çözümün fiziksel doğruluğu her zaman türbülans modelinin fiziksel doğruluğu ile sınırlı kalmaktadır [7]. Bu sınırlamaya rağmen, standart türbülans modelleri uygulamadaki çoğu mühendislik problemlerinde makul çözümler vermektedir [7]. Modifiye edilen dieselEngineFoam kodunda türbülanslı akışı modellemek için RANS yaklaşımı (EK-10) kullanılmıştır.

9.4.2. Türbülanslı yanma modeli

Reaktif akışları modelleyen birçok yöntem Navier-Stokes denklemlerinin Reynolds ortalama metodu ile (RANS) sayısal çözümünü içerir. Herhangi bir güvenilir türbülanslı yanma modelinin püf noktası, türbülans karışım modelinde, mikro ve makro iki ayrı türbülans mekanizmasının karışımı ve birleştirilmesidir [99].

Kimya ve türbülans karışımı için bazı davranış biçimleri kullanmak kaçınılmazdır. Literatürde bu iş için

- Kısmi-karışimli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli [100],
- Difüzyon alevcikleri (diffusion flamelets) [101],
- Mükemmel karıştırılmış reaktörlü (perfectly-stirred reactor) detaylı kimyasal kinetikler [102], ve
- Genel alev yüzey yoğunluk (general flame surface density) modeli [103]

gibi bir çok öneri bulunmaktadır [91].

Bu çalışmada OpenFOAM CFD hesaplamalarında türbülans-kimya etkileşimini modellemek için EK-11’de tanımlanan Chalmers Üniversitesinin Kısmi-karışimli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli kullanılmıştır.

Bu model ile dizel yakıt püskürtme ve karmaşık kimya mümkün olmaktadır [104].

Kärrholm (2008) dizel püskürtme enjeksiyonu, türbülans etkileşimi ve yanmanın sayısal modellemesi adlı doktora çalışmasında OpenFOAM CFD kodunu ve PaSR modelini kullanmıştır. Ayrıca tutuşma başlangıcının ve alev dağılımının nasıl olduğunu OpenFOAM, KIVA-3V ve deneysel sonuçlarla karşılaştırma yaparak incelemiştir [91].

İmren (2010), doktora çalışmasında 4 zamanlı, yüksek aşırı doldurma oranlarında çalışan, ağır hizmet dizel motorunun tüm çevrim simülasyonunu KIVA-4 yazılımı kullanarak gerçekleştirmiş, türbülanslı yanmayı ise girdap yitim kavramı (Eddy Dissipation Concept-EDC) modeli tabanlı Kısmi-karışımli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli ile ele almıştır [104].

9.4.3. CFD için PRF reaksiyon mekanizmaları

HCCI yanma için kimya ile ilgili detaylı bir tanımlamanın yanısıra yanma odası içindeki homojensizliğin ve 3 boyutlu türbülansın doğru bir değerlendirmesi de birinci derecede önemlidir. CFD ve detaylı kimya birleşimi, zaman bakımından yüksek maliyetli ve çoğu pratik olmayan hesaplamalarla sonuçlanmaktadır. Bu noktadan bakıldığında CFD ve azaltılmış kimyasal modellerin birleşimi en iyi çözüm olarak görülmektedir. Azaltılmış kimyasal modeller, ateşleme zamanı, ısı yayılımı, sıcaklık ve basınç değişimleri ve yakıt tüketimi gibi ana özellikleri hesaplamak için önemli reaksiyonlarla eşleşmelidir [105].

Ana referans yakıtları (izo-oktan ve n-heptan) ile deneyler gerçekleştirilmiş olduğundan EK-3 (CFD modellerde kullanılmış olan PRF reaksiyon mekanizmaları)'de gösterilen bu yakıtlar için geliştirilmiş olan kimyasal reaksiyon mekanizmalarının kullanıldığı CFD model sonuçları ile deney verileri karşılaştırılmıştır. Tsurushima [63] reaksiyon mekanizmasında NO_x

emisyonları için reaksiyonlar bulunmamaktadır. Bundan dolayı kullanılan reaksiyon mekanizmasına GRI-Mech 3.0 [59] reaksiyon mekanizmasından NO oluşumu ile ilgili veriler eklenmiştir. Tsurushima reaksiyon mekanizmasında bileşen sayısı 40'a, reaksiyon sayısı 50'ye çıkmıştır.

9.4.4. Courant sayısı

Eleman (mesh-örgü) aralığı olarak sabit bir h değeri kullanıldığında zaman adımları 'Courant Kararlılık Ölçütü' kullanılarak belirlenir. Bu ölçüt aşağıdaki gibi verilmektedir.

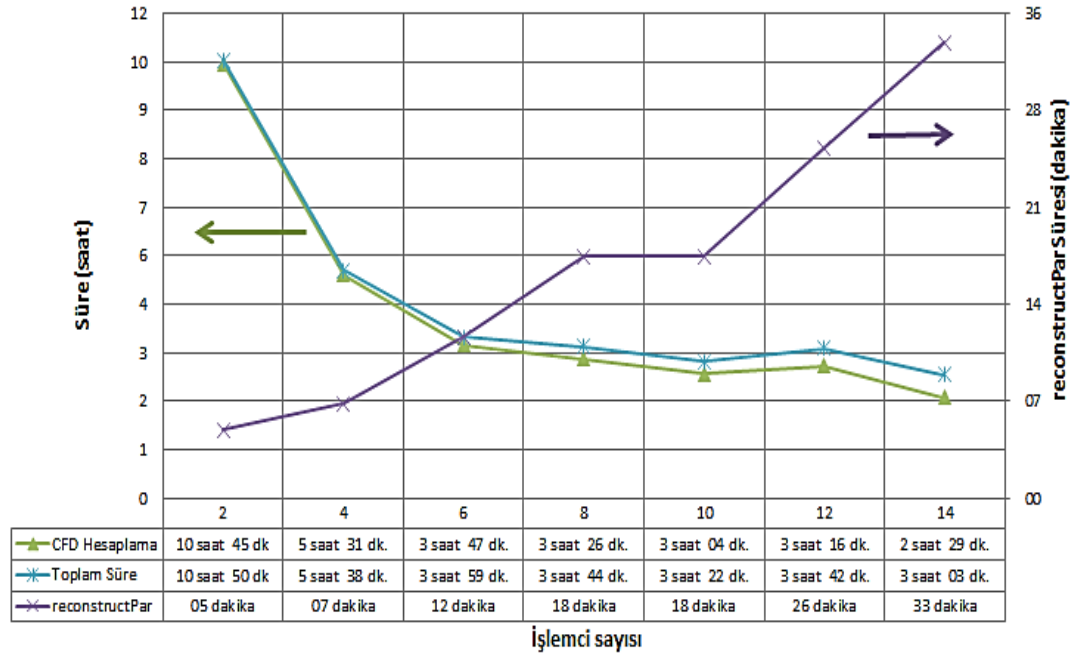
$$\Delta t < \gamma \frac{h}{V_{\max}}$$

Bu denklemde kullanılan γ sabiti 'Courant Sayısı' olarak bilinmektedir. Üç boyutlu bir sistemde ikinci basamak işlemler kullanıldığında Courant Sayısı 0,577, dördüncü basamak işlemler kullanıldığında ise 0,495 olarak seçilmektedir [106].

Yaman'a göre modellemede seçilen ağ (mesh) aralığı benzeştirilmek istenen akış için önemli olan tüm batimetrik değişimleri yansıtabilecek çözünürlükte olmalı ve ideal Courant Sayısını sağlamalıdır. Model sisteminin kararlı (stabil) olabilmesi için Courant Sayısı 5 ten fazla olmaması gerekmektedir [107].

9.5. Son İşlem (Post-processing)

decomposePar komutu ile kullanılacak işlemci sayısı kadar parçaya ayrılmış olan eleman ağı ve hesaplama alanı, çözüm, hesaplama bittikten sonra reconstructPar komutu ile birleştirilir. Şekil 9.4'de görüldüğü gibi kullanılan işlemci sayısı arttıkça birleştirilecek alan ve sonuç arttığından yeniden birleştirme süreci artmaktadır.

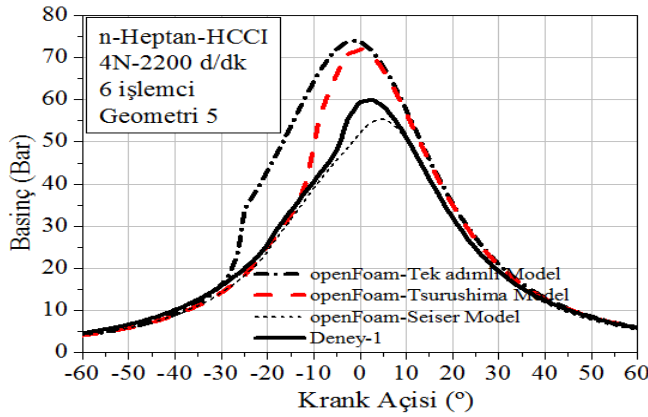


Şekil 9.4. İşlemci sayısı ile hesaplama süresi arasındaki ilişki

Yapılan simülasyonlara ait resimlerin ve animasyonların oluşturulmasında paraView ve EnSight yazılımları kullanılmıştır.

9.6. CFD Model Sonuçları

Şekil 9.5’de n-heptan kullanılmış model ve deney sonuçlarının karşılaştırılması görülmektedir. Modellemeler, EK-8’de belirtilen Geometri 5 ile 6 işlemci paralel kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Giriş ve sınır şartları aynı tutulmuş sadece reaksiyon mekanizmaları değiştirilmiştir. Tek adımlı reaksiyon modeline göre daha fazla reaksiyon ve bileşen içeren Tsurushima ve Seiser modellerinin deney sonucu elde edilmiş olan değişime daha yakın değerler verdikleri görülmektedir.



Şekil 9.5. Farklı mekanizmalar ve Geometri 5 ile elde edilmiş basınç değişim grafikleri

RON20, RON40 ve RON60 yakıtları ile yapılmış deneylerin basınç değişimleri ve Andrae ve Tsurushima PRF yakıt modellerinin kullanıldığı OpenFOAM CFD modelleme ile elde edilmiş basınç değişimi grafikleri ve R^2 değerleri EK-12’de gösterilmektedir. R^2 değerleri MATLAB’ın eğri uydurma aracı (curve fitting tool) ile hesaplanmıştır. İlk olarak deneye ait bir çevrimin silindir içi basınç değişim değerleri, lineer olmayan en küçük kareler (non linear least squares) metoduyla 2. dereceden bir Gaussian fonksiyon eğrisine uydurulmuş, daha sonra deney ve modellerin verileri bu fonksiyona göre değerlendirilerek R^2 değerleri hesaplanmıştır. Grafikler ve R^2 değerlerinden anlaşılacağı üzere Tsurushima PRF yakıt modeli CFD modelleri, Andrae PRF yakıt modeli CFD modellerine göre deney verilerine en yakın basınç değişimini vermektedir. Ayrıca EK-3’de görüldüğü gibi Tsurushima PRF yakıt modelinin daha az bileşen ve reaksiyon sayısına sahip olmasından dolayı hesaplama süresi çok daha kısadır.

Deney, Chemkinle yapılmış olan tek bölgesi modelleme (Curran ve Tsurushima PRF mekanizmalı) ve OpenFOAM ile yapılmış olan CFD modelleme (Andrae ve Tsurushima PRF mekanizmalı) ile elde edilmiş CO, CO₂, ve NO_x bileşenlerinin egzoz subabı açılışındaki değerlerine ve modellerin maksimum çevrim sıcaklıklarına ilişkin grafikler EK-13’de gösterilmektedir. CFD modelleri ile elde edilmiş olan maksimum çevrim

sıcaklıklarının 1500 K'den düşük olduğu görülmektedir. Eğer yanma sıcaklığı 1500 K'in altında kalırsa yanma verimini azaltan karbonmonoksit ve yanmamış hidrokarbon artar. Diğer taraftan yanma sıcaklığı 1800 K'in üzerine çıkarsa motor çalışması vuruntu ve hızlı NO_x emisyonu artışıyla sınırlandırılır [63].

10. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

10.1. Sonuçlar

Model sonuçları, planlanan deney sayısını azaltabilir. Deney sonuçlarından elde edilen verilerle model düzenlenerek daha doğru sonuçların alınması, ölçümü yapılamayan değerlerin tespit edilmesi mümkün olmaktadır. Geçerliliği kanıtlanmış modelle daha detaylı parametrik çalışmalar yapılabilir.

Yanma çok boyutlu CFD kodu kullanılarak simüle edilmiştir. PRF için tek adımlı reaksiyondan, detaylı reaksiyon mekanizmalarına kadar farklı modeller kullanılmıştır. Sayısal yöntem ve simülasyonların geçerliliği için literatürdeki ve 108M228 nolu TÜBİTAK projesi kapsamındaki deneysel sonuçlarla karşılaştırma yapılmıştır. Aynı zamanda farklı hesaplama-modelleme yöntemleri (tek bölgesel ve CFD modelleme) ile de karşılaştırmalar gerçekleştirilmiştir.

Bu çalışmada İYM'ların modellenmesinde kullanılmakta olan açık kaynaklı çok boyutlu simülasyon kodları incelenmiştir. Geliştirilme çalışmaları devam eden KIVA ve OpenFOAM kodları karşılaştırma yapılabilmesi için aynı çalışma şartlarında ortak bir geometride kullanılmıştır. Farklı hava fazlalık katsayısı (0,8-1,2), tutuşma başlangıç noktası (-45° , -5°) ve sıkıştırma zamanı başlangıç sıcaklığı (303-350K) gibi bazı çalışma parametrelerinin yanma sürecine etkisi çok boyutlu sayısal model aracılığıyla incelenmiştir. Yanma sürecinin modellenmesi tek adımlı oksidasyon reaksiyonu ile gerçekleştirilmiştir.

n-heptan yakıtlı HCCI motorda yanma sürecinin modellenmesi çalışmasında eşdeğerlilik oranı ve EGR çalışma parametrelerinin yanma sürecine ve egzoz emisyonlarına etkisi tek bölgesel sayısal model aracılığıyla araştırılmıştır. Yanma sürecinin modellenmesi 29 bileşen ve 52 reaksiyon içeren n-heptan mekanizmasının kullanılmasıyla gerçekleştirilmiştir. Farklı eşdeğerlilik

oranlarındaki (0,01-0,5) çalışma sonucunda silindir içi sıcaklık ve emisyon değerine göre 0,3 eşdeğerlilik oranı optimum değer olarak tespit edilmiştir. 0,3 eşdeğerlilik oranında farklı EGR oranlarının (%0-%35) yanma sürecine etkisi incelenmiştir. EGR oranındaki artışa bağlı olarak yanma reaksiyonlarının süresinin uzadığı, silindir içi basınç ve sıcaklık değerlerinin azaldığı tespit edilmiş dolayısıyla sıcaklığa bağlı NO_x emisyonlarının azaltılmasında olumlu bir etki elde edileceği sonucuna varılmıştır. Çalışmada kullanılmış olan 2 boyutlu CFD kodu ve tek bölgeli yanma modeli, temel çalışma aralığının ve parametrelerin etkilerinin belirlenmesinde kısa sürede yeterli bilgi sağlamaktadır. Gerçekleştirilen çalışmalarda silindir içindeki dizel HCCI yanma süreci ve emisyonların oluşumunu bilgisayar ortamında simüle etmek için çok boyutlu motor CFD kodu KIVA4 kullanılmıştır. Dizel HCCI yanmasının simulasyonu için doğru kimyasal reaksiyon mekanizmasının kullanılması gereklidir. n-heptanın kimyasal özelliklerinin dizel yakıtının özelliklerine yakın olmasından dolayı dizel yakıtının oksidasyonunun simülasyonu için Patel ve arkadaşlarınca geliştirilmiş n-heptan mekanizması [70] tek bölgeli ve çok bölgeli modellerde kullanılmıştır. Modellemede ilk olarak literatür bilgileri ile karşılaştırılma yapılabilmesi ve deneylerle tespit edilmiş olan başlangıç ve sınır şartlarının tanımlanabilmesi için HCCI araştırmalarında kullanılan motor geometrileri kullanılmıştır. Farklı kod ve yazılımlar birlikte kullanılarak HCCI tipi yanma modellenmiştir. Oluşturulmuş modellerle elde edilen verilerin literatür ve deney yoluyla elde edilmiş gerçek verilerle karşılaştırılarak modelin doğruluğunun ve geçerliliğinin artırılması sağlanmıştır.

Oluşturulan ve geçerliliği kabul edilebilir seviyede olan sayısal model ve deney verileri yardımıyla HCCI motorlarda yanmaya etki eden değişkenlerin belirlenmesi için parametrik çalışmalar yapılmıştır.

Model üzerinden HCCI motorlarda silindir geometrisi, karışım homojenliği, ateşleme gecikmesi, karışım giriş sıcaklığı, karışımın hava fazlalık katsayısı,

yakıt bileşimi, EGR değeri vb. değişik parametrelerin performans ve emisyonlara etkisi incelenmiştir.

- Farklı yüklerde (4-20N) yapılan deneylerden sağlanan veriler, tek bölgele modele girilerek deney verileri ve model verileri karşılaştırılmıştır. İlk modelde deney verileri ile uyuşma sağlanamaması üzerine n-heptan oksidasyonu için geliştirilmiş ve HCCI motor ile ilgili çalışmalarda kullanılmış farklı reaksiyon mekanizmaları kullanılmıştır.
- Curran ve Seiser tarafından geliştirilmiş olan reaksiyon mekanizmalarının kullanıldığı modellerle silindir basıncında deney verileri ile uyum sağlansa da emisyon verilerinde farklılıklar devam etmektedir. Bu duruma aşağıdaki faktörler neden olmaktadır.
 - Tek bölgele modellerle başlangıç şartları bilindiği takdirde bir HCCI motordaki ateşleme yeterli doğrulukta tahmin edilebilir. Termal sınır tabakalarının ve sekman yarıklarının bulunduğu düşük sıcaklık bölgeleri hesaplama katılmadığından tek bölgele modellerde CO ve UHC emisyonları olması gereken değerin altında, maksimum basınç değerleri ise olması gereken değerin üstünde hesaplanmaktadır. Yanma süresinin, UHC'ların ve diğer bileşiklerin miktarının tahmini için genellikle çok bölgele simülasyon gerekmektedir. HCCI motorların düşünce aşamasından çıkıp gerçeğe dönüşmesinde sayısal yanma modellerinin, bilgisayar simülasyonlarının katkısı büyüktür [32].
 - Tek bölgele HCCI yanma modelleri, tekdüze (üniform) sıcaklık, basınç ve gaz bileşimi ile yanma odasının tümünde gazın homojen olduğunun varsayılmasıyla kullanımda olan yakıtlar için kimyasal kinetiklerin detaylı modellenmesine imkân

vermektedir. Ancak pratikte çalışma şartlarından dolayı gaz bileşimi ve sıcaklık açısından varsayılan homojenlik sağlanamayabilir.

- Modelde varsayılan bazı çalışma koşulları farklılığa neden olabilir. Modelde tahmini olarak girilmiş olan cidar sıcaklığının 340 K'den 400 K'e çıkarılmasıyla Seiser modelinin CO emisyon değişimi deney verileri ile hemen hemen aynı eğilimi göstermiş ancak daha önce tam uyumlu olan basınç değişiminde ise genişleme zamanında sapma oluşmuştur.
- Yakıt giriş sıcaklığı ve emme supabı kapanışındaki silindir içi sıcaklık, deneylerin yapıldığı ortam sıcaklığı ile aynı, 25 °C olarak kullanılmıştır. Gerçekte ise eş değerlilik artışı ile daha zengin karışım alınır ve yakıt emme manifoldunda buharlaşırken ortamdaki daha fazla ısı çekmektedir.

Deneylerde ölçümü yapılamayan bazı parametrelerin modellerde kabul edilmesinden dolayı deney ve model sonuçları arasındaki farklılıklar normaldir. Deneylerde yük, hava tüketimi, yakıt tüketimi, basınç değişimi ve egzoz emisyonlarının ölçümü için farklı cihazlar ve yöntemler kullanılmaktadır. Bunlardan ölçülen hava ve yakıt tüketim değerleri simülasyon başlangıç şartlarında giriş verisi olarak gerekli olan yakıt (n-heptan ve izo-oktan) ve hava (oksijen ve azot) bileşenlerinin kütleli yüzdelik değerlerinin hesaplanmasında kullanılmıştır. Ölçülen basınç değişimi ve egzoz emisyonları ise model sonuçlarının karşılaştırılmasında kullanılmıştır. Gerek tek bölge modellemede gerekse CFD modellemede kullanılmış olan Tsurushima PRF mekanizması ile elde edilen sonuçlar diğer reaksiyon mekanizmalarına göre daha iyi olmakla birlikte hesaplama süresi açısından daha kısa sürede sonuç vermektedir.

10.2. Öneriler

1. Karşılaştırmada kullanılan deney verileri port enjeksiyonlu motordan alındığı için modellemelerde silindire doğrudan yakıt enjeksiyonu yapılmamış, yakıt-hava karışımı ön karışıklı olarak silindire alınmıştır. Daha sonraki çalışmalarda;
 - doğrudan silindir içine enjeksiyon,
 - kısmi silindir içine enjeksiyon (bir kısmı yine ön karışıklı),
 - farklı krank açılarında farklı miktarlarda bir çevrim için çoklu veya parçalı enjeksiyon,
 - bir çevrimde farklı yakıtları ve hatta su buharı püskürtme,
 - enjeksiyon açısı, basıncı, enjektör deliği çapı, sayısı,
 gibi parametrelerin etkisi modellenerek performans ve emisyonla katkısı incelenebilir.
2. Çalışmadaki CFD modellemesinde yapılacak olan karşılaştırmaya göre düzenlemeye (kod ekleme, çıkarmaya) imkan veren farklı model ve yaklaşımların eklenebildiği esneklikte açık kaynak kodlu OpenFOAM kullanılmıştır. KIVA, OpenFOAM gibi açık kaynak kodlu sistemler akademik alanda tercih edilirken endüstride zaman önemli olduğu ve yazılım firmaları tarafından kullanıcı desteği ve eğitimi sağlandığı için oldukça pahalı, kapalı kaynaklı (kullanıcılar tarafından tüm kodlarına ulaşamayan, düzenlenemeyen) paket mühendislik yazılımları kullanılmaktadır. Otomotiv endüstrisinde özellikle akış ve yanma simülasyonunda yaygın olarak kullanılmakta olan STAR CD, AVL FIRE ve FLUENT gibi yazılımlarla aynı modellemeler yapılarak sonuçlar karşılaştırılabilir.
3. Çalışmadaki CFD modellemede kullanılmış olan geometri, hesaplama yükü bakımından oldukça basit bir geometridir. Ancak yanma odası geometrisi (piston ve silindir kapağı tasarımı) değiştirilerek silindir içi akışa, yanmaya, performans ve emisyonlara etkileri incelenebilir.
4. Çalışmadaki CFD modellemeler sadece emme supabı kapanışı ile egzoz subabı açılışı aralığında gerçekleştirilmiştir.

- İlk olarak supap hareketlerini de içeren farklı bir eleman ağı ile supap açılış, kapanışındaki akışın silindirdeki madde dağılımına etkisi incelenebilir.
 - Supap açılma zamanları ve miktarlarının silindire alınan dolgunun silindir içine dağılımını ve sıkıştırma zamanı sonuna kadar devam eden akış hareketini ne şekilde etkilediği incelenebilir.
 - Emme manifold ve supap oturma yüzeylerindeki tasarımların silindir içine alınan dolgunun akışını dolayısıyla yanmayı ne şekilde etkilediği incelenebilir.
 - Egzoz manifoldu ve EGR tasarımının eklenmesiyle çok çevrimli EGR'li çalışma modellenenebilir.
 - Egzoz supabının açılmasıyla oluşan silindir içindeki akışın, yanmanın tam gerçekleşemediği sekman yarıklarındaki ve silindir cidarlarındaki dolguyu ne şekilde etkilediği incelenebilir.
5. Karşılaştırmada kullanılan deneyler PRF (RON0, RON20, RON40 ve RON60) yakıtları ile yapıldığından çalışmadaki modellemeler de bu yakıtlar incelenmiştir. Ancak farklı yakıtlar, karışım yakıtlar ve yakıt katkılarının etkileri de benzer şekilde incelenebilir.
- Yakıtların yanma sürecindeki kimyasal reaksiyonları ile ilgili mekanizma geliştirme ve iyileştirme çalışmaları devam etmektedir. Daha güncel reaksiyon mekanizmalarının kullanılmasıyla daha iyi model sonuçlarına ulaşılabilir.
6. Modellemede kullanılmış yakıtlarda yine aynı şekilde farklı eleman ağları, halen geliştirilme aşamasında olan farklı reaksiyon mekanizmaları, farklı çalışma parametreleri, farklı modelleme yaklaşımları ve sayısal modellerle incelenebilir.
7. Yukarıda da belirtilen farklı parametre ve yaklaşımlarla elde edilmiş olan modelleme sonuçları ile yapay sinir ağı oluşturularak hangi parametrenin (çalışma, tasarım, modelleme), hangi sonuçları (performans, emisyon), hangi ağırlıkla etkilediği bulunabilir, modelleme

sayısı azaltılabilir. Oluşmuş veri seti ile uzun süreli hesaplamalara girmeden sonuç tahmini denenebilir.

8. Gelişmekte olan bilgisayar teknolojisi, günümüzde hesaplama yükü nedeniyle imkansız olarak görülen türbülans modelleri gibi karmaşık sayısal modellerin, yaklaşımların çözümüne imkan verecektir. İleriki zamanlarda hesaplama yükü, ağır ancak doğruluğu yüksek modellerle daha gerçekçi sonuçlar alınabilir.
9. Çalışmadaki CFD modellemede kullanılmış olan OpenFOAM kodlarına farklı ısı transferi korelasyonları (Woschni, Annand, Hohenberg vb.) eklenerek sonuçlara etkisi incelenebilir.
10. Çalışmadaki CFD modelleme ile elde edilmiş yanma ve püskürtme görüntü sonuçları deneysel olarak hızlı kamera ve görüntü işleme ile elde edilmiş sonuçlarla karşılaştırılarak yanma süreci daha iyi, detaylı yorumlanabilir.
11. Çalışmadaki CFD modellemede kullanılmış olan OpenFOAM'la tek bölgeli ve çok bölgeli motor modelleme için düzenleme ve modellemeler yapılabilir.

KAYNAKLAR

1. Wang, Z., Shuai, S., Wang, J., Tian, G., "A computational study of direct injection gasoline HCCI engine with secondary injection", **Fuel**, 12-13 (85): 1831-1841 (2006).
2. Internet : Açıkgöz, A., Gelişli, M.Ö., Öztürk, E., "Otomotiv Endüstrisinde Hesaplamalı Uygulamaları", http://www.anova.com.tr/upload/files/1236356868r9071.makale_otomotiv.pdf
3. Lee, C.S., Lee, K.H., Kim, D.S., "Experimental and numerical study on the combustion characteristics of partially premixed charge compression ignition engine with dual fuel", **Fuel**, (82): 553-560 (2003).
4. Yaşar, O., "Computational Engine Modeling", **Oak Ridge National Laboratory Review**, 3 & 4 (30): (1997).
5. Yang, S.L., Siow, Y.K., Teo, C.Y., Hanjalic, K., "A KIVA code with Reynolds-stress model for engine flow simulation", **Energy**, (30): 427-445 (2005).
6. Sezer-Uzol, N., "Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği ile Üç-Boyutlu Karmaşık Akış Problemlerinin Yüksek Başarımlı Hesaplamaları", **1. Ulusal Yüksek Başarım ve Grid Konferansı**, ODTÜ-KKM, Ankara, (2009).
7. Cengel, Y.A., Cimbala, J.M., "Akışkanlar Mekaniği: Temelleri ve Uygulamaları-Birinci Baskıdan Çeviri", Çeviri Editörü: Engin T, **Güven Bilimsel**, İzmir, (2008).
8. Internet : Majumdar, P., "Computational Fluid Dynamics Analysis of Turbulent Flow", **Computational Fluid Dynamics Technologies and Applications, Igor V. Minin and Oleg V. Minin**, 255-292 , <http://www.intechopen.com/articles/show/title/computational-fluid-dynamics-analysis-of-turbulent-flow> (2011).
9. Chen, C.-J., Jaw, S.-Y., "Fundamentals of Turbulence Modeling", **Taylor and Francis**, New York, (1998).
10. Pulkrabek, W.W., "Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine", **Prentice Hall, Inc.**, New Jersey, (1997).
11. Heywood, J.B., "Internal Combustion Engines Fundamentals", **McGraw-Hill**, (1988).

12. Stone, R., "Introduction to Internal Combustion Engines", **Society of Automotive Engineers Inc**, (1999).
13. Bella, G., Rotondi, R., Defranco, G., Nigro, N., "Code Coupling to Enhance CFD Analysis of I.C. Engines", **Mecánica Computacional**, (22): (2003).
14. Soruşbay, C., Ergeneman, M., İmren, A., Çalık, A.T., "Experimental and Numerical Air Flow and Spray Dynamics Investigation in Internal Combustion Engines", **Tübitak Projesi Raporu**, Proje No : 104M355, (2008).
15. Amsden, A.A., "KIVA3V-Release 2 Improvements to KIVA3V-LA-13608-MS", **Los Alamos National Laboratory**, (1999).
16. Das, S., Chmiel, D.M., York, N., "Computational and Experimental Study of In-cylinder Flow in a Direct Injection Gasoline (DIG) Engine", **Proceedings of the 11th International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting**, Detroit, (2001).
17. Kong, S., Rutland, C.J., Reitz, R.D., "Implementation of a Spray and Combustion Model Library in Engine CFD codes", **Proceedings of the 10th International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting**, Detroit, (2000).
18. Alkidas, A.C., "Combustion advancements in gasoline engines", **Energy Conversion and Management**, (48): 2751-2761 (2007).
19. Mahrous, A.-F.M., Potrzebowski, A., Wyszynski, M.L., Xu, H.M., Tsolakis, A., Luszcz, P., "A modelling study into the effects of variable valve timing on the gas exchange process and performance of a 4-valve DI homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine", **Energy Conversion and Management**, 2 (50): 393-398 (2009).
20. Komninos, N.P., "Modeling HCCI combustion: Modification of a multi-zone model and comparison to experimental results at varying boost pressure", **Applied Energy**, 10 (86): 2141-2151 (2009).
21. Najt, P.M., Foster, D.E., "Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion", **SAE Paper**, 830264 (1983).
22. Aceves, S.M., Flowers, D.L., Westbrook, C.K., Smith, J.R., Pitz, W., Dibble, R., Christensen, M., Johansson, B., "A multi-zone model for prediction of HCCI combustion and emissions", **SAE Paper**, 2000-01-0327 (2000).

23. Soyhan, H., Yasar, H., Walmsley, H., Head, B., Kalghatgi, G., Sorousbay, C., "Evaluation of heat transfer correlations for HCCI engine modeling", ***Applied Thermal Engineering***, 2-3 (29): 541-549 (2009).
24. Machrafi, H., Cavadias, S., Guibert, P., "An experimental and numerical investigation on the influence of external gas recirculation on the HCCI autoignition process in an engine: Thermal, diluting, and chemical effects", ***Combustion and Flame***, 3 (155): 476-489 (2008).
25. Ohashi, T., Yang, X., Takabayashi, T., Urata, Y., Kubota, S., Katsuyama, H., "Ignition and Combustion Simulation in HCCI Engines", ***SAE Paper***, 2006-01-1522 (2006).
26. Stanglmaier, R.H., Roberts, C.E., "Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI): Benefits, Compromises, and Future Engine Applications", ***SAE Paper***, 1999-01-3682 (1999).
27. Christensen, M., Johansson, B., "Homogeneous Charge Compression Ignition with Water Injection", ***SAE Paper***, 1999-01-0182 (1999).
28. Özden, C.M., "Homojen Karışimli İçten Yanmalı Motorlar", Y.Lisans Tezi, ***Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü***, 85 (2005).
29. Halstead, M.P., Kirsch, L.J., Prothero, a., Quinn, C.P., "A Mathematical Model for Hydrocarbon Autoignition at High Pressures", ***Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences***, 1647 (346): 515-538 (1975).
30. Wang, Z., Shuai, S.-J., Wang, J.-X., Tian, G.-H., An, X.-L., "Modeling of HCCI Combustion: From 0D to 3D", ***SAE Paper***, 2006-01-1364 (2006).
31. "Chemkin Theory Manual", ***Reaction Design***, (2008).
32. Westbrook, C.K., Mizobuchi, Y., Poinot, T.J., Smith, P.J., Warnatz, J., "Computational combustion", ***Proceedings of the Combustion Institute***, 1 (30): 125-157 (2005).
33. Merker, G.P., Schwarz, C., Stiesch, G., Otto, F., "Simulating Combustion: Simulation of combustion and pollutant formation for engine development", ***Springer-Verlag***, (2006).
34. Ogink, R., Golovitchev, V., "Gasoline HCCI Modeling: Computer Program Combining Detailed Chemistry and Gas Exchange Processes", ***SAE Paper***, 2001-01-3614 (2001).

35. Milovanovic, N., Chen, R., "Influence of the Variable Valve Timing Strategy on the Control of a Homogeneous Charge Compression (HCCI) Engine", **SAE Paper**, 2004-01-1899 (2004).
36. Fiveland, S.B., Assanis, D.N., "Development of a Two-Zone HCCI Combustion Model Accounting for Boundary Layer Effects", **SAE Paper**, 2001-01-1028 (2001).
37. Easley, W.L., Agarwal, A., Lavoie, G.A., "Modeling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry", **SAE Paper**, 2001-01-1029 (2001).
38. Ogink, R., Golovitchev, V., "Gasoline HCCI Modeling : An Engine Cycle Simulation Code with a Multi-Zone Combustion Model", **SAE Paper**, 2002-01-1745 (2002).
39. Xu, H., Liu, M., Gharahbaghi, S., Richardson, S., "Modelling of HCCI Engines : Comparison of Single-zone , Multi-zone and Test Data", **SAE Paper**, 2005-01-2123 (2005).
40. Aceves, S.M., Martinez-Frias, J., Flowers, D.L., Smith, J.R., "A Decoupled Model of Detailed Fluid Mechanics Followed by Detailed Chemical Kinetics for Prediction of Iso-Octane HCCI Combustion", **SAE Paper**, 2001-01-3612 (2001).
41. Flowers, D., Aceves, S., Martinez-frias, J., Hessel, R., Dibble, R., "Effect of mixing on hydrocarbon and carbon monoxide emissions prediction for isooctane HCCI Engine Combustion Using a Multi-zone Detailed Kinetics Solver", **SAE Paper**, 2003-01-1821 (2003).
42. Kumano, K., Iida, N., "Analysis of the Effect of Charge Inhomogeneity on HCCI combustion by Chemiluminescence Measurement", **SAE Paper**, 2004-01-1902 (2004).
43. Christensen, M., Johansson, B., "The Effect of In-Cylinder Flow and Turbulence on HCCI Operation", **SAE Paper**, 2002-01-2864 (2002).
44. Yao, M., Zheng, Z., Liang, X., "Numerical study on the chemical reaction kinetics of n-heptane for HCCI combustion process", **SAE Paper**, 2006-01-1521 doi:10.1016/j.fuel.2006.05.005(2006).
45. Internet : "Los Alamos National Laboratory",
<http://www.lanl.gov/orgs/t/t3/codes/kiva.shtml> (2012).
46. Sterno, N., Greeves, G., Tullis, S., Jiang, X., Zhao, H., Town, C., Africa, S., "Improvements of the KIVA Dense Spray Modeling for HSDI

Diesel Engines Fuels & Emissions Conference”, **SAE Paper**, 2007-01-0001 (2007).

47. Urip, E., Yang, S.L., Arici, O., “Conjugate Heat Transfer for Internal Combustion Engine Application using KIVA code”, **Proceedings of the 15th International Multidimensional Engine Modeling User’s Group Meeting**, Detroit, 1-6 (2005).
48. Urip, E., Liew, K.H., Yang, S.L., Arici, O., “Numerical Investigation of Heat Conduction with Unsteady Thermal Boundary Conditions for Internal Combustion Engine Application”, **Proceeding of the ASME International Mechanical Engineering Congress**, (2004).
49. Bianchi, G.M., Richards, K., Reitz, R.D., “Effects of Initial Conditions in Multidimensional Combustion Simulations of HSDI Diesel Engines”, **SAE Paper**, 1999-01-1180 (1999).
50. Han, Z., Uludogan, A., Hampson, G.J., Reitz, R.D., “Mechanism of Soot and NO_x Emission Reduction Using Multiple-injection in a Diesel Engine”, **SAE Paper**, 960633 (1996).
51. Uludogan, A., Foster, D.E., Reitz, R.D., “Modeling the Effect of Engine Speed on the Combustion Process and Emissions in a DI Diesel Engine”, **SAE Paper**, 962056 (1996).
52. Uludogan, A., Xin, J., Reitz, R.D., “Exploring the Use of Multiple Injectors and Split Injection to Reduce DI Diesel Engine Emissions”, **SAE Paper**, 962058 (1996).
53. Amsden, A.A., “KIVA-3: A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex Geometries-LA-12503-MS”, **Los Alamos National Laboratory**, (1993).
54. Marzouk, O.A., Huckaby, E.D., “A Comparative Study of Eight Finite-Rate Chemistry Kinetics for CO/H₂ Combustion”, **Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics**, 3 (4): 331-356 (2010).
55. Internet : Lundström, A., “reactingFoam.pdf”, **Chalmers University of Technology**,
http://www.tfd.chalmers.se/~hani/kurser/OS_CFD_2007/AndreasLundstrom/reactingFoam.pdf (2008).
56. Internet : Carlsson, P., “PC_Tutorial_dieselFoam_peered_NL_HN.pdf”, **Chalmers University of Technology**,

http://www.tfd.chalmers.se/~hani/kurser/OS_CFD_2008/PerCarlsson/PC_Tutorial_dieselFoam_peered_NL_HN.pdf (2009).

57. Çalık, A.T., "CFD Modeling of Emissions Formation and Reduction in Heavy Duty Diesel Engines", Doktora Tezi, **İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, İstanbul, (2007).
58. Lakshminarayanan, P.A., Aghav, Y.V., "Modelling Diesel Combustion", **Media**, , **Springer**, (2010).
59. Internet : Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., C. Thomas Bowman, R.K.H., Song, S., William C. Gardiner, J., Lissianski, V.V., Qin, Z., "GRI-Mech 3.0", http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ (1999).
60. "CHEMKIN-PRO", **Reaction Design: San Diego**, (2008).
61. Internet : "chemFoam Hakkında", <http://foam.sourceforge.net/docs/cpp/a02339.htm> (2012).
62. Curran, H.J., Gaffuri, P., Pitz, W.J., Westbrook, C.K., "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation", **Combustion and Flame**, 1-2 (114): 149-177 (1998).
63. Tsurushima, T., "A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion", **Proceedings of the Combustion Institute**, 2 (32): 2835-2841 (2009).
64. Heel, B., Maly, R., Weller, H.G., Gosman, A.D., "Validation of SI Combustion Model over Range of Speed, Load, Equivalence Ratio and Spark timing", **The Fourth International Symposium COMODIA 98, The Japan Society of Mechanical Engineers**, 255-260 (1998).
65. Jasak, H., Weller, H.G., Nordin, N., "In-Cylinder CFD Simulation Using a C ++ Object-Oriented Toolkit", **SAE Paper**, 2004-01-0110 (2004).
66. Zheng, Z., Yao, M., "Numerical study on the chemical reaction kinetics of n-heptane for HCCI combustion process", **Fuel**, 17-18 (85): 2605-2615 (2006).
67. Zhong, B., Xi, J., "Reduced kinetic mechanism of n-heptane oxidation in modeling polycyclic aromatic hydrocarbon formation in opposed-flow diffusion flames", **Frontiers of Energy and Power Engineering in China**, 3 (2): 326-332 (2008).

68. Lu, X., Ji, L., Zu, L., Hou, Y., Huang, C., Huang, Z., "Experimental study and chemical analysis of n-heptane homogeneous charge compression ignition combustion with port injection of reaction inhibitors", **Combustion and Flame**, 3 (149): 261-270 (2007).
69. Farrell, J.T., Cernansky, N.P., Dryer, F.L., Friend, D.G., Hergart, C.A., Law, C.K., McDavid, R.M., Mueller, C.J., Patel, A.K., Pitsch, H., "Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Diesel Fuels", **SAE Paper**, 2007-01-0201 (2007).
70. Patel, A., Kong, S.-charng, Reitz, R.D., "Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations", **SAE Paper**, 2004-01-0558 (2004).
71. Torres, D., Trujillo, M., "KIVA-4: An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays", **Journal of Computational Physics**, 2 (219): 943-975 (2006).
72. Battinleclerc, F., "Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates", **Progress in Energy and Combustion Science**, 4 (34): 440-498 (2008).
73. Wang, Y., Rutland, C.J., "DNS study of the ignition of n-heptane fuel spray under high pressure and lean conditions", **Journal of Physics: Conference Series**, (16): 124-128 (2005).
74. Kong, S., "A study of natural gas/DME combustion in HCCI engines using CFD with detailed chemical kinetics", **Fuel**, 10-11 (86): 1483-1489 (2007).
75. Hardy, W.L., Reitz, R.D., "A Study of the Effects of High EGR , High Equivalence Ratio , and Mixing Time on Emissions Levels in a Heavy-Duty Diesel Engine for PCCI Combustion", **SAE Paper**, 2006-01-0026 (2006).
76. Zhao, H., "HCCI and CAI engines for the automotive industry", **CRC Press**, (2007).
77. Machrafi, H., "Experimental validation of a kinetic multi-component mechanism in a wide HCCI engine operating range for mixtures of n-heptane, iso-octane and toluene: Influence of EGR parameters", **Energy Conversion and Management**, 11 (49): 2956-2965 (2008).

78. Curran, H.J., Gaffuri, P., Pitz, W.J., Westbrook, C.K., "A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation", **Combustion and Flame**, 3 (129): 253-280 (2002).
79. Sjöberg, M., Dec, J.E., "An investigation into lowest acceptable combustion temperatures for hydrocarbon fuels in HCCI engines", **Proceedings of the Combustion Institute**, 2 (30): 2719-2726 (2005).
80. Dec, J.E., Sjöberg, M., "Isolating the Effects of Fuel Chemistry on Combustion Phasing in an HCCI Engine and the Potential of Fuel Stratification for Ignition Control", **SAE Paper**, 2004-01-0557 (2004).
81. Dec, J.E., Sjöberg, M., "A Parametric Study of HCCI Combustion – the Sources of Emissions at Low Loads and the Effects of GDI Fuel Injection Reprinted From: Homogeneous Charge Compression Ignition", **SAE Paper**, 2003-01-0752 (2003).
82. Sjöberg, M., Dec, J.E., "Combined Effects of Fuel-Type and Engine Speed on Intake Temperature Requirements and Completeness of Bulk-Gas Reactions for HCCI Combustion", **SAE Paper**, 2003-01-3173 (2003).
83. Chen, Y.H., Chen, J.Y., "Development of Isooctane Skeletal Mechanisms for Fast and Accurate Predictions of SOC and Emissions of HCCI Engines based on LLNL Detailed Mechanism", **2005 Fall Meeting Western States Combustion Institute, Stanford, CA**, (05F-44): (2005).
84. Curran, H.J., Pitz, W.J., Westbrook, C.K., Callahan, C.V., Dryer, F.L., "Oxidation of automotive primary reference fuels at elevated pressures", **Symposium (International) on Combustion**, 1 (27): 379-387 (1998).
85. Coşkun, G., Toksöz, S., Soyhan, H.S., Halıcı, F., "Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği Kullanılarak Bir HCCI Motorunun Yanma Analizi", **6th International Advanced Technologies Symposium (IATS'11)**, 141-145 (2011).
86. Cheung, H.M., Heywood, J.B., "Evaluation of a One-Zone Burn-Rate Analysis Procedure Using Production SI Engine Pressure Data", **SAE Paper**, 932749 Evaluation of a one-zone burn-rate analysis (1993).
87. Sanli, A., Ozsezen, A.N., Kilicaslan, I., Canakci, M., "The influence of engine speed and load on the heat transfer between gases and in-cylinder walls at fired and motored conditions of an IDI diesel engine", **Applied Thermal Engineering**, (28): 1395-1404 (2007).

88. Internet : “UYBHM Hakkında”,
http://www.uybhm.itu.edu.tr/inner/hakkimizda_a.html (2011).
89. Internet : Can, E., “OPENMPI , R ve RMPI ile Paralel Hesaplama”,
http://akademik.maltepe.edu.tr/~ttbilgin/BIL517/SUNUMLAR-RAPORLAR/emin_can/rapor.pdf
90. Internet : “UYBHM Kaynakları”,
<http://www.uybhm.itu.edu.tr/inner/kaynaklar.html> (2011).
91. Kärholm, F.P., “Numerical Modelling of Diesel Spray Injection , Turbulence Interaction and Combustion”, Doktora Tezi, **Chalmers University Of Technology Department of Applied Mechanics**, Göteborg, (2008).
92. Internet : “Appendix A Mesh Quality”, **ANSYS, Inc.**, ,
[ftp://ae.metu.edu.tr/personal/melika/Egitim_MESH/AM_12_Appendix A.ppt](ftp://ae.metu.edu.tr/personal/melika/Egitim_MESH/AM_12_Appendix_A.ppt) (2009).
93. Wang, Z., Shuai, S.-J., Wang, J.-X., Zhang, F., “Numerical Simulation of Gasoline Stratified Charge Compression Ignition Using 3D-CFD Coupled with Detailed Chemistry”, **Combustion Science and Technology**, 7 (180): 1295-1316 (2008).
94. Internet : “OpenFOAMReferences - OpenFOAMWiki”,
<http://openfoamwiki.net/index.php/OpenFOAMReferences>
95. Stoer, J., Bulirsch, R., “Introduction to Numerical Analysis”, **Springer**, 783 (2002).
96. Zhao, H., “Advanced Direct Injection Combustion Engine Technologies and Development: Volume 2: Diesel Engines”, **CRC Press Inc Woodhead Publishing Ltd**, 560 (2010).
97. Atmaca, M., “Eliptik Jet Akışlarının Sayısal Analizi”, **Teknolojik Araştırmalar-Makine Teknolojileri Elektronik Dergisi**, 1 25-32 (2007).
98. Launder, B.E., Spalding, D.B., “The numerical computation of turbulent flows”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2 (3): 269-289 (1974).
99. Çalık, A.T., Ergeneman, A.M., Golovitchev, V.I., “Hesaplamalı akışkanlar dinamiği ile dizel motorlarında emisyon oluşumu ve azaltılmasının modellenmesi”, **İTÜDERGİSİ/d**, 2 (8): 93-104 (2009).

100. Karlsson, A., "Modeling Auto-Ignition, Flame Propagation and Combustion in Non-Stationary Turbulent Sprays", Doktora Tezi, **Chalmers University of Technology**, Göteborg, (1995).
101. Venugopal, R., Abraham, J., "A Numerical Investigation of Flame Lift-Off in Diesel Jets", **Combustion Science and Technology**, 12 (179): 2599-2618 (2007).
102. Senecal, P.K., Pomraning, E., Richards, K.J., Briggs, T.E., Choi, C.Y., McDavid, R.M., Patterson, M.A., "Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-off Length using CFD and Parallel Detailed Chemistry", **SAE Paper**, Warrendale, PA, 2003-01-1043 (2003).
103. Tap, F.A., Veynante, D., "Simulation of flame lift-off on a diesel jet using a generalized flame surface density modeling approach", **Proceedings of the Combustion Institute**, 1 (30): 919-926 (2005).
104. İmren, A., "The Full Operating Cycle Modeling of Heavy-Duty Diesel Engines", Doktora Tezi, **İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, İstanbul, (2010).
105. Baumgarten, C., "Mixture Formation in Internal Combustion Engines", **Springer-Verlag**, (2006).
106. Üsküplü, S., "Elastik Dalga Yayılımının Aşırtmalı Örgü Sonlu Farklar Yöntemi ile Üç Boyutlu Benzetimi ve Sismik Dalga Yayılımına Uygulanması", Y.Lisans Tezi, **İstanbul Teknik Üniversitesi Bilişim Enstitüsü**, İstanbul, (2004).
107. Yaman, G., "Akyatan lagünü'nde su kalitesinin bilgisayar destekli analizi", Y.Lisans Tezi, **Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Adana, (2010).
108. Mo, Y., "HCCI Heat Release Rate And Combustion Efficiency: A Coupled Kiva Multi-Zone Modeling Study", Doktora Tezi, **The University of the Michigan, Mechanical Engineering**, Michigan, (2008).
109. Internet : "National Institute of Standards and Technology (NIST), Chemical Kinetics Model Database", <http://kinetics.nist.gov/CKMech/ModelsResults.jsp> (2011).
110. Seiser, H., Pitsch, H., Seshadri, K., Pitz, W.J., Curran, H.J., "Extinction and Autoignition of n-Heptane in Counterflow Configuration", **Proceedings of the Combustion Institute**, (28): 2029-2037 (2000).

111. Babushok, V.I., Tsang, W., "Kinetic modeling of heptane combustion and PAH formation", ***Journal of propulsion and power***, 3 (20): 403-414 (2004).
112. Andrae, J.C.G., Head, R.A., "HCCI experiments with gasoline surrogate fuels modeled by a semidetained chemical kinetic model", ***Combustion and Flame***, (156): 842–851 (2009).
113. Internet : "University of Cambridge-Department of Chemistry-Chemistry Resources-Molecular Weight Calculation", <http://www-jmg.ch.cam.ac.uk/tools/magnus/MolWeight.html> (2011).
114. Beaudoin, M., Jasak, H., "OpenFOAM Turbo Tools: From General Purpose CFD to Turbomachinery Simulations", ***Proceedings of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference***, Paper No. AJK2011-05015 (2011).
115. Internet : Andersen, C., Nielsen, N.E.L., "Numerical investigation of a BFR using OpenFOAM", ***AAU - Institute of Energy Technology***, , <http://projekter.aau.dk/projekter/files/14411784/Report.pdf> (2008).
116. Golovitchev, V.I., "Possible "road" map of solving new spray combustion problems in compression ignited engine modeling", ***Proc. 11th HTCES: High-Tech Cars and Engines***, Modena, Italy, (2005).

EKLER

EK-1. Silindirdeki ısı kaybının hesaplanması

Woschni korelasyonu, doğrudan enjeksiyonlu dizel motorları için geliştirilmiş olmasına rağmen HCCI motor çalışmalarında sıklıkla kullanılmaktadır [108]. Çevrim boyunca olan ısı transferi Woschni tarafından geliştirilen korelasyon ile hesaplanmaktadır. Korelasyon, Nusselt, Reynolds ve Prandtl sayıları cinsinden Eş. 1.1'de gösterilmektedir [11].

$$Nu = a Re^b Pr^c \quad (1.1)$$

Nu sayısının hesaplanması için gerekli olan Re sayısı ve bu sayı için gerekli olan silindir içi ortalama gaz hızı (w), Eş. 1.2 ve Eş. 1.3 kullanılarak elde edilmektedir.

$$w = \left[\left(c_{11} + c_{12} \frac{V_{swirl}}{\bar{S}_p} \right) \bar{S}_p + c_2 \frac{V_d T_i}{P_i V_i} (P - P_{motored}) \right] \quad (1.2)$$

$$Re \equiv \frac{D w \rho}{\mu} \quad (1.3)$$

Bağıntıların hesaplanmasında kullanılan katsayılar Çizelge E.1'de verilmiştir.

Çizelge E.1. Woschni korelasyonunda kullanılan sabitler [11]

a	b	c	c_{11}	c_{12}	c_2
0,035	0,71	0	2,28	0,308	3,24

$$h = 3,26 D^{-0,2} P^{0,8} w^{0,8} T^{-0,55} \quad (1.4)$$

Eş. 1.2 ve Eş. 1.4 yardımıyla hesaplanmış olan h , ısı transferi katsayısı ile her bir hesaplama adımındaki ısı kaybı Eş. 1.5 ile hesaplanmaktadır. A , zamanla değişen silindir cidarları ve uç noktaları ($\sim 2\pi D^2/4$) içeren toplam ısı transferi alanıdır.

$$Q_{cidar} = hA(T - T_{cidar}) \quad (1.5)$$

EK-2. Chemkin formatında reaksiyon tanımı

Eğer yakıtın oksidasyonu için tek adımlı (global) basit bir reaksiyon kullanılması durumunda reaksiyon Chemkin yazılımında aşağıdaki formatta belirtilir [55,56].

```

1 ELEMENTS
2 H O C N ! Bileşenleri oluşturan elementler
3 END
4 SPECIE
5 C7H16 O2 N2 CO2 H2O ! Reaksiyona giren bileşenler
6 END
7 REACTIONS
8 ! Tek adımda gerçekleşen basit reaksiyon
9 C7H16 + 11O2 => 7CO2 + 8H2O 5.00E+8 0.0 15780.0! 1
10 FORD / C7H16 0.25 / ! 0.25 yakıtın ileri reaksiyon üssü
11 FORD / O2 1.5 / ! 1.5 oksijenin ileri reaksiyon üssü
12 END

```

Şekil E.1. Tek adımlı reaksiyon için reaksiyon mekanizması dosyası

```

1 THERMO ALL
2 200.000 1000.000 5000.000
3 C7H16 P10/95C 7H 16 0 OG 200.000 5000.000 1391.000 1
4 2.22148969e+01 3.47675750e-02-1.18407129e-05 1.83298478e-09-1.06130266e-13 2
5 -3.42760081e+04-9.23040196e+01-1.26836187e+00 8.54355820e-02-5.25346786e-05 3
6 1.62945721e-08-2.02394925e-12-2.56586565e+04 3.53732912e+01 4
7 O2 1213860 2 G 0200.00 5000.00 1000.00 1
8 0.03697578E+02 0.06135197E-02-0.01258842E-05 0.01775281E-09-0.01136435E-13 2
9 -0.01233930E+05 0.03189166E+02 0.03212936E+02 0.01127486E-01-0.05756150E-05 3
10 0.01313877E-07-0.08768554E-11-0.01005249E+05 0.06034738E+02 4
11 CO2 121286C 10 2 G 0200.00 5000.00 1000.00 1
12 0.04453623E+02 0.03140169E-01-0.01278411E-04 0.02393997E-08-0.01669033E-12 2
13 -0.04896696E+06-0.09553959E+01 0.02275725E+02 0.09922072E-01-0.01040911E-03 3
14 0.06866687E-07-0.02117280E-10-0.04837314E+06 0.01018849E+03 4
15 H2O 20387H 20 1 G 0200.00 5000.00 1000.00 1
16 0.02672146E+02 0.03056293E-01-0.08730260E-05 0.01200996E-08-0.06391618E-13 2
17 -0.02989921E+06 0.06862817E+02 0.03386842E+02 0.03474982E-01-0.06354696E-04 3
18 0.06968581E-07-0.02506588E-10-0.03020811E+06 0.02590233E+02 4
19 END

```

Şekil E.2. Tek adımlı reaksiyon için termo dosyası

k_{fr} ileri reaksiyon oranı

EK-2. (Devam) Chemkin formatında reaksiyon tanımı

$$k_{fr} = AT^b \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2.1)$$

R, ideal gaz sabiti (8,314 J K⁻¹mol⁻¹, 1985,89 cal/(mol K) [54])

$$k_{fr} = 5 \times 10^8 \times 1000^0 \exp\left(-\frac{15780}{1985,89 \times 1000}\right) = 4,96 \times 10^8 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad (2.2)$$

ω kimyasal reaksiyon oranı

$$\omega = \frac{d(\text{ürün})}{dt} = -k_{fr} [\text{yakıt}]^c [\text{yakıtçı madde oksitleyici}]^d = -k_{fr} \left[\frac{\rho_{\text{yakıt}}}{W_{\text{yakıt}}} \right]^{0,25} [\text{O}_2]^{1,5} \quad (2.3)$$

t zaman, c ve d ileri reaksiyon üssü

EK-3. Reaksiyon Mekanizmaları

Çizelge E.2. Reaksiyon mekanizmaları

Model Yılı	Yazarlar		Bileşen Sayısı	Reaksiyon Sayısı	
1997	Held, T.J.; Marchese, A.J.; Dryer, F.L; [109]		41	275	
2000	Pitz [109]		179	1642	
2000	Golovitchev [109]		40	165	
2004	Babushok, V.I.; Tsang, W. [109]		335	1708	
2004	Babushok, V.I.; Tsang, W. [109]		361	1848	
2004	Babushok [109]		362	1849	
2008	Zhong ve Xi [109]		57	83	
Modellerde kullanılmış olan n-heptan reaksiyon mekanizmaları					
Model Yılı	Mekanizma Adı	Yazarlar	Bileşen Sayısı	Reaksiyon Sayısı	NO _x
1998	Detaylı n-heptan mekanizması [62]	Curran, H.J.; Gaffuri, P.; Pitz, W.J.; Westbrook, C.K	544	2446	Eklendi
2000	Azaltılmış n-heptan mekanizması (n-heptane, Reduced Mechanism) [110]	Seiser, H., Pitsch, H. , Seshadri, K., Pitz,W. J., ve Curran, H. J.	160	1540	Eklendi
2004	Heptane-Babushok [111]	Babushok, V.I.; Tsang, W.	362	1849	-
2004	PRF mekanizması 2.versiyon (Detaylı n-heptan mekanizması) [78]	Curran, H. J., Pitz, W. J., ve Westbrook, C. K.	1034	4238	Eklendi
2004	ERC V2 mekanizması (Azaltılmış n-heptan) [70]	Patel, A., Kong, S.C., Reitz, R.D.,	29	52	Eklendi
Tek bölgeli modellerde kullanılmış olan PRF reaksiyon mekanizmaları					
2004	PRF mekanizması 2.versiyon (Detaylı n-heptan mekanizması) [78]	Curran, H. J., Pitz, W. J., ve Westbrook, C. K.	1034	4238	Eklendi
2009	HCCI yanma için çatısal PRF kinetik model [63]	Tsurushima, T.	33	38	Eklendi
CFD modellerde kullanılmış olan PRF reaksiyon mekanizmaları					
2009	HCCI yanma için çatısal PRF kinetik model [63]	Tsurushima, T.	33	38	Eklendi
2009	HCCI yanma için yarıdetaylı kimyasal kinetik model [112]	Andrae, J.C.G. ve Head, R.A.	142	672	Mevcut
NO _x reaksiyonları için kullanılmış olan reaksiyon mekanizması					
1999	GRI-Mech 3.0 [59]	Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., C. Thomas Bowman, R.K.H., Song, S., William C. Gardiner, J., Lissianski, V.V., Qin, Z.	54	325	Mevcut

Modellemede kullanılmış olan yukarıdaki reaksiyon mekanizmalarına yine çizelgede belirtilmiş olan kaynaklardan ulaşılabileceğinden dolayı mekanizma ve termo dosyaları ekte verilmemiştir.

EK-4. C_8H_{18} 'in yanma ve NO_x oluşum reaksiyonları için kullanılan eşitlikler

Kinetik reaksiyonlar ve eşitlikler



$$k_{fr} = 4,6 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{15078}{T}\right) \quad (4.2)$$

$k_{br}=0$ (Reaksiyon tek yönlü olduğu için geri reaksiyon katsayısı 0)

$$\dot{\omega} = k_{fr} \left[\frac{\rho_{yakıt}}{W_{yakıt}} \right]^{0,25} [O_2]^{1,5} \quad (4.3)$$



$$k_{fr} = 1,5587 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{67627}{T}\right) \quad (4.5)$$

$$k_{br} = 7,5 \times 10^{12} \quad (4.6)$$

$$\dot{\omega} = k_{fr} [O_2] [N_2]^2 - k_{br} [N]^2 [NO]^2 \quad (4.7)$$



$$k_{fr} = 2,6484 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{59418}{T}\right) \quad (4.9)$$

$$k_{br} = 1,6 \times 10^9 \exp\left(-\frac{19678}{T}\right) \quad (4.10)$$

$$\dot{\omega} = k_{fr} [O_2]^2 [N_2] - k_{br} [O]^2 [NO]^2 \quad (4.11)$$



$$k_{fr} = 2,123 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{57020}{T}\right) \quad (4.13)$$

$$k_{br} = 0 \quad (4.14)$$

$$\dot{\omega} = k_{fr} [N_2]^{0,5} [OH] \quad (4.15)$$

EK-5. Deneysel verilerden eş değeriilik oranının hesaplanması

Emme girişı sıcaklığı 25 °C (298 K), R=0,287 kJ/kgK olarak kullanılmıştır.

- 4N yüklü, A1. Deney için emme supabı kapanma anındaki silindir içi basınç 1,01731 bar (101,731 kPa) olarak ölçülmüştür.

$$\text{Hava Yoğunluğu: } \rho_{\text{hava}} = \frac{m}{v} = \frac{P}{RT} = \frac{101,731}{0,287 \times 298} = 1,189474546 \text{ kg/m}^3 \quad (5.1)$$

- Deneyler 4 zamanlı motorda 2200 1/min'de yapılmıştır.

$$1 \text{ dakikadaki çevrim sayısı: } 2200 \times \frac{1}{2} = 1100 \text{ çevrim/min} \quad (5.2)$$

- A1. Deney için yakıt tüketimi 8,47241 g/min ölçülmüştür.

Bir çevrimde tüketilen yakıt kütlesi:

$$\frac{8,47241 \text{ g/min}}{1100 \text{ çevrim/min}} = 0,007702191 \text{ g/çevrim} \quad (5.3)$$

- A1. Deney için hava tüketimi 328 ℓ /min ölçülmüştür.

$$\text{Bir çevrimde tüketilen hava: } \frac{328 \text{ ℓ / min}}{1100 \text{ çevrim / min}} = 0,29818 \text{ ℓ / çevrim} \quad (5.4)$$

Bir çevrimde tüketilen hava kütlesi:

$$(1,189474546 \text{ kg / m}^3) \times (0,29818 \text{ ℓ / çevrim}) = 0,354679683 \text{ g / çevrim} \quad (5.5)$$

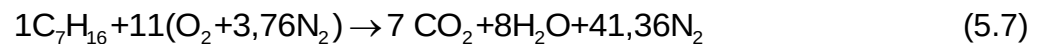
Çevrimin hava-yakıt oranı:

$$\left(\frac{H}{Y} \right)_{\text{pratik}} = \frac{0,354679683 \text{ g hava/çevrim}}{0,007702191 \text{ g yakıt/çevrim}} = 46,04919391 \quad (5.6)$$

Teorik (stokiyometrik) Hava Yakıt Oranının Hesaplanması:

Çizelge E.3. Elementlerin atom ağırlıkları [113]

	C	H	O	N
Atom Ağırlıkları	12,0110	1,0080	15,9993	14,0067231



EK-5. (Devam) Deneysel verilerden eş değeriilik oranının hesaplanması

n-heptan yakıtı için teorik (stokiyometrik) hava yakıt oranı (H/Y) kütleli olarak

$$\left(\frac{H}{Y}\right)_{\text{teorik}} = \frac{11 \times 2 \times 15,99940 + 11 \times 3,76 \times 2 \times 14,0067}{100,2048727} = 15,11530049 \quad (5.8)$$

$$\text{Hava fazlalık katsayısı: HFK} = \frac{\left(\frac{H}{Y}\right)_{\text{pratik}}}{\left(\frac{H}{Y}\right)_{\text{teorik}}} = \frac{46,049193}{15,115300} = 3,046529 \quad (5.9)$$

$$\text{Çevrimin eş değeriilik oranı: ER}(\Phi) = \frac{1}{\text{HFK}} = \frac{1}{3,046529} = 0,328242 \quad (5.10)$$

- Bir çevrimde tüketilen madde miktarı:

$$0,354679683 \text{ g/çevrim hava} + 0,007702191 \text{ g/çevrim yakıt} \quad (5.11)$$

$$= 0,362381874 \text{ g/çevrim}$$

Bir saniyede tüketilen madde miktarı: (Chemkin toplam madde geçişi (g/s))

$$0,362381874 \text{ g/çevrim} \times \frac{1100 \text{ çevrim/min}}{60} = 6,64366768 \text{ g/s} \quad (5.12)$$

A1.Deneyi için eş değeriilik oranı 0,328242 ve Chemkin toplam madde geçişi 6,64366768 g/s olarak hesaplanmıştır. Bu iki değişken deneylerde yüke göre değişen şartları tek bölgeli modele girmek için kullanılmıştır.

Daha sonra yapılmış olan n-heptan (RON0), RON20, RON40 ve RON60 yakıtlı deneylerin ölçülen verilerinin ve bu verilerle EK-5 belirtildiği gibi hesaplanmış model giriş verisi olarak kullanılan sonuçlarının tamamı EK-6'da gösterilmektedir.

EK-6. Ölçülen deneysel veriler ve model için hesaplanan değerler

Enjektör Açılma Gecikmesi		1,38	ms	Motor Devri		2200	1/min
---------------------------	--	------	----	-------------	--	------	-------

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

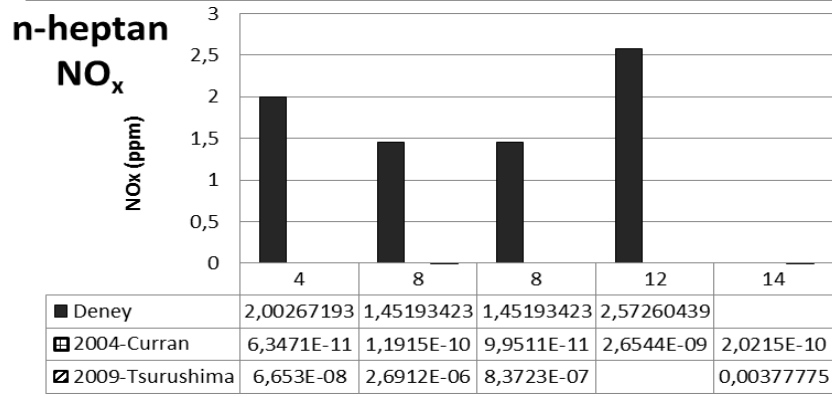
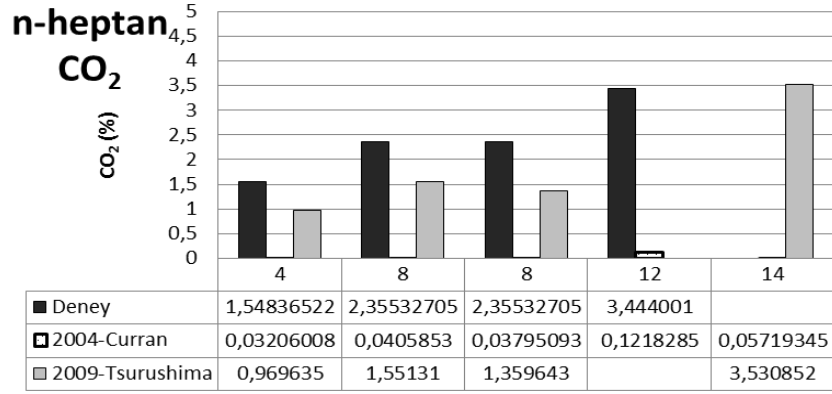
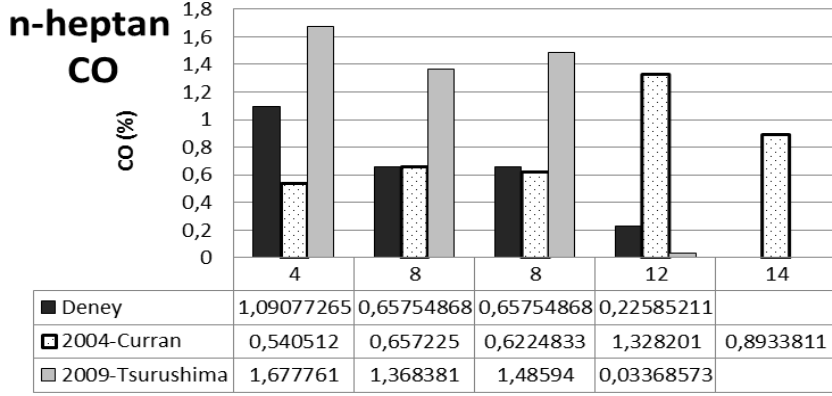
Yoğunluk (g/cm³)		RON 20	RON 40	RON 60	n-heptan	Enjektör Hacimsel Akış		94,5	ml/min
0,6888		0,6916	0,6944	0,686	0,686	Basınc		0,956	bar
H/Y Oranı (Kütlesel)		15,105	15,09483997	15,085	15,11556				

Yoğunluk (g/cm³)		RON 20
------------------	--	--------

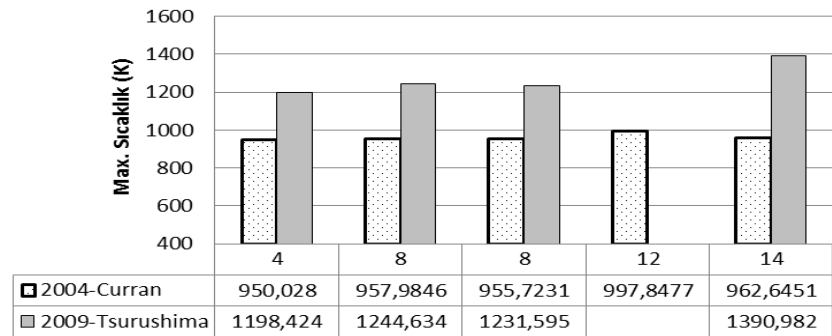
EK-6. (Devam) Ölçülen deneysel veriler ve model için hesaplanan değerler

Ölçülen Değerler										Hesaplanan Değerler								Chemkin toplam (g/s)
Deney No	Deney Tarihi	Yakıt	Emme İstima Sıcaklığı (°C)	EGR %	Enj. Süresi (ms)	Yağ Sıcaklığı (°C)	Emme Hava Sıcaklığı (°C-K)	Hava Tüketimi (l/min)	Yakıt Tüketimi (g/min)	Yakıt Tüketimi (g/çevrim)	Hava Tüketimi (l/çevrim)	Hava Yoğunluğu (kg/m³)	Tüketilen Hava Kütle (g/çevrim)	H/Y	HFK	ER=1/HFK	Chemkin toplam (g/s)	
11	19.07.2010	RON40	4		4,28	80	25	298	325	6,94954	0,0063178	0,29545455	1,041	0,307568182	48,68306	3,22515	0,310063	5,754576
12			8		4,32	79	25	298	325	7,0454	0,0064049	0,29545455	1,041	0,307568182	48,02071	3,18127	0,314340	5,756173
13			12	25	4,46	79	25	298	327	7,38089	0,0067099	0,29727273	1,041	0,309460909	46,12003	3,05535	0,327295	5,796465
14			16		4,5	79	25	298	328	7,47675	0,006797	0,29818182	1,041	0,310407273	45,66798	3,0254	0,330534	5,815412
15			20		4,86	78	25	298	328	8,33945	0,0075813	0,29818182	1,041	0,310407273	40,9437	2,71243	0,368673	5,829791
16	20.07.2010	RON60	4	47	4,11	85	47	320	306	6,56864	0,0059715	0,27818182	1,041	0,289587273	48,49495	3,21472	0,311069	5,418577
17			8	53	4,15	85	53	326	300	6,66489	0,006059	0,27272727	1,041	0,283909091	46,85752	3,10617	0,321939	5,316081
18			12	56	4,24	84	56	329	308	6,88143	0,0062558	0,28	1,041	0,29148	46,59319	3,08865	0,323766	5,458491
19			16	54	4,32	85	54	327	305	7,07392	0,0064308	0,2727273	1,041	0,288640909	44,88387	2,97534	0,336096	5,409649
20			20	56	4,53	85	56	329	306	7,5792	0,0068902	0,27818182	1,041	0,289587273	42,02896	2,78609	0,358926	5,435420

EK-7. Tek bölgesi model sonuçları

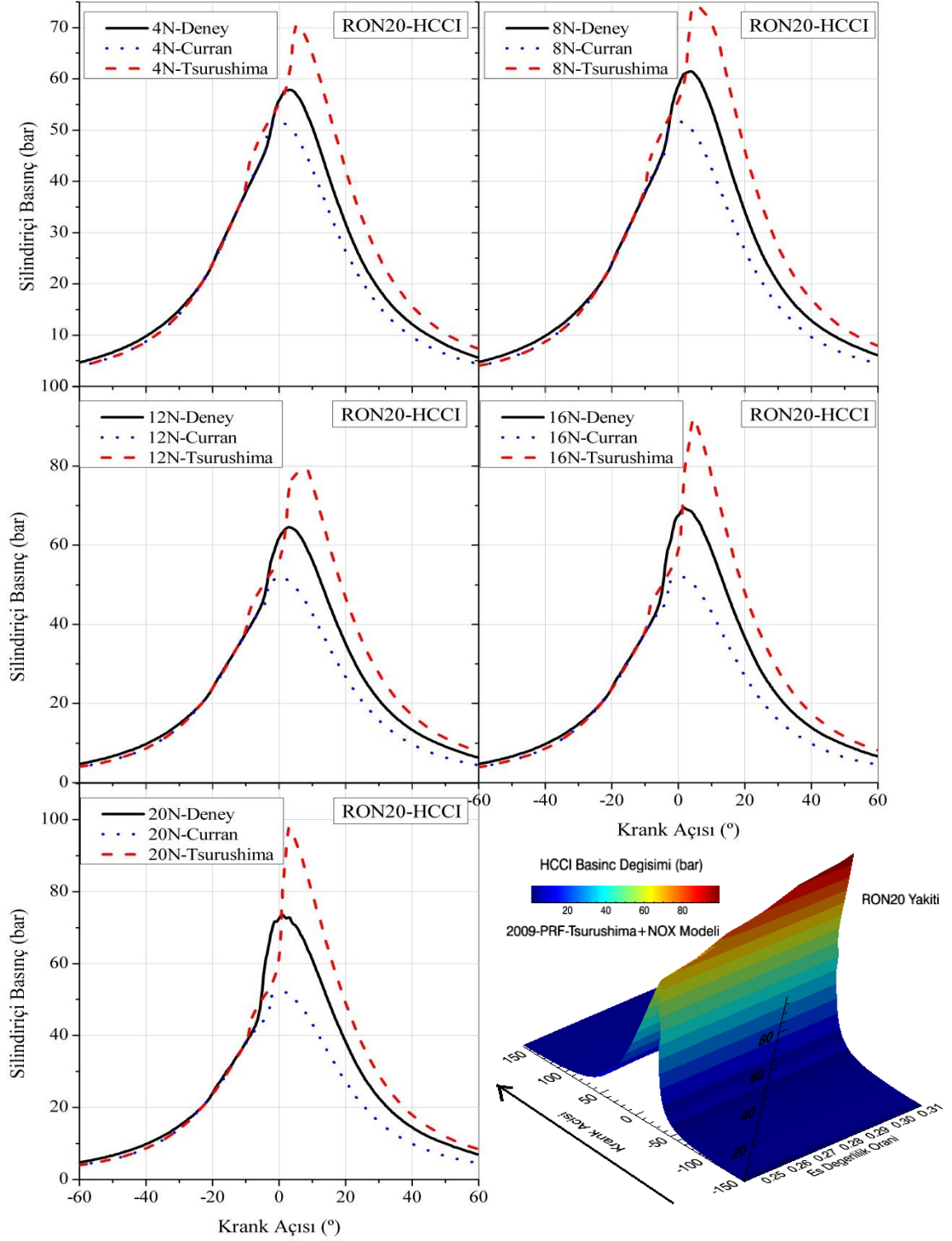


n-heptan Maksimum Çevrim Sıcaklığı Model



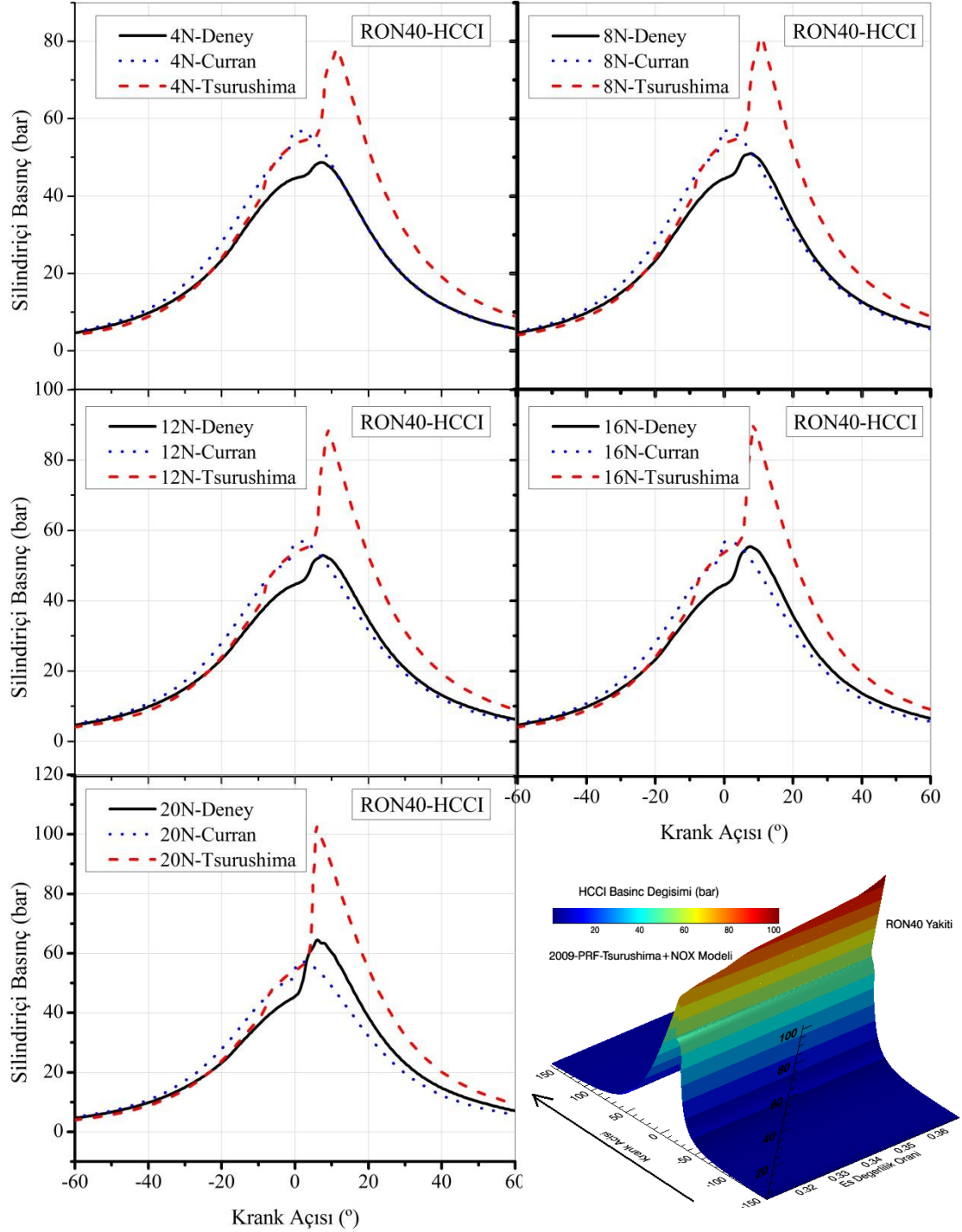
Şekil E.3. n-heptan yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri emisyon karşılaştırması

EK-7. (Devam) Tek bölge model sonuçları



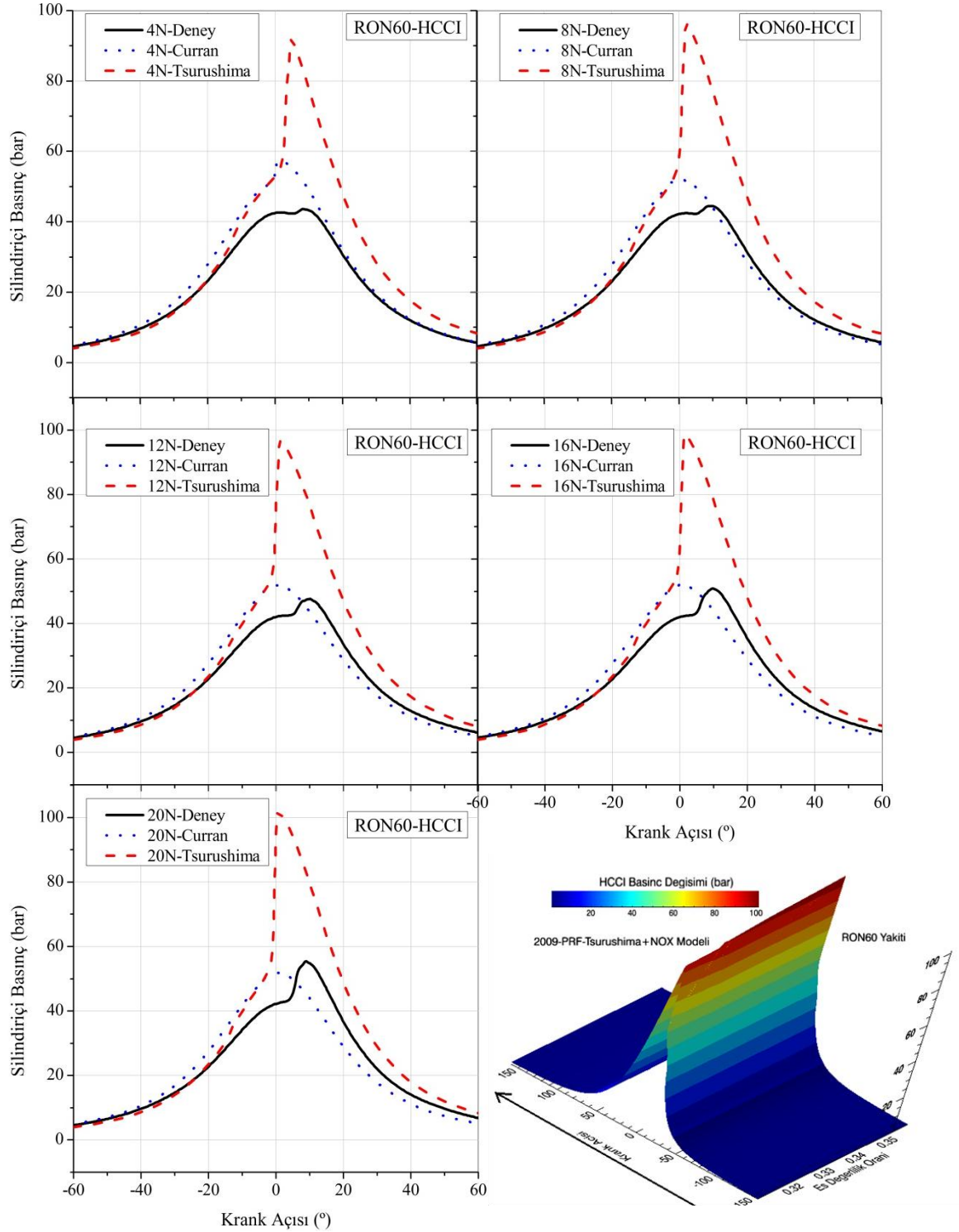
Şekil E.4. RON20 yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması

EK-7. (Devam) Tek bölge model sonuçları



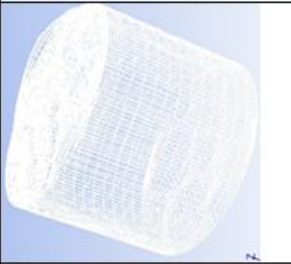
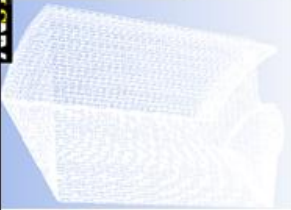
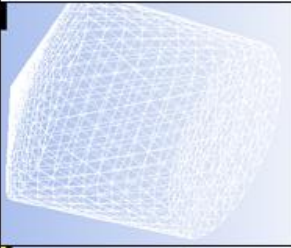
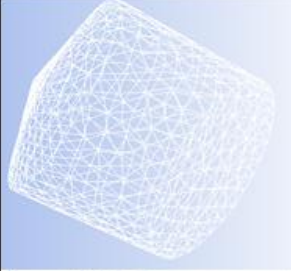
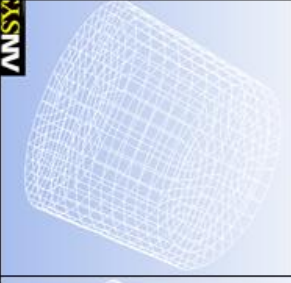
Şekil E.5. RON40 yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması

EK-7. (Devam) Tek bölgesi model sonuçları



Şekil E.6. RON60 yakıtı için deney, Curran ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması

EK-8. Kullanılan farklı geometriler ve teknik özellikleri

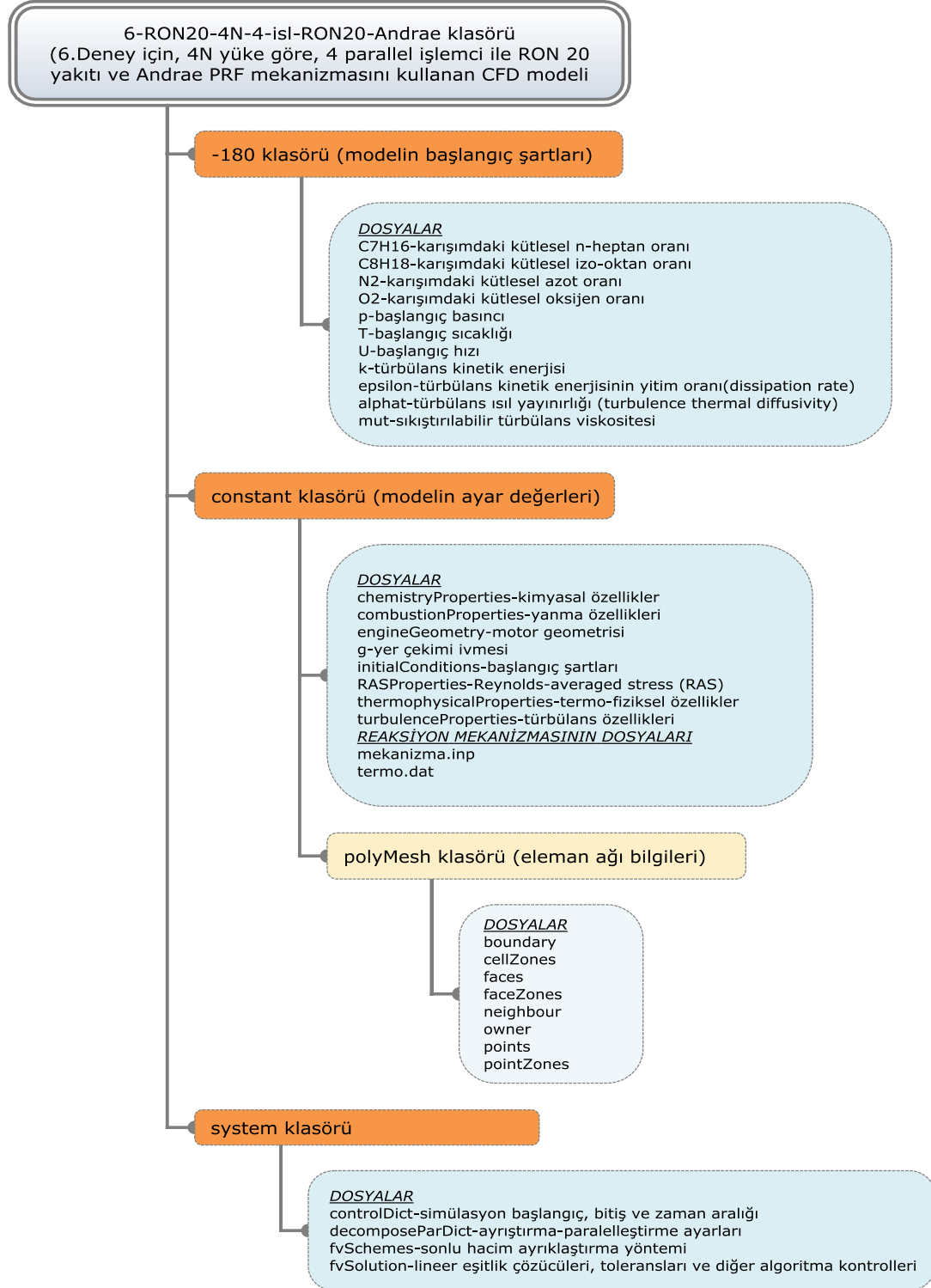
Kullanılan eleman ağı yapısı program görüntüleri	Ozellikler	Geometri 1	Geometri 2	Geometri 3	Geometri 4	Geometri 5
	ANSYS FLUENT 12.1.2					
Eleman Ağı Boyutu	Düğüm Sayısı	32397	82050	6692	1331	2736
	Hücre Sayısı	27544	76750	34358	6093	2288
Eleman Tipi	Yüzey Sayısı	87320	235420	70539	12756	7281
	TRI_3	50	50	3646	1140	4
	TETRA_4			34358	6093	-
	QUAD_4	9376	11415			852
	PENTA_6		1125			22
	HEXA_8	27544	75625			2266

ANSYS ICEM CFD
12.1

EK-8. (Devam) Kullanılan farklı geometriler ve teknik özellikleri

	Ozellikler	Geometri 1	Geometri 2	Geometri 3	Geometri 4	Geometri 5
Eleman Parçaları	Silindir kapağı (cylinderHead)	2184 quadrilateral-mixed wall faces, zone 4.	1900 mixed wall faces, zone 14.	2289 triangular wall faces, zone 12.	390 triangular wall faces, zone 12.	208 mixed wall faces, zone 12.
	Silindir Diş (liner)	2596 quadrilateral -mixed wall faces, zone 2.	750 quadrilateral wall faces, zone 13.	898 triangular wall faces, zone 14.	574 triangular wall faces, zone 13.	440 quadrilateral wall faces, zone 13
	piston	1326 quadrilateral -mixed wall faces, zone 3.	2675 mixed wall faces, zone 12.	459 triangular wall faces, zone 13.	176 triangular wall faces, zone 14.	208 mixed wall faces, zone 14.
		FLUID-1: 27544 hexahedral cells, zone 1.	FLUID-1: 76750 mixed cells, zone 17	Solid : 34358 tetrahedral cells, zone 10	SOLID : 6093 tetrahedral cells, zone 10	SOLID : 2288 mixed cells, zone 10
		default-interior: 77944 quadrilateral - mixed interior faces, zone 7.	CYCLOC_HALF0: 3070-quadrilateral periodic faces, zone 15	-	11616 triangular interior faces, zone 11	6425 mixed interior faces, zone 11
Alan Boyutları		default-exterior: 3270 quadrilateral - mixed wall faces, zone 6.	CYCLOC_HALF1: 3070-quadrilateral wall faces, zone 16	-	-	-
	Toplam Eleman Sayısı	36920	88215	38004	7233	3144
	Min. (x,y,z) (m)	-0,04301 0,0429955 0,00721194	0 0 0	0,0429999 0,0429868 0	-0,043 -0,043 -2,63299e-018	-0,043 -0,043 0
Hacim İstatistikleri	Mak. (x,y,z) (m)	0,04301 0,0429955 0,0679594	0,043 0,0304056 0,0685369	0,043 0,0429881 0,075535	0,043 0,043 0,08	0,043 0,043 0,072
	Min. Hacim (m³):	1,036182e-010	8,887037e-013	2,723927e-014	1,849720e-009	7,138087e-008
	Mak. Hacim (m³):	9,187703e-008	1,814176e-009	8,380196e-008	3,334580e-007	3,137314e-007
Alan İstatistikleri	Toplam Hacim (m³):	4,083806e-004	4,593538e-005	3,938156e-004	4,159962e-004	4,165161e-004
	Min. yüzey alanı (m²):	1,240745e-007	3,150810e-009	1,987331e-009	2,378845e-006	1,090542e-005
	Mak. yüzey alanı (m²):	2,971386e-005	2,700664e-006	3,955795e-005	1,083528e-004	5,416718e-005
Eleman Ağırlığı	Mak. hücre ezilmesi (Max. cell squish)	9,23191e-001	9,38955e-001	6,69934e-001	6,75715e-001	2,15302e-001
	Mak. hücre çarpıklığı	--	9,70134e-001	7,21938e-001	8,39867e-001	4,97421e-001
	Mak. en/boy oranı	4,25510e+001	1,79519e+002	1,30467e+001	1,15668e+001	5,02157e+000
	Kalite kriterinin uygulandığı hücreler	hexahedra	tetrahedra/mixed	tetrahedra/mixed	tetrahedra/mixed	tetrahedra/mixed

EK-9. CFD model örnek çalışma klasörü düzeni



Şekil E.7. CFD model örnek çalışma klasörü düzeni

EK-10. OpenFOAM'da k-ε Türbülans Modeli

Bir türbülans kinetik enerji eşitliği dikkate alındığında bu tarz eşitlikte ana nesneler (k , u , ν_t , gibi alanlar ve $\frac{\partial}{\partial t}$, $\nabla \cdot$, ∇ gibi operatörler) kolaylıkla tanınmaktadır [114].

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (uk) - \nabla \cdot [(\nu + \nu_t) \nabla k] = \nu_t \left[\frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T) \right]^2 - \frac{\varepsilon_0}{k_0} k \quad (10.1)$$

Daha düşük seviyedeki nesneler, örneğin sayısal eleman ağı, zaman ilerleme yöntemi, sınır şartları ve diğerleri yukarıdaki eşitliği destekler. Eş.10.1'in OpenFOAM'daki kodlanmış hali aşağıdaki gibidir:

```
solve
(
  fvm::ddt(k)
  + fvm::div(phi, k)
  - fvm::laplacian(nu() + nut, k)
  == nut*magSqr(symm(fvc::grad(U)))
  - fvm::Sp(epsilon/k, k)
);
```

Eş.10.1 ile kod arasındaki uyuma, sınırlı programlama bilgisine sahip ve nesne yönelimli veya C++ programlama ile ilgisi olmayan kişiler için bile belirgindir [114].

Kodda *fvm*, sonlu hacim matrisi (Finite volume matrix) bir sınıf olup *ddt(k)* girdisi ile *fvm* sınıfı çağrılmaktadır. Sonlu hacim hesabı (finite volume calculus-fvc) skaler bir dizi iken sonlu hacim matris sınıfı (Finite volume matrix-fvm-class) bir matris girişi ile bir kısmi diferansiyel eşitliği çözmektedir. Zamanın türevi "*ddt()*" fonksiyonu ile çağrılmakta ve *fvm* sınıfının bir üyesidir.

EK-10. (Devam) OpenFOAM'da k-ε Türbülans Modeli

"div()" diverjans (divergence) operatörü ve "laplacian" laplace (laplacian) operatörüdür [115].

Çizelge E.4. Standart k-ε türbülans modeli sabitleri

Sabitler	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$C_{\epsilon 3}$	Pr_{ϵ}	Pr_k	C_{μ}	C_s
KIVA Standart k-ε [71]	1,44	1,92	-1	1,3	1	0,09	1,5
Sabitler	C_1	C_2	C_3	σ_{ϵ}	σ_k	C_{μ}	Prt
OpenFOAM k-ε	1,44	1,92	-0,33	1,3	1	0,09	1

Türbülans viskozitesi

$$\nu_t = \frac{\rho C_{\mu} k^2}{\epsilon} \quad (10.2)$$

Çizelge E.5. Başlangıç Şartları

		Türbülans kinetik enerjisi $k \text{ (m}^2/\text{s}^2\text{)}$	Türbülans enerjisi yitim oranı [56] $\epsilon \text{ (m}^2/\text{s}^3\text{)}$	Sıcaklık T (K)	Basınç P (pa)
internalField				298	95600
boundaryField	silindir kapağı (cylinderHead)	4	450	383	zeroGradient
	silindir (Liner)			373	zeroGradient
	piston			433	zeroGradient

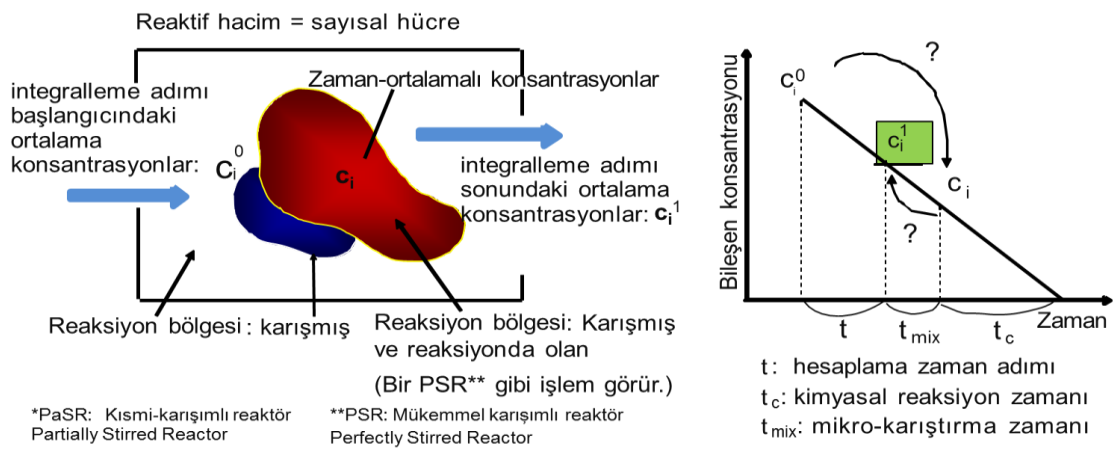
EK-11. Kısmi-karışimli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli

Karışım düzgünsüzlüğünün (heterojen karışım) etkisini modelleyebilmek için genelleştirilmiş *kısmi-karışimli reaktör* (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli kullanılmıştır. İlk kez Villiermaux ve Devillon (1972) tarafından ortaya atılan orijinal PaSR modeli, Interaction by Exchange with the Mean (IEM) yaklaşımının basit bir formudur. Reaktör içinde lagrangian parçacık bölünmesini dikkate alarak IEM modeli kısaca tarif edilecek olunursa, reaktöre gönderilen parçacıklar, reaktörde önceden bulunan eski parçacıklarla karışarak ısınmakta ve reaksiyona girmektedir. Parçacık karışım hızı mikro-karışım zaman ölçeği τ_{mix} 'e bağlıdır [99].

Reaktör içindeki bileşenlerin yoğunluklarını tanımlayan zamana bağlı denklemler:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\langle c \rangle - c}{\tau_{mix}} + f_r(c, T); \quad c(t=0) = c_0 \quad (11.1)$$

Burada, c , anlık bileşen molar konsantrasyonu, T , karışım sıcaklığı ve $f_r(c, T)$, kimyasal kaynak terimi olup, $\langle \rangle$ ortalama işlemini temsil eder. Bileşenlerin indisleri basitlik amacıyla gösterilmemiştir [99].



Şekil E.8. PaSR modelinin kavramsal şematik diyagramı [116]

EK-11. (Devam) Kısmi-karışımli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli

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

$$\langle c \rangle = \int_0^1 c \cdot p(c) \cdot dc \quad (11.2)$$

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

$$p(c) \cdot dc = \phi(t) \cdot dt \quad (11.3)$$

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

$$\langle c \rangle = \int_0^\infty c(t) \cdot \phi(t) \cdot dt \quad (11.4)$$

Bu model PaSR modeli olarak bilinir. Golovitchev ve diğerlerinin (2000) genişletilmiş PaSR modelinde, Eş.11.2-Eş.11.4 denklemleri ile tanımlanan ortalama işlemi, hesaplama hücresindeki korunum denklemlerinin sayısal çözümleri ile değiştirilerek, $\langle c \rangle$ ve diğer akış parametreleri bulunmaktadır. Hesaplama ağının hücreleri, orjinal IEM modelinde karışım bileşimini temsil eden parçacıklar gibi değerlendirilebilir. Sayısal çözüm, çok adımlı reaksiyon mekanizmasında bileşenler için kütle korunum denklemlerine uygulanan operator-ayrıştırması metoduna dayanır. Bu yaklaşıma göre son hesaplama

EK-11. (Devam) Kısmi-karışımli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli

adımı, bir hesaplama hücre boyutundaki sabit PaSR hacimdeki yanmayı temsil eder, öyleki reaksiyonlar aşağıdaki Adi Diferansiyel Denklem, ADD, sistemiyle tanımlanan hacim kesrinde gerçekleşir,

$$\frac{d\langle c \rangle}{dt} = \frac{\langle c^1 \rangle - \langle c^0 \rangle}{\tau} = \frac{c^1 - c^0}{\tau} = f_r(c, T) \quad (11.5)$$

Yukarıda, kimyasal kaynak terimi sanal reaktör konsantrasyonlarında hesaplanır, τ integrasyon adımı olup ortalama sembolü ihmal edilecektir. [99].

Model, reaktör çıkışındaki, c^1 , reaktör içindeki, c , ve reaktör girişindeki, c^0 konsantrasyonlarını ayırır. Bir sonraki adımda c^1 , c^0 ile yer değiştirir. $c \equiv c^1$ olması durumunda Eş.11.5 geleneksel sayısal metotlarla (örneğin CHEMKIN-II paketinin kinetik programı ile) çözülebilir. Aksi takdirde bu denklemler, c^1 ve c gibi iki adet bilinmeyen olmasından dolayı, çözülemez ve Eş.11.5'i çözebilmek için Eş.11.1'in rutin olarak çözülebilen kararlı hali alınır Eş.11.6 [99,104].

$$\frac{c^1 - c^0}{\tau} = \frac{c^1 - c}{\tau_{mix}} = f_r(c, T) \quad (11.6)$$

i bileşeni için reaksiyon oranı terimi yaklaşık olarak Eş.11.7 [91].

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{c_i^1 - c_i^0}{\tau} = \kappa RR_i(c_i^1) \quad (11.7)$$

Burada $RR_i(c_i^1)$ laminar kimyasal kaynak terim, κ ise Eş.11.8'de tanımlanan reaksiyon oranı çarpanıdır [91].

$$\kappa = \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_{mix}} \quad (11.8)$$

EK-11. (Devam) Kısmi-karışımli reaktör (Partially Stirred Reactor-PaSR) modeli

τ_c kimyasal zaman,

Karışım zamanı Eş 11.9'a göre hesaplanır [56].

$$\tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho \varepsilon}} \quad (11.9)$$

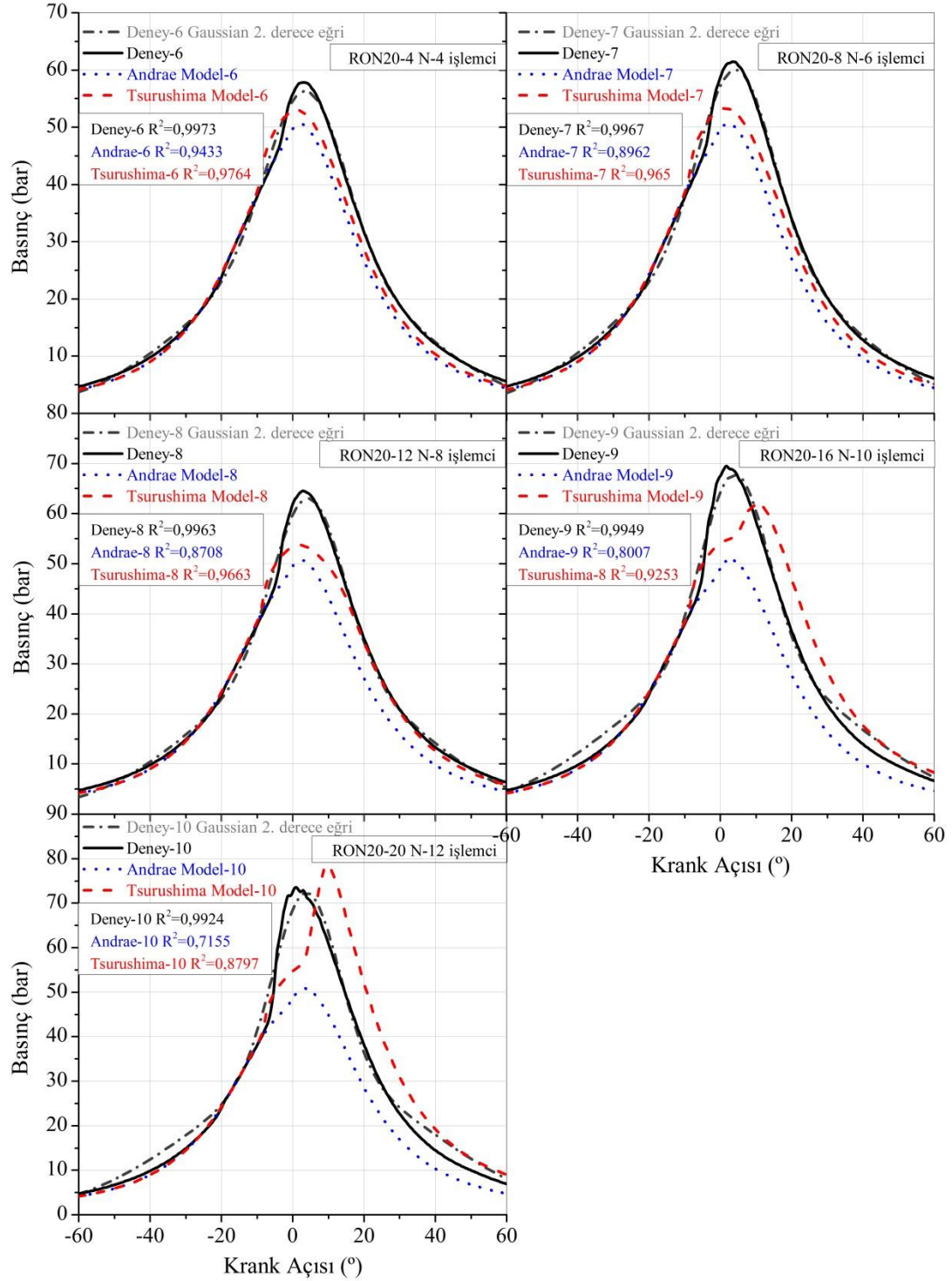
C_{mix} sabit, μ_{eff} efektif viskozite, ρ yoğunluk ve ε türbülans kinetik enerjisi yitim oranıdır [56].

Bu çalışmada *combustionProperties* dosyasındaki C_{mix} parametresi için 1 değeri yerine 1,0e-21 değeri kullanılmıştır.

τ_c kimyasal zaman, reaksiyon mekanizmasının ADD'lerine tamamen bağlı olarak çözülen ve bu mekanizma için bulunan karakteristik zaman ile tanımlanmaktadır [91].

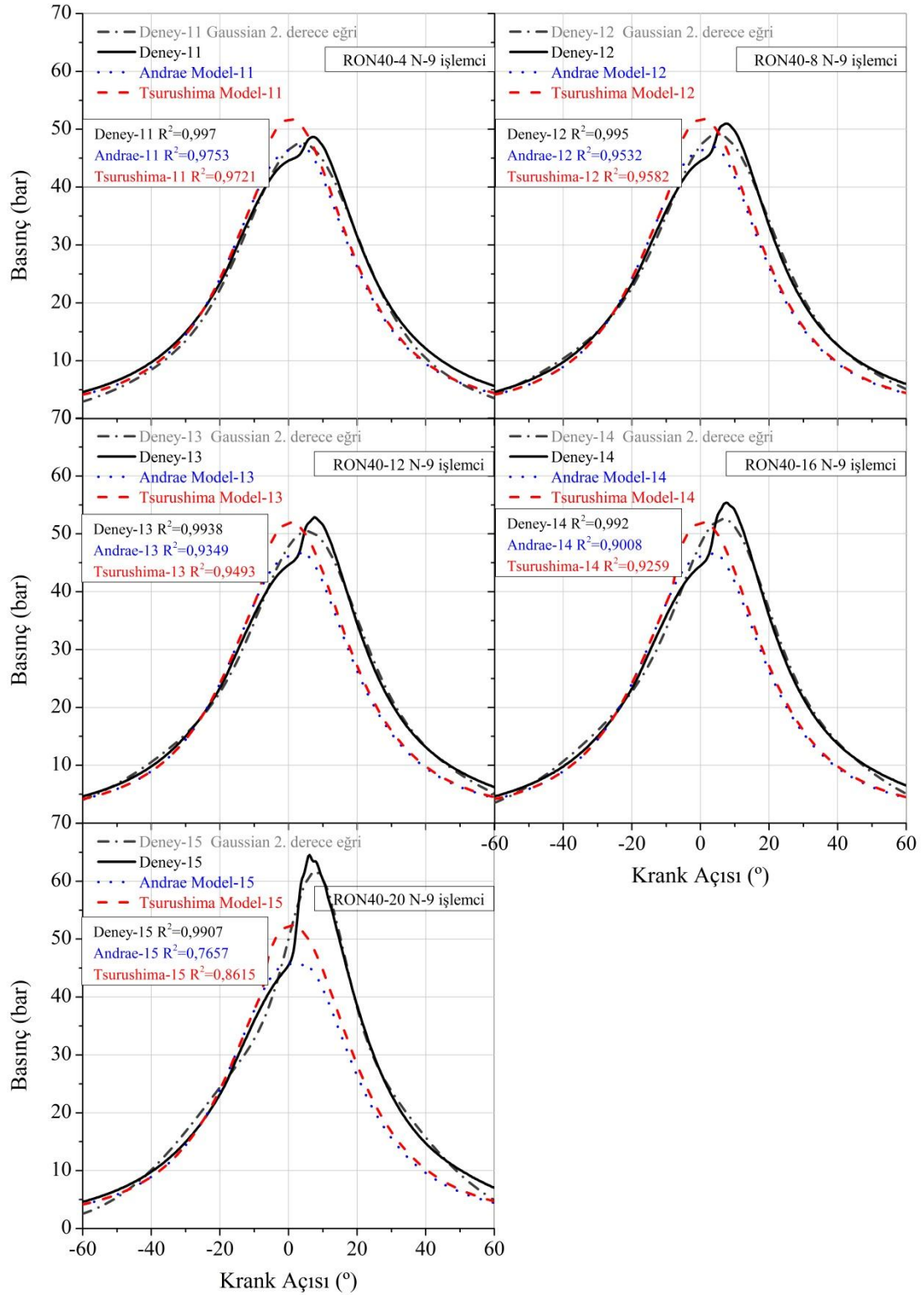
PaSR modeli kimya-türbülans etkileşimini çok gerçekçi bir şekilde ele alamamakta bu durumda modelin doğruluğunu ve sayısal kararlılığını etkilemektedir.

EK-12. CFD model sonuçları



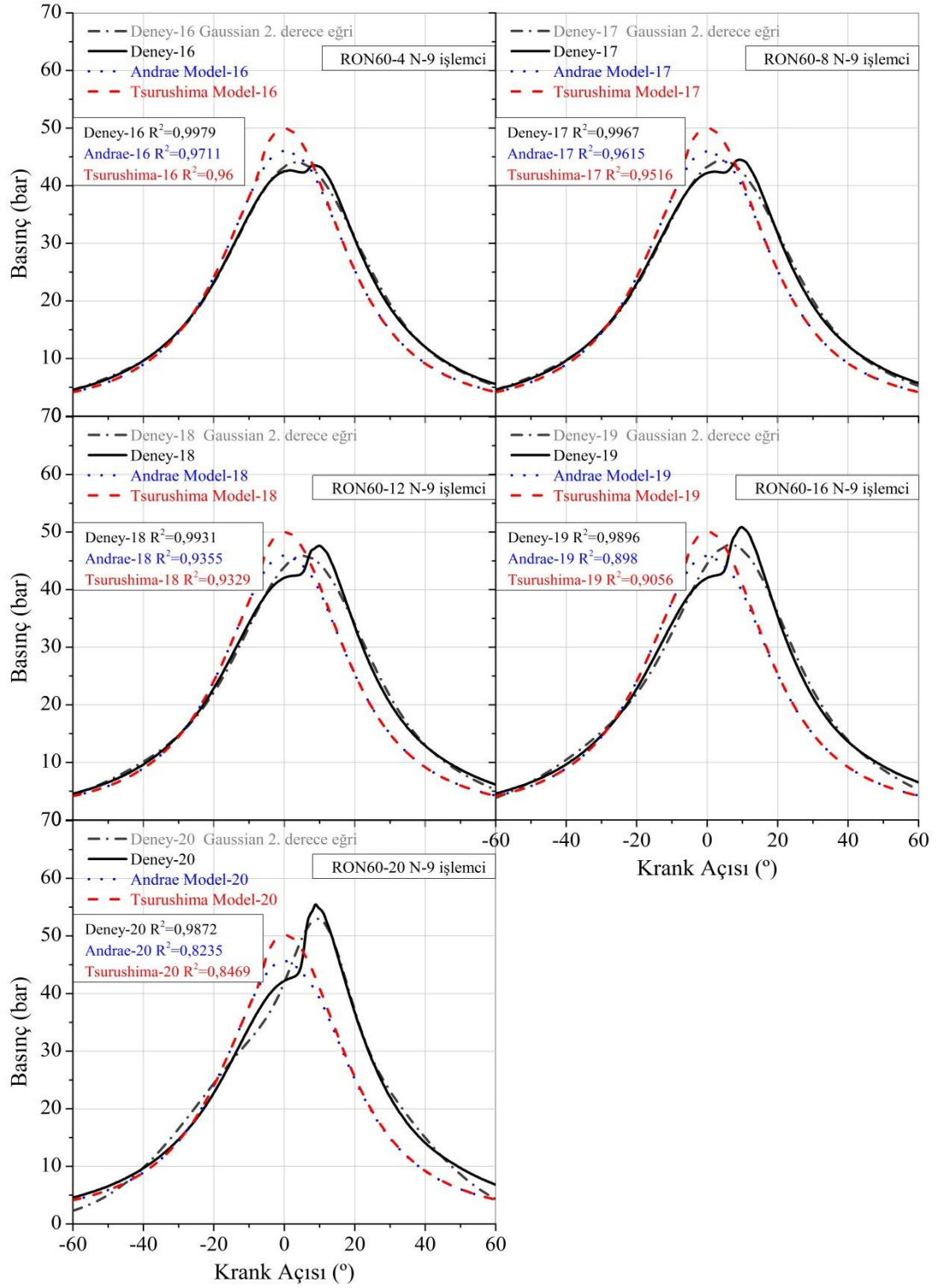
Şekil E.9. RON20 yakıtı için deney, Andrae ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması

EK-12. (Devam) CFD model sonuçları



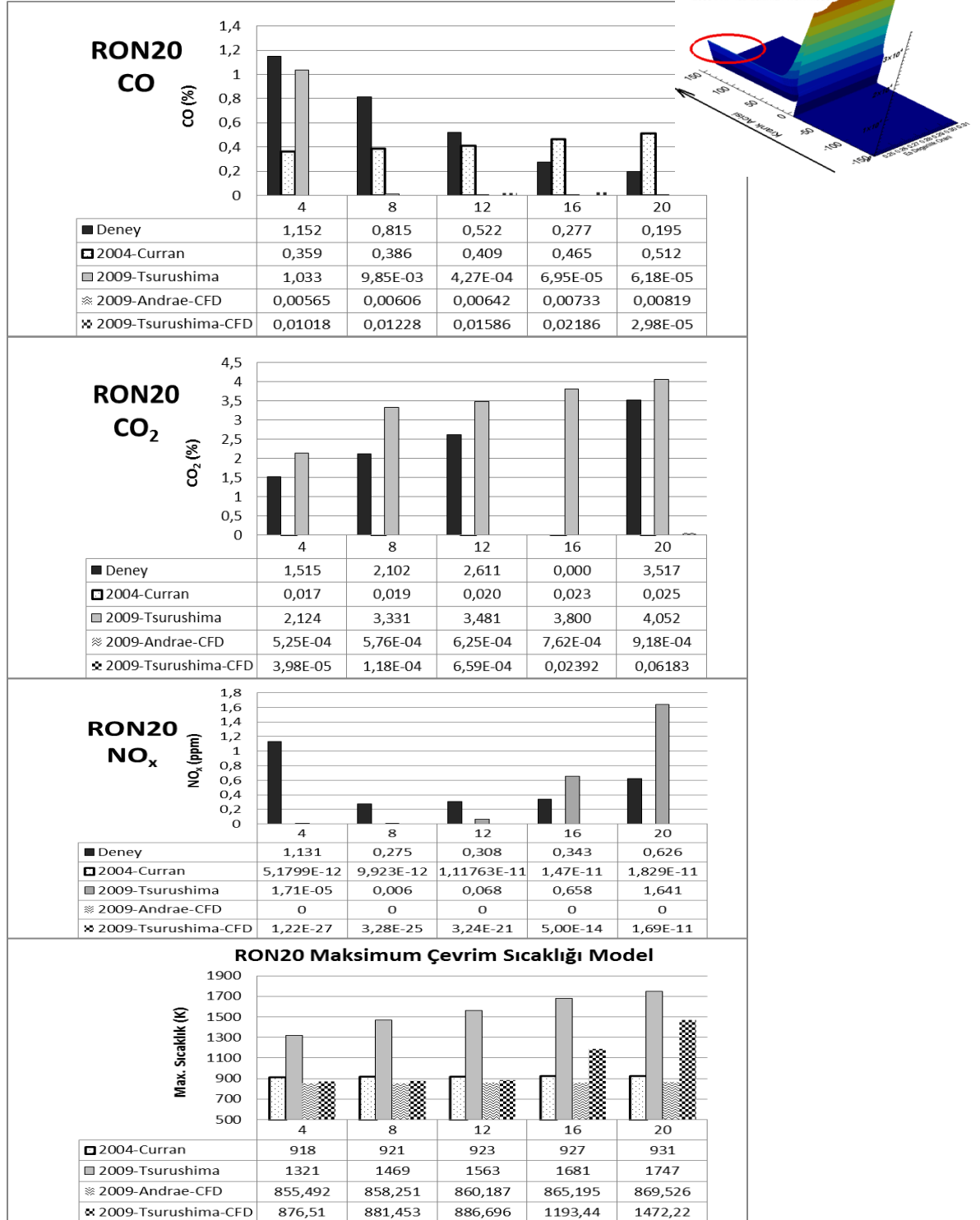
Şekil E.10. RON40 yakıtı için deney, Andrae ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması

EK-12. (Devam) CFD model sonuçları



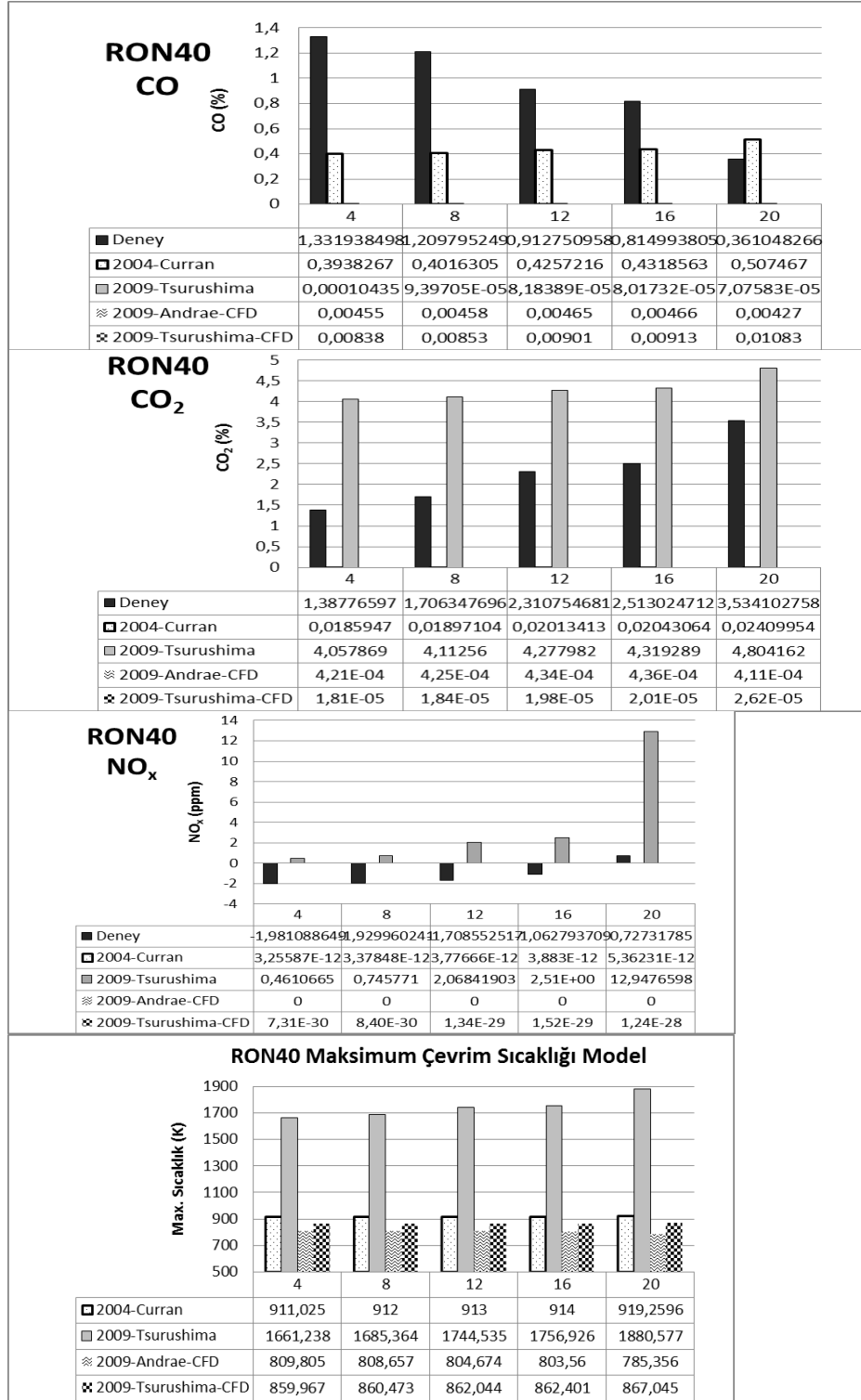
Şekil E.11. RON60 yakıtı için deney, Andrae ve Tsurushima PRF modelleri basınç karşılaştırması

EK-13. Tek bölge ve CFD model sonuçları



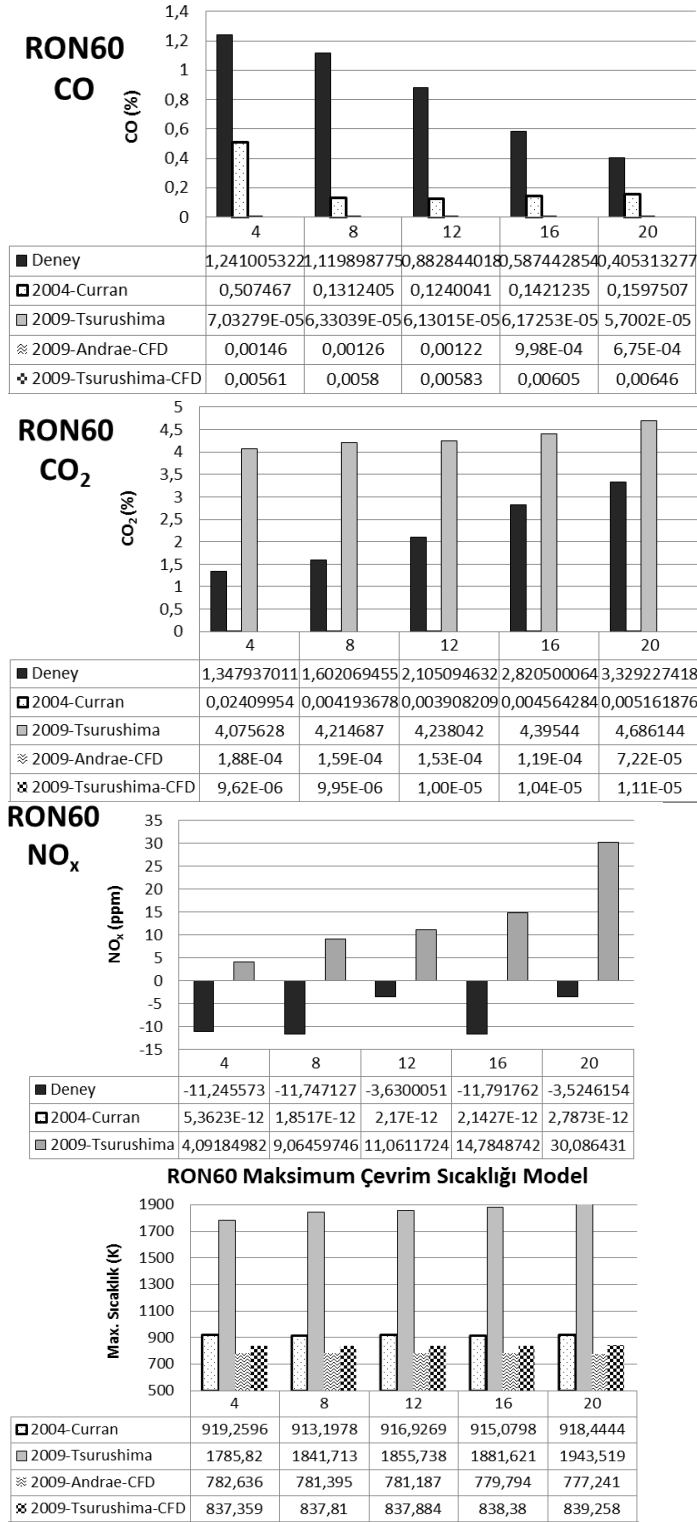
Şekil E.12. RON20 yakıtı için deney, Curran, Tsurushima ve Andrae reaksiyon mekanizmalı tek bölge ve CFD modelleri emisyon karşılaştırması

EK-13. (Devam) Tek bölge ve CFD model sonuçları



Şekil E.13. RON40 yakıtı için deney, Curran, Tsurushima ve Andrae reaksiyon mekanizmalı tek bölge ve CFD modelleri emisyon karşılaştırması

EK-13. (Devam) Tek bölge ve CFD model sonuçları



Şekil E.14. RON60 yakıtı için deney, Curran, Tsurushima ve Andrae reaksiyon mekanizmalı tek bölge ve CFD modelleri emisyon karşılaştırması

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : BAYDIR, Şükrü Ayhan
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 11.04.1980 Eskişehir
 Medeni hali : Bekar
 Telefon : 0 (505) 516 75 14
 Faks : -
 e-mail : ayhan515@yahoo.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Makine Eğitimi Bölümü	2005
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Makine Eğitimi Bölümü	2002
Lise	Eskişehir Motor Meslek Lisesi	1997

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
-----	-----	-------

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

Hobiler

Bilgisayar teknolojileri