

Investigation of Performance Combustion Simulation Software for Modelling HCCI Engine

^{1,*} Usame Demir, ¹Hakan S. Soyhan

^{*1}Faculty of Engineering, Department of Mechanical Engineering Sakarya University, Turkey

Abstract

In this study, Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engine run on Toluene Reference Fuel (TRF) (% 79 toluene ve % 21 n-heptane) combustion simulation was performed. Zero-dimensional (0-D) commercial software is SRM Suite, which is capable of internal combustion engine simulation. The other simulation software is Ansys-Fluent, which is also commercial and three-dimensional (3-D) simulation software. The performance of two-simulation software was evaluated. Chemical kinetic mechanism developed by Machrafi et. al, which contains 49 components and 62 reactions were used to simulate the combustion of the TRF fuel. Both software simulation results evaluated in terms of in-cylinder pressure change, heat release rate and emission and compatibility with the experimental data was examined. Comparisons output of simulation, the chemical kinetic mechanism where the impact on the results, but in general it is seen that results of both software compatible with the experimental data.

Key words: Combustion Simulation Software, Chemical Kinetic Mechanism, HCCI Engine

Yanma Simülasyonu Yazılımlarının HCCI Motorunun Modellenmesindeki Performanslarının İncelenmesi

Özet

Bu çalışmada Toluene Referans Yakıtı (TRY) (% 79 toluene ve % 21 n-heptan) ile test edilmiş homojen dolgulu sıkıştırma ile ateşlemeli (HCCI) motorunun yanma simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Yanma simülasyonu için sıfır boyutlu (0-B) Stokastik Reaktor Model (SRM) mantığı ile motor yanması analizleri yapabilen ticari bir yazılım olan SRM Suit ve üç boyutlu (3-B) yazılım için ise yine ticari bir yazılım olan Ansys-Fluent programları kullanılarak simülasyon performansı incelenmiştir. TRY yakıtının silindir içi yanma analizinin yapılabilmesi için Machrafi vd. tarafından geliştirilen 49 bileşen ve 62 reaksiyon içeren kimyasal kinetik mekanizma kullanılmıştır. Her iki yazılım ile yapılan simülasyonlar silindir içi basınç değişimi, ısı yayılım oranı ve emisyonlar açısından değerlendirilmiş ve deneysel veriler ile olan tutarlılıkları incelenmiştir. Karşılaştırmalar sonucunda kimyasal kinetik mekanizmanın da sonuçlara etkisinin olduğu fakat genel olarak deneysel sonuç ile her iki yazılımın uyumlu sonuçlar verdiği görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Yanma Simülasyon Yazılımı, Kimyasal Kinetik Mekanizma, HCCI Motor

1. Giriş

Günümüzde; çevre kirliliğinin en önemli etkeni olarak görülen araçlara getirilen emisyon kısıtlamaları nedeniyle otomotiv sektörünün her geçen gün içten yanmalı motor teknolojisini yenileme çalışmaları artmaktadır. Bu sebeple her firma ciddi yatırımlar yapmaktadır. Test düzeneklerinin kurulması için ciddi rakamlar harcanmaktadır. İçten yanmalı motor teknolojisinin gelişmesinin hızlanması ise bilgisayar ortamında yapılabilen simülasyonlar sayesinde hem zaman hem de maliyetten kazanç sağlamıştır. İçten yanmalı motor simülasyonu yapabilen bir çok yazılım geliştirilmekte veya var olan yazılımların güncelleme çalışmaları yapılmaktadır. Zamana bağlı olmayan, sabit yanma şartlarına sahip analizlerde sıfır boyutlu çözümler ile yüksek karbonlu yakıtlar için detaylı kimyasal mekanizmalar kullanılarak çözüm yapmak günümüz bilgisayar ile dakika mertebesine kadar indirgenmiştir [1] .

Yanma analizi yapan programlar genel olarak 3 gruba ayrılır. Bunlar Sıfır Boyutlu, Bir boyutlu ve çok boyutlu olarak isimlendirilir.

Son yıllarda geliştirilen, sıfır boyutlu yanma analizi yapabilen yazılımlara, içten yanmalı motorları doğru ve efektif olarak simule edebilme kabiliyeti kazandırılmaya çalışılmaktadır. Bu yazılımlardan biri olan SRM Suite [2] asıl geliştirilme amacı olan içten yanmalı motorlarda yanma ve emisyon analizlerini, stokastik çözüm metodu kullanarak yapabilmektedir. Stokastik çözüm denklemleri sayesinde yapılan içten yanmalı motor analizlerine göreceli olarak boyut kazandırmaktadır. Yazılımın güvenilirliğini ve kabiliyetini inceleyen birçok yayın literatürde bulunmaktadır. Farklı motor konseptleri ve yanma koşullarında SRM yazılımının kullanılabilirliğini tespit etmek için yapılan çalışmalardan bazıları; manifolddan yakıt püskürtmeli HCCI motor modellemesi [3, 4, 5], alternatif yakıt karışımlarının motor yanmasına etkilerinin modellenmesi [6, 7], erken ve tek enjeksiyonlu HCCI motor modellemesi [8], çift püskürtmeli HCCI motor modellemesi[9, 10], çoklu-çevrimli sürekli olmayan simülasyon ve kontrolü [11, 12, 13], is oluşumu [14] ve CFD programı olan KIVA programı [15] ile ortak çalışarak yanma analizleri gerçekleştirmişlerdir.

Yapılan bu çalışmada deneysel olarak HCCI motorda test edilen alternatif yakıt çalışmasının, motor içi yanma modellemesi gerçekleştiren iki farklı yazılımın performanslarının kıyaslanması amaçlanarak 4 farklı hava fazlalık katsayısı (HFK) durumundaki deneysel ve modelleme sonucu elde edilen veriler kıyaslanmıştır.

2. Deneysel Ve Modelleme Parametreleri

Çalışmada temel alınan deneysel veriler, SHELL İngiltere Araştırma Enstitüsünde yapılan HCCI motorun yanma performansını araştırmak için özel olarak tasarlanan tek silindirik, 4 valfli, eğimli çatılı silindir kafasına sahip deneysel Ricardo Hydra motorunda yapılan deneyler sonucunda elde edilmiştir[16]. Motor özellikleri Tablo 1’de ayrıntılı olarak verilmiştir. Deneysel kurulumda HCCI şartlarını yakalayabilmek için piston tepesi yükseltılarak sıkıştırma oranı 14.04 değerine getirilmiş ve silindir içine giriş sıcaklık değeri ise 80 °C ve silindire alınan havanın basıncı da 2

bar'a yükseltilmiştir. Yapılan deneysel çalışmada emme manifoldundan silindir içine giren havanın basıncı 2 bar ve HFK değerleri ise değiştirilerek ön karışım odasında hava yakıt karışımı hazırlanmıştır.

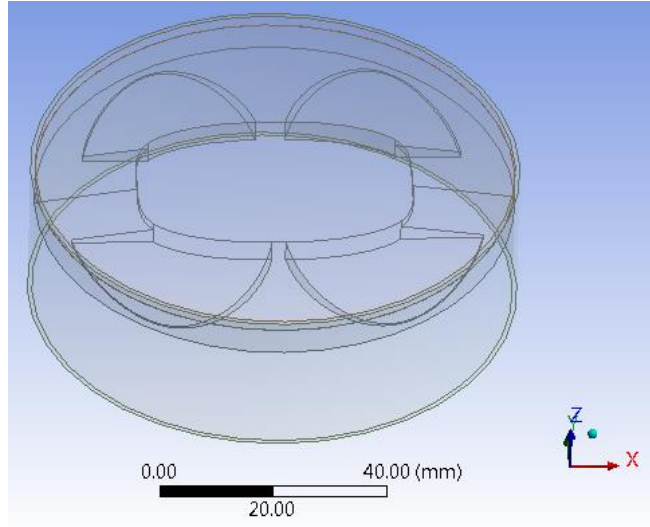
Tablo 1. Motor parametreleri

Parametre	Değer	Birim
Silindir çapı	86	mm
Strok	86	mm
Biyel kolu uzunluğu	143.5	mm
Sıkıştırma oranı	14.04	-
Motor devri	1200	dev/dak
Toplam valf sayısı	4	-
Emme valfi açılma zamanı	340 BTDC	⁰ KMA
Emme valfi kapanma zamanı	108 BTDC	⁰ KMA
Egzoz valfi açılma zamanı	120 ATDC	⁰ KMA
Egzoz valfi kapanma zamanı	332 ATDC	⁰ KMA

Deneysel çalışmada Toluene referans yakıt (TRF-79) karışımı %79 toluene/%21 n-heptan test edilmiştir. TRF yakıtın yanmasını temsil edebilmek için Machrafi ve diğ. tarafından geliştirilen 49 bileşen ve 62 reaksiyon içeren TRF kimyasal kinetik mekanizması kullanılmıştır[17].

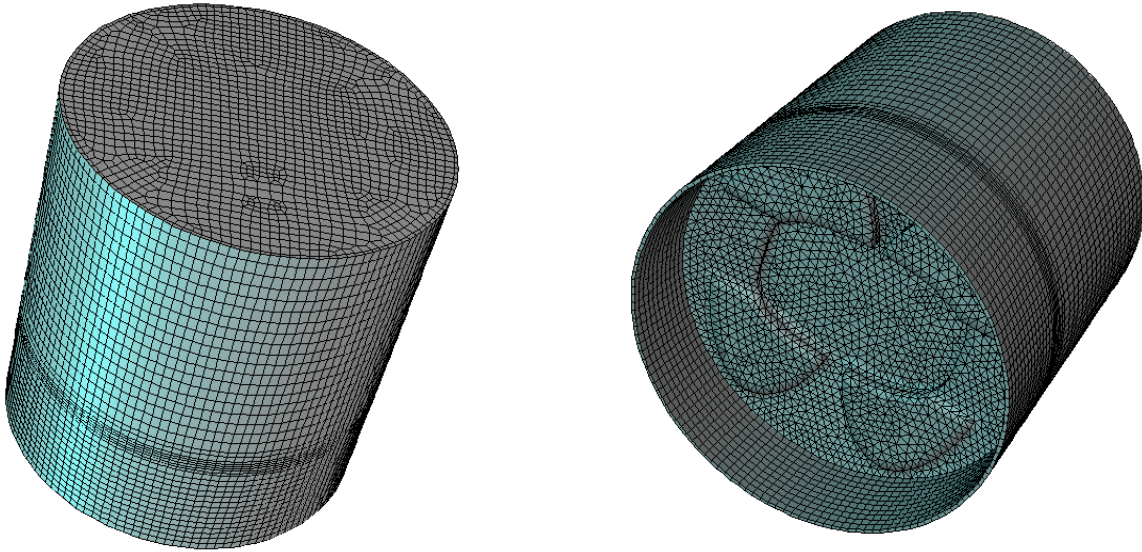
SRM yazılımında analizler yukarıdaki tablodaki deneysel şartlarla aynı olacak şekilde analizler gerçekleştirilmiştir. SRM yazılımında gerçekleştirilen analizler emme valfi kapanma zamanından (EVK) egzoz valfi açılma (EVA) zamanına kadar sürdürülmüştür. Başlangıç koşulları olarak emme valfi kapanma (EVK) zamanındaki basınç ve sıcaklık değerleri kullanılmıştır. Deneysel şartlardaki yakıt karışımı kütleli olduğu için SRM yazılımında da aynı oranda girilmiştir. Stokastik partikül miktarı ise 300 partikül olarak ayarlanmıştır. Çözüm için adım aralığı 0.1 olarak alınmıştır. Stokastik partikül ağırlığı ise 12 olarak alınmıştır. Türbülans model olarak lokal karışım modeli kullanılmış ve değer olarak 0.005 s olarak alınmıştır. Çeperlerden gerçekleşen ısı transferi için duvar sıcaklığı sabit 430 K olarak alınmıştır. Yapılan çalışma benzer olarak da Ansys-Fluent yazılımına uygulanmıştır.

HAD analizinde kullanılan HCCI motorun silindir içi geometrisi şekilde görülmektedir. 3 boyutlu model Ansys Workbench Design Modeller programı kullanılarak oluşturulmuştur. Gerçek geometrik ölçülerde ve silindir içinin tamamını kapsayacak biçimde modelleme yapılmıştır. CFD analizi emme valfi kapanma zamanından (EVK) egzoz valfi açılma (EVA) zamanına kadar sürdürülmüştür, bu yüzden 3 boyutlu modele valf geometrisi eklenmemiş ve silindir üstü bölgesinin tamamen düz olduğu varsayılmıştır. CFD analizinde başlangıç koşulu olarak yakıtla yanma havasının homojen bir karışım halinde bulunması düşünülmüştür. Silindir ile piston arasında kalan ve crevice olarak isimlendirilen hacimde modele eklenmiştir. Bu bölgede, gerçekte olduğu gibi bir miktar yakıtın yanmadan kalacağı ve analizin gerçekliğini arttırdığı bilinmektedir. Tam modelin oluşturulmasında en büyük etken piston yüzeyinin farklı bir geometrik yapıya sahip olmasıdır. Bu durum analiz süresini ciddi ölçüde arttırsa da analiz sonuçlarının doğruluğu açısından önemlidir.



Şekil 1. Piston yüzeyinin CAD modeldeki görüntüsü

Şekil 1’de modeli hazırlanmış silindir içi geometrisinin ağ yapısı görülmektedir. Ağ yapısı piston üst ölü noktada (ÜON) iken oluşturulmuştur. Daha sonra HAD yazılımında dinamik ağ yapısı oluşturularak piston istenen krank mili açısına çekilebilmektedir. Toplam hücre sayısı piston ÜON da iken 34000 adet ve alt ölü noktada iken 70795 adettir. Model, eğriler ve düzensiz hacimlerden oluştuğu için piston üstü hacminde prizma, diğer hacimler ise dört gensel ve düzenli ağ yapılarına sahiptir. Şekil 2’de farklı açılardan ve kesitlerden bu yapılar görülmektedir. Dinamik modelin düzgün çalışabilmesi için dörtgensel ve düzenli ağ yapısına ihtiyaç duyulmaktadır ve bunu sağlamak için de silindir üstünün hemen altındaki hacme bir sıra olacak şekilde düzenli ağ yapısı katmanı oluşturulmuştur. Oluşturulan bu ağ yapıları çözüm optimizasyonunda dikkate alınarak mümkün olan minimal düzeye çekilmeye çalışılmıştır.

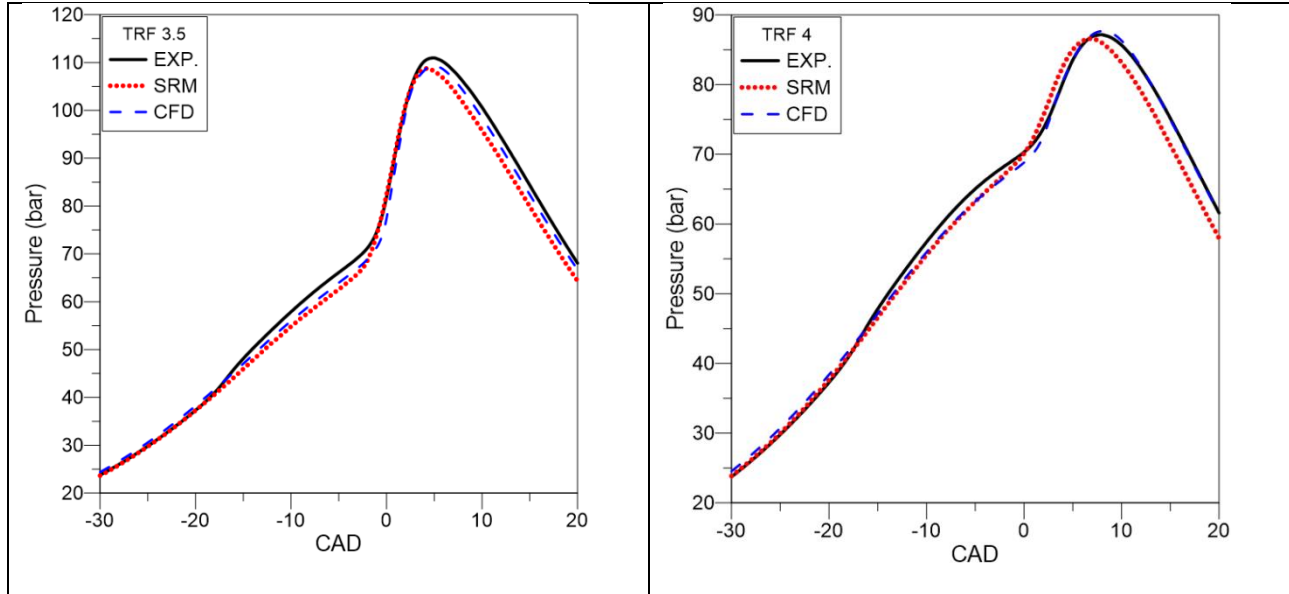


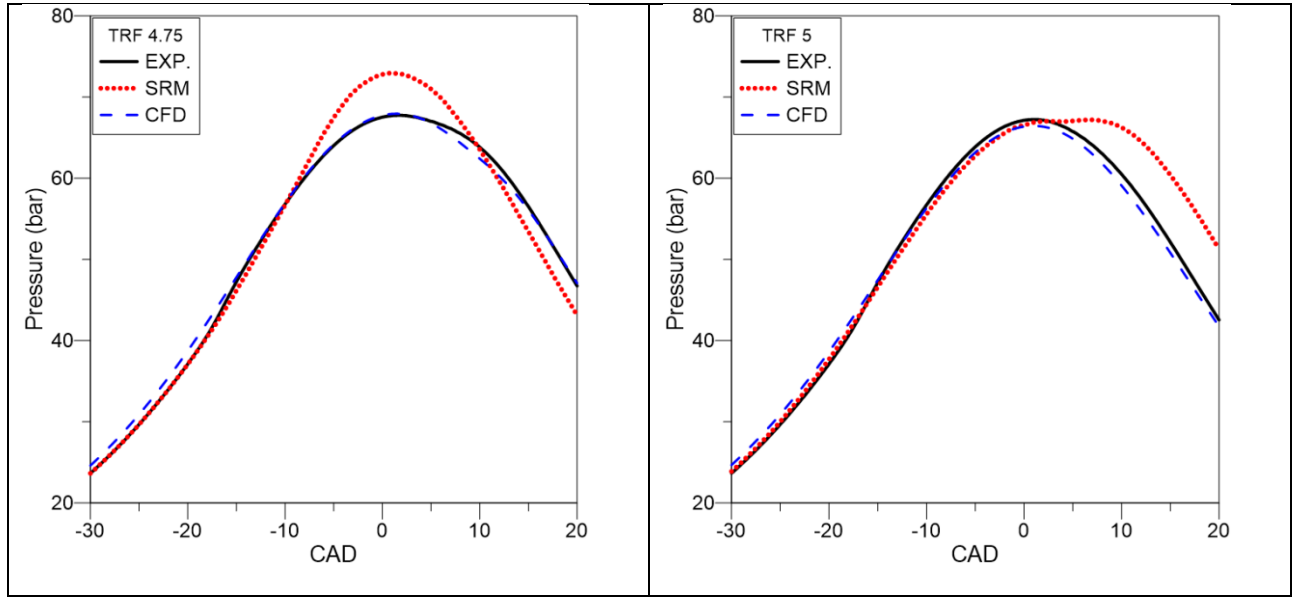
Şekil 2. Piston alt ölü noktada iken oluşturulmuş olan ağ yapısının görüntüsü

3. Sonular

HCCI motorun TRF-79 yakıtı kullanılarak 4 farklı hava fazlalık katsayısı için yapılan analizler ve deneysel olarak ölçülen basın, ısıl yayılım oranı, yanma sonu meydana gelen CO, CO₂ ve O₂ emisyon yüzdeleri kıyaslanmıştır. TRF-79 yakıtı için HFK sırasıyla; 3.5, 4, 4.75, 5 olarak deęerler alınmıştır.

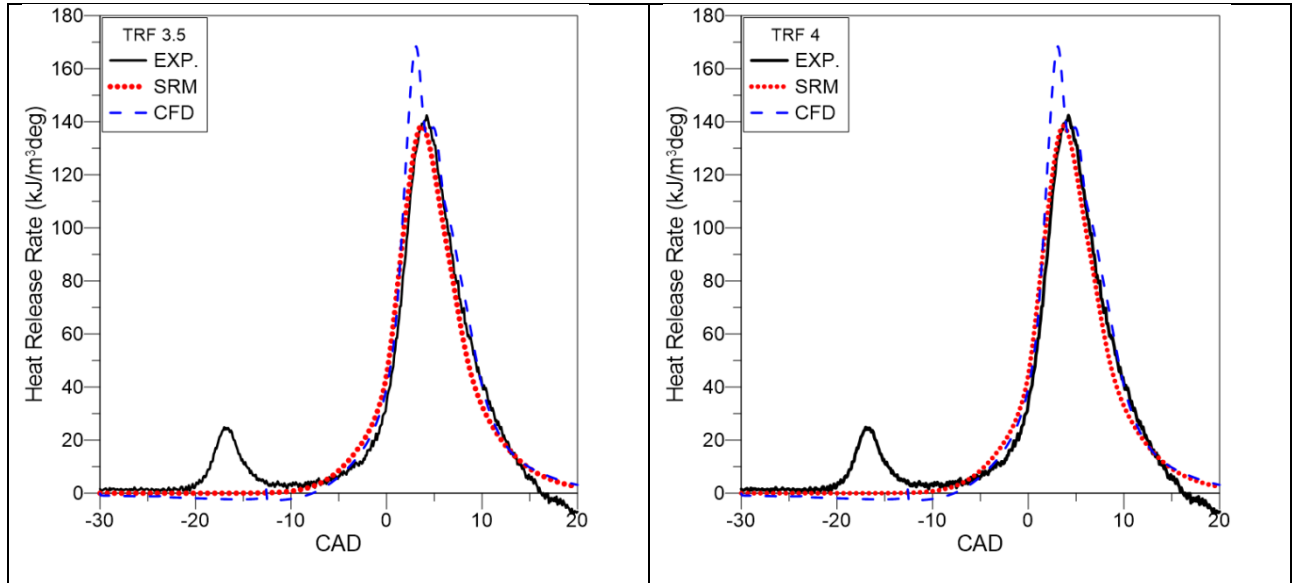
Şekil 3’de TRF-79 yakıtı için 4 farklı HFK deęeri için basın eęrileri mevcuttur. Basın eęrileri incelendięinde HFK 5 ve HFK 4.75 için deneysel basın eęrisinin CFD analizi ile uyumlu olduęu fakat HFK 4.75’de SRM analizinde basının yanmanın erken başlamasından kaynaklı olarak yanma maksimum basınını yüksek ıktıęı görülmektedir.

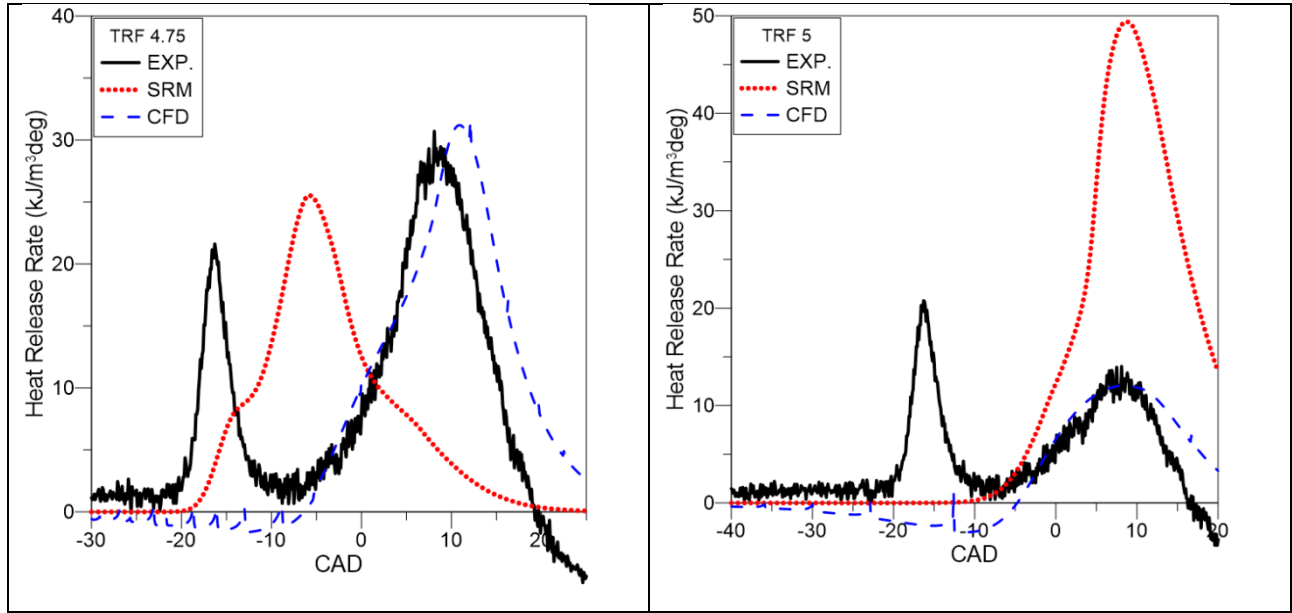




Şekil 3. TRF-79 yakıtı için deneysel ve analiz basınç eğrilerinin karşılaştırılması

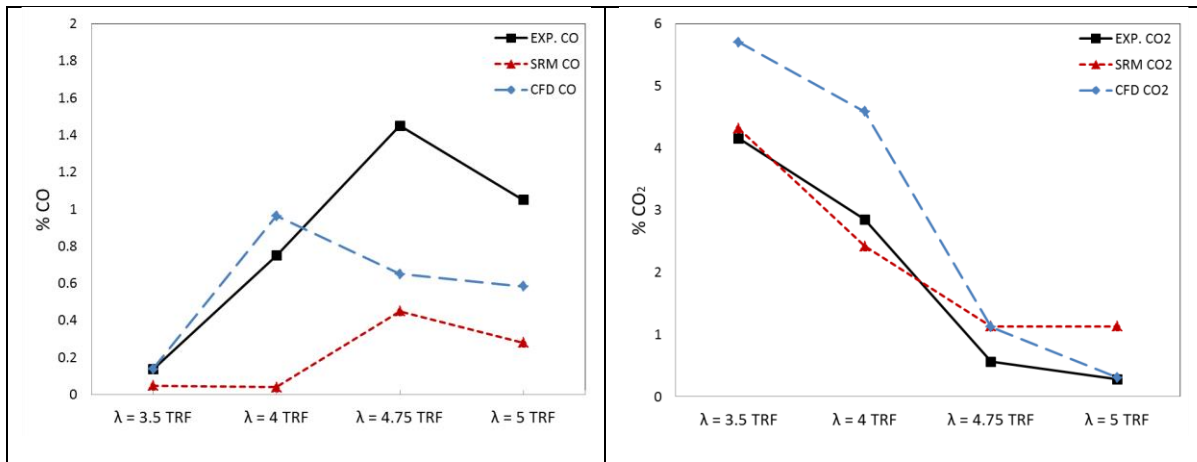
Bunun yanında HFK 5 basınç grafiği incelendiğinde yine SRM basınç eğrisinin yanmanın geç başlaması ve ani gerçekleşmesinden kaynaklı bir son basınç artışı meydana geldiği görülmektedir. Diğer basınç eğrileri incelendiğinde ise deneysel ve analiz sonuçlarının birbiri ile örtüştüğü gözlemlenmiştir.

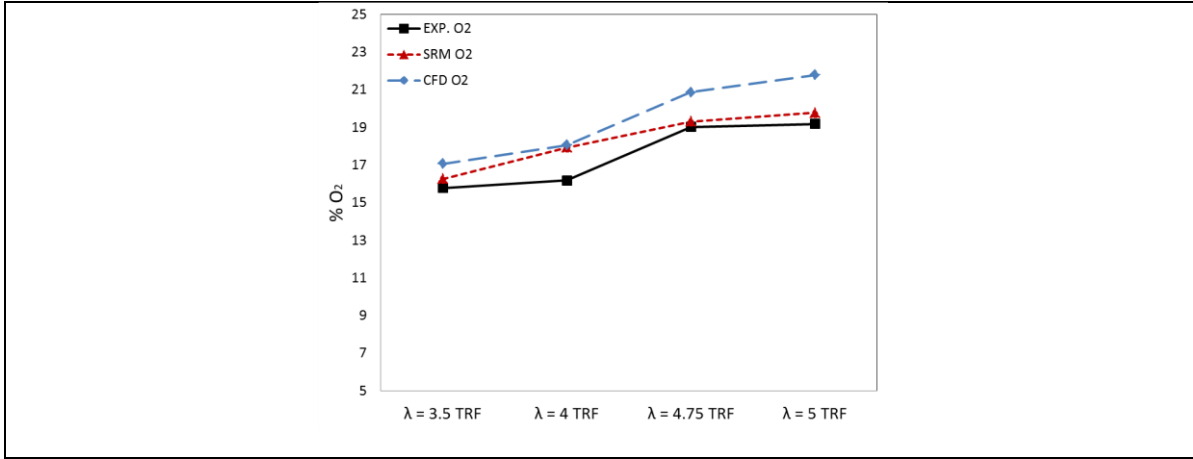




Şekil 4. TRF-79 yakıtı için deneysel ve analiz ısı yayılım oranı eğrilerinin kıyaslanması

Şekil 4’de TRF-79 yakıtı için 4 farklı HFK değeri için ısı yayılım oranı grafikleri mevcuttur. Isıl yayılım oranı grafikleri incelendiğinde 4 farklı HFK için deneysel ısı yayılım oranı grafiklerinde görüldüğü üzere soğuk yanmanın gerçekleşmediği ve bunun mekanizmadan kaynaklandığı düşünülmektedir. Fakat yanmanın olduğu kısımlarda HFK 3.5 ve 4 için deneysel eğriye çok yaklaştığı görülmektedir. HFK 4.75 ve 5 durumu incelendiğinde deneysel verinin CFD analizinin SRM analizine göre daha uyumlu olduğu grafiklerden görülmektedir. SRM analizinde HFK 4.75 için yanmanın erken başlamasından kaynaklı olarak ısı yayılım grafiğinde gözükteği gibi maksimum nokta hem fazla olmuş hem de krank açısı olarak da erken gerçekleştiği maksimum ısı yayılım oranında görülmektedir. SRM analizinde HFK 5 için yanmanın geç başlamasından kaynaklı olarak ısı yayılım grafiğinde gözükteği gibi maksimum nokta hem fazla olmuş hem de krank açısı olarak da geç gerçekleştiği maksimum ısı yayılım oranında görülmektedir.





Şekil 5. TRF-79 yakıtı için deneysel ve analiz CO, CO₂ ve O₂ % değer kıyaslanması

Şekil 5’de TRF-79 yakıtı için 4 farklı HFK değeri için CO, CO₂ ve O₂ yanma sonu ürünlerde yüzdesel değer grafikleri mevcuttur. Emisyon grafikleri incelendiğinde 4 farklı HFK için deneysel veri ile genel olarak aynı trendde olduğu fakat CO emisyonu için HFK 4.75 ve 5 için SRM ve CFD analiz değerlerinin uyumsuz olduğu görülmektedir. Genel trend incelendiğinde HFK artması sonucu karışımın fakirleşmesi nedeniyle CO₂ azalmaya başladığı ve CO emisyonun artmaya başladığı O₂ yanma sonu ürünlerde artış göstermesi yanmanın tam olarak gerçekleşemediği sonucu ortaya çıkmaktadır.

4. Değerlendirme

Yanma sonucu silindir içinde oluşan basınç, ısı yayılım oranı ve yanma sonu ürünlerde bulunan CO, CO₂ ve O₂ yüzdesel değerleri karşılaştırılması yapılmıştır. 4 farklı HFK için SRM ve CFD analizleri ile deneysel ölçüm sonuçları her bir veri için karşılaştırılmalı olarak sunulmuştur.

- HCCI modda motorun yanma verimliliği ve emisyonlarında düşüş beklentisi oluşmuş fakat HFK artması ile karışımın çok fakirleşmesi nedeniyle yanmanın kötüleştiği hem deneylerde hem de analiz sonuçlarında görülmektedir.
- SRM ve CFD analiz sonuçlarının genel olarak uyumlu olduğu fakat HFK artması ile yanma kalitesinin düşmesi sonucu analiz programlarında da deneysel olduğu gibi kötüleşme görülmektedir.
- SRM yazılımının 0-boyutlu yanma analizi yapmasına rağmen deneysel verilere çok yakın sonuçlar verdiği görülmektedir. SRM Suite programı stokastik reaktör model özelliğinden dolayı yani silindir içi hacimde kendi belirlediği noktalara partikül atayarak 3 boyutlu bir programdaki mesh mantığında çalışması nedeniyle deneysel sonuçlara yakın analiz sonuçları verdiği ve CFD analizleri kadar iyi olduğu sonuçlardan görülmektedir.
- SRM yazılımında sınırsız büyüklükte kimyasal mekanizma kullanılabilir olması ve analiz süresinin de CFD analizi yapan yazılımlara göre nispeten kısa sürmesi büyük bir avantajdır. CFD yazılımlarının en büyük avantajı ise görsel veri sunabilmesidir.

- Ayrıca kullanılan kimyasal kinetik mekanizmanın soğuk yanma diye tabir edilen ve hidrojen per oksit ile hidroksil grubu bileşenlerin önemli göstergesinin mekanizmada çok da iyi olmadığı görülmüştür.

Kaynaklar

[1] J.C.G. Andrae, T. Brinck, G.T. Kalghatgi; (2008) "HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semidetailed chemical kinetic model" Vol. 155, Issue 4, pp: 696–712

[2] <http://www.cmclinnovations.com/> da bulunabilir. Erişim Tarihi: 22.01.2015.

[3] Kraft, M., Maigaard, P., Mauss, F., Christensen, M., and Johansson, B. "Investigation of combustion emissions in a homogeneous charge compression injection engine: Measurements and a new computational model" Proceedings of the Combustion Institute, 28:1195–1201, 2000.

[4] Demir, U; Yilmaz, N.; Coskun, G.; Soyhan, H. S., "Evaluation of zero dimensional codes in simulating IC engines using primary reference fuel ", Applied Thermal Engineering, Volume: 76 Pages: 18-24 Published: FEB 5 2015

[5] Maigaard P, Mauss F, Kraft M, "Homogeneous charge compression ignition engine: A simulation study on the effects of inhomogeneities" Journal of Engineering for Gas Turbines and Power: Transactions of the ASME Volume: 125 Issue: 2 Pages: 466-471 April, 2003.

[6] A. N. Bhave, M. Balthasar, M. Kraft and F. Mauss, Analysis of a Natural Gas Fuelled HCCI Engine with Exhaust Gas Recirculation Using a Stochastic Reactor Model, Int. J. Engine Res., Vol. 5, No. 1, pp. 93- 104, 2004.

[7] Mosbach, S. M. Kraft, A. Bhave, F. Mauss, J. H. Mack, and R. W. Dibble. Simulating a homogenous charge compression ignition engine fuelled with a DEE/EtOH blend. SAE Paper No. 2006-01-1362, 2006.

[8] H. Su, A. Vikhansky, S. Mosbach, M. Kraft, A. Bhave, K.-O. Kim, T. Kobayashi, and F. Mauss. A computational study of an HCCI engine with direct injection during gas exchange. Combustion and Flame, 147(1-2):118-132, 2006.

[9] Turkcan, A.; Ozsezen, A. N.; Canakci, M.; Coskun, G.; Soyhan, H. S.; Demir, U., "An Experimental And Modeling Study To Investigate Effects Of Two-Stage Direct Injection Variations On HCCI Combustion" Combustion Science And Technology Volume: 187 Issue: 4 Pages: 642-658 Published: 2015.

-
- [10] S. Mosbach, H. Su, M. Kraft, A. Bhave, F. Mauss, Z. Wang, and J.-X. Wang. Dual injection HCCI engine simulation using a stochastic reactor model. *International Journal of Engine Research*, 8(1):41-50, 2007.
- [11] A. M. Aldawood, S. Mosbach, and M. Kraft. HCCI combustion phasing transient control by hydrogen-rich gas: Investigation using a fast detailed-chemistry full-cycle model. SAE Paper No. 2009-01-1134, 2009.
- [12] J. E. Etheridge, S. Mosbach, M. Kraft, H. Wu, and N. Collings. A detailed chemistry multi-cycle simulation of a gasoline fueled HCCI engine operated with NVO. SAE Paper No. 2009-01-0130, 2009.
- [13] S. Mosbach, A. M. Aldawood, and M. Kraft. Real-time evaluation of a detailed chemistry HCCI engine model using a tabulation technique. *Combustion Science and Technology*, 180(7):1263-1277, 2008.
- [14] S. Mosbach, M. S. Celnik, A. Raj, M. Kraft, H. R. Zhang, S. Kubo, and K.-O. Kim. Towards a detailed soot model for internal combustion engines. *Combustion and Flame*, 156(6):1156-1165, 2009.
- [15] L. Cao, H. Su, S. Mosbach, M. Kraft, and A. Bhave. Studying the influence of direct injection on PCCI combustion and emissions at engine idle condition using two dimensional CFD and stochastic reactor model. SAE Paper No. 2008-01-0021, 2008.
- [16] Yasar H., Soyhan, H.S., Walmsley H., Head B. and Sorousbay C., "Double-Wiebe function: An approach for single-zone HCCI engine modeling", *Applied Thermal Engineering*, Volume 28, Issues 11-12, Pages 1284-1290, 2008.
- [17] H. Machrafi, S. Cavadias, J. Amouroux; (2009) , "The development and experimental validation of a reduced ternary kinetic mechanism for the auto-ignition at HCCI conditions, proposing a global reaction path for ternary gasoline surrogates", *Fuel Processing Technology* Vol. 90 pp:247 – 263.