

پیش بینی شروع مرحله‌ی دوم احتراق در موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن توسط الگوی سینتیک شیمیایی کاهش یافته

رحیم ابراهیمی¹

شهر کرد- دانشگاه شهر کرد - کیلومتر 2 جاده سامان - صندوق پستی 115
Rahim.Ebrahimi@gmail.com

چکیده

در این مقاله، الگوی شل و الگوی هو و کک به جهت قابلیت استفاده در سیستم کنترل موتور برای پیش بینی شروع احتراق پیشنهاد و مقایسه شدند. نتایج نشان می‌دهد که زمان شروع مرحله‌ی اول احتراق توسط الگوی شل بهتر از الگوی هو و کک پیش بینی می‌شود. این می‌تواند بخاطر حساسیت کم الگوی شل به خطای درجه حرارت و فشار بدست آمده در شروع مرحله‌ی تراکم چرخه‌ی موتور باشد. اما الگوی هو و کک پیش بینی بهتری در زمان شروع مرحله‌ی دوم احتراق به علت دارا بودن تعداد بیشتر گونه و واکنش دارد. نظر به اینکه رابطه‌ی بین مرحله‌ی اول و دوم احتراق با نسبت هم‌ارزی نسبتاً خطی است، توسط پیش بینی مرحله‌ی اول احتراق در رابطه‌ی شل می‌توان مرحله‌ی دوم احتراق را با دقتی بالاتر از الگوی هو و کک پیش بینی نمود.

واژه‌های کلیدی: موتور - شروع احتراق - الگوی هو و کک - الگوی شل

1- مقدمه

موتور دیزل و اشتعال جرقه‌ای دو موتور سنتی احتراق داخلی هستند که بیش از یک قرن بدون هیچ تغییر اساسی با سوخته‌های فسیلی (به طور معمول گازوییل و بنزین) در زندگی روزمره‌ی ما نفوذ کرده‌اند. اما به دلیل کاهش مقدار و افزایش قیمت سوخته‌های فسیلی و همچنین مسئله‌ی آلودگی باید راه چاره اساسی برای موتورهای احتراق داخلی اندیشید. برای برخورد با این مشکلات دو راه اصلی به نظر می‌رسد. اولین راه، اصلاح موتورهای سنتی است که می‌توان به زمانبندی متغیر سوپاپها (Variable valve timing)، افزایش تعداد دریچه‌ها برای هر استوانه، استفاده از میل بادامک روی دریچه‌ها، افزایش تعداد شمعها در محفظه‌ی احتراق، استفاده از واکنشگرها، استفاده از تزریق مستقیم سوخت (Direct fuel injection)، بهبود سوخته‌های سنتی و بهره‌برداری از سوخته‌های جایگزین همچون متانول، اتانول و گاز طبیعی اشاره کرد. هر کدام از این روشها به نوبه خود در کاهش مصرف سوخت و آلودگی موثر می‌باشند. حسن این روشها این است که اعمال هر کدام از آنها هزینه‌ی بسیار کمتری را نسبت به طراحی موتور از پایه دارند. راه دومی را که می‌توان برای بهبود عملکرد موتورهای احتراق داخلی در نظر گرفت تغییر فرایند احتراق از پایه می‌باشد. در این مورد می‌توان به موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن (Homogeneous Charge Compression Ignition= HCCI) که برای اولین بار توسط اونیشی و همکاران [1] مطرح گردیده است، به عنوان یک ایده‌ی مناسب اشاره کرد. به عنوان مزیت اصلی این نوع موتور می‌توان به مقدار پایین اکسیدهای نیتروژن و ذرات معلق، راندمان بالا و همچنین قابلیت استفاده از انواع مختلف سوخته‌ها (بنزین، گازوییل، گاز طبیعی و هیدروژن...) به

شرط تنظیم دقیق پارامترهای موتور اشاره کرد. روش احتراق در این موتورها به این طریق است که مخلوط هوا و سوخت مانند مخلوط هوا و سوخت در موتورهای اشتعال جرقه‌ای همگن تشکیل شده اما شروع اشتعال مانند موتورهای اشتعال تراکمی است. بنابراین احتراق مخلوط همگن توسط فرایند سینتیک شیمیایی انجام شده و هیچ نوع وسیله‌ای جهت کنترل زمان احتراق چنانچه در موتورهای اشتعال جرقه‌ای و دیزل وجود دارد دیده نمی‌شود. یادآوری می‌گردد که زمان احتراق در موتورهای اشتعال جرقه‌ای توسط شمع و در موتورهای دیزل توسط زمان پاشش سوخت کنترل می‌گردد. بنابراین کنترل زمان احتراق در این نوع موتورها مشکل اساسی آنها در روند تجاری شدن می‌باشد. به این دلایل تخمین زمان احتراق جهت کنترل آن از اصلی‌ترین دغدغه‌ی محققین در این راه است. برای این منظور آنها الگوهای جهت اکسید شدن سوخت برای تعیین زمان احتراق ارائه داده‌اند. این الگوها را می‌توان به سه دسته کلی تقسیم بندی نمود. اولین دسته که شامل الگوهای تجربی است بدون اینکه به واکنشهای اولیه سوخت و اکسید کننده احتیاج باشد زمان خود اشتعالی را تعیین می‌کند. معروفترین الگوی این دسته توسط لیونگود و همکاران [2] که به الگوی انتگرال کوپش معروف می‌باشد ارائه شده است. الگوی دسته دوم به الگوی سینتیک شیمیایی کاهش یافته (Reduced chemical kinetic model) معروف می‌باشد که فقط واکنشهای غالب و اساسی در اکسایش را در بر می‌گیرد. الگوی دسته سوم شامل الگوی سینتیک شیمیایی تفصیلی (Detailed chemical kinetic model) است. الگوهای دسته دوم دقت نسبتاً پایینی دارند، اما به دلیل سادگی و سریع بودن آن هنوز هم مورد استفاده می‌باشند. همچنین این الگوها به دلیل دقت مناسب و زمان کوتاه، برای همگام شدن با الگوهای محاسبات دینامیک سیالات که زمان اجرای طولانی دارند مورد توجه قرار می‌گیرند. از الگوهای این دسته، الگوی شل (Shell) و الگوی هو و کک (Hu and Keck) بیشتر از دیگر الگوها مورد استفاده محققین قرار گرفته شده است. به این علت، این دو الگو برای این تحقیق انتخاب شدند. الگوی دسته سوم که الگوی سینتیک شیمیایی تفصیلی نامیده می‌شود، بازه کاربردی آن بستگی به توانایی و کامل بودن واکنشها دارد. برای مثال در سال 2002 الگوی کوران [3] برای ایزواکتان شامل 860 گونه و 3600 واکنش می‌باشد. بنابراین الگوهای دسته سوم بخاطر تعداد زیاد گونه‌ها و واکنشهای موجود قادرند علاوه بر تاخیر اشتعال، آلودگی را نیز پیش بینی کنند. در هر حال به دلیل طولانی بودن زمان اجرای محاسبات فقط زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرند که بررسی مواد آلوده کننده ارجحیت داشته باشد که در این تحقیق در اولویت قرار ندارد.

در ادامه‌ی مقدمه به بررسی کارهای انجام شده توسط دیگر محققین پرداخته می‌شود. آگینگ [4] با الگوی سینتیک شیمیایی فشار داخل سیلندر موتور را به روش یک منطقه‌ای و چند منطقه‌ای برای سوخت دیزل مدل کرد. برای اینکه تطابق قابل قبولی بین مدل و داده‌های اندازه‌گیری وجود داشته باشد مدل سینتیکی جدیدی برای اجزاء سوخت دیزل ارائه شد. در نهایت تطابق قابل قبولی بین مدل معرفی شده با داده‌های تجربی بوجود آمد. بنگتسون [5] یک موتور مجهز به توربو شارژ، خنک کننده‌ی گازهای بازخورانی و خنک کننده‌ی مخلوط ورودی به داخل سیلندر را به عنوان موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن در نظر گرفت. همچنین بر روی این موتور او قادر به اندازه‌گیری پارامترهای چون فشار داخل سیلندر، درجه حرارت مخلوط ورودی بود. بنگتسون به کمک الگوی شل همراه با روش کنترل PID (Proportional Integral Derivative) و پارامترهای اندازه‌گیری شده کارکرد دینامیکی موتور را کنترل نمود. در آخر نتیجه گرفته که کنترل قابل قبولی در سرعت و فشارموتور متوسط اندیکاتوری پایین را می‌توان در موتور برقرار کرد. هی و همکاران [6] از روشی که پایه‌ی آن بر مبنای رابطه‌ی آرنیوس (Arrhenius) می‌باشد جهت پیش بینی زمان خود اشتعالی برای سوخت ایزواکتان استفاده نمودند. در آخر یک رابطه‌ی ساده جهت پیش بینی زمان خود اشتعالی همراه با جزئیات مرتبط معرفی شد. سویلو [7] یک روش جدید را برای مدل کردن احتراق در یک موتور بنزینی با سوخت گاز طبیعی ارائه کرد. اساس این روش بر مبنای الگوی انتگرال کوپش می‌باشد که بر حسب نسبت هم‌ارزی و پروپان موجود در گاز طبیعی معرفی گردید. آنها همچنین با استفاده از این فرمول به روش‌های یک منطقه‌ی و دو منطقه‌ی فشار داخل سیلندر را به خوبی مدل کردند

در این تحقیق، هدف اصلی در ابتدا پیش بینی زمان شروع احتراق در موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن به کمک الگوی شل و الگوی هو و کک می‌باشد. در مرحله‌ی بعد، هر یک از این الگوها بررسی شده و پس از مقایسه بهترین الگو پیشنهاد شده است.

2- الگوهای سینتیک شیمیایی کاهش یافته‌ی سوخت

کوبش و احتراق خود به خودی از نیمه‌ی دوم قرن گذشته مورد توجه محققان بوده است و در آن راستا اکسید شدن سوخته‌های مختلف بررسی و الگوهایی نیز استخراج شده است. الگوی شل و الگوی هو و کک نیز جزء الگوهای سینتیک شیمیایی کاهش یافته می‌باشند که برای پیش بینی زمان خوداشتعالی تهیه شده است. این دو الگو به دلیل پایین بودن واکنش‌های موجود در آن، سادگی و سریع بودن کاربردشان، قابل استفاده بودن آنها در انواع مختلف هیدرو کربن‌های موجود، استفاده‌ی زیاد آنها توسط دیگر محققین و دقت مناسب و زمان کوتاه برای همگام شدن با الگوی محاسبات دینامیک سیالات (Computation fluid dynamics) که زمان اجرای طولانی دارد از بین الگوهای سینتیک شیمیایی سوخت انتخاب شدند. [10, 9]

2-1- الگوی شل

در این مدل واکنش‌های شیمیایی به هشت زنجیره واکنشی کاهش یافته است. این زنجیره‌های واکنشی در چهار مرحله که به ترتیب عبارتند از مرحله آغازین، انتشار، انشعاب و پایانی دسته بندی شده‌اند. [11, 12]

مرحله‌ی آغازین :



مرحله‌ی انتشار :



مرحله‌ی انشعاب :



مرحله‌ی پایانی :



که در آن RH هیدروکربن سوخت، R^* معرف رادیکال‌های ایجاد شده در روند احتراق، B معرف عامل انشعاب، Q معرف عامل واسطه و P معرف تولیدات احتراق که محصولات CO ، CO_2 و H_2O است می‌باشد. مرحله‌ی انشعاب به واسطه‌ی هیدروپروکسید ($Hydroperoxide=RO_2H$) در درجه حرارت پایین و به واسطه پیروکسید هیدروژن ($Hydrogen\ peroxide=H_2O_2$) در درجه حرارت بالا ظاهر می‌شود. گونه‌های واسطه‌ی تولیدی در این مرحله به طور عموم به آلدئیدهای ($Aldehydes=RCHO$) تولیدی در فرایند اکسیداسیون سوخت مرتبط می‌باشد [13]. در حالت کلی فرض اصلی الگوی شل، بر ثابت بودن مقدار رادیکال تولیدی R^* در سامانه‌ی پیشنهادی است. در واقع، به طور کلی R^* به رادیکال‌های مختلف تولیدی در واکنش اشاره می‌کند.

تغییرات تمرکز گونه‌های موجود در الگوی شل به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{d[R^*]}{dt} = 2(k_q[RH][O_2] + k_B[B] - k_t[R^*]^2) - f_3 k_p[R^*] \quad (9)$$

$$\frac{d[B]}{dt} = f_1 k_p[R^*] + f_2 k_p[Q][R^*] - k_B[B] \quad (10)$$

$$\frac{d[Q]}{dt} = f_4 k_p[R^*] - f_2 k_p[Q][R^*] \quad (11)$$

$$\frac{d[O_2]}{dt} = -p k_p[R^*] \quad (12)$$

$$[RH] = \frac{[O_2] - [O_2](t=0)}{pm} + [RH](t=0) \quad (13)$$

در آنجا $[M]$ معرف تمرکز مول از انواع مختلف گونه‌ی M می‌باشد. مقادیر ثابت واکنشهای الگوی شل به همراه حل معادله‌ی غیر خطی استخراج شده از آن را می‌توان در مرجع شماره‌ی [14] مشاهده نمود.

2-2- الگوی هو و کک

نظر به قدمت الگوی هو و کک که به سال 1967 برمی‌گردد [15]، این الگو در حال حاضر نیز مورد استفاده و بازبینی قرار می‌گیرد [13، 16]. الگو دارای 13 گونه‌ی فعال شیمیایی و 18 واکنش می‌باشد که می‌توان در جدول (1) مشاهده نمود. فرآیند اکسیداسیون در این الگو با جذب هیدروژن (H) از سوخت هیدروکربن اشباع شده (RH)، در جهت تشکیل رادیکال آلکیل (R^*) و رادیکال هیدروپروکسید (HO_2^*) در درجه حرارت پایین شروع می‌شود.



مرحله‌ی اصلی انتشار و انشعاب برای اکسیداسیون آلکان (Alkanes) با تعداد کربن بزرگتر و برابر 4 در زیر به ترتیب واکنش ارائه خواهد شد. اتصال بازگشت‌پذیر O_2 با رادیکال آلکیل به تولید رادیکال پروکسید آلکیل (Peroxy alkyl radical= RO_2^*) می‌انجامد. واکنش بعدی ایزومر شدن RO_2^* را نشان می‌دهد، که در آن واکنش جذب یک اکسیژن داخلی منجر به تولید رادیکال آلکیل هیدروپروکسید ($Hydroperoxy\ alkyl\ radical=ROOH^*$) می‌شود. در واکنش چهارم جذب اکسیژن توسط رادیکال آلکیل هیدروپروکسید انجام می‌گیرد. محصول تولیدی واکنش چهارم در یک واکنش بازگشت‌پذیر به رادیکال OH^* و کتروهیدروپروکسید ($Ketohydroperoxide=OOROOH^*$) می‌انجامد. رادیکال OH^* با حذف هیدروژن سوخت موجب تشکیل رادیکال آلکیل و آب (H_2O) می‌گردد. بنابراین در این مرحله OH^* شروع به مصرف RH می‌نماید. به طور خلاصه، واکنشها را می‌توان به صورت زیر بیان نمود.



مرحله‌ی انشعابی که در ادامه‌ی زنجیره‌ی واکنش شماره‌ی (19) ظاهر می‌شود، تجزیه‌ی هیدروپروکسید ($OROOH$) می‌باشد:



در زمان طی شدن مرحله‌ی اول احتراق (Start of ignition of the first-stage combustion =SOI1st)، درجه حرارت تا حدی که رابطه‌ی (21) از اهمیت خاصی در واکنشها برقرار شود افزایش می‌یابد. در این نقطه‌ی زمانی، مرحله‌ی اول احتراق به اتمام می‌رسد.



واکنش زیر به دنبال واکنش (21) در جهت تولید (O_2) و ($HOOH$) اتفاق می افتد.



در درجه حرارت بالاتر از 800 کلوین، گونه‌ی $HOOH$ تولیدی از واکنش قبلی به صورت زیر تجزیه می گردد. با اهمیت یافتن رابطه‌ی (23) مرحله‌ی دوم احتراق (Start of ignition of the second-stage combustion = SOI2nd) آغاز می گردد.



جدول 1- الگوی هو و کک برای سوخت ایزو اکتان

الف- 13 گونه فعال							
1. RH	2. O_2	3. R^*	4. RO_2^*	5. $ROOH^*$	6. $OOROOH^*$	7. ORO^*	8. OH^*
9. HO_2^*	10. $HOOH$	11. $OROOH$	12. $RCHO$	13. $C=C$			
ب- 18 واکنش شیمیایی (واحدها: cc, mole, s, kcal)							
مقدار ثابت پارامترهای آرنیوس $k = Ae^{-E/RT}$ برای هیدروکربن در $600 K < T < 1100 K$							
Reaction	Equilibrium			k^+		k^-	
	ΔH_{300}^0	$\log A$	E	$\log A^+$	E^+	$\log A^-$	E^-
1 $RH + O_2 \xrightleftharpoons[k_{b1}]{k_{f1}} R^* + HO_2^*$	46.4	1.5	46.0	13.5	46.0	12.0	0.0
2 $R^* + O_2 \xrightleftharpoons[k_{b2}]{k_{f2}} RO_2^*$	-31.0	-1.4	-27.4	12.0	0.0	13.4	27.4
3 $RO_2^* \xrightleftharpoons[k_{b3}]{k_{f3}} ROOH^*$	7.5	0.9	8.0	11.0	21.4	11.0	11.0
4 $ROOH^* + O_2 \xrightleftharpoons[k_{b4}]{k_{f4}} OOROOH^*$	-31.0	-1.9	-27.4	11.5	0.0	13.4	27.4
5 $OOROOH^* \xrightarrow{k_{f5}} OROOH + OH^*$	-26.6			11.3	17.0		
6 $OH^* + RH \xrightarrow{k_{f6}} H_2O + R^*$	-23.5			13.3	3.0		
7 $OROOH \xrightarrow{k_{f7}} ORO^* + OH^*$	43.6			15.6	43.0		
8 $R^* + O_2 \xrightleftharpoons[k_{b8}]{k_{f8}} C = C + HO_2^*$	-13.5	0.0	-13.5	11.5	6.0	11.5	19.5
9 $HO_2^* + HO_2^* \xrightarrow{k_{f9}} HOOH + O_2$	-38.5			12.3	0.0		
10 $HOOH + M \xrightarrow{k_{f10}} 2OH^* + M$	51.4			17.1	46.0		
11 $ORO^* \xrightarrow{k_{f11}} RCHO + R^*$	8.5			14.0	15.0		
12 $ROOH^* \xrightarrow{k_{f12}} C = C + RCHO + OH^*$	-3.0			14.34	31.0		
13 $RO_2^* + RCHO \xrightarrow{k_{f13}} ROOH + RCO^*$	-0.6			11.45	31.0		
14 $HO_2^* + RCHO \xrightarrow{k_{f14}} HOOH + RCO^*$	-0.6			11.7	8.64		
15 $C = C + HO_2^* \xrightarrow{k_{f15}} Epox + OH^*$	-0.23			10.95	10.0		
16 $HO_2^* + RH \xrightleftharpoons[k_{b16}]{k_{f16}} R^* + HOOH$	8.0	0.9	8.0	11.7	16.0	10.8	8.0
17 $RO_2^* + RH \xrightleftharpoons[k_{b17}]{k_{f17}} ROOH + R^*$	8.0	1.1	8.0	11.2	16.0	10.1	8.0
18 $R^* + R^* \xrightarrow{k_{f18}} RH$	-0.23			13.2	0.0		

نکته: $ROOH$ و $OROOH$ مشابه و R^* , RCO^* و $Epox$ غیر فعال در نظر گرفته می شوند.

رابطه‌ی (14) تا رابطه‌ی (23) قادر به مدل کردن دو مرحله‌ی احتراق در هیدروکربنها می‌باشند. با این وجود جهت بالا بردن دقت پیش بینی مراحل احتراق، 8 واکنش اضافی که سرعت واکنش آنها پایین‌تر از واکنشهای قبلی است نیز توسط هو و کک در ادامه آورده شد. پارامترهای ذکر نشده در اینجا را می‌توان در مرجع [13] و [17] مشاهده کرد. برای بدست آوردن مقدار تمرکز گونه‌ها، بایستی یک معادله‌ی غیر خطی حل شود. بر این اساس ابتدا معادله توسط روش حل ضمنی معادله‌های جزئی (Implicit solution of partial differential equation) خطی می‌گردد. بعد از خطی شدن، می‌توان توسط روشهای معمول معادله را حل نمود. [18]

3- بررسی نتایج حاصل از الگوهای تئوری

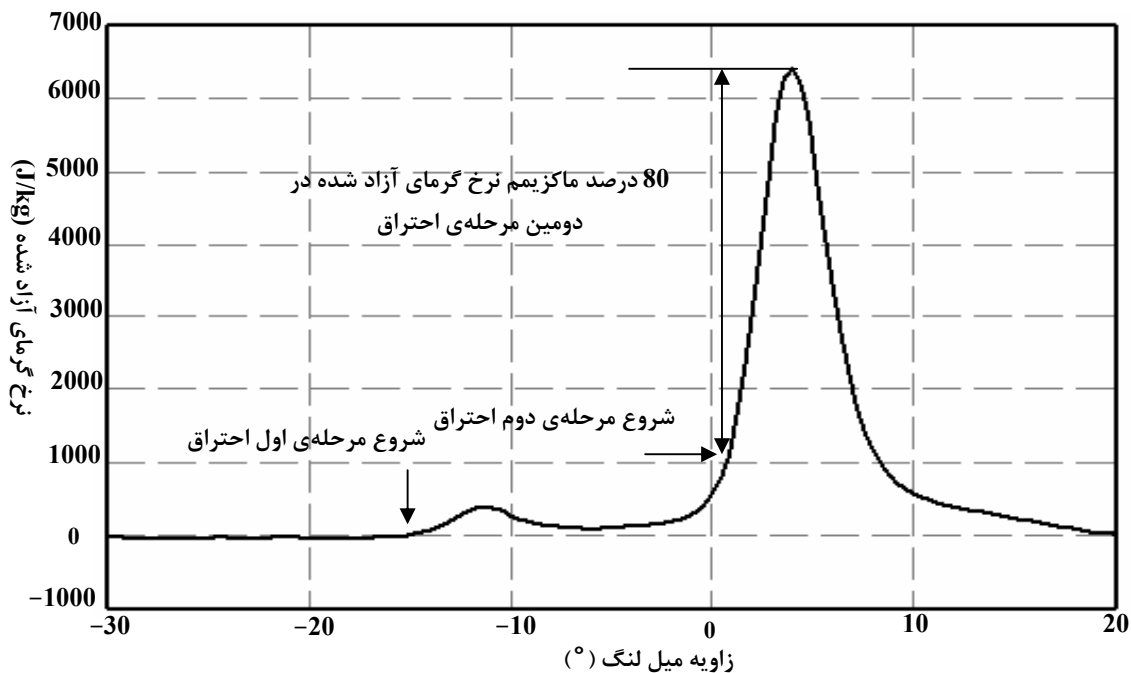
زمان شروع احتراق در موتور اشتعال جرقه‌ای توسط جرقه زدن شمع و در موتور دیزل توسط پاشش سوخت کنترل می‌شود. اما با توجه به اینکه زمان شروع احتراق در موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن توسط سینتیک شیمیایی انجام می‌پذیرد، کنترل آغاز احتراق در این موتور مشکل می‌باشد. بنابراین جهت کنترل شروع احتراق در این موتور، بایستی یک پیش بینی در زمان بسته شدن هر دو سوپاپ انجام شود تا اینکه بتوان شرایط را به نحوی تغییر داد که مرحله دوم احتراق که احتراق اصلی می‌باشد در نزدیکی نقطه‌ی مرگ بالا ایجاد گردد. بر این اساس لزوم پیش بینی زمان خوداشتعالی در این نوع از موتورها اجتناب ناپذیر است.

در این کار الگوی شل و الگوی هو و کک به علت پایین بودن تعداد واکنشهای موجود در آن که موجب سادگی آن در شبیه سازی سیستم کنترل موتور می‌شود، مورد انتخاب قرار گرفتند. مقادیر بدست آمده از این دو الگو با مقادیر تجربی ارائه شده در مرجع [19] برای سوخت ایزواکتان مقایسه شدند. تعیین مقادیر تجربی بر اساس اندازه‌گیری فشار داخل سیلندر انجام شده است. در این روش نرخ تغییرات گرمای آزاد شده در هر سیکل بر اساس قانون اول ترمودینامیک استخراج شدند. شکل (1) نرخ تغییرات گرمای آزاد شده را در موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن نشان می‌دهد. بر طبق شکل، شروع مرحله‌ی اول احتراق برابر نقطه‌ی جدایی بین منحنی نرخ گرمای آزاد شده با محور افقی می‌باشد که در آن مقدار نرخ تغییرات گرمای آزاد شده برابر صفر ($\frac{dQ}{d\theta} = 0$) است. شروع مرحله‌ی دوم احتراق را نیز برابر نقطه‌ی که در آن 20 درصد ماکزیمم نرخ گرمای آزاد شده در دومین مرحله‌ی احتراق انجام شده است در نظر گرفته می‌شود.

شکل (2) شروع مرحله‌ی اول و دوم احتراق را برای مقادیر الگوهای تئوری و تجربی نشان می‌دهد. به طور کلی از این شکل نتیجه می‌شود که هر دو الگو قادر به پیش بینی نسبی مرحله‌ی اول و دوم احتراق می‌باشند و اختلاف زاویه‌ای زیادی بین مقادیر تئوری و تجربی وجود ندارد. همچنین مشاهده می‌شود که مقادیر پیش بینی شروع مرحله‌ی دوم احتراق با افزایش نسبت هم‌ارزی در هر دو الگو گرایشی همچون مقادیر تجربی دارند. به عبارت دیگر با افزایش نسبت هم‌ارزی، مقادیر شروع مرحله‌ی دوم در هر دو الگو هم زمان مقادیر تجربی زودرس می‌گردد. اما گرایشی که در پیش بینی مرحله‌ی دوم احتراق مشاهده گردید در مرحله‌ی اول احتراق به خصوص در الگوی هو و کک مشاهده نمی‌شود.

توضیح این مسئله را می‌توان به این صورت بیان کرد که شروع مرحله‌ی اول احتراق متأثر از درجه حرارت گازهای داخل سیلندر بوده و فشار داخل سیلندر و نسبت هم‌ارزی تأثیری بر آن ندارد [20]. نظر به اینکه تعیین درجه حرارت در ابتدای تراکم به دلیل وجود گازهای باقیمانده از سیکل قبلی مشکل می‌باشد، خطای درجه حرارت گازهای محاسبه شده در ابتدای تراکم، به سهولت در پیش بینی مرحله‌ی اول احتراق تأثیر می‌گذارد. اما شروع مرحله دوم احتراق علاوه بر درجه حرارت گازهای داخل سیلندر به نسبت هم‌ارزی و فشار داخل سیلندر بستگی دارد [20]. بعلاوه در این مرحله درجه حرارت گازهای داخل سیلندر به دلیل گرمای آزاد شده توسط واکنشهای مرحله‌ی اول احتراق و افزایش تراکم تا حدودی افزایش یافته است. بر اساس موارد ذکر شده، تأثیر خطای اندازه‌گیری درجه حرارت در ابتدای تراکم بر روی پیش بینی خود اشتعالی مرحله‌ی دوم ناچیز خواهد بود. بنابراین الگوهای استفاده شده در مرحله‌ی دوم احتراق گرایشی مشابه با مقادیر تجربی دارد. یادآوری می‌شود که این امر دلیلی بر پیش بینی خوب مرحله‌ی دوم احتراق توسط الگوها نمی‌باشد. ماکزیمم خطای بین مقادیر الگوی شل و

الگوی هو و کک در مرحله‌ی اول احتراق با مقادیر تجربی به ترتیب برابر $2/2$ و $3/5$ درجه‌ی میل لنگ و در مرحله‌ی دوم احتراق برابر $4/3$ و $1/9$ درجه‌ی میل لنگ می‌باشد.



شکل 1- تعیین شروع مرحله‌ی اول و دوم احتراق

شکل (3) اختلاف بین مقادیر تجربی با مقادیر الگوی شل و الگوی هو و کک را در مرحله‌ی اول احتراق نشان می‌دهد. اختلاف مقادیر تجربی با مقادیر الگوی شل نسبت به اختلاف آن با مقادیر الگوی هو و کک کمتر می‌باشد. همچنین به سهولت نتیجه می‌شود که مقادیر بدست آمده از الگوی شل دارای پراکندگی پایین‌تری نسبت به مقادیر بدست آمده از الگوی هو و کک است. بر این اساس، دقت پیش بینی مرحله‌ی اول احتراق توسط الگوی شل بالاتر از الگوی هو و کک می‌باشد. اختلاف مقادیر تجربی با مقادیر الگوی شل در نسبت هم‌ارزی بالاتر از $\phi = 0/28$ ثابت می‌باشد در حالی که در نسبت هم‌ارزی پایین‌تر از $\phi = 0/28$ تقریباً خطی است. بنابراین، در نسبت هم‌ارزی بالاتر از $\phi = 0/28$ ، به مقادیر بدست آمده از الگوی شل در مرحله‌ی اول احتراق می‌توان مقدار ثابت $0/6$ را اضافه نمود تا پیش بینی مرحله‌ی اول احتراق با مقادیر تجربی یکسان گردد. نظر به اینکه در نسبت هم‌ارزی پایین‌تر از $0/6$ ، یک رابطه‌ی خطی بین داده‌های بدست آمده از اختلاف مقادیر تجربی و مقادیر الگوی شل با نسبت هم‌ارزی وجود دارد، می‌توان یک رابطه‌ی خطی برای داده‌ها نوشت. بر این اساس، مقادیر بدست آمده از الگوی شل در رابطه‌های بدست آمده قرار داده می‌شود تا مقدار شروع مرحله‌ی اول احتراق بدست آید. دو رابطه‌ی (24) و (25)، روش پیشنهادی جهت پیش بینی مرحله‌ی اول احتراق را به صورت خلاصه بیان می‌نماید.

$$\theta_{SOI1st} = -10.8\phi + 3.9 + \theta_{Shell} \quad \phi \leq 0.28 \quad (24)$$

$$\theta_{SOI1st} = 0.6 + \theta_{Shell} \quad \phi > 0.28 \quad (25)$$

که در آن θ_{SOI1st} معرف زاویه‌ی شروع مرحله‌ی اول احتراق، θ_{Shell} زاویه‌ی بدست آمده از پیش بینی الگوی شل برای شروع مرحله‌ی اول احتراق و ϕ برابر نسبت هم‌ارزی می‌باشد.

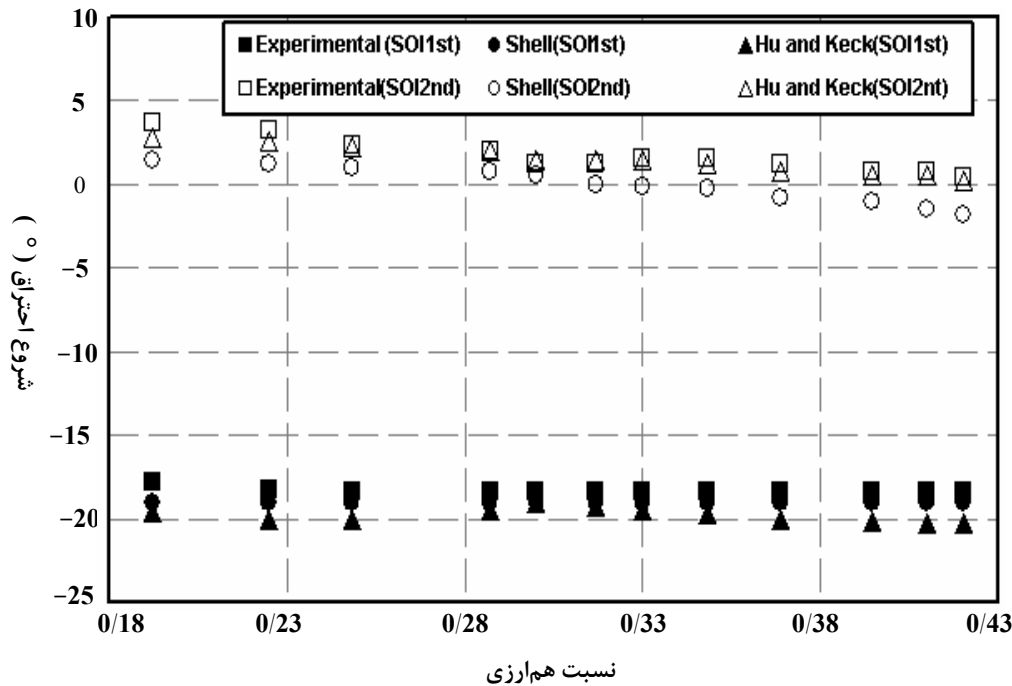
آزاد شدن بیش از نود درصد انرژی سوخت بعد از مرحله‌ی دوم احتراق می‌باشد. این امر باعث می‌شود که کنترل موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن توسط کنترل مرحله‌ی دوم احتراق ممکن شود. بر این اساس، هدف اصلی این تحقیق پیش بینی مرحله دوم احتراق می‌باشد. بنابراین بایستی پیش بینی شروع مرحله‌ی اول احتراق را به شروع مرحله‌ی دوم احتراق

مرتبط کرد. شکل (4) اختلاف بین مرحله‌ی اول و دوم احتراق را با نسبت هم‌ارزی نشان می‌دهد. از شکل مشخص است که یک رابطه‌ی خطی را برای داده‌ها می‌توان ترسیم نمود. بر این اساس رابطه‌ی زیر نتیجه می‌شود:

$$\theta_{SOI2nd} = -11.1\phi + 23.5 + \theta_{SOI1st} \quad (26)$$

که در آن θ_{SOI2nd} زاویه‌ی شروع مرحله دوم احتراق می‌باشد.

ماکزیمم خطای پیش بینی مرحله‌ی دوم احتراق توسط رابطه‌ی (26) برابر با 0/8 درجه میل لنگ است.



شکل 2- شروع مرحله‌ی اول و دوم احتراق

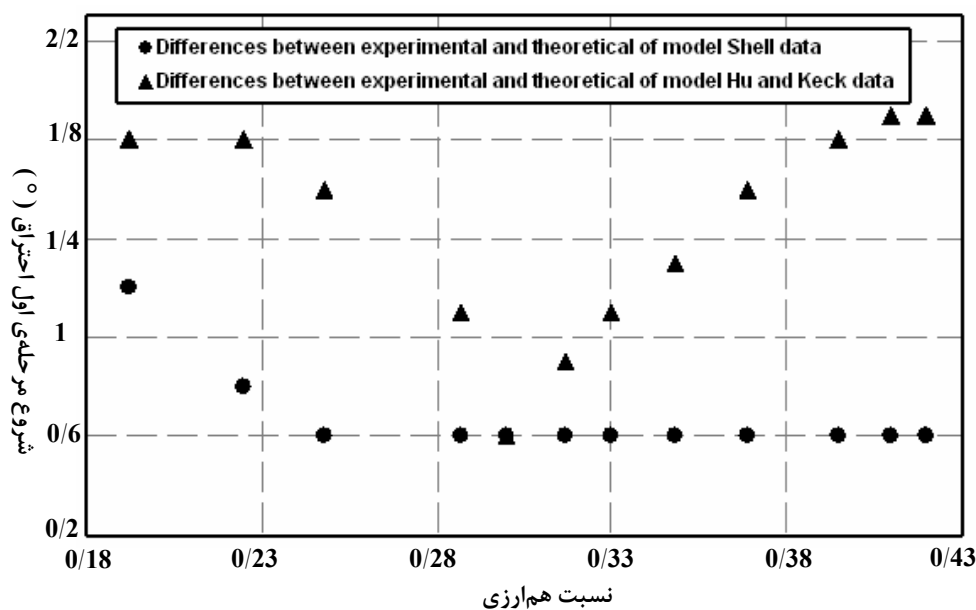
اختلاف مقادیر بدست آمده از روش تجربی با الگوی شل و الگوی هو و کک در مرحله‌ی دوم احتراق در شکل (5) نشان داده شده است. انحراف معیار در داده‌های الگوی شل برابر $\sigma = 0/48$ و الگوی هو و کک برابر $\sigma = 0/43$ می‌باشد. از شکل نتیجه می‌شود که مقادیر بدست آمده از دو الگوی تئوری را می‌توان در نسبت هم‌ارزی پایین‌تر و بالاتر از $\phi = 0/3$ تقسیم بندی نمود. مقادیر بدست آمده از الگوهای تئوری یک رابطه‌ی خطی را با نسبت هم‌ارزی پایین‌تر از $\phi = 0/3$ و یک رابطه‌ی لگاریتمی را با نسبت هم‌ارزی بالاتر از $\phi = 0/3$ نشان می‌دهند. ضریب برازش خطی در مقادیر بدست آمده از الگوی شل برابر $R^2 = 0/92$ و در الگوی هو و کک برابر $R^2 = 0/97$ در نسبت هم‌ارزی پایین‌تر از $\phi = 0/3$ می‌باشد. در نسبت هم‌ارزی بالاتر از مقدار $\phi = 0/3$ ، ضریب برازش در الگوی شل برابر $R^2 = 0/75$ و در الگوی هو و کک دارای مقدار $R^2 = 0/22$ می‌باشد. بر این اساس، الگوی هو و کک در نسبت هم‌ارزی پایین‌تر از $\phi = 0/3$ و الگوی شل در نسبت هم‌ارزی بالاتر از $\phi = 0/3$ دارای پیش بینی بهتری می‌باشند. بنابراین، بر اساس دو رابطه‌ی زیر می‌توان شروع احتراق را در مرحله‌ی دوم احتراق پیش بینی نمود:

$$\theta_{SOI2nd} = -10.9\phi + 3.03 + \theta_{Hu\ and\ Keck} \quad \phi \leq 0.3 \quad (27)$$

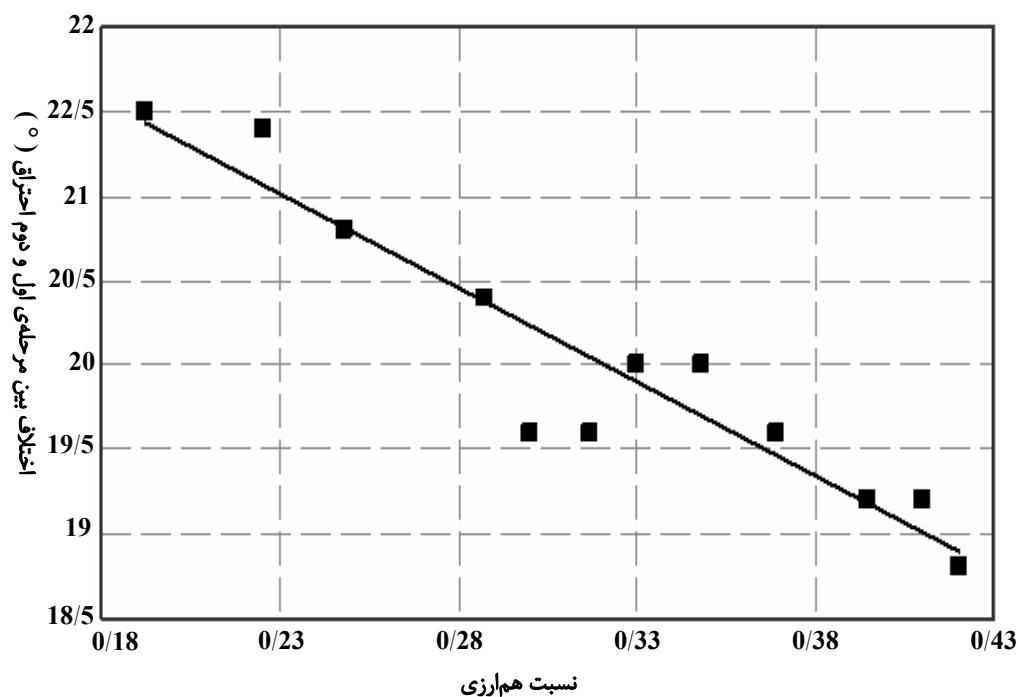
$$\theta_{SOI2nd} = 2.9 \log \phi + 4.7 + \theta_{Shell} \quad \phi > 0.3 \quad (28)$$

ماکزیمم خطای بدست آمده بر این اساس برابر یک درجه‌ی میل لنگ در نسبت هم‌ارزی $\phi = 0/19$ می‌باشد.

جهت انتخاب یکی از دو روش ارائه شده برای پیش بینی مرحله‌ی دوم احتراق، مجموع مکعب اختلاف مقادیر تجربی با مقادیر بدست آمده از رابطه‌ی (26)، (27) و (28) با یکدیگر مقایسه می‌شوند. الگوی شل به کمک رابطه‌ی (26) جهت پیش بینی مرحله‌ی دوم احتراق پیشنهاد می‌گردد.



شکل 3- اختلاف بین مقادیر تجربی با مقادیر الگوهای تئوری در مرحله‌ی اول احتراق

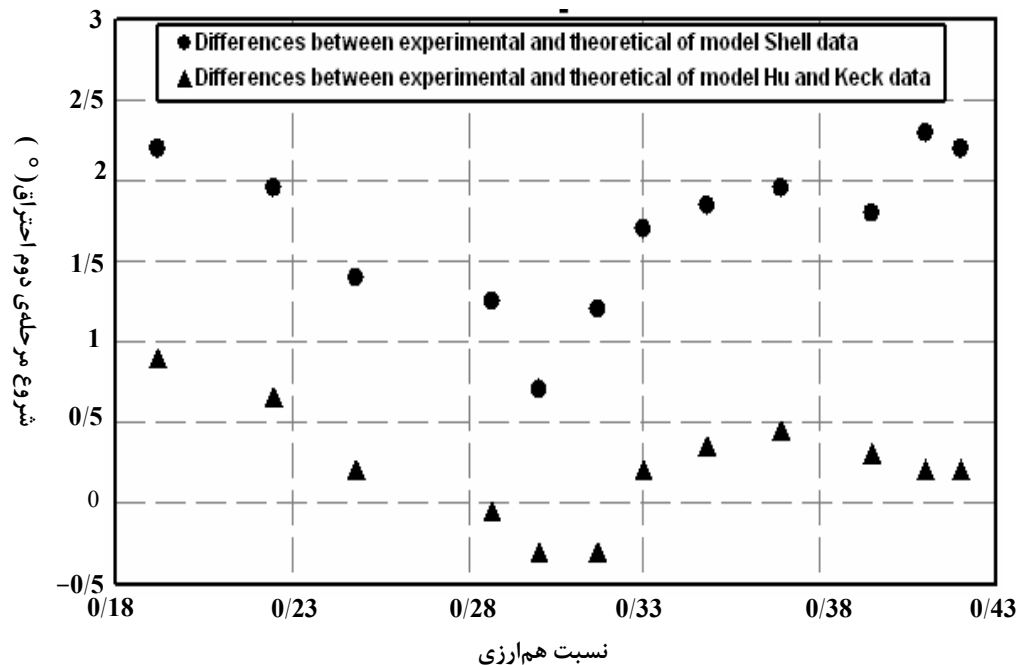


شکل 4- اختلاف بین مرحله‌ی اول احتراق با مرحله‌ی دوم احتراق برای مقادیر تجربی

5- نتیجه‌گیری

از بین الگوهای سینتیک شیمیایی سوخت، الگوی سینتیک شیمیایی کاهش یافته به دلیل پایین بودن تعداد گونه و واکنش شرکت کننده در آن مورد انتخاب قرار گرفتند. شایان ذکر است که پایین بودن واکنش‌های موجود در الگوهای سینتیک شیمیایی، قابلیت برنامه نویسی آنها در سیستم کنترل موتور ممکن می‌سازد. از میان الگوهای این دسته، دو الگوی معروف شل و الگوی هو و کک مورد انتخاب قرار گرفتند. با توجه به سادگی الگوهای انتخاب شده، آنها قادر به پیش بینی نسبی زمان شروع احتراق در موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن می‌باشند. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که الگوی شل پیش بینی دقیق تری را در زمان شروع مرحله‌ی اول احتراق نسبت به الگوی هو و کک دارد. این می‌تواند به دلیل حساسیت کم

الگوی شل به خطای درجه حرارت و فشار بدست آمده در شروع مرحله‌ی تراکم چرخه‌ی موتور باشد. ولی الگوی هو و کک پیش بینی بهتری در زمان شروع مرحله‌ی دوم احتراق با توجه به دلیل در بر داشتن تعداد بیشتر گونه و واکنش نشان داد. نظر به اینکه رابطه‌ی بین مرحله‌ی اول و دوم احتراق با نسبت هم‌ارزی خطی است، با کمک تخمین مرحله اول احتراق توسط رابطه شل می‌توان مرحله دوم احتراق را با دقتی بالاتر از الگوی هو و کک پیش بینی کرد.



شکل 5- اختلاف مقادیر تجربی با مقادیر الگوی تئوری در مرحله‌ی دوم احتراق

نظر به اینکه گازهای باقیمانده از سیکل قبلی در داخل سیلندر با گازهای ورودی مخلوط شده است، تصحیح دو الگوی سینتیک شیمیایی در جهت افزایش دقت پیش بینی شروع احتراق در موتور واقعی، مستلزم در نظر گرفتن اثر سینتیک شیمیایی گازهای باقیمانده و واکنشهای بیشتر است. یادآوری می‌شود که گازهای باقیمانده از ترکیب زیادی گاز که در واکنش نهایی سوخت شرکت نکرده است تشکیل می‌شود. مقدار و ترکیب گازهای باقیمانده نیز در هر نسبت هم‌ارزی مختلف متغیر می‌باشد. بر این اساس، بایستی اثر ترکیبات موجود در گازهای باقیمانده در الگوهای سینتیک شیمیایی در نظر گرفته شود. این امر مستلزم افزایش تعداد گونه و واکنش در دو الگوی سینتیک شیمیایی و محاسبه‌ی مقدار هر گاز در ترکیب گازهای باقیمانده می‌باشد. ولی این امر موجب افزایش تعداد گونه و واکنشهای موجود در الگوها و همچنین نیاز به محاسبه‌ی مقدار هر گاز می‌باشد. بر این اساس، تعداد واکنشها و مدت محاسبه‌ی الگوها افزایش می‌یابد. با توجه به اینکه هدف اولیه‌ی انتخاب این دو الگو، سادگی آنها بوده است، افزایش تعداد واکنشها پیشنهاد نمی‌گردد. بنابراین الگوی شل بهترین انتخاب از بین الگوهای سینتیک شیمیایی می‌باشد.

بررسی دقت الگوی انتگرال کوبش جهت پیش بینی شروع مرحله‌ی دوم احتراق در راستای این کار پیشنهاد می‌گردد. یادآوری می‌شود که الگوی انتگرال کوبش دارای ساختار ساده‌ای بوده و در دسته‌ی الگوهای تجربی طبقه‌بندی شده است.

مراجع

- 1- Onishi S., Jo S. H., Shoda K., JO P. D., Kato S., Active thermo-atmosphere combustion (ATAC)- A new combustion process for internal combustion engine, SAE paper 790501, 1979.
- 2- Livengood J. C., Wu P. C., Correlation of autoignition phenomenon in internal combustion engines and rapid compression machines, Fifth Symposium (International) on Combustion; pp. 347-56, 1955.

- 3- Curran H. J., Gaffuri P., Pitz W. J., Westbrook C. K., A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation, *Combustion and flame* 129: 253-280, 2002.
- 4- Ogink R., Computer modeling of HCCI combustion, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, Sweden, 2004.
- 5- Bengtsson J., Closed-Loop Control of HCCI Engine Dynamics, Ph.D. Thesis, Lund Institute of Technology, Sweden, 2004.
- 6- He X., Donovan M.T., Zigler B.T., Palmer T.R., Walton S.M., Wooldridge M.S.; Atreya A., An experimental and modeling study of iso-octane ignition delay times under homogeneous charge compression ignition conditions, *Combustion and Flame*, 2005.
- 7- Soyulu S., Prediction of knock limited operating conditions of a natural gas engine, *Energy Conversion and Management*, 2004.
- 8- Lida M., Aroonrisopon T., Hayashi M., Foster D., Martin J., The effect of intake air temperature, compression ratio and coolant temperature on the start of heat release in an HCCI (homogeneous charge compression ignition) Engine, SAE Paper 2001-01-1880, 2001.
- 9- Coward J. S., Keck J. C., Heywood J. B., Westbrook C. K. and Pitz W. J., Engine knock predictions using a fully detailed and a reduced chemical kinetic mechanism, 23rd Symp. (International) on Combustion/ The combustion Institute, PP. 1055-1062, 1990.
- 10- Nishiwa ki K., Yoshihara Y. and Saijyo K., Numerical analysis of the location of knock initiation in SI engine, SAE 2000-01-1897, 2000.
- 11- Kong S. C., Han, Z., Reitz, R. D., The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulations, SAE Paper 950278, 1996.
- 12- Halstead M. P., Kirsh L. J., Quinn C. P., The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures— Fitting of a mathematical model, *Combust.Flame* 30:45–60 (1977).
- 13- Nabil S. Ayoub, Rolf D. Reitz, Multidimensional Modeling of Fuel Composition Effects on Combustion and Cold-starting in Diesel Engines, SAE Paper, 1998.
- 14- Sazhin S. S., Sazhina E. M., Heikal M. R., Marooney C. and Mikhalovsky S. V., The shell autoignition model: A new mathematical formulation, *Combustion and flame*, 117:529–540 1999.
- 15- Hu H., Keck J., Autoignition of adiabatically compressed combustible gas mixtures, Society of Automotive Engineers SAE, 872110, 1987.
- 16- Tanaka S., Ayala F., Keck J., A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine, *Combustion and Flame* 133 467–481, 2003.
- 17- Choi Y., Chen J.-Y., WSSCI paper 03F-69, Presented at the 2003 Fall Western States Meeting of Combustion Institute, 2003.
- 18- Warnatz J., Maas U., Dibble R.W., *Combustion Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, 4th Edition, 2006.
- 19- Dagaut P., Dayma G., Desmet B., Djedaili-Chaumeix N., Ebrahimi R., Hadj Ali K., Mercier M., Minetti R., Utilisation de combustibles issus de la gazéification de la biomasse dans les moteurs HCCI., Rapport Final, PR5.5 SYNGAZ-GTL-HCCI, 2005 (In French).
- 20- Vanhove G., Oxydation, Co-oxydation et Auto-inflammation à Basses Températures d'Alcènes et Aromatiques Type. Etude Expérimentale des Interactions an Sein d'un Carburant-Modèle, Thèse Ph.D., L'Université des Sciences et technologies de Lille, 2004 (In French).