

بررسی تغییرات سینتیکی و ترمودینامیکی خود اشتعالی متان با افزودن گاز سنتزی در یک موتور اشتعال تراکمی همگن

مسعود ریحانیان^{۱*}، سینا وشتانی^۲، سمیرا اکبری^۳ و وحید حسینی^۴
تهران، خیابان آزادی، دانشگاه صنعتی شریف
*مسعود ریحانیان: m_reyhaniyan@mech.sharif.edu

چکیده

ویژگی اصلی موتورهای اشتعال تراکمی (HCCI) کاهش شدید آلاینده NOx همزمان با افزایش راندمان و کاهش مصرف سوخت است. با این وجود به علت نبود راه‌های معین برای کنترل زمان شروع و طول مدت احتراق کاربردهای این موتورها محدود مانده است. احتراق در یک موتور اشتعال تراکمی وابسته به پارامترهای مختلفی از جمله نوع سوخت و شرایط اولیه می‌باشد. به این دلیل دانستن تأثیر این پارامترها در احتراق HCCI به منظور توسعه پارامترهای کنترلی ضروری است. در این مقاله به بررسی تأثیر شرایط اولیه از جمله دمای اولیه و نسبت تراکم و نسبت هم‌ارزی بر زمان شروع احتراق HCCI پرداخته شده است. بدین منظور از یک مدل عددی صفر بعدی تک ناحیه‌ای با سوخت متان و مکانیزم واکنش کامل GRI-Mech 3.0 استفاده شده است. صحت سنجی این مدل با استفاده از نتایج تجربی حاصل از موتور تک سیلندر CFR انجام گرفته است. نتایج حاکی از آن است که مدل تک ناحیه‌ای زمان آغاز احتراق بر اثر تغییر شرایط ورودی و افزودن گاز سنتزی را به درستی پیش‌بینی می‌کند. علاوه بر آن برای بررسی دقیق‌تر تأثیر افزودن گاز سنتزی بر رفتار احتراق مسیر واکنش‌های تعیین کننده و نرخ انجام آن مورد مطالعه قرار گرفته است و مشاهده شد که با افزودن گاز سنتزی مسیر واکنش‌های تعیین کننده احتراق افزایش یافته ولی نرخ انجام آن‌ها کاهش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: موتور اشتعال تراکمی (HCCI)، زمان شروع احتراق (SOC)، کنترل احتراق، مدل تک ناحیه‌ای.

۱- مقدمه

اگرچه احتراق HCCI باعث راندمان بهتر و کاهش آلاینده NOx در یک موتور احتراق داخلی می‌شود، اما موتور HCCI باید به سه چالش عمده پیش روی آن غلبه کند. اولین مشکل کنترل زمان احتراق است. احتراق در موتور HCCI تنها وابسته به واکنش‌پذیری شیمیایی مخلوط است، به عبارت دیگر هیچ روش بیرونی برای کنترل زمان احتراق به صورتی که موتور به صورت عادی کار کند و بهترین عملکرد خود را داشته باشد وجود ندارد. چالش بعدی محدود بودن محدوده‌ی عملکردی آن است. تغییر شرایط کارکردی موتور مانند دور موتور و بار می‌تواند سبب کوبش و بد سوزی گردد. مشکل دیگر موتور HCCI استارت سرد است. احتراق قابل قبول تنها زمانی رخ می‌دهد که دمای ورودی به حد کافی زیاد باشد که بتواند اشتعال خود به خودی مخلوط صورت پذیرد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که احتراق HCCI یک مفهوم با ارزش است که می‌تواند تعدادی از

۱- دانشجوی دکتری دانشکده‌ی مکانیک دانشگاه صنعتی شریف

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شریف

۳- دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شریف

۴- عضو هیئت علمی دانشکده مکانیک دانشگاه صنعتی شریف

مشکلات موتورهای احتراق داخلی را حل کند به شرطی که تمام چالش‌های گفته شده‌ی آن رفع شود. از وقتی موتور HCCI توسط انیسی [۱] در سال ۱۹۷۸ معرفی شد، تلاش‌ها برای غلبه بر مشکلات آن تا کنون ادامه داشته است و روش‌های مختلفی هم به صورت تجربی و هم به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفته است که می‌توان به چهار دسته کلی تقسیم نمود: نسبت تراکم، شرایط ورودی، EGR و مخلوط کردن سوخت‌ها.

نسبت تراکم: معمولاً موتورهای HCCI به منظور کاهش نرخ احتراق با غلظت‌های خیلی پایین کار می‌کنند. بنابراین نسبت‌های تراکم‌های بالا در موتورهای HCCI مرسوم است. انتخاب نسبت تراکم در کران بالا به کوبش موتور و در کران پایین به خود اشتعالی مخلوط در پایان تراکم محدود شده است. به عبارت دیگر، نسبت تراکم انتخاب شده باید به اندازه‌ی بزرگ باشد که سبب اکسید شدن مخلوط گردد اما نباید بیش از حد بزرگ باشد تا سبب کوبش در موتور نگردد. نسبت تراکم بالا نیاز به سیستم گرمایشی در ورودی منیفولد را از بین می‌برد، چون نسبت تراکم بالا سبب افزایش دما در پایان تراکم می‌شود [۲]. هرچه قدر دمای احتراق به علت افزایش نسبت تراکم بیشتر می‌شود، آلاینده NOx افزایش می‌یابد، در حالی که مقدار HC و CO کاهش می‌یابد. تعدادی تحقیقات بر روی موتور HCCI با نسبت تراکم متغیر انجام شده است [۳].

شرایط ورودی: از آن جایی که احتراق در موتور HCCI وابسته به سینتیک شیمیایی است که به صورت نمایی به دما وابسته است، دمای اولیه می‌تواند تأثیر به‌سزایی در رفتار احتراقی موتور داشته باشد و احتمالاً مؤثرترین پارامتر کنترلی احتراق می‌باشد. دماهای اولیه بالا سبب می‌شود که احتراق زودتر انجام گردد، تأخیر اشتعال کم‌تر شود، نرخ آزادسازی احتراق سریع‌تر گردد، راندمان احتراق بهتر شود و بازه عملکردی موتور با سوخت اکتان بالا گسترده‌تر گردد [۴]. اما با وجود همه مزیت‌ها استفاده از سیستم گرمایشی برای کنترل احتراق HCCI معایبی نیز دارد. علاوه بر هزینه، مصرف انرژی و پیچیدگی‌های افزودن این سیستم، راندمان حجمی در دماهای بالای ورودی به میزان قابل توجهی به علت کاهش چگالی، کاهش می‌یابد. همچنین میزان NOx تولیدی نیز افزایش می‌یابد. مهم‌تر از آن تنظیم کردن دمای ورودی در شرایط مختلف برای کنترل احتراق HCCI به علت زمان عکس‌العمل زیاد سیستم کنترلی ممکن نیست، اگرچه تلاش‌هایی برای تنظیم سریع‌تر دمای ورودی از طریق مخلوط دو جریان هوای سرد و گرم صورت گرفته است [۵].

پارامتر کنترلی دیگر فشار مکشی است که می‌تواند با کم کردن میزان جریان ورودی کاهش یابد و یا با استفاده از سوپرشاژ کردن سیستم افزایش پیدا کند. به ازای کاهش راندمان حجمی کاهش فشار ورودی سبب احتراق پایدارتر می‌گردد، مقدار CO را کاهش می‌دهد و دمای خروجی را در کارکرد بدون بار افزایش می‌دهد زیرا به موتور اجازه کارکرد با غلظت بالاتر را می‌دهد. افزایش فشار ورودی به منظور افزایش توان خروجی موتور انجام می‌شود و مزیت‌هایی مانند افزایش راندمان احتراق و کاهش HC و CO را نیز دارد. با این وجود تعدادی مشکلات با افزایش فشار به وجود می‌آید. از جمله اینکه تلفات کار پمپی در یک موتور HCCI توربوشاژ بالاست. و چون مقداری از انرژی خروجی صرف راندن توربین می‌شود، دمای گازهای خروجی می‌تواند بسیار کاهش یابد و در نتیجه مشکل دمای فعال شدن کاتالیست و یا کاهش نرخ تبدیل مونوکسید کربن و هیدروکربن‌های نسوخته در مبدل کاتالیستی پیش آید.

روش‌های دیگری نیز وجود دارد که زمان احتراق مربوط به تغییر خواص واکنش‌پذیری مخلوط تحت سینتیک شیمیایی را کنترل می‌کند مانند اختلاط دو یا چند سوخت به طور همزمان با خواص شیمیایی مختلف و یا با استفاده از افزودن گاز سنتزی (RG) ناشی از تجزیه سوخت هیدروکربنی [۶]. از آنجا که ذخیره و حمل و نقل چند سوخت عملاً دشوار می‌باشد، از روش افزودن گاز سنتزی که نیاز به حمل چند سوخت را برطرف کرده و علاوه بر آن نسبت به تغییر خواص سیکنی به خوبی واکنش نشان می‌دهد، استفاده می‌گردد. از اولین کارهای جدی افزودن RG در موتور HCCI توسط شودو [۷] که با افزودن CO و H₂ به دی متیل اتر بوده، انجام گرفت. مگارتی و تسولاکی [۸] نیز با افزودن آن به گاز طبیعی متوجه تغییرات قابل توجهی در زمان و دوره احتراق شدند که باعث کاهش PM، NOx می‌گشت و بعد از آن حسینی و چکل [۱۰،۹] با انجام تحقیقات تجربی اثر افزودن RG را بر سوخت‌ها با اکتان بالا و اکتان پایین، به طور مجزا بررسی کردند.

در مقاله حاضر از مدل تک ناحیه‌ای صفر بعدی با مکانیزم مفصل شیمیایی (۳۲۵ واکنش و ۵۳ گونه است) با فرض مخلوط سوخت و هوای همگن، خواص ترمودینامیکی یکنواخت در محفظه و متغیر با زمان، با سوخت گاز طبیعی برای پیش بینی و کنترل زمان شروع احتراق استفاده می‌شود. تأثیر تغییرات نسبت تراکم، نسبت دمای اولیه به طور مستقیم بر روی زمان آغاز احتراق نشان داده شده است. همچنین تغییرات ترکیب درصد گاز سنتزی (RG) نشان می‌دهد که افزایش مقدار RG و افزایش ترکیب درصد H2 موجب می‌شود احتراق زودتر رخ دهد.

۲- مدل تک ناحیه‌ای و معادلات حاکم

در این مقاله از یک مدل صفر بعدی تک ناحیه‌ای به علت سادگی و صحیح پیش‌بینی کردن زمان شروع احتراق استفاده شده است. در این مدل از مکانیزم کامل GRI-Mech 3.0 [۱۱] استفاده شده است. فرضیات زیر در این مدل لحاظ شده است:

- مخلوط سوخت و هوا به صورت همگن در نظر گرفته شده و هیچ گرادیان مکانی در داخل محفظه احتراق وجود ندارد.
- همه گونه‌های موجود در محفظه به صورت گاز ایده‌آل در نظر گرفته شده‌اند.
- مخلوط همگن سوخت و هوا قبل از IVC تشکیل شده است.
- مدل‌سازی برای یک چرخه بسته موتور که از زمان باز شدن دریچه ورود هوا تا بسته شدن دریچه خروج دود می‌باشد.
- محاسبه انتقال حرارت از گازهای درون سیلندر به دیواره با تقریب خوبی از رابطه اصلاح شده ووشنی برای موتور HCCI استفاده می‌شود (شامل انتقال حرارت ساده جابجایی و تشعشع است).
- بقای جرم درون سیلندر همواره برقرار است و در نتیجه نشتی به خارج از سیلندر وجود ندارد.
- واکنش‌های شیمیایی مربوط به مکانیزم در دمای کمتر از ۷۰۰ کلوین غیر فعال است.

حجم داخل سیلندر در هر لحظه تابع زاویه لنگ است و از طریق رابطه‌ی (۱) بدست می‌آید که در این رابطه V_c ، r_c و R و θ به ترتیب نمایانگر حجم لقی، نسبت تراکم، نسبت طول میله اتصال به شعاع لنگ و زاویه‌ی لنگ هستند.

$$V = V_c \left(1 + \frac{r_c - 1}{2} (R + 1 - \cos \theta - \sqrt{R^2 - \sin^2 \theta}) \right) \quad (1)$$

نرخ تغییرات حجم داخل سیلندر نیز با مشتق‌گیری از رابطه (۱) به صورت رابطه (۲) بدست می‌آید [7].

$$\frac{dV}{dt} = V_c \left(\frac{r_c - 1}{2} \left(\sin \theta \frac{d\theta}{dt} - \frac{1}{2} \sqrt{R^2 - \sin^2 \theta} \right) \right) \quad (2)$$

با در نظر گرفتن ناحیه داخل سیلندر به عنوان حجم کنترل معادله بقای انرژی را می‌توان به صورت رابطه‌ی (۳) نوشت:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dQ}{dt} - P \frac{dV}{dt} \quad (3)$$

معادله (۳) قابل تبدیل به رابطه (۴) است که در این رابطه Y_i و u_i به ترتیب کسر مولی و انرژی داخلی هر کدام از گونه‌ها، ρ چگالی مخلوط و C_v گرمای ویژه در حجم ثابت می‌باشد.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\frac{1}{V} \left(\frac{dQ}{dt} - p \frac{dV}{dt} \right) - \sum_{i=1}^N u_i \frac{dY_i}{dt}}{\dots C_v} \quad (4)$$

نرخ تغییرات کسر مولی گونه‌های شیمیایی از روی نرخ انجام واکنش‌های سینتیک احتراق به دست می‌آید.

معادله واکنش‌های مقدماتی برای K گونه‌ی شیمیایی را می‌توان به صورت رابطه‌ی (۵) نوشت:

$$\sum_{k=1}^N \tilde{S}_{k,i} \dot{S}_i \Leftrightarrow \sum_{k=1}^N \tilde{S}_{k,i} \dot{S}_i \quad (5)$$

که در این رابطه $\nu_{k,i}$ ضرایب استوکیومتری معادله است و S_k نمایانگر گونه‌ی k ام است.

نرخ تولید برای هر گونه از رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$\dot{S}_{k,i} = \sum_{k=1}^N (\epsilon''_{k,i} - \epsilon'_{k,i}) q_i \quad (6)$$

که q_i نرخ پیشرفت واکنش i -ام می‌باشد و برای واکنش‌هایی که در آن‌ها ذره واسطه وجود ندارد به صورت رابطه (۷) خواهد بود:

$$q_i = k_{f,i} \prod_{k=1}^K [S_K]^{v_{k,i}} - k_{b,i} \prod_{k=1}^K [S_K]^{v'_{k,i}} \quad (7)$$

و برای واکنش‌هایی که دارای ذره واسطه هستند معادله نرخ پیشرفت به صورت زیر تغییر خواهد یافت:

$$q_i = \left(\sum_{k=1}^K a_{k,i} [S_K] \right) (k_{f,i} \prod_{k=1}^K [S_K]^{v_{k,i}} - k_{b,i} \prod_{k=1}^K [S_K]^{v'_{k,i}}) \quad (8)$$

در روابط بالا k_f ثابت نرخ رفت می‌باشد که از رابطه آرنیوس قابل محاسبه است:

$$k_{f,i} = A_i T^{B_i} \exp\left(\frac{-E_i}{R_u T}\right) \quad (9)$$

و k_b ثابت نرخ برگشت می‌باشد که با استفاده از ثابت تعادل واکنش به صورت رابطه (۱۰) قابل محاسبه است:

$$k_{b,i} = \frac{k_{f,i}}{K_{c,i}} \quad (10)$$

ماتریس a نیز مربوط به ضریب تأثیر هر یک از گونه‌ها به عنوان گونه واسطه است.

نرخ تغییرات کسر مولی را می‌توان از طریق رابطه (۱۱) به نرخ تولید گونه‌ها مربوط ساخت:

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{M_k W_k'}{\dots} \quad (11)$$

در رابطه بالا W_k جرم مولکولی هر کدام از گونه‌هاست.

ضرایب خواص ترمودینامیکی از جداول NASA استفاده شده است که به صورت معادلات زیر محاسبه می‌شوند.

$$C_{pk}^0 = a_{1k} + a_{2k} T + a_{3k} T^2 + a_{4k} T^3 + a_{5k} T^4 \quad (12)$$

$$\frac{H_k^0}{R_u T} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T + \frac{a_{3k}}{3} T^2 + \frac{a_{4k}}{4} T^3 + \frac{a_{5k}}{5} T^4 + \frac{a_{6k}}{6} T^5 \quad (13)$$

$$\frac{S_k^0}{R_u} = a_{1,k} \ln T_k + \sum_{n=2}^7 \frac{a_{nk} T_k^{(n-1)}}{n-1} + a_{n+2,k} \quad (14)$$

برای تعیین مقدار $\frac{dQ}{dt}$ در معادله انرژی از روابط کلاسیک انتقال حرارت مثل رابطه ووشنی [۱۲] که ضرایب آن برای موتور HCCI

اصلاح گردید استفاده شده است.

$$\frac{dQ}{dt} = -\dot{q}'_{convection} - \dot{q}'_{radiation} \quad (15)$$

$$\frac{dQ}{dt} = 0.00326 B^{-0.2} P^{0.8} T^{-0.53} (T_m - T_{wall}) + C (T_m^4 - T_{wall}^4) \quad (16)$$

$$W = C_1 S_p + C_2 \frac{V_d T_{ig}}{P_{ig} V_{ig}} (P - P_{mot}) \quad (17)$$

۳- بررسی گرمای آزاد شده احتراق و محاسبه‌ی زمان شروع احتراق

جزئیات مدل گرمای آزاد شده در کتاب موتورهای احتراق داخلی هیوود مورد تحلیل قرار گرفته است. معادله‌ی کامل گرمای آزاد شده که با

در نظر گرفتن رابطه گاز ایده‌آل بدست می‌آید به صورت زیر است:

$$\frac{dQ_{HR}}{d\theta} = \frac{\gamma}{\gamma-1} P \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{\gamma-1} V \frac{dP}{d\theta} + V_{cr} \left[\frac{\dot{T}}{T_w} + \frac{T}{T_w(\gamma-1)} + \frac{1}{bT_w} \left(\frac{\gamma-1}{\gamma'-1} \right) \right] \frac{dP}{d\theta} + \frac{dQ_{HT}}{d\theta} \quad (18)$$

مقدار dQ_{HT}/dt نرخ انتقال حرارت مجموع^۱ می‌باشد. ترم سوم در سمت راست نشان دهنده‌ی انتقال حرارت به درزها و شکاف‌ها می‌باشد و در محاسبات صرف نظر شده است. ترم اول و دوم بیانگر تغییرات انرژی محسوس ناشی از تغییرات فشار و کار پیستون می‌باشد. ترم آخر هم بیانگر انتقال حرارت به دیواره‌ی سیلندر است که با استفاده از رابطه‌ی اصلاح شده‌ی وشنی محاسبه شده است.

برای محاسبه‌ی زمان شروع احتراق می‌توان از دو تعریف زیر استفاده کرد:

(۱) زمان شروع احتراق برابر درجه‌ی لنگی که در آن ۱۰٪ از ماکزیمم انتقال حرارت ناخالص آزاد شود تعریف می‌شود. همچنین دوره‌ی احتراق برابر تغییر درجه‌ی لنگی است که در آن از ۱۰٪ تا ۹۰٪ انتقال حرارت ناخالص (GHR) آزاد می‌شود.

(۲) زمان شروع احتراق برابر درجه‌ی لنگی که در آن مشتق سوم فشار از مقدار حدی که با توجه به مشخصات هر موتور به طور تجربی محاسبه می‌شود، بیشتر باشد تعریف می‌شود:

$$\left. \frac{d^3P}{d\theta^3} \right|_{iim} > \frac{d^3P}{d\theta^3}$$

مقدار dp_{3lim} با توجه به داده‌های آزمایشگاهی انجام شده برای موتور CFR برابر 5 kPa/CaD^3 بدست آمده است [9]. در نتیجه برای محاسبه زمان شروع احتراق از رابطه زیر استفاده می‌شود.

محاسبه‌ی مشتق سوم فشار به صورت عددی با استفاده از بسط سری تیلور از مرتبه ۱ و با دقتی از مرتبه ۲ با ۵ نقطه در هر بازه زمانی و به صورت پسرو محاسبه شده است:

$$\frac{d^3P}{d\theta^3}(i) = \frac{5P(i) - 18P(i-1) + 24P(i-2) - 14P(i-3) + 3P(i-4)}{2h^3} + O(h^2) \quad (19)$$

۴- صحت سنجی مدل

صحت سنجی با استفاده از نتایج تجربی بدست آمده بر روی یک موتور CFR توسط حسینی و چکل [۱۳] انجام گرفته است. در جدول ۱ شرایط این آزمایش آورده شده است.

جدول ۱ شرایط نتایج تجربی انجام گرفته توسط حسینی و چکل [۱۳]

140 °C	دمای ورودی
17.5	نسبت تراکم
0.25	نسبت هم‌ارزی
400 °C	دمای دیوار
800 rpm	دور موتور
1.4 bar	فشار ورودی

در شکل ۱ روند تغییرات فشار با زاویه‌ی لنگ برای مدل عددی و نتایج آزمایشگاهی با یکدیگر مقایسه شده‌اند. همان‌گونه که مشاهده می‌شود تا قبل از شروع احتراق روند تغییرات برای مدل عددی و نتایج تجربی یکسان است و مدل تک ناحیه‌ای شروع احتراق را به درستی پیش‌بینی می‌کند، ولی در مرحله احتراق اصلی به علت این که از گرادیان‌های مکانی صرف نظر شده است و تمام محفظه در یک دما قرار دارد احتراق به یکباره و در تمام محفظه به صورت همزمان انجام می‌گیرد در نتیجه مقدار بیشینه فشاری که توسط مدل تک ناحیه‌ای پیش‌بینی می‌شود بسیار بیشتر از نتایج تجربی است.

۵- اثر دمای اولیه روی خود اشتعالی

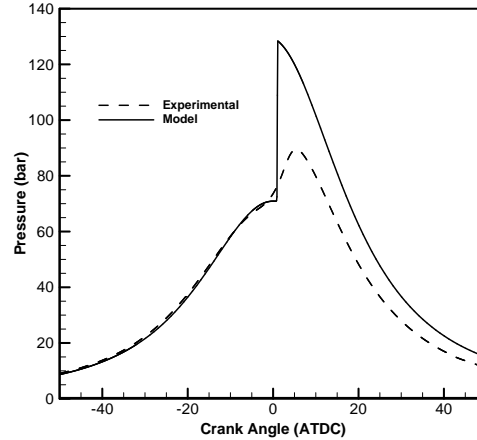
برای تعیین شرایط خود اشتعالی متان در شرایط کاری یاد شده، محدوده دمای اولیه‌ی مخلوط از ۳۱۳ K تا ۳۷۳ K تغییر داده شده است. در جدول ۲ زمان شروع احتراق با استفاده از دو تعریف مختلف که در قسمت قبل توضیح داده شد آورده شده است. نتایج مربوط به نمودارهای فشار و دما در شکل ۲ و شکل ۳ آمده است. با توجه به نتایج حاصله تا دمای ورودی ۳۸۳ کلوین، خود اشتعالی نخواهیم داشت و از دمای ۳۹۳ کلوین شاهد نقطه عطف در نمودار فشار-زاویه لنگ و افزایش فشار ناگهانی فشار و دما خواهیم بود. همان‌طور که ملاحظه می‌شود در دمای اولیه ۳۹۳ کلوین، خود اشتعالی بعد از TDC رخ می‌دهد. در این حالت از یک طرف افزایش فشار به علت واکنش‌های گرماده و از

¹ Gross Heat Release Rate (GHR)

طرف دیگر کاهش فشار به علت انبساط حجم محفظه احتراق را خواهیم داشت. این عوامل باعث می‌شود تا ابتدا شاهد افتی در فشار استوانه باشیم.

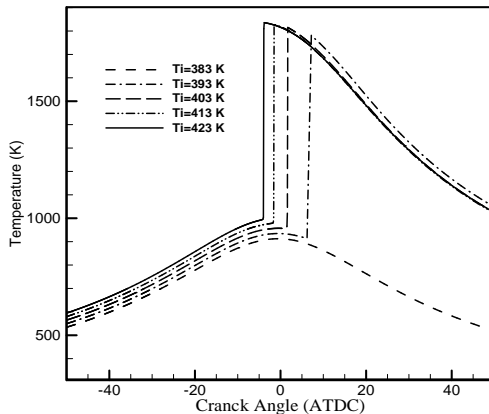
جدول ۲ مقایسه زمان آغاز احتراق برای دماهای اولیه مختلف با استفاده از دو تئوری متفاوت

Single-zone	T_{intake}	SOC (heat release analysis)	SOC (third derivative Method)
$\lambda = 3.4$	۳۸۳	-	-
	۳۹۳	5.5 CA	6.2 CA
	۴۰۳	0.8 CA	1.2 CA
	۴۱۳	-2.4 CA	-1.9 CA
	۴۲۳	-4.8 CA	-4.3 CA

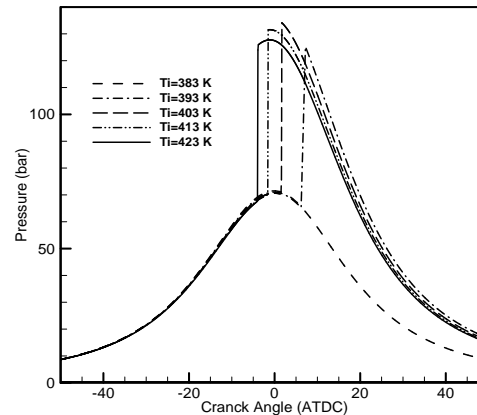


شکل ۱ تغییرات فشار در داخل سیلندر برای نتایج آزمایشگاهی و مدل سازی عددی

ولی با پیشرفت واکنش‌های احتراق و آزاد شدن سریع انرژی، دما به حدود ۱۹۰۰ درجه کلوین می‌رسد. با افزایش دمای ورودی مخلوط، خود اشتعالی سریع‌تر و زودتر رخ می‌دهد و به قبل از TDC می‌رسد و ماکزیمم دمای داخل سیلندر بیشتر می‌گردد. بررسی اثر تغییرات غلظت NO_2 و NO با دماهای ورودی متفاوت در شکل ۴ و شکل ۵ نشان داده شده است با افزایش دمای اولیه، مقدار NO تولیدی نیز به مراتب افزایش می‌یابد زیرا با افزایش دمای اولیه دمای ماکزیمم داخل محفظه زیاد شده است و مقدار NO_x تولیدی با توجه به مکانیزم زلدویچ که فقط وابسته به دما می‌باشد، افزایش می‌یابد.



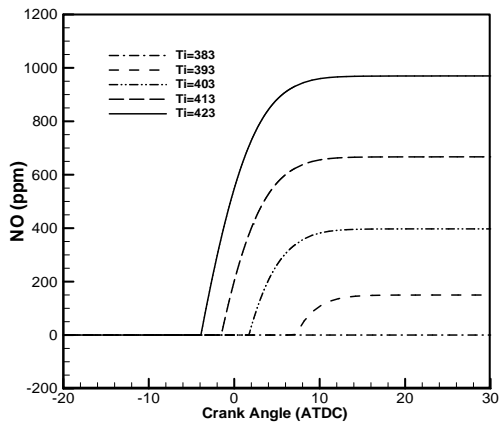
شکل ۳ تغییرات دما-زاویه لنگ به ازای دماهای ورودی مختلف



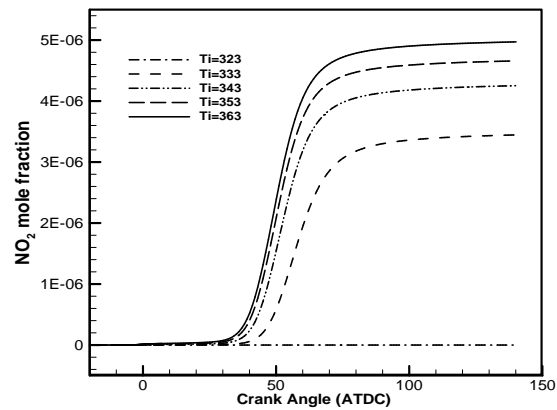
شکل ۴ تغییرات فشار-زاویه لنگ به ازای دماهای ورودی مختلف

۶- اثر نسبت تراکم روی خود اشتعالی

یکی از مهم‌ترین سازوکارهای پایش احتراق HCCI، استفاده از ساز و کار نسبت تراکم متغیر است. به این ترتیب که موتور در شرایط کاری متفاوت در نسبت تراکم بهینه کار کند. در این بخش نسبت تراکم از ۱۶ تا ۲۱ تغییر کرده و نتایج الگوی حاضر برای دمای ورودی ۳۵۰ کلوین در شکل‌های ۶ تا ۸ دیده می‌شود. همان طور که در شکل ۷ دیده می‌شود، تا نسبت تراکم ۱۷ شاهد خود اشتعالی نخواهیم بود و از نسبت تراکم ۱۸ و بالاتر خود اشتعالی اتفاق می‌افتد که نشان دهنده‌ی آن است تراکم امکان بیشتری برای گرم شدن پیدا می‌کند تا به دمای



شکل ۵ تغییرات غلظت NO-زاویه لنگ به ازای دماهای ورودی مختلف

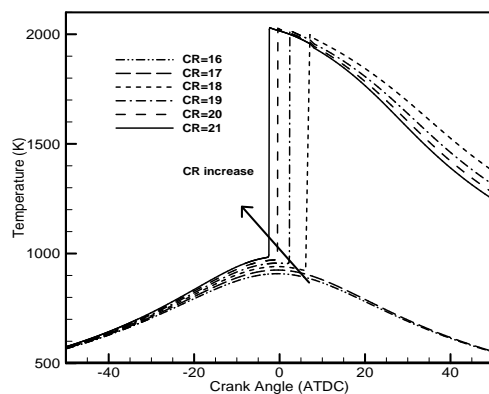


شکل ۴ تغییرات کسر مولی NO₂-زاویه لنگ به ازای دماهای ورودی مختلف

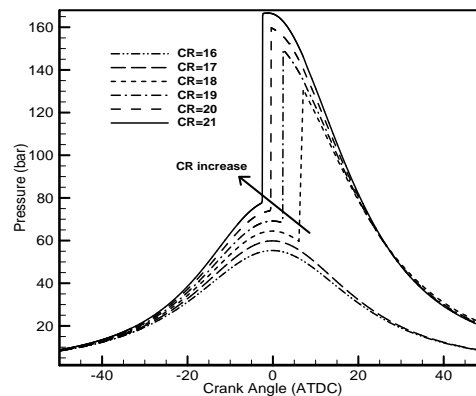
خود اشتعالی برسد. با بررسی نرخ انجام واکنش‌های برگشت زلدویچ مشاهده می‌شود که این واکنش‌ها در دمای بالاتر از ۱۸۰۰ کلوین فعال می‌شوند بنابراین چون در همه‌ی نسبت‌های تراکم بررسی شده با توجه به شکل ۸ دمای ماکزیمم بیشتر از ۱۸۰۰ کلوین است در نتیجه واکنش‌های برگشت زلدویچ نیز فعال می‌شوند و مقدار NO تولیدی کاهش می‌یابد.

جدو

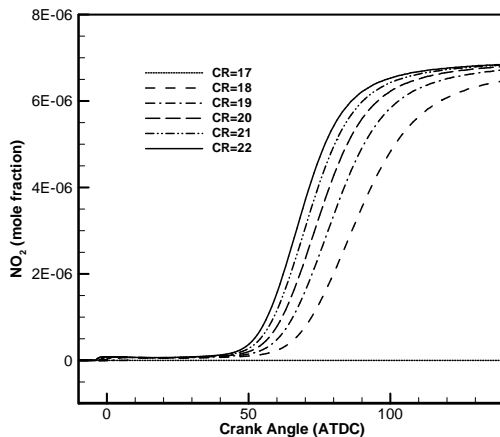
Single-zone	CR	SOC (heat release analysis)	SOC (third derivative Method)
$\lambda = 2$	16	-	-
	17	-	-
	18	-5.4 CA	6.1 CA
	19	1.5 CA	1.9 CA
	20	-1.3 CA	-0.9 CA
	21	-3.3 CA	-2.8 CA
	22	-4.8 CA	-4.3 CA



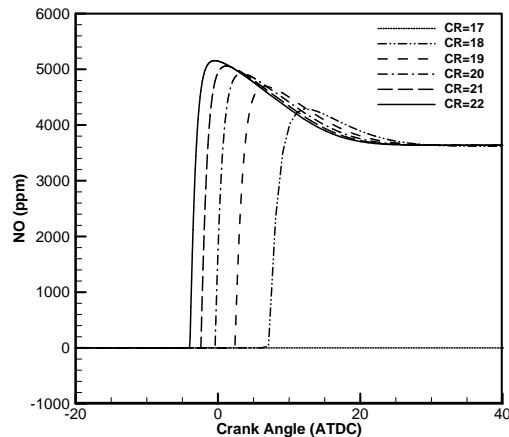
شکل ۶ تغییرات دما بر حسب زاویه لنگ به ازای نسبت تراکم‌های مختلف



شکل ۷ تغییرات فشار بر حسب زاویه لنگ به ازای نسبت تراکم‌های مختلف



شکل ۹ تغییرات غلظت NO₂-زاویه لنگ به ازای نسبت‌های تراکم مختلف



شکل ۸ تغییرات غلظت NO-زاویه لنگ به ازای نسبت‌های تراکم مختلف

۸- بررسی اثر افزودن گاز سنتزی بر روی احتراق HCCI

با پیش بینی درست زمان شروع احتراق در مدل تک ناحیه‌ای، این امکان برای کنترل زمان‌بندی احتراق فراهم می‌شود تا با استفاده از روش‌های مختلف به منظور افزایش بازدهی، کاهش مصرف سوخت، جلوگیری از ضربه شدید و کاهش آلاینده‌گی زمان شروع احتراق را به طور بهینه‌ای تغییر داد. روش‌های مستقیم برای تغییر زمان‌بندی احتراق معمولاً از انعطاف پذیری بالایی برای کنترل احتراق برخوردار نیستند. به طور مثال روش تغییر دمای ورودی برای کنترل زمان شروع احتراق از یک سیکل به سیکلی دیگر بسیار آهسته است و یا روش تغییر نسبت تراکم سیلندر برای کنترل زمان احتراق نیاز به تکنولوژی پیچیده همراه با هزینه بالا دارد. استفاده از روش جدید و بهینه تحت عنوان استفاده از گاز سنتزی RG که از سوخت اصلی حاصل می‌شود، دارای انعطاف پذیری و کاربرد بیشتری در کنترل احتراق HCCI می‌باشد.

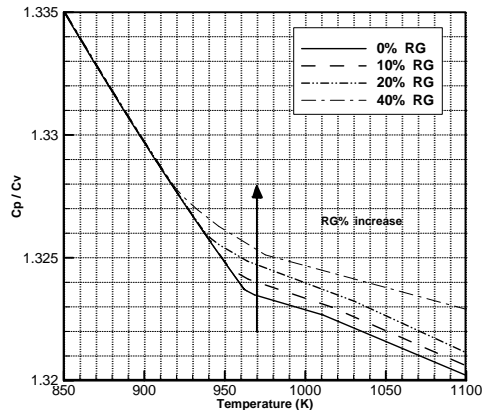
ترکیب گاز طبیعی به صورت معمولی ترکیبی از ۷۵٪ H₂ و ۲۵٪ CO می‌باشد. مقدار گاز سنتزی وارد شده نسبت به سوخت ورودی، بر مبنای جرمی سنجیده می‌شود و از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$\% RG = \frac{m_{RG}}{m_{RG} + m_{fuel}} \times 100 \quad (15)$$

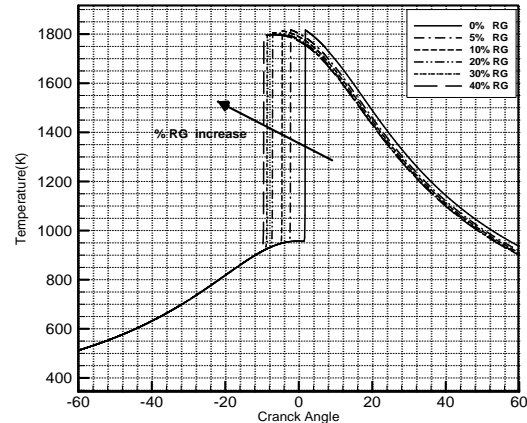
برای شرایط کاری ذکر شده در قسمت قبل تغییر درصد جرمی RG از ۰٪ تا ۴۰٪ تغییر داده شده است و اثر آن در شکل ۱۰ بر شروع احتراق قابل ملاحظه است. با توجه به شکل ۱۰ در نسبت هم‌ارزی ثابت برابر ۰.۳، افزایش درصد جرمی گاز سنتزی (RG) در نسبت هم‌ارزی‌های ثابت و کم (مخلوط رقیق) باعث شده با جلو افتادن شروع احتراق بازده آن افزایش یابد. بررسی اثر افزودن RG با دو دیدگاه مختلف مورد بررسی قرار گرفته است.

۸-۱- بررسی تغییر خواص ترمودینامیکی

احتراق متان نسبت به خود اشتعالی مقاومت بالایی نشان می‌دهد و احتراقی تک مرحله‌ای می‌باشد. به علت طبیعت احتراق که رادیکال‌های میانی قبل از احتراق به اندازه کافی در آن تشکیل نمی‌شوند یکی از عوامل کنترل کننده احتراق در این حالت دمای انتهای تراکم می‌باشد. همان طور که در شکل (۱۲) مشاهده می‌شود با افزایش مقدار RG مقدار نسبت گرمای ویژه (γ) در انتهای مرحله‌ی تراکم افزایش می‌یابد که دلیل آن جایگزینی مولکول دو اتمی RG که دارای مقدار γ بیشتری است نسبت به مولکول متان که دارای γ کمتر در دمای یکسان می‌باشد. افزایش مقدار نسبت گرمای ویژه موجب می‌شود دمای انتهای مرحله تراکم افزایش یابد و در نتیجه شروع احتراق که در این حالت مستقیماً وابسته به این دما است زودتر اتفاق بیفتد.



شکل ۱۱ تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه با دما به ازای درصد مختلف RG برای موتورهای با نسبت تراکم ۱۷.۵ و نسبت هم‌ارزی ۰.۳

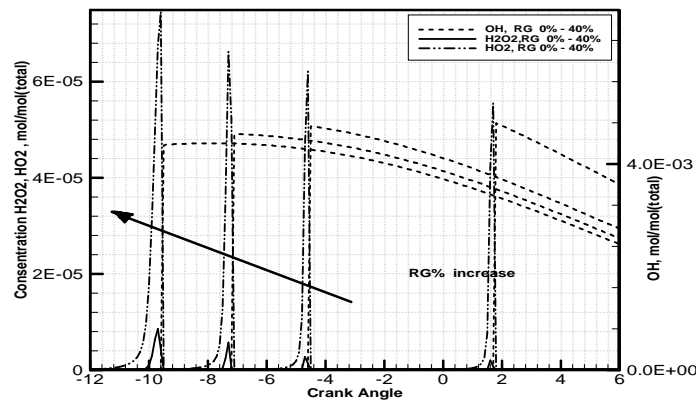


شکل ۱۰ بررسی اثر افزودن RG بر شروع احتراق برای موتورهای با نسبت تراکم ۱۷.۵ و نسبت هم‌ارزی ۰.۳

۸-۲- بررسی تغییر خواص سینتیک شیمیایی

افزودن گاز سنتزی به جای سوخت اولیه، شیمی واکنش‌های احتراقی را نیز تحت تأثیر قرار داده و مسیر و نرخ انجام واکنش‌ها را تغییر می‌دهد. با بررسی نرخ تغییر غلظت گونه‌ها در لحظه‌ی قبل از احتراق اصلی و لحظه‌ی احتراق می‌توان به اثر رادیکال‌های اصلی برای راه‌اندازی احتراق پی برد. گونه‌ی OH هم‌زمان با خود اشتعالی و مصرف سوخت، تولید و بلافاصله در واکنش‌هایی با نرخ بالا مصرف می‌شود و اما در حالتی که RG به سوخت افزوده می‌شود به علت افزایش غلظت H_2 ، غلظت گونه‌هایی میانی دیگر نظیر HO_2 ، H_2O_2 قبل از احتراق به شدت افزایش می‌یابد.

بنابراین غلظت گونه‌های OH ، H_2O_2 ، HO_2 به عنوان شاخصی برای فعال سازی سینتیک شیمیایی در نظر گرفته می‌شود. شکل ۱۲ تغییرات این رادیکال‌ها با افزایش درصد RG و تأثیر آن بر آغاز واکنش‌های شیمیایی را نشان می‌دهد. در حالتی که RG وجود ندارد غلظت گونه H_2O_2 دارای مقدار بیشینه (ppm) ۲ است اما با افزایش غلظت H_2 بر اثر اضافه کردن RG غلظت گونه H_2O_2 به مقدار بیشینه ۸.۶ (ppm) می‌رسد.



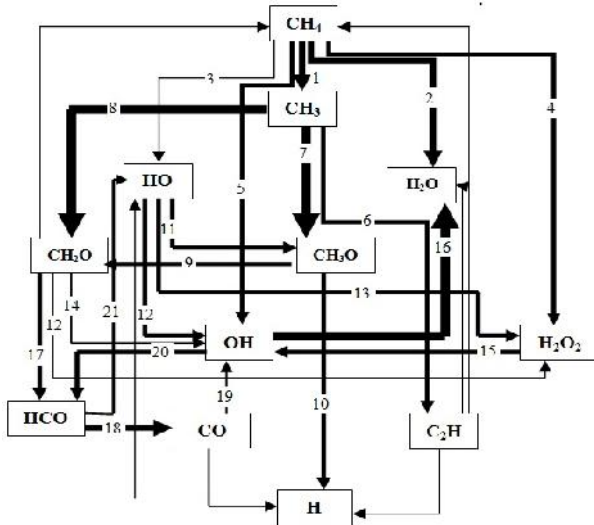
شکل ۱۲ تغییرات غلظت‌های گونه‌های OH ، H_2O_2 ، HO_2 با زاویه لنگ به ازای درصد مختلف RG برای موتورهای با نسبت تراکم ۱۷.۵ و نسبت هم‌ارزی ۰.۳

برای بررسی دقیق‌تر اثر سینتیکی افزودن RG مسیر انجام واکنش‌های اصلی برای گونه‌های موثر نشان داده شده است. مسیرهای نشان داده شده مربوط به درجه‌ی لنگ ثابتی قبل از احتراق اصلی می‌باشد. واکنش‌های مورد نظر برای این مسیرها در نشان داده شده است. در قسمت اول واکنش‌های ۱ تا ۱۶ در جدول ۴ واکنش‌ها مربوط به حالت ۰٪ RG بوده که مسیرهای واکنش‌های اصلی موثر مربوط به آن در احتراق در شکل ۱۳ نشان داده شده است. با افزودن RG که دارای ترکیب ثابت ۷۵٪ هیدروژن و ۲۵٪ متواکسید کربن است،

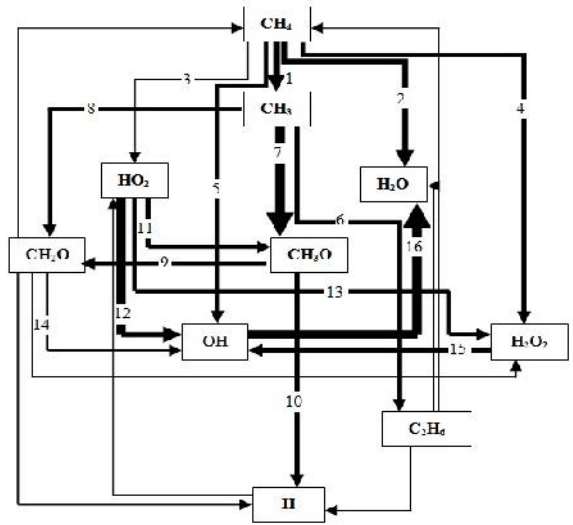
جدول ۴ واکنش‌های اساسی برای تعیین مسیرهای واکنش سوختن متان و اثر افزودن گاز سنتزی

1.	$\text{OH} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	- R98
2.	$\text{OH} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	- R98
3.	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{CH}_4$	- R118
4.	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CH}_4$	- R157
5.	$\text{O} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3$	- R11
6.	$2\text{CH}_3(+M) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_6(+M)$	- R158
7.	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3\text{O}$	- R119
8.	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_2\text{O}$	- R156
9.	$\text{H} + \text{CH}_2\text{O}(+M) \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O}(+M)$	- R157
	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	- R170
10.	$\text{H} + \text{CH}_2\text{O}(+M) \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O}(+M)$	- R57
11.	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3\text{O}$	- R11
	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	R170
12.	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3\text{O}$	- R119
13.	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3\text{O}$	R11
	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	- R170
14.	$\text{O}_2 + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{HCO}$	- R32
15.	$2\text{OH}(+M) \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2(+M)$	- R85
16.	$\text{OH} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	- R98
17.	$\text{O}_2 + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{HCO}$	- R32
	$\text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}_2$	R121
18.	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$	- R168
19.	$\text{HO}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CO}_2$	- R120
20.	$\text{OH} + \text{CH}_2\text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_2\text{O}$	- R102
21.	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$	- R168
22.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	R33
	$\text{H} + 2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{O}_2$	R34
	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{N}_2$	R36
23.	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{OH}$	- R38
	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	- R84
	$\text{OH} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	- R98
24.	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3\text{O}$	R119
	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{CH}_3\text{O}$	- R155

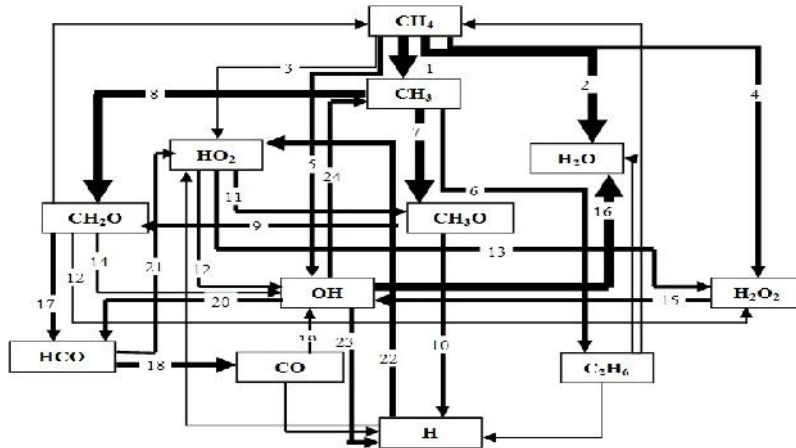
از ۰٪ تا ۱۰٪، واکنش‌های جدیدی در همان زمان علاوه بر واکنش‌های قبلی شکل می‌گیرد که در قسمت دوم جدول ۴ نشان داده شده است (۲۱، ۲۰، ۱۹، ۱۸، ۱۷). شکل گیری واکنش‌ها و گونه‌های جدید با بررسی مسیرهای واکنش در شکل ۱۴ نشان دهنده‌ی فعال شدن سینتیک شیمیایی در مسیرهای جدید می‌باشد. با افزایش درصد RG از ۱۰٪ به ۳۰٪ به علت افزایش غلظت هیدروژن با افزودن بیشتر RG و تأثیر سینتیکی ناشی از این رادیکال در واکنش‌هایی در مسیرهای (۲۴، ۲۳، ۲۲) که در شکل ۱۵ نشان داده شده پدیدار می‌گردد. این واکنش‌ها در قسمت سوم جدول ۴ نشان داده شده است. علاوه بر بررسی مسیر انجام واکنش‌ها برای بیان تأثیر سینتیک شیمیایی بر احتراق HCCI بررسی نرخ انجام واکنش‌ها در این مسیرها نیز تأثیر بسزایی برای بررسی افزودن RG بر احتراق دارد. شکل ۱۶ نرخ انجام واکنش ۱۱۹ در مسیر ۱۲ و شکل ۱۷ نرخ انجام واکنش ۳۳ در مسیر ۲۲ را نشان می‌دهد. با افزایش مقدار RG نرخ بیشینه در لحظه‌ی احتراق و پیش از آن کاهش پیدا کرده است و علت آن ناشی از تأثیر سینتیکی افزودن RG است به گونه‌ای که با افزودن RG مقدار سوخت کاهش یافته و واکنش در مسیرهای دیگر فعال شده است. علاوه بر بررسی مسیر انجام واکنش‌ها برای بیان تأثیر سینتیک شیمیایی بر احتراق HCCI بررسی نرخ انجام واکنش‌ها در این مسیرها نیز تأثیر بسزایی برای بررسی افزودن RG بر احتراق دارد. شکل (۱۶) نرخ انجام واکنش ۱۱۹ در مسیر ۱۲ و شکل (۱۶) نرخ انجام واکنش ۳۳ در مسیر ۲۲ را نشان می‌دهد. با افزایش مقدار RG نرخ بیشینه در لحظه‌ی احتراق و پیش از آن کاهش پیدا کرده است و علت آن ناشی از تأثیر سینتیکی افزودن RG است به گونه‌ای که با افزودن RG مقدار سوخت کاهش یافته و واکنش در مسیرهای دیگر فعال شده است.



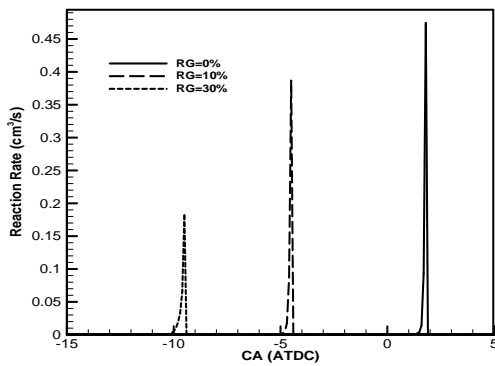
شکل ۱۴ مسیر واکنش‌های اساسی گونه‌ها برای شناسایی رفتار احتراقی با افزودن ۱۰٪ RG



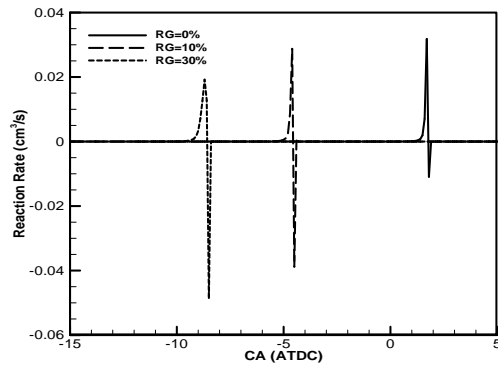
شکل ۱۳ مسیر واکنش‌های اساسی گونه‌ها برای شناسایی رفتار احتراقی در حالت RG ٪۰



شکل ۱۵ مسیر واکنش‌های اساسی گونه‌ها برای شناسایی رفتار احتراقی با افزودن ۳۰٪ RG



شکل ۱۷ تغییر نرخ واکنش ۳۳ در مسیر ۲۲ با افزودن RG



شکل ۱۶ تغییر نرخ واکنش ۱۱۹ در مسیر ۱۲ با افزودن RG

۹- نتیجه گیری

با مدل ترمودینامیکی-سینتیکی صفر بعدی تک ناحیه ای می توان به صورت کیفی و کمی رفتار احتراق HCCI را برای شرایط گوناگون مورد بررسی قرار داد و زمان شروع احتراق را با دقتی مناسب با استفاده از تئوری های آزادسازی گرمایی و مشتق سوم فشار با مقایسه با داده های آزمون بررسی و محاسبه کرد.

مدل تک ناحیه ای قابلیت پیش بینی کمی و کیفی تأثیر پارامترهای ورودی موتور بر پارامترهای کنترلی را دارد. بررسی تأثیر دمای ورودی و نسبت تراکم بر احتراق برای بدست آوردن دمای مناسب که موجب افزایش راندمان و کاهش آلایندگی NOx شود. بررسی و کنترل زمان احتراق با روش افزودن RG یک روش موثر و قابل حصول می باشد که با افزایش مقدار آن در مخلوط احتراق زودتر اتفاق می افتد. در نتیجه امکان استفاده از این موتور را در نسبت تراکم های کمتر برای جلوگیری از ضربه، با دمای ورودی پایین تر و نسبت هم آریزی کمتر فراهم می کند و در نهایت از بد سوزی ناشی از پایین بودن احتراق جلوگیری می کند.

بررسی دقیق تر احتراق نشان می دهد با افزودن RG نه تنها خواص ترمودینامیکی تغییر می کند، بلکه سینتیک شیمیایی احتراق تغییر کرده که با بررسی مسیر واکنش های اساسی و گونه های احتراقی مهم نشان داده شده است. این بررسی امکان بیشتر کنترل زمان آغاز احتراق را با اضافه کردن افزودنی ها فراهم می کند.

مراجع و منابع

- 1- Onishi, S., Jo, S. H., Shoda, K., Jo, P. D. And Kato, S. "Active Thermo-Atmosphere," Combustion (Atac), a New Combustion Process For Internal Combustion Engines. Sae Paper, No. 790501
- 2- Fiveland S. B. and Assanis D.N. "Development and Validation of a Quasi-Dimensional Model for HCCI Engine Performance and Emissions Studies under Turbocharged Conditions." SAE Technical Paper, No. 2002-01-1757.
- 3- Fiveland S. B., Christensen M., Johansson B., Hiltner F. and Assanis D. N. "Experimental and Simulated Results Detailing the Sensitivity of natural Gas HCCI Engines to Fuel Composition." SAE Technical Paper, No. 2001-01-3609
- 4- R.R. Chianelli, M.X. Daage, M.J. Ledoux Fundamental studies of transition-metal sulfide catalytic materials, In Advances in Catalysis, edited by D.D. Eley, H. Pines, W.O. Haag, Burlington, Mass; Academic press, 1994
- 5- Haraldsson G, et al. (2004). HCCI closed-loop combustion control using fast thermal management. SAE Paper, 2004-01-0943.
- 6- Amjad, A. K., R. Khoshbakhi Saray, et al. (2011). "Availability analysis of n-heptane and natural gas blends combustion in HCCI engines." Energy 36(12): 6900-6909
- 7- Shudo, T., Ono, Y., and Takahashi, T., "Influence of Hydrogen and Carbon Monoxide on HCCI Combustion of Dimethyl Ether," SAE Technical Paper 2002-01-2828
- 8- Tsolakis, A., and Megaritis, A., 2005, "Partially Premixed Charge Compression Ignition Engine With On-Board H2 Production by Exhaust Gas Fuel Reforming of Diesel and Biodiesel," Int. J. Hydrogen Energy, 30,
- 9- Hosseini, V., and Checkel, M. D., 2007, "Effect of Reformer Gas on HCCI Combustion—Part I: High Octane Fuels," SAE Paper No. 2007-01-0208.
- 10- Hosseini, V. and Checkel, M., "Effect of Reformer Gas on HCCI Combustion - Part II: Low Octane Fuels," SAE Technical Paper 2007-01-0206, 2007,
- 11- <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>
- 12- Heywood J B. (1 988). Internal Combustion Engine Fundamentals: McGraw-Hill, Inc. 930 Pages
- 13- V Hosseini, M D Checkel, 2009, "Reformer Gas Application in Combustion Onset Control of HCCI Engine", The Journal of Engine Research, Vol 14, Spring 2009, ISSN 173
- 14- Shahbakhti, M. (2009), Modeling and Experimental Study of an HCCI Engine for Combustion Timing Control, Ph.D. Thesis, University of Alberta
- 15- Shahangian S. N. and Jazayeri S.A." Effect of Initial Temperature and EGR on Combustion and Performance Characteristics of Homogeneous Charge Compression Ignition Engine Fueled with Dimethyl Ether." Journal of Engine Research 14(2009): 63-70