



## شبیه‌سازی ترموسینتیک چندناحیه‌ای موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن با سوخت ترکیبی متان و دی‌متیل‌اتر

امید جهانیان<sup>۱\*</sup>، سید علی جزایری<sup>۲</sup>، علی یوسف‌زاده<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، بابل، ایران، [jahanian@nit.ac.ir](mailto:jahanian@nit.ac.ir)

<sup>۲</sup>دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران، [jazayeri@kntu.ac.ir](mailto:jazayeri@kntu.ac.ir)

<sup>۳</sup>دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، بابل، ایران، [a.yousefzadeh@stu.nit.ac.ir](mailto:a.yousefzadeh@stu.nit.ac.ir)

\*نویسنده مسئول، شماره تماس: ۰۹۱۳۳۱۳۵۵۸۱

### اطلاعات مقاله

### چکیده

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۲۹ بهمن ۱۳۹۲

پذیرش: ۲۵ اسفند ۱۳۹۲

کلیدواژه‌ها:

موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن

شبیه‌سازی چندناحیه‌ای

دی‌متیل‌اتر

متان

موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن (HCCI) طرحی کارآمد از موتورهای احتراق داخلی برای کاهش مصرف سوخت و آلاینده‌های دود خروجی است. هدف این کار، بررسی شبیه‌سازی چندناحیه‌ای با سینتیک مفصل شیمیایی موتور اشتعال تراکمی مخلوط همگن است تا به بررسی شرایط کاری این موتور در ترکیب مختلف از سوخت دی‌متیل‌اتر و متان پرداخته شود. شبیه‌سازی گسترش یافته با ۱۳ ناحیه و حل سینتیک مفصل شیمیایی متان و دی‌متیل‌اتر، نشان از احتراق دومرحله‌ای سوخت دی‌متیل‌اتر دارد. مقایسه با نتایج تجربی نشان‌دهنده پیش‌بینی مناسب زمان شروع احتراق و الگوی فشار نیز است. پنج ترکیب مختلف که از دی‌متیل‌اتر خالص تا متان خالص تغییر می‌کند، برای مطالعه اثر سوخت ترکیبی انتخاب شده است. بررسی نشان داده است که در یک شرایط اولیه، متان خالص محترق نمی‌شود اما افزودن دی‌متیل‌اتر واکنش را به سمت شکل‌گیری احتراق پیش می‌برد. تغییرات مقدار دی‌متیل‌اتر تغییرات چندانی در شروع احتراق ایجاد نمی‌کند اما بشدت قدرت خروجی را تغییر می‌دهد.

تمامی حقوق برای انجمن علمی موتور ایران محفوظ است.

**(۱) مقدمه**

از سال ۱۹۷۹ که مفهوم احتراق اشتعال تراکمی مخلوط همگن (HCCI) را برای اولین بار اونیسی بر روی موتورهای دوزمانه پیاده کرد [۱]، این گونه از موتورها به دلیل بازده گرمایی بزرگ و مقدار کم آلاینده ها در دود خروجی، توجه بسیاری از محققان را جلب کرده است.

آماده سازی مخلوط همگن و زمان بندی شروع (SOC)<sup>۲</sup> احتراق از دشوارترین متغیرهای احتراق HCCI اند [۲]. سوخت متان از سوخت‌های مهم در موتورهای احتراق داخلی بخصوص در منطقه شهری است [۳]، این سوخت به دلیل پایداری شیمیایی و ظرفیت مناسب در تولید مخلوط با هوا برای موتورهای HCCI مناسب است. ساختار مولکولی ساده متان گونه‌های میانی کمتری را در هنگام احتراق شامل می‌شود و نسبت کم کربن به هیدروژن در این سوخت مواد مضر کمتری را در محصولات خروجی احتراق آن نتیجه می‌دهد. علاوه بر این مخلوط متان و هوا مقاومت قوی در برابر اشتعال خودبخودی دارد که امکان افزایش نسبت تراکم حجمی و در پی آن بازده موتور را فراهم می‌سازد [۴].

به این علت که قابلیت اشتعال خودبخودی متان ضعیف است، برای داشتن اشتعالی پایدار نیاز به اشتعال اضافی است. افزایش دمای مخلوط و همچنین افزودن بهبوددهنده اشتعال از راه‌های اصلی اند. فرمالدهید و دی‌متیل‌اتر (DME)<sup>۳</sup> شناخته‌شده‌ترین افزودنی برای بهبود احتراق متان به حساب می‌آیند [۵]. از خواص دی‌متیل‌اتر دمای نقطه جوش خنک و عدد ستان بزرگ است، که باعث شده تا از این سوخت به عنوان افزودنی استفاده گردد [۶].

دی‌متیل‌اتر به دلیل برتری آن در خوداشتعالی نسبت به سوخت‌های دیزل معمول، از افزودنی‌های مطلوب در موتورهای HCCI است. این خاصیت از دی‌متیل‌اتر باعث شده که در دمای خنکتر خوداشتعالی به وجود آید و نیاز به پیش گرمایش سوخت نباشد که همین ویژگی می‌تواند دی‌متیل‌اتر را به عنوان سوخت اصلی معرفی کند. سوخت محترق نشده موجود در این مخلوط را هم می‌توان در واکنشگری ساده تحت پایش قرار داد [۷]. در جدول (۱) خواص دو سوخت متان و دی‌متیل‌اتر با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

تاکنون مطالعات زیادی در این امر متمرکز شده‌اند. آکرومانیاس [۸] در کار خود اشاره به ظرفیت قوی دی‌متیل‌اتر به عنوان سوخت جایگزین کرد. شیباتا [۹] پیشنهاد داد که استفاده از شاخص عدد اکتان در موتور HCCI اشتباه است. سعید [۱۰] در کار خود از شبیه سازی ۱۰ ناحیه‌ای برای بررسی مشخصات سوخت‌های سوخته‌شده در موتور اشتعال تراکمی استفاده کرد. پدرس و شران [۷] از شبیه سازی تجربی برای بررسی اثرات غنا (نسبت هم‌ارزی)، سرعت موتور

و نسبت تراکم حجمی بر روی موتور HCCI با سوخت دی‌متیل‌اتر برای به دست آوردن محدوده کوبش موتور استفاده کردند. کانگ [۶] از شبیه سازی CFD با سینتیک مفصل شیمیایی برای تعیین محدوده کاری موتور با سوخت ترکیبی متان و دی‌متیل‌اتر استفاده کرد. یانگ [۱۱] از سوخت دی‌متیل‌اتر به عنوان افزودنی بر متانول و گاز طبیعی در موتور HCCI استفاده کرد و آن دو را با هم مقایسه کرد. مرسی از شبیه سازی تک‌ناحیه‌ای برای بررسی اثر افزودن دی‌متیل‌اتر و فرمالدهید در شروع احتراق بر روی موتور HCCI با سوخت متان استفاده کرد. کونو و چن [۵] بر روی احتراق HCCI با سوخت دی‌متیل‌اتر و متان کار کردند. شاهنگیان [۱۳] به مقایسه عملکرد موتوری HCCI با سوخت‌های دی‌متیل‌اتر و ان-هپتان پرداخته است. چون-یان [۱۴] از سازوکار گسترده برای داشتن احتراقی منظم دی‌متیل‌اتر استفاده کرد و آن را با نمونه ساده‌تر از سازوکار این سوخت بر روی موتور HCCI مقایسه کرد. جزایری [۱۵] سوخت دی‌متیل‌اتر و PRF را مقایسه کرد.

این مقاله به معرفی شبیه سازی صفربعدی چندناحیه‌ای برای بررسی مشخصات احتراق موتور HCCI با سوخت متان و دی‌متیل‌اتر پرداخته است. این شبیه سازی شامل سینتیک مفصل شیمیایی است. ترکیبات مختلفی از متان و دی‌متیل‌اتر برای مقایسه انتخاب شده است. روش کار در بخش بعدی به طور گسترده شرح داده خواهد شد.

**(۲) شبیه سازی**

شبیه سازی‌های تک ناحیه‌ای که در کارهای گذشته بکار رفت [۱۷-۲۰] شبیه سازی چندناحیه‌ای گسترش یافته است. در این بخش یک شبیه سازی چندناحیه‌ای با جزئیات شرح داده می‌شود. در این کار از محیط MATLAB برای پیاده کردن نرم‌افزار هدف و از گزینه CANTERA برای دستیابی به خواص ترموسینتیک مخلوط گازی شکل استفاده شده است.

این شبیه سازی از سینتیک مفصل شیمیایی استفاده می‌کند و از اثرات پدیده انتقال گونه‌ها صرف‌نظر شده است. به این دلیل که بر احتراق HCCI عمدتاً واکنش‌های شیمیایی مسلط است و چندان اثراتی از پخش شعله دیده نمی‌شود.

جدول ۱: خواص سوخت‌های متان و دی‌متیل‌اتر [۱۶]

متان	دی‌متیل‌اتر	ساختار
$CH_4$	$CH_3OCH_3$	
۴۹٫۹	۲۸٫۸	ارزش حرارتی کوچک (MJ/kg)
۱۷٫۲	۸٫۹۵	AF <sub>stoichiometric</sub>
۰	۶۰-۵۰	عدد ستان
-۱۶۲	-۲۵	نقطه جوش (°C)

1 Homogenous charge compression ignition

2 Start of combustion

3 Di methyl ether

### ۳-۱) بقای جرم

با صرف نظر از نشتی استوانه، مقدار جرم در چرخه بسته، ثابت در نظر گرفته شده است:

$$\frac{dm_{cyl}}{dt} = 0 \quad (5)$$

علاوه بر این، با توجه به اینکه انتقال جرم در مرز ناحیه‌ها در نظر گرفته نشده است در مرزها جرم محلی ثابت خواهد بود:

$$\frac{dm_k}{dt} = 0 \quad (6)$$

### ۳-۲) بقای انرژی

بقای انرژی برای هر ناحیه تعادل بین انرژی داخلی و کار و حرارت عبوری از مرز برقرار می‌کند:

$$\frac{dU_k}{dt} = \frac{dQ_k}{dt} - p \frac{dV_k}{dt} \quad (7)$$

انرژی داخلی ناحیه  $k$  ام به صورت مجموع انرژی داخلی تمام گونه‌ها محاسبه می‌گردد:

$$U_k = \sum_{i=1}^{N_s} m_{k,i} u_{k,i} \quad (8)$$

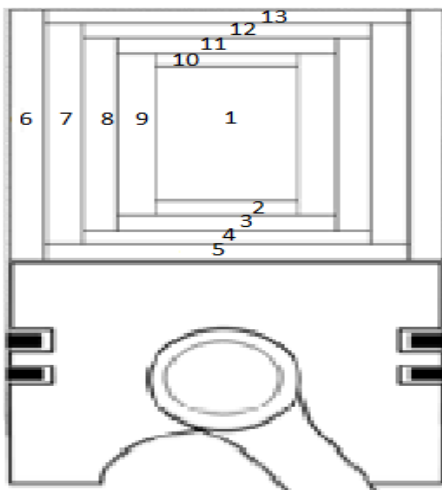
مشق معادله ۸ بدین شرح است:

$$\frac{dU_k}{dt} = \sum_{i=1}^{N_s} \left( m_{k,i} \frac{du_{k,i}}{dt} + u_{k,i} \frac{dm_{k,i}}{dt} \right) \quad (9)$$

نرخ تغییرات گونه‌های  $i$  ام نیز بدین شرح است:

$$\frac{dm_{k,i}}{dt} = m_k \times \frac{dY_{k,i}}{dt} \quad (10)$$

نرخ تغییرات حجم ناحیه  $k$  ام و همچنین حجم کل بترتیب از معادلات (۱) و (۲) به دست می‌آید.



شکل ۱: نحوه قرارگیری ناحیه‌ها در شبیه‌سازی چندناحیه‌ای

یک موتور چهار زمانه HCCI در چرخه بسته از لحظه بسته شدن دریچه ورودی (IVC) تا باز شدن دریچه خروجی (EVO) در نظر گرفته شده است. کل محفظه احتراق به ۱۳ ناحیه تقسیم شده است. هر ناحیه توزیع دما و فشار یکنواختی دارد. دمای ناحیه‌ها با هم متفاوت است اما فشار در سراسر استوانه یکنواخت است [۲۱]. تمامی گازها همچون گاز کامل رفتار می‌کنند. از نشتی سمبه صرف نظر شده است. فشار و مخلوط هوا و سوخت در لحظه بسته شدن دریچه ورودی کاملاً همگن در نظر گرفته شده اما دما در ناحیه‌های مختلف متفاوت است. آشفتنی در موتورهای HCCI تأثیر چندانی ندارد [۲۲]. از اختلاط بین ناحیه‌ها صرف نظر شده است. تنها کار و گرما از مرز ناحیه‌ها به یکدیگر انتقال می‌یابند. مرز ناحیه‌ها می‌توانند حرکت کنند. از شبیه‌سازی اصلاح شده برای انتقال حرارت به دیواره استوانه استفاده شده است.

نحوه شکل‌دهی ناحیه‌ها در شکل (۱) مشخص است. محفظه احتراق به ۱۳ ناحیه که در چهار دسته قرار می‌گیرند تقسیم‌بندی شده است.

گروه ۱: هسته (ناحیه ۱)

گروه ۲: پایین محفظه احتراق (۴ ناحیه)

گروه ۳: نواحی حلقوی (۴ ناحیه)

گروه ۴: بالای محفظه احتراق (۴ ناحیه)

### ۳) معادلات حاکم

با مشخص کردن فشار یکسان در هر ناحیه، با استفاده از قانون گاز کامل حجم هر ناحیه از حجم کل به دست می‌آید.

$$V_k = V_{cyl} \frac{m_k R_k T_k}{\sum_{k=1}^{N_z} m_k R_k T_k} \quad (1)$$

زیرنویس  $k$  بیانگر  $k$  امین ناحیه است. حجم استوانه ( $V_{cyl}$ ) از معادله (۲) محاسبه می‌گردد [۲۳]:

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

از قانون گاز کامل می‌توان برای محاسبه فشار محفظه احتراق و نرخ تغییرات آن استفاده کرد.

$$P = \frac{1}{V_{cyl}} \sum_{k=1}^{N_z} m_k R_k T_k \quad (3)$$

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{1}{V^2} \frac{dV_{cyl}}{dt} \sum_{k=1}^{N_z} m_k R_k T_k + \frac{1}{V_{cyl}} \times \sum_{k=1}^{N_z} \left( m_k T_k \frac{dR_k}{dt} + m_k R_k \frac{dT_k}{dt} \right) \quad (4)$$

1 Inlet Valve Closing

2 Exhaust Valve Opening

بنابراین نرخ تغییرات واکنش برای این واکنش‌های اولیه بدین شرح است:

$$RR_i = \left( \sum_{j=1}^{N_s} a_{j,i} [TB_k] \right) \times \left( k_{f,i} \prod_{j=1}^{N_s} [S_j]^{v'_{j,i}} - k_{b,i} \prod_{j=1}^{N_s} [S_j]^{v''_{j,i}} \right) \quad (17)$$

ضرایب می‌توانند از اطلاعات سازوکار سوخت به دست آیند [۲۵]. بنابراین نرخ تولید و مصرف هرگونه شیمیایی می‌تواند بدین شرح محاسبه گردد:

$$\dot{\omega}_j = \sum_{i=1}^{N_R} RR_i (v'_{j,i} - v''_{j,i}) \quad (18)$$

سرانجام برای هر یک از گونه‌ها در هر ناحیه، نرخ تغییرات نسبت جرمی بدین شرح است:

$$\frac{dY_{k,i}}{dt} = \frac{\dot{\omega}_{k,i} W_i}{\rho_k} \quad (19)$$

### ۳-۴) جزئیات سازوکار احتراق

سینیتیک مفصل شیمیایی که در این مقاله استفاده شده است شامل ۳۳۶ واکنش ابتدایی و ۷۸ گونه شیمیایی برای احتراق دی‌متیل‌اتر است، اما بهترین سازوکار برای احتراق متان GRI-Mech 3.0 است [۲۷]. این شبیه‌سازی‌ها به طور اساسی مشابه اکسایش متان اند. اکسایش با هیدروژن زدایی با OH شروع می‌گردد. سپس گونه CO و CO<sub>2</sub> از HCHO تشکیل می‌گردند. اما تفاوتی در تشکیل HCHO وجود دارد.

در شبیه‌سازی کوران، مسیر اصلی از گونه میانی CH<sub>3</sub>OH است، در حالی که در GRI-Mech 3.0 این از گونه CH<sub>3</sub>O است. کونو و چن نشان دادند که به طور کلی این دو بسیار به هم شبیه اند هرچند که تفاوتی کوچک در محدوده دمای داغ آن وجود دارد.

این امکان وجود دارد که شبیه‌سازی کوران به طور کلی سازوکار واکنش احتراق متان را نمایش می‌دهد و می‌تواند برای ترکیبات سوخت در این مقاله استفاده شود.

### ۴) انتقال حرارت

معادله اصلاح شده انتقال حرارت وشنی [۲۸] (شبیه‌سازی آسانیس)، به طور کلی در شبیه‌سازی‌های تک‌ناحیه‌ای و چندناحیه‌ای موتور HCCI بکار می‌رود. شبیه‌سازی اصلاح شده، شبیه‌سازی اولیه آن را گسترش می‌دهد که حالت سریع احتراق HCCI را هم در نظر می‌گیرد. این معادله، تخمینی منطقی از انتقال حرارت کلی می‌زند اما برای دمای گازها در ناحیه‌های مشخص مناسب نیست. برای مثال، انتقال حرارت جابه‌جایی بین مرز نواحی و دیواره استوانه باید با استفاده از دمای کلی ناحیه هسته پیشگویی شود. برای فراهم کردن

سرانجام با قرار دادن این دو معادله در کنار معادله (۷) و دانستن اینکه  $dU = C_v dT$  و  $C_p - C_v = R$  برای گاز کامل می‌دهند:

$$\bar{C}_p \frac{dT_k}{dt} = \frac{1}{m_k} \frac{dQ_k}{dt} - \sum_{i=1}^{N_s} u_{k,i} \frac{dY_{k,i}}{dt} - \frac{R_k T_k}{V_{cyl}} \frac{dV_{cyl}}{dt} - T_k \frac{dR_k}{dt} + \frac{R_k T_k}{\sum_{k=1}^{N_z} m_k R_k T_k} \times \sum_{k=1}^{N_z} (m_k R_k \frac{dT_k}{dt} + m_k T_k \frac{dR_k}{dt}) \quad (11)$$

$\bar{C}_p$  ظرفیت گرمایی مخلوط در فشار ثابت است. دومین عبارت در سمت راست معادله از وابستگی با سینیتیک مفصل شیمیایی به دست می‌آید.

### ۳-۳) سینیتیک شیمیایی

قانون کنش جرم [۲۴] تشریح می‌کند که برای شکل کلی  $aA + bB \rightarrow cC$  نرخ واکنش در هر مسیر بستگی به غلظت و ضرایب استوکیومتریک آنها دارد. بنابراین سرعت واکنش بدین شرح است:

$$RR = k_f [A]^a [B]^b - k_b [C]^c \quad (12)$$

نماد [A] غلظت مولی گونه A را بیان می‌کند و ثابت k از معادله آرنهیوس [۲۴] محاسبه می‌گردد. نماد f و b بترتیب نماد واکنش دهنده و محصولات اند.

$$k = A_{Ar} T^\beta \exp\left(\frac{-E_a}{R_u T}\right) \quad (13)$$

هر سازوکار شامل معادلات اولیه است که بنسبت ساده یا شامل جسم سوم است. یک معادله اولیه ساده می‌تواند بدین شکل خلاصه گردد:

$$\sum_{k=1}^{N_s} v'_{k,i} S_i \rightarrow \sum_{k=1}^{N_s} v''_{k,i} S_i \quad i = 1, 2, \dots, N_R \quad (14)$$

برای هر واکنش اولیه ساده، نرخ تغییرات واکنش بدین شرح است:

$$RR_i = k_{f,i} \prod_{k=1}^{N_s} [S_k]^{v'_{k,i}} - k_{b,i} \prod_{k=1}^{N_s} [S_k]^{v''_{k,i}} \quad (15)$$

بعضی از معادلات اولیه نیاز به جسم سوم دارند. به نسبت مقدار غلظت جسم سوم، سرعت واکنش دستخوش تغییر می‌گردد. در صورت حضور جسم سوم معادله بدین شرح تغییر می‌کند:

$$\sum_{j=1}^{N_s} v'_{j,i} S_i + TB \rightarrow \sum_{j=1}^{N_s} v''_{j,i} S_i + TB \quad (16)$$

غلظت جسم سوم شامل غلظت تمام گونه‌ها به علت افزایش ضریب آنهاست.

در این کار انتقال جرم بین نواحی در نظر گرفته نشده است. انتقال انرژی بین نواحی فقط به دلیل اختلاف دما رخ می‌دهد [۲۹]. انتقال حرارت بین نواحی بدین شکل محاسبه می‌گردد:

$$\dot{q}_{cond,k} = A_{cond,k,k'}(T_k - T_{k'}) / \left( \frac{d_k}{\lambda_k} + \frac{d_{k'}}{\lambda_{k'}} \right) \quad (23)$$

ضریب رسانش گرمایی برای ناحیه k ام ( $\lambda_k$ ) با فرض گاز کامل برای مخلوط به دست می‌آید و  $d_k$  مرکز ناحیه k ام و سطح در تماس با ناحیه بعد است.

به‌طور معمول، انتقال حرارت جابه‌جایی از مرز به دیواره استوانه حدود ده مرتبه بزرگتر از انتقال حرارت تشعشعی محلی است. همچنین انتقال حرارت هدایتی بین نواحی دارای مرتبه بزرگی کمتر از انتقال حرارت مرز به دیواره است و انتقال حرارت تشعشعی از ناحیه هسته به دیواره دارای مرتبه بزرگی کمتری است. با این وجود، تأثیر آنها به دلیل وابستگی توانی دما و نرخ واکنش قابل توجه است [۲۹].

### ۵) صحنه‌گذاری شبیه‌سازی

برای صحنه‌گذاری شبیه‌سازی از نتایج تجربی موجود در مقاله مرجع استفاده شده است. صحنه‌گذاری در سه شرایط مختلف برای متان خالص و دی‌متیل‌اتر به عنوان سوخت انجام گرفته است. جدول (۲) مشخصات موتور را نشان می‌دهد. در شرایط اول، موتور ۱ با سوخت خاص متان و شرایط اولیه با فشار ۲ bar و غنا ۰٫۳ ارزیابی شد. تمامی شرایط اولیه بجز فشار ثابت نگه داشته می‌شود، در شرایط دوم فشار به ۱٫۵ bar تغییر داده می‌شود. الگوی دما و فشار در شکل‌های ۳-۵ نشان داده شده است. اطلاعات موتور (۱) در مرجع [۳۰] آورده شده است. همان‌طور که نشان داده شد، شبیه‌سازی پیشگویی خوبی از شرایط کاری موتور HCCI دارد. مشابه با تمامی شبیه‌سازی‌های صفربعدی، بیشینه فشار و دمای استوانه در این کار از نتایج تجربی نیز بزرگتر است و زودتر هم اتفاق می‌افتد و دلیل این امر، شکاف‌ها و همچنین مقدار کمی سوخت نسوخته در شکاف‌ها و درزهای موجود در سامانه در نمونه تجربی است. به این دلیل همچنین پیشگویی واضحی از آزادسازی انرژی قبل از بیشینه فشار دارد. برای مطالعه بیشتر مقدار HC و CO در دود خروجی، مقدار آن با نتایج تجربی آن در شرایط اول مقایسه شده است، که نتایج تجربی حاکی از مقدار ۰٫۰۹۹۶ g/s برای HC است در حالی که این مقدار در شبیه‌سازی چندناحیه‌ای انجام شده ۰٫۰۶۲۳ g/s است. این اختلاف به دلیل نادیده گرفتن درزها و شکاف‌ها در شبیه‌سازی توسعه یافته است. از طرف دیگر پیش‌بینی مقدار CO حدود ۵۰٪ خطا را نشان می‌دهد. شبیه‌سازی مقدار g/s ۰٫۰۱۳، در حالی که نمونه تجربی آن مقدار g/s ۰٫۰۲۷۹ را نشان می‌دهد. این به این دلیل است که CO در یک محدوده دمایی کوچک تولید و مصرف می‌گردد و به همین دلیل بدرستی حل نمی‌گردد.

تفاوت بیشتر بین الگوی دمای نواحی، دمای مرز نواحی (نواحی ۵، ۶، ۱۳) استفاده شده‌اند تا به محاسبه انتقال حرارت جابه‌جایی به دیواره استوانه بپردازد. علاوه بر این، انتقال حرارت هدایتی بین نواحی و تشعشع با ویژگی‌های جسم خاکستری از گاز داغ نواحی به دیواره استوانه محاسبه شده است. شکل (۲) این امر را برای ناحیه ۶ نشان می‌دهد.

### ۴-۱) انتقال حرارت جابه‌جایی

انتقال حرارت جابه‌جایی بین مرزها و دیواره استوانه بدین شکل است:

$$\dot{q}_{conv,k} = h_k A_{conv,k} (T_k - T_w) \quad (20)$$

ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی بدین شرح است:

$$\begin{cases} h_{conv,k} = 29.8 l^{0.2} P^{0.8} T_k^{-0.73} [2.28 S_p + f(p)]^{0.8} \\ f(p) = 3.34 \times 10^{-4} \frac{V_d T_r}{P_r T_r} (P - P_{max}) \end{cases} \quad (21)$$

### ۴-۲) انتقال حرارت تشعشعی

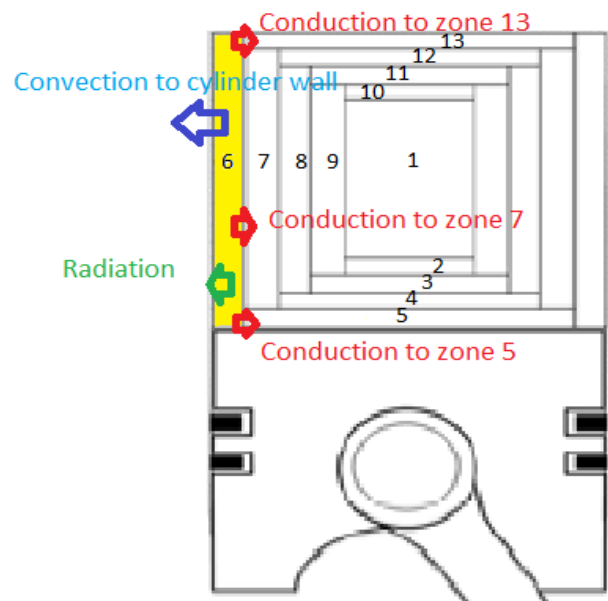
انتقال حرارت تشعشعی برای ناحیه k ام به دیواره استوانه بدین شکل محاسبه می‌گردد:

$$\dot{q}_{rad,k} = \beta \sigma (T_k^4 - T_w^4) \quad (22)$$

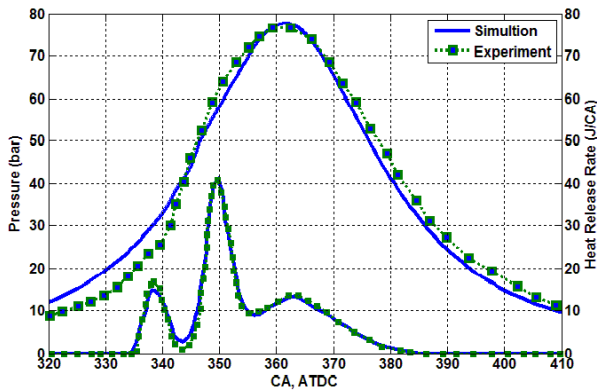
$\beta$  ضریب صدور و  $\sigma$  ثابت استفان-بولتزمن است.

### ۴-۳) انتقال حرارت هدایتی

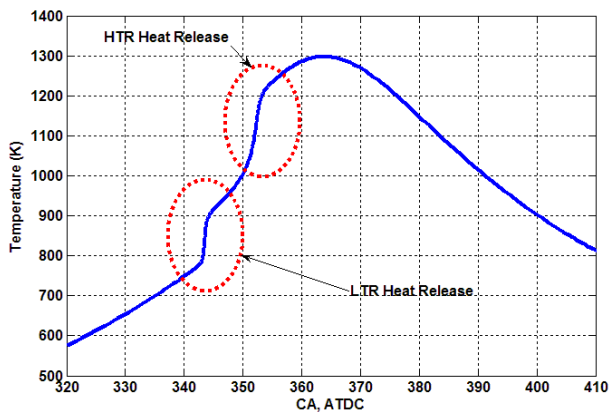
آنچه که در واقعیت اتفاق می‌افتد این است که در انتقال انرژی بین نواحی به دلیل انتقال جرم است و برای شبیه‌سازی صحیح این امر نیاز به دانه بندی مناسب و زمان بنسبت طولانی برای حل آن است.



شکل ۲: نمای از انتقال حرارت بین نواحی و دیواره



شکل ۵: فشار و نرخ آزادسازی انرژی در شرایط سوم برای موتور ۲ با سوخت دی‌متیل اتر خالص

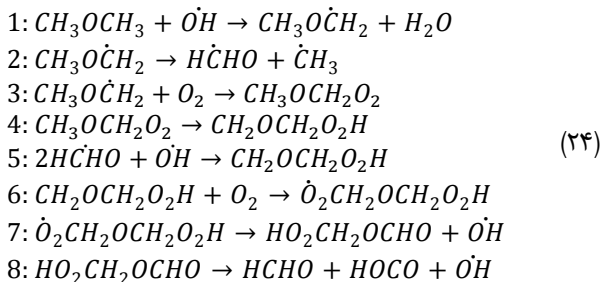


شکل ۶: دو مرحله آزادسازی انرژی در احتراق متان

### ۶ نتایج

شبیه سازی برای بررسی مشخصات احتراق موتور دوم با سوخت متان و دی‌متیل اتر اجرا گردید. نرخ آزادسازی انرژی دومرحله‌ای دی‌متیل اتر را می‌توان در شکل (۶) مشاهده کرد. LTR و HTR کاملاً در شکل مشخص است.

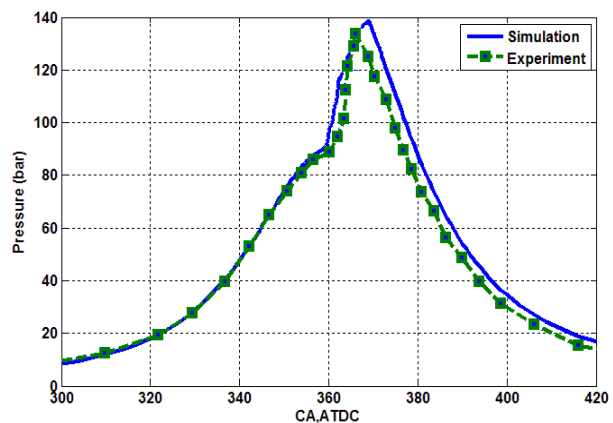
مرحله اول از آزادسازی انرژی به عنوان LTR شناخته می‌شود که در دمایی حدود ۷۰۰-۸۰۰K اتفاق می‌افتد. این فرآیند بروشنی با معادلاتی که تحت تأثیر تولید و پخش گونه OH اند، مشخص است. معادلات بدین شرح اند [۲۶]:



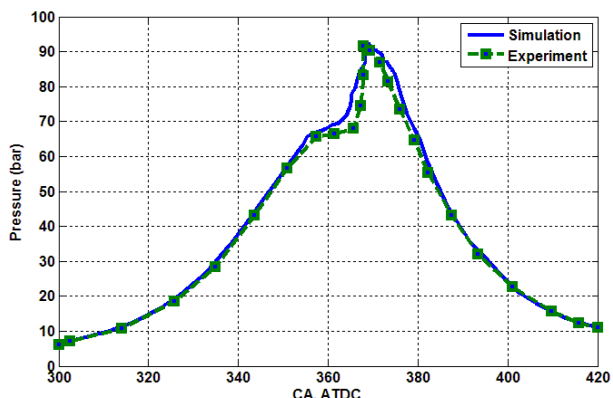
در شرایط سوم، دی‌متیل اتر خالص با غنای ۰٫۲ و همچنین شرایط اولیه ۱٫۳ bar در موتور ۲ بکار رفته که در شکل (۵) صحنه‌گذاری آن انجام شده است که الگوی فشار و نرخ آزادسازی انرژی آن نمایش داده شده است. اطلاعات تجربی در مرجع [۳۱] آورده شده است.

جدول ۲: مشخصات موتور

Engine 1: <i>Caterpillar</i> 3500	Engine 2: <i>Yanmar</i> <i>NF170-(E)</i>	مشخصات
۱۷۰	۱۰۲	قطر سمبه (mm)
۱۹۰	۱۰۵	طول پیمایش سمبه (mm)
۳۵۰	۱۹۷	دسته سمبه (mm)
۱۷	۱۷٫۸	نسبت تراکم حجمی
۲۰	۲۸	(ABDC) IVC
۴۰	۴۰	(BBDC) EVO
۱۵۰۰	۱۲۰۰	سرعت دورانی (rpm)



شکل ۳: فشار در شرایط اول برای موتور ۱ با سوخت متان خالص



شکل ۴: فشار در شرایط دوم برای موتور ۱ با سوخت متان خالص

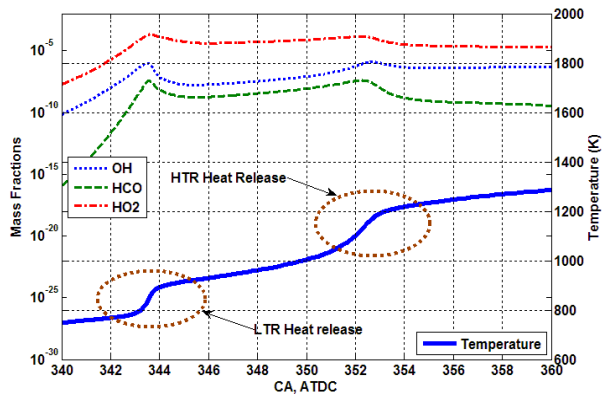
1 Low temperature reactions  
2 High temperature reactions

فشار را بزرگتر می کند درحالی که نقطه شروع احتراق تغییری نخواهد داشت.

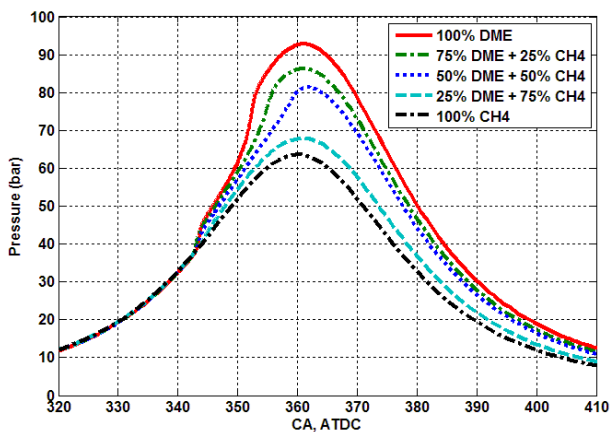
نقطه شروع احتراق می تواند از مشتق سوم فشار برحسب زاویه لنگ به دست آید. SOC زمانی رخ می دهد که این مقدار بزرگتر شود [۲۳، ۱۸]:

$$\left. \frac{d^3 P}{d^3 \theta} \right|_{SOC} = 0.25 \quad (27)$$

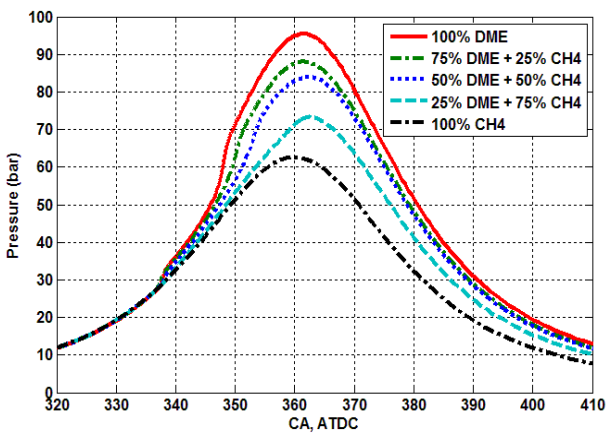
جدول (۳) نشاندهنده SOC برای این سه شرایط است.



شکل ۷: نحوه تغییرات سه گونه مهم در مراحل LTR و HTR

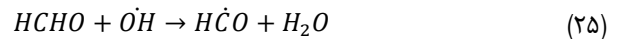


شکل ۸: فشار برحسب زاویه لنگ ( $T_{IVC} = 313 \text{ K}$ )

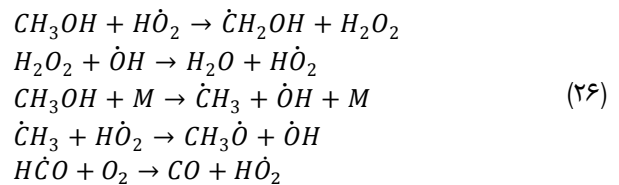


شکل ۹: فشار برحسب زاویه لنگ ( $T_{IVC} = 343 \text{ K}$ )

اولین واکنش واکنشی زنجیره‌ای ابتدایی است و واکنش دوم گونه فعال آلکیل تولید می کند. در واکنش سوم اکسیژن افزوده می شود، همپاراش (ایزومرشدگی) در واکنش چهارم و سرانجام دومین گونه اکسیژن در واکنش ششم افزوده می گردد. گونه هیدروکسیل (OH) در واکنش های ۷ و ۸ مجدد تولید می گردند. واکنش های ۲ و ۵ دو واکنشی اند که در کنار یکدیگر عمل می کنند و مصرف و تولید هریک بر دیگری تأثیر می گذارد. فرمالدهید گونه ای واسطه مهم است که بر زنجیره واکنش ها تأثیرگذار است. بعد از تولید فرمالدهید، این گونه همراه با گونه OH در کنار واکنش ۱ انجام می گردد.



گونه  $\dot{H}CO$  می تواند با اکسیژن واکنش دهد و کربن مونواکسید و هیدروژن پراکسید را تولید نماید. این محصولات نمی توانند به عنوان منبعی برای گونه OH عمل کنند، لذا این آخرین واکنش از مرحله LTR است [۲۶]. بعد از LTR، این گونه هیدروپروکسی (OH) است که سهم اصلی را در مرحله HTR ایفا می کند.

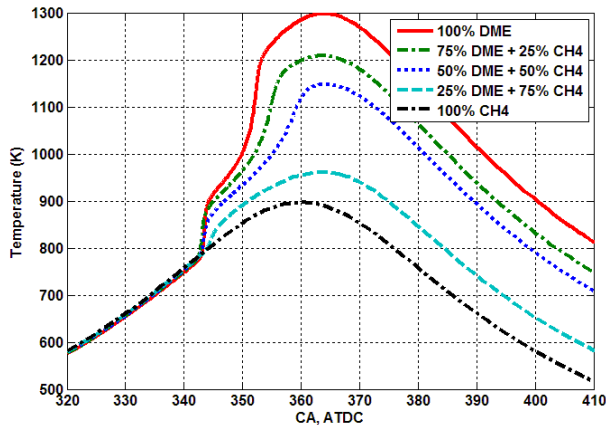


HTR بر پایه دو واکنش مهم است، تجزیه هیدروژن پروکسید و مصرف فرمالدهید که مقدار زیادی از انرژی را در مرحله HTR و دمای گرمتر تولید می کند [۲۵]. تغییرات نسبت جرمی  $\dot{H}CO$ ،  $H\dot{O}_2$  و  $\dot{O}H$  در شکل (۷) نشان داده شده است. خط آبی پررنگ نشاندهنده دما است تا اثر گونه ها را بر فرآیند احتراق نشان دهد. پنج ترکیب مختلف از متان و دی متیل اتر ارزیابی شد که بدین شرح انتخاب گردید:

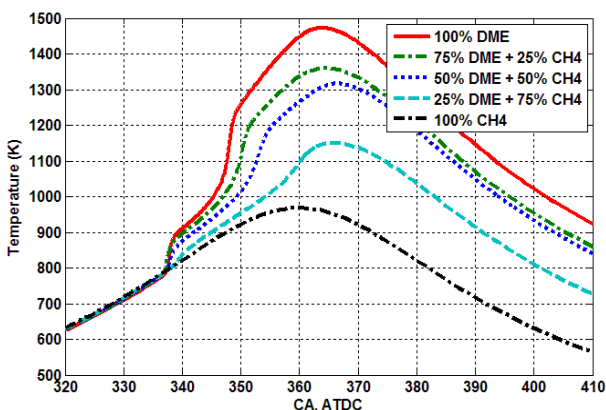
- ۱۰۰٪ متان
- ۷۵٪ متان + ۲۵٪ دی متیل اتر
- ۵۰٪ متان + ۵۰٪ دی متیل اتر
- ۲۵٪ متان + ۷۵٪ دی متیل اتر
- ۱۰۰٪ دی متیل اتر

نسبت های بیان شده بیانگر نسبت مولی است. غنا در ۰،۳۴ ثابت نگه داشته شده است و به این نکته باید توجه شود که غنا برای سوخت های دارای اکسیژن باید از روش valence به دست آید [۱۸، ۳۲].

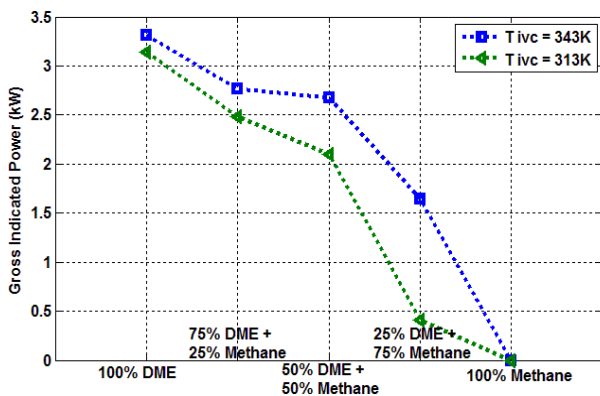
برای مقایسه شبیه سازی، فشار اولیه ۱،۳ bar و دمای اولیه ۳۱۳ K و ۳۴۳ K قرار داده شد. پنج ترکیب مختلف استفاده شد و نمودار فشار برحسب زاویه لنگ در شکل های (۸) و (۹) رسم شد. در این شرایط مشاهده می گردد در حالی که متان خالص می سوزد به دلیل دما و فشار ناکافی برای خوداشتعالی، احتراقی رخ نمی دهد. اما افزودن ۲۵٪ دی متیل اتر احتراق را آغاز می کند. افزودن بیشتر دی متیل اتر بیشینه



شکل ۱۰: دمای داخل استوانه در ترکیبات مختلف ( $T_{IVC} = 313\text{ K}$ )



شکل ۱۱: دمای داخل استوانه در ترکیبات مختلف ( $T_{IVC} = 343\text{ K}$ )



شکل ۱۲: کار داخلی (اندیکاتور) در شرایط مختلف

جدول ۳: زمان شروع احتراق در شرایط مختلف (SOC)

متان	دی‌متیل‌اتر	$T_{IVC} = 343\text{ K}$	$T_{IVC} = 313\text{ K}$
%۱۰۰		۳۳۷,۵۷	۳۴۳,۱۱
%۲۵	%۷۵	۳۳۷,۸۶	۳۴۳,۴۵
%۵۰	%۵۰	۳۳۸,۲۲	۳۴۳,۹۰
%۷۵	%۲۵	۳۳۸,۷۴	۳۴۴,۲۱

تفاوت کمی در این جدول در اندازه‌گیری SOC دیده شده است. چون EGR وجود ندارد و همچنین گونه‌های فعال در محفظه احتراق ظاهر نمی‌گردند و چون غنا هم ثابت نگه داشته شده است، SOC بسیار به دما وابسته است. متان خالص به این دلیل که دمای بیشینه برای خوداشتعالی فراهم نگردد محترق نشده است. مطالعات نشان می‌دهد که نیاز است دمای اولیه به  $430\text{ K}$  برسد تا با متان خالص احتراق دیده شود. از طرف دیگر، در شرایط کاری با دی‌متیل‌اتر، این سوخت در دمای ( $700-800\text{ K}$ ) محترق می‌گردد. این امر بخوبی در شکل‌های (۱۰) و (۱۱) نشان داده شده که در دو دمای اولیه مختلف تغییرات دما برحسب زاویه لنگ را نمایش می‌دهد.

بزرگی کار داخلی<sup>۲</sup> و بازده موتور در شرایط مختلف در شکل‌های (۱۲) و (۱۳) نشان داده شده‌اند. در حالتی که احتراق برای متان خالص رخ نمی‌دهد مقدار تقریبی کار در آن صفر است. الگوی تغییرات این دو متغیر برای این دو شرایط مشابه یکدیگر است.

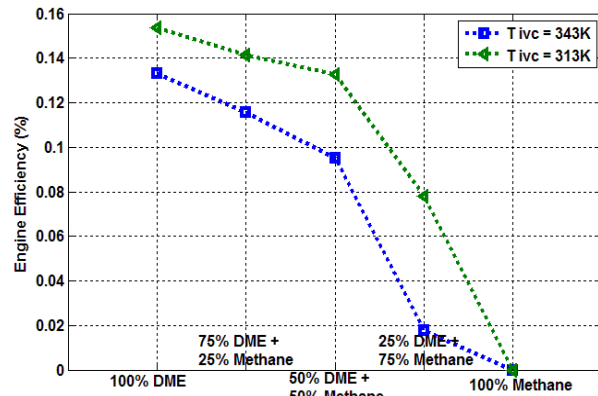
افزودن مقدار دی‌متیل‌اتر بر مقدار کار خروجی و بازده موتور می‌افزاید. این امر به دلیل افزایش فشار بیشینه در نتیجه افزودن این سوخت است که در شکل‌های (۸) و (۹) نشان داده شده است. دلیل این امر بزرگتر بودن ارزش گرمایی سوخت دی‌متیل‌اتر در مقایسه با متان است. با گرم شدن دمای اولیه، کار خروجی و بازده موتور افزایش می‌یابد. گرم شدن دمای اولیه نرخ واکنش‌های ابتدایی را بزرگتر می‌کند و SOC را طبق جدول (۳) پیش می‌اندازد. همچنین حفظ بیشتر بیشینه فشار در طول احتراق کار خروجی و بازده موتور را می‌افزاید.

1 Exhaust gas recirculation

2 Indicator work

## References

- [1] S. Onishi, S.H. Jo, K. Shoda, S. Kato, Active thermo-atmosphere combustion (ATAC) - A new combustion process for internal combustion engines, SAE International, Paper No. 790501, 1979
- [2] P. Kongsereparp, M.D. Checkel, Novel method of setting initial conditions for multi-zone HCCI combustion modeling, SAE International, Paper No. 2007-01-0674, 2007
- [3] R.G. Papagiannakis, C.D. Rakopoulos, D.T. Hountalas, D.C. Rakopoulos, Emission characteristics of high speed, dual fuel, compression ignition engine operating in a wide range of natural gas/diesel fuel proportions, Fuel, Vol. 89, pp.1397-1406, 2010
- [4] S.B. Fiveland, M. Christensen, B. Johansson, J. Hiltner, F. Mauss, D.N. Assanis, Experimental and simulated results detailing the sensitivity of natural gas HCCI engine to fuel composition, SAE International, Paper No. 2001-01-3609, 2001
- [5] M. Konno, Z. Chen, Ignition mechanisms of HCCI combustion process fueled with methane/DME composite fuel, SAE International, Paper No. 2005-01-0182, 2005
- [6] S.C. Kong, A study of natural gas/DME combustion in HCCI engines using CFD with detailed chemical kinetics, Fuel, Vol. 86, pp.1783-1489, 2007
- [7] T.D. Pedersen, J. Schramm, A study on the effects of compression ratio, engine speed and equivalence ratio on HCCI combustion of DME, SAE International, Paper No. 2007-01-1860, 2007
- [8] C. Arcoumanis, C. Bae, R. Crookes, E. Kinoshita, The potential of dimethyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: A review, Fuel, Vol. 87, pp.1014-1030, 2008
- [9] G. Shibata, K. Oyama, T. Urushihara T. Nakano, The effect of fuel properties on HCCI engine combustion characteristics and performances, IFP International Conference, pp.45-58, 2004
- [10] A. Saeed, K. Saeed, A. Ahmad, K.A. Malik, Multizones modeling of the combustion characteristics of oxygenated fuels in CI engines, SAE International, Paper No. 2006-01-0051, 2006
- [11] S. Jung, M. Ishida, H. Ueki, D. Sakaguchi, Ignition characteristics of methanol and natural-gas in a HCCI engine assisted by DME, SAE International, Paper No. 2007-01-1863, 2007
- [12] M.H. Morsy, Ignition control of methane fueled homogeneous charge compression ignition engines using additives, Fuel, Vol. 86, pp.533-540, 2007
- [13] S.N. Shahngian, M. Keshavarz, G. Javadirad, N. Bagheri, S.A. Jazayeri, A theoretical study on performance and combustion characteristics of HCCI engine operation with diesel surrogate fuels: N-heptane, dimethyl ether, ASME Internal Combustion Engine Division Spring Technical Conference, Paper No. ICES2008-1682, 2008



شکل ۱۳: بازده موتور در شرایط مختلف

## ۷ نتیجه گیری

در این مقاله شبیه سازی صفر بعدی از شبیه سازی ترموسینتیک چند ناحیه ای گسترش یافت تا مشخصات موتوری HCCI با سوخت دی متیل اتر و متان بررسی شود. نتایج کار را می توان بدین شرح خلاصه کرد:

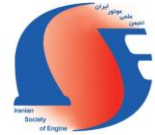
- با مقایسه با نتایج تجربی، شبیه سازی صفر بعدی چند ناحیه ای پیش بینی خوبی از مشخصات احتراق HCCI نظیر فشار، دما و نرخ آزاد سازی انرژی دارد.
- شبیه سازی گسترش یافته تخمین مناسبی از مقدار CO خروجی ندارد. برای دقت بیشتر در تخمین HC خروجی باید درز و شکافها در هندسه شبیه سازی در نظر گرفته شوند.
- این امکان وجود دارد که با اضافه کردن دی متیل اتر به متان محدوده کاری را تغییر داد. افزودن ۲۵٪ حجمی دی متیل اتر به شرایط بدون احتراق با متان خالص، احتراق را به وجود می آورد. در شرایطی که متان خالص بکار رود، یا نیاز است دمای اولیه تا ۴۳۰K گرم می شود تا احتراق رخ دهد یا با افزودن ۲۵٪ دی متیل اتر با دمای اولیه ای در حدود ۳۱۳ K احتراق پدید می آید.
- در شرایط بدون EGR و غنا ثابت، تمامی ترکیبات متان و دی متیل اتر در این کار بررسی شدند که همگی SOC مشابهی دارند که با این شرایط، SOC و LTR در احتراق دی متیل اتر، وابستگی زیادی به دما دارند.
- مقدار بیشتر دی متیل اتر در ترکیب سوخت ارزش گرمایی را خواهد افزود که به افزودن دما و فشار استوانه منجر خواهد شد. در نهایت افزودن نسبت دی متیل اتر موجب افزایش کار خروجی و بازده موتور خواهد شد.

- [19] O. Jahanian, S.A. Jazayeri, The effects of using formaldehyde as an additive on the performance of an HCCI engine fueled with natural gas, ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Paper No. IMECE2010-38074, 2010
- [20] O. Jahanian, S.A. Jazayeri, A thermo-kinetic model base study on natural gas HCCI engine response to different initial conditions, International Congress on Combustion Engines, Paper No. PTNSS-2009-SC-105, 2009
- [21] W.L. Easley, A. Agarwal, G. Lavoie, Modeling of HCCI combustion and emissions using detailed chemistry, SAE International, Paper No. 2001-01-1029, 2001
- [22] S.M. Aceves, D.L. Flowers, C.K. Westbrook, J.R. Smith, W. Pitz, R. Dibble, M. Christensen, B. Johansson, A multi-zone model for prediction of HCCI combustion and emissions, SAE International, Paper No. 2000-01-0327, 2000
- [14] M.C. Lan, Z.Y. Sheng, S. Yu, H. Jian, S.H. Ying, Experimental and numerical study on emission in an HCCI engine operated with neat dimethyl ether, SAE International, Paper No. 2007-01-1888, 2007
- [15] S.A. Jazayeri, M. Keshavarz, N. Shahngian, Homogenous charge compression ignition (HCCI) engines in electrical power generation systems, International Council on Combustion Engines, Paper No.192, 2007
- [16] D. Varish, Dimethyl ether (DME) as an environmentally friendly transportation fuel alternate, International Conference on Energy and Automotive Technologist, Turkey, 2010
- [17] O. Jahanian, S.A. Jazayeri, A comprehensive numerical study on effects of natural gas composition on the operation of an HCCI engine, Oil Gas Science and Technology, 2011
- [18] O. Jahanian, S.A. Jazayeri, A comprehensive study on natural gas HCCI engine response to different initial conditions via a thermo-kinetic engine model, ASME Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference, Paper No. ICEF2009-14084, 2009



# The Journal of Engine Research

Journal Homepage: [www.engineersearch.ir](http://www.engineersearch.ir)



## Developing a multi-zone thermo-kinetic model to investigate effects of using DME-methane blend in an HCCI engine

O. Jahanian<sup>1\*</sup>, S.A. Jazayeri<sup>2</sup>, A. Yousefzadeh<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Mechanical Engineering Department, Babol Noshirvani University of Technology, Babol, Iran, [jahanian@nit.ac.ir](mailto:jahanian@nit.ac.ir)

<sup>2</sup>Mechanical Engineering Department, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran, [jazayeri@kntu.ac.ir](mailto:jazayeri@kntu.ac.ir)

<sup>3</sup>Mechanical Engineering Department, Babol Noshirvani University of Technology, Babol, Iran, [a.yousefzadeh@stu.nit.ac.ir](mailto:a.yousefzadeh@stu.nit.ac.ir)

\*Corresponding Author, Phone Number: +98-912-313-5581

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received: 18 February 2014

Accepted: 16 March 2014

#### Keywords:

HCCI engine

Multi-zone model

DME

Methane

### ABSTRACT

The homogenous charge compression ignition (HCCI) is a promising concept for internal combustion engines to reduce the fuel consumption and exhaust emissions. The main target of the current study is developing a multi-zone thermo-kinetic model for HCCI engines in order to investigate the engine operation in different conditions and effects of using the DME-methane blended fuel on combustion characteristics. The developed 13-zone model included detailed chemical kinetics of DME and methane combustions and clearly showed the two-stage heat release of DME. Comparisons to experimental data showed the precision of the model in predicting SOC and the pressure trend. Five different compositions, varied from the pure DME to the pure methane, were selected to study effects of the blended fuel composition. Results showed that in an initial condition that the pure methane would not ignite, adding DME would lead to a combustion phase. Changing the amount of added DME do not change the SOC distinctly, but strongly affected the engine output power.

© Iranian Society of Engine (ISE), all rights reserved.