

151540

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**GEMİ DİZEL MOTORLARINDA KARIŞIM OLUŞUMUNUN
ÇOK BOYUTLU MATEMATİKSEL MODELİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ
Mak. Müh. Özgür Oğuz TAŞKIRAN
(503011200)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 19 Aralık 2003
Tezin Savunulduğu Tarih : 12 Ocak 2004

Tez Danışmanı :

Prof.Dr. Metin ERGENEMAN

Diğer Jüri Üyeleri

Prof.Dr. Cem SORUŞBAY (İ.T.Ü.)

Prof.Dr. Orhan DENİZ (Y.T.Ü.)

OCAK 2004

ÖNSÖZ

Tez çalışması süresince her konuda destek olması sebebiyle değerli hocam Prof. Dr. Metin ERGENEMAN'a, her türlü yardımı esirgemeyen ve özellikle samimiyetlerinden dolayı hocam Dr. Akın KUTLAR'a, Dr. Hikmet ARSLAN'a, Dr. Kubilay YAY'a, Y.Müh. Nejat SEZGİN'e ve Araştırma Görevlisi Mehmet Mert ARICAN'a, tüm hayatım boyunca bana verdikleri destek ve bana karşı duydukları güvenden ötürü aileme teşekkürü bir borç bilirim.

Aralık 2003

Özgür Oğuz TAŞKIRAN



İÇİNDEKİLER

KISALTMALAR	v
TABLO LİSTESİ	vi
ŞEKİL LİSTESİ	vii
SEMBOL LİSTESİ	ix
ÖZET	xi
SUMMARY	xiii
1. GİRİŞ	1
2. TEMEL DENKLEMLER	4
2.1. Gaz Fazı (Eulerian) Denklemleri	5
2.1.1 Süreklilik Denklemi	6
2.1.2 Momentum Denklemi	9
2.1.3 Enerji Denklemi	14
2.1.4 Türbülans Denklemleri	19
2.1.4.1 Karışım Uzunluğu Modeli	24
2.1.4.2 k-ε Modeli	25
2.1.5 Kimyasal Reaksiyon Denklemleri	31
2.2. Sıvı Fazı (Langrangian) Denklemleri	32
2.2.1 Hareket Denklemi	33
2.2.2 Damlacık Enerji Denklemi	34
2.2.3 Damlacık Kütle Denklemi	35
2.2.4 Atomizasyon Modeli	37
2.2.5 Parçalanma Modeli	37
2.2.5.1 TAB Parçalanma Modeli	38
2.2.5.2 KHRT Parçalanma Modeli	39
2.2.6 Çarpışma Modeli	41
3. TÜRBÜLANS VE KİMYASAL REAKSİYONLARIN ETKİLEŞİMİ	44
3.1. Yanma Modelleri	44
3.2. Referans Bileşenleri Tekniği	45
3.3. Partially Stirred Reactor (PaSR) Modeli	47
4. SAYISAL YÖNTEMİN YAPISI VE BİLGİSAYAR PROGRAMI	53
4.1. Denklemler ve Sınır Koşulları	53
4.2. Çözüm Yöntemi	56
4.2.1 A Safhası	56
4.2.2 B Safhası	57

4.2.3 C Safhası	57
4.3 Bilgisayar Programı	57
5. NO_x OLUŞUMU VE YANMA MEKANİZMASI	59
5.1 NO _x Oluşum Mekanizmaları	59
5.1.1 Zeldovich-NO (Termal-NO)	59
5.1.2 Prompt-NO (Fenimore-NO)	60
5.1.3 NO ₂ Oluşumu	62
5.2 Dizel Motorlarda NO Oluşumunun Modellenmesi	63
5.3 Yanma Mekanizması	63
6. TÜRBÜLANSLI YANMA MODELİ	65
6.1 Türbülansın Yapısı	65
6.1.1 Moment Metodu	65
6.1.2 Türbülansın Spektral Gösterimi ve Enerji Kademeleri	66
6.2 Ortalama Parametreler ile Temel Denklemler	68
6.3 Türbülans ve Kimyasal reaksiyonların Etkileşimi	69
6.3.1 Matematiksel Zorluk: Taylor açılımı Analizi	69
6.3.2 Önkarışım Yanma Rejimleri ve Ölçekleri	70
6.4 Reynolds Ortalamalı Yanma Modelleri	72
6.4.1 Reaktör Modeli	72
6.4.2 Flamelet Modeli	74
6.4.3 PDF Transfer Denklemi Modeli	75
7. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	77
7.1 Sabit Hacimde Yapılan Model Sonuçları	77
7.1.1. Ağ Yapısının Etkisi	77
7.1.2 Farklı Parçalanma ve Çarpışma Modellerinin Etkisi	80
7.1.3 Türbülans Parametrelerinin Etkisi	82
7.1.4 Sayısal Sonuçlar	83
7.2 Dizel Motor Modeli Sayısal Sonuçları	88
7.2.1 Tek Basamaklı Yanma Reaksiyonu ile Elde Edilen Sonuçlar	89
7.2.2 Detaylı Yanma Mekanizması ile Elde Edilen Sonuçlar	91
7.2.3 MTU 396 TB 63 Motoru ile Elde Edilen Sonuçlar	95
7.3 Değerlendirme ve Öneriler	96
KAYNAKLAR	98
EKLER	100
ÖZGEÇMİŞ	124

KISALTMALAR

ALE : Arbitrary Lagrangian Eulerian modeli
CFD : Computational Fluid Dynamics
EBU : Eddy Break-Up modeli
EDC : Eddy-Dissipation-Concept modeli
KHRT: Kelvin-Helmoltz Rayleigh-Taylor modeli
LHF : Locally Homogeneous Flow modeli
PaSR : Partially Stirred Reactor modeli
PDF : Probability Density Function
PDC : Partial Donor Cell yöntemi
PEUL : Probabilistic Eulerian Lagrangian modeli
PGS : Pressure Gradient Scaling metodu
QSOU: Quasi Second Order Upwind yöntemi
RNG : Renormalization Group
SAD : Sayısal Akışkanlar Dinamiği
SFLM : Stationary Flamelet Library Modeli
TAB : Taylor Analogy Breakup modeli
YMT : Yüksek Mertebeden Terimler

TABLO LİSTESİ

<u>No</u>		<u>Sayfa</u>
Tablo 2.1.	Standart ve RNG $k - \varepsilon$ modellerinde kullanılan sabitler	30
Tablo 2.2.	Kimyasal reaksiyon örneği	31
Tablo 5.1.	Tek basamaklı kimyasal yanma mekanizması.....	64
Tablo 7.1.	Farklı türbülans parametreleri ile buharlaşan yakıt miktarları	83
Tablo 7.2.	Model değişkenleri	84
Tablo 7.3.	21 mg n-Heptan için giriş verileri	84
Tablo 7.4.	Modellenen 4 zamanlı dizel motorunun genel özellikleri	88
Tablo 7.5.	MTU 396 TB 63 motorunun genel özellikleri	95
Tablo C.1.	Sayısal çözüm zamanları.....	103
Tablo G.1.	NHDD motorunda elde edilen emisyon değerleri.....	111
Tablo G.2.	Ek G’de elde edilen değerler için kullanılan NO mekanizması.....	111

ŞEKİL LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Şekil 2.1 : Ele alınan akışkan elamanına gelen kütle akıları.....	6
Şekil 2.2 : Kayma gerilmesi ve Normal gerilme	9
Şekil 2.3 : Akışkan elamanına x yönünde etkiyen kuvvetler	10
Şekil 2.4 : Türbülanslı ortamda hız ölçümü	19
Şekil 2.5 : KH modunda damlacık oluşumunun şematik gösterimi.....	40
Şekil 2.6 : Birbirine doğru hareket eden damlacıklar	43
Şekil 3.1 : PaSR modelinin şematik gösterimi.....	48
Şekil 3.2 : Reaksiyon / Karışım adımının hesaplanması.....	49
Şekil 4.1 : KIVA3V’de kullanılan tipik bir hücre elemanı.....	53
Şekil 4.2 : Genel akış diyagramı.....	58
Şekil 5.1 : Yakıt Hava karışımına bağlı olarak karışım reaktöründe NO oluşumu.....	61
Şekil 5.2 : Prompt-NO oluşumundaki genel reaksiyon diyagramı	62
Şekil 6.1 : Türbülanslı akış için enerji spektrumunun şematik gösterimi	67
Şekil 6.2 : Ön karışımli yanma rejimleri	71
Şekil 6.3 : Büyük türbülans yapılarından küçük türbülans yapılarına olan enerji transfer diyagramı	73
Şekil 7.1 : Farklı ağ yapılarında damlacıkların ilerleyişi ve buharlaşma yüzdesi..	78
Şekil 7.2 : İnterpolasyon uygulanan damlacık grubunun ilerleyişindeki ve buharlaşma sürecindeki farklılık.....	79
Şekil 7.3 : İnterpolasyon uygulanmamış ve interpolasyon uygulanan yakıt demeti şekilleri.....	80
Şekil 7.4 : TAB ve KHRT parçalanma modelleri ile elde edilen damlacık yarıçapları.....	81
Şekil 7.5 : Farklı çarpışma modelleri.....	81
Şekil 7.6 : Farklı türbülans parametreleri ile yakıt buharının ilerleyişi.....	82
Şekil 7.7 : 21 mg n-Heptan için gerçek püskürtme debisi.....	84
Şekil 7.8 : Başlangıç şartı olarak %21 O ₂ ile elde edilen sıcaklık dağılımı...	85
Şekil 7.9 : 21 mg n-Heptan için elde edilen sonuçlar, Tao ve diğ. (2001)....	85
Şekil 7.10 : Dizel yakıt demetinin yanma modeli.....	85
Şekil 7.11 : 21 mg n-Heptan için elde edilen sayısal sonuçlar.....	86
Şekil 7.12 : $t = 4$ ms’de yakıt hava karışım oranı ($1/\lambda$).....	86
Şekil 7.13 : $P_0=60$ bar $T_0=823$ K’de yapılan deney sonuçları.Golovitchev ve diğ. (2003).....	87
Şekil 7.14 : 15 mg C ₁₄ H ₂₈ ile elde edilen sayısal sonuçlar.....	87
Şekil 7.15 : Çevri oranı 1.7 iken radyal yöndeki hız vektörünün değişimi.....	89
Şekil 7.16 : Ağ yapısı (piston tacında 29x15x16 ve silindir kısmında 37x15xZ ile elde edilmiştir).....	89
Şekil 7.17 : Tek basamaklı yanma reaksiyonu ile tam yükte değişik çarpışma frekans katsayıları ile basıncın krank açısına göre değişimi.....	90
Şekil 7.18 : Tek basamaklı yanma reaksiyonu ile tam yükte NO emisyonu ve ısı enerjisi.....	91
Şekil 7.19 : Tam yükte değişik çarpışma frekans katsayıları ile basıncın krank açısına göre değişimi.....	91

Şekil 7.20	: %80 yükte değişik çarpışma frekansı katsayıları ile basıncın krank açısına göre değişimi.....	92
Şekil 7.21	: %60 yükte değişik çarpışma frekansı katsayıları ile basıncın krank açısına göre değişimi.....	93
Şekil 7.22	: Detaylı yanma mekanizma ile tam yükte NO, is emisyonu ve ısı enerji.....	94
Şekil 7.23	: MTU motorunda basınç değişimi.....	95
Şekil 7.24	: -2 ve 3 krank açılarındaki yakıt demeti civarında sıcaklık dağılımı....	96
Şekil A.1	: Magnussen-Hjertager modeli ile 6 mg C ₇ H ₁₆ püskürtülerek elde edilen sayısal sonuçlar.....	100
Şekil A.2	: PaSR modeli ile 6 mg C ₇ H ₁₆ püskürtülerek elde edilen sayısal sonuçlar.....	101
Şekil B.1	: Sabit hacimde 6 mg C ₁₄ H ₂₈ ile elde edilen sayısal sonuçlar.....	102
Şekil C.1	: Farklı ağ yapıları ile basınç değişimi.....	103
Şekil D.1	: Tek basamaklı yanma mekanizması ile elde edilen sıcaklık dağılımı.....	104
Şekil E.1	: Detaylı yanma mekanizması ile elde edilen sıcaklık dağılımı.....	105
Şekil F.1	: MTU motorunda detaylı yanma mekanizması ile elde edilen sıcaklık dağılımı.....	107
Şekil G.1	: NHDD motorunda tam yükte elde edilen değerler.....	108
Şekil G.2	: NHDD motorunda %80 yükte elde edilen değerler.....	109
Şekil G.3	: NHDD motorunda %60 yükte elde edilen değerler.....	110

SEMBOL LİSTESİ

A_r	: Çarpışma frekansı
a_i	: i yönündeki ivme
c_i	: Molar konsantrasyon
c_j	: Mol sayısı
Da	: Damköhler sayısı
$D, \mathcal{D}$	: Fick kütle difüzyon katsayısı
E_a	: Aktivasyon enerjisi
e	: İç enerji
e_{ij}	: Akışkan elemanın deformasyonu
F	: Kuvvet
F^s	: Yakıt demeti momentum kazanç/kayıp terimi
f_m	: m bileşeninin kaynak/kayıp terimi
g	: Yerçekimi ivmesi
h_s	: Formasyon entalpisi
J	: Isı akısı vektörü
J_w	: Cidar ısı kaybı terimi
K	: Akışın ortalama kinetik enerjisi
Ka	: Karlovitz sayısı
κ	: Isı iletim katsayısı
κ	: Birim dalga sayısı için kinetik enerji yoğunluğu
k	: Türbülans kinetik enerjisi
k_r	: Reaksiyon hız sabiti
L_{SGS}	: Alt grid uzunluk ölçeği
ℓ	: Uzunluk ölçeği
m	: Akışkan elemanın kütlesi
$\dot{m}_d$	: Damlacığın buharlaşma hızı
N_p	: Damlacık sayısı
N_r	: Reaksiyon sayısı
N_s	: Bileşen sayısı
Nu	: Nusselt sayısı
n_r	: İhtimal faktörü
Oh	: Ohnesorge sayısı
Pr	: Prandtl sayısı
$\dot{Q}^c$	: Kimyasal reaksiyon kaynak terimi
$\dot{Q}^s$	: Yakıt demeti kaynak terimi
q_r	: r reaksiyonunun reaksiyon ısısı
$\dot{q}$	: Isı akısı
Re	: Reynolds sayısı
r_d	: Yarıçap
Sc	: Schmidt sayısı

Sh	: Sherwood sayısı
S_{ϕ}	: Kaynak terimi
T	: Sıcaklık
t_d	: Viskoz sönümlenme zamanı
t_{bu}	: Parçalanma zamanı
$\mathbf{u}$	: Hız vektörü
V	: Hücre hacmi
$\mathcal{G}$	: Türbülans hız ölçeği
$\mathcal{G}'$	: İleri reaksiyon stokyometrik katsayısı
$\mathcal{G}''$	: Geri reaksiyon stokyometrik katsayısı
We	: Weber sayısı
ω	: Salınım frekansı
$\mathbf{x}_d$	: Damlacık yer vektörü
Y_F''	: Yakıt kütle oranı
y_d	: Küresel şekilden olan bozulma
∇	: Vektör operatörü
ε	: Türbülans kinetik enerjisinin sönüm hızı
ρ	: Yoğunluk
ρ_m	: Kısmi yoğunluk
$\dot{\rho}^s$	: Buharlaşma kaynak terimi
σ	: Viskoz gerilme tensörü
Γ_{ϕ}	: Difüzyon katsayısı
δ_{ij}	: Dirac fonksiyonu
λ	: İkincil viskozite
λ	: Hava yakıt oranı
μ	: Moleküler viskozite
μ_t	: Türbülans viskozitesi
ν	: Kinematik viskozite
ν_t	: Kinematik türbülans viskozitesi
σ_t	: Türbülans Prandtl/Schmidt sayısı
τ_{ij}	: Yüzey gerilmesi
τ_u	: Momentum relaxation zamanı
τ_e	: Buharlaşma relaxation zamanı
τ_{mix}	: Türbülans karakteristik zaman adımı
τ_k	: Kolmogorov zaman ölçeği
τ_t	: Taylor zaman ölçeği
τ_w	: Cidar kayma gerilimi
τ_I	: İntegral zaman ölçeği
ϕ	: Yakıt / hava oranı
χ	: Korunmuş skalerin kayıp hızı

GEMİ DİZEL MOTORLARINDA KARIŞIM OLUŞUMUNUN ÇOK BOYUTLU MATEMATİKSEL MODELİ

ÖZET

Dizel motorlar; içten yanmalı makinalar arasında en yüksek termal verime sahiptir. Motorun giriş ve çıkış parametreleri çok iyi bilinmesine rağmen, yanma odasına yakıtın püskürtülmesi ile başlayan karışım oluşumu, tutuşma ve yanma süreçleri çok iyi tanımlanamayan karmaşık kimyasal ve fiziksel olayların sonucunda gerçekleşmektedir. Bu kimyasal ve fiziksel olayların niteliğinin araştırılarak bir matematiksel modelin oluşturulması, bir çok araştırmacı tarafından üzerinde çalışılan bir konudur. Dizel motorlar üzerinde araştırma ve geliştirme çalışmaları, deneysel ve teorik olarak yapılmaktadır. Deneysel çalışmalar oldukça yüksek maliyetli laboratuvar imkanları ile yapılabilmektedir. Bunun dışında motor deneyleri oldukça uzun zaman almakta ve ekonomik olmamaktadır. Deneysel çalışmaların sayısını ve maliyetini azaltmak amacıyla matematik modellerin geliştirilmesine ihtiyaç duyulmuştur. Bu modellerin çözümü Akışkanlar Dinamiğine dayanmaktadır. İçten yanmalı motorlarda Sayısal Akışkanlar Dinamiği modellerinin kullanımı 1970'li yıllarda başlamıştır.

Sonlu hacimler metodu kullanılarak elde edilen sayısal çözümler, bilgisayar teknolojisinin ilerlemesiyle daha kapsamlı hale getirilmektedir. Yanma odasının sonlu hacimlere bölünerek, kütle, momentum ve enerjinin korunum denklemleri bu küçük hacimlere uygulanmaktadır. Dizel motorların modellenmesinde ortaya çıkan problemlerden biri yanma odası içerisinde sıvı ve gaz fazının bir arada bulunmasıdır. Yanma odası içerisinde bulunan sıkıştırılabilir akışkan hareketleri için gaz fazı, sıkıştırılamaz akışkan hareketleri için sıvı fazı denklemleri kullanılmakta ve bu denklemler birbirleri ile ilişkilendirilmektedir. Bir diğer problem ise pistonun hareketine bağlı olarak model geometrisinin değişmesidir. Yanma odası geometrisinin zamana göre değişimi, hücre yapısının da zamana bağlı olarak yeniden düzenlenmesini gerektirmektedir. Gaz ile sıvı fazı ilişkisi ve geometrinin yeniden düzenlenmesi, birbirini izleyen üç ayrı safhada ele alınmaktadır. A ve B safhalarında sırasıyla sıvı ve gaz fazı denklemleri çözümlenmekte, C safhasında ise hücre yapısı yeniden oluşturulmaktadır.

Çok boyutlu modeller ile oluşturulabilen yakıt demeti modeli sıvı yakıtın çok küçük damlacıklara ayrılarak parçalanması, birleşmesi ve buharlaşmasını içermektedir. Bu çalışmada kullanılan matematik modelde, parçalanma ve birleşme modelleri için farklı modeller ele alınmış ve incelenmiştir. Yakıtın buharlaşması ve yüksek türbülanslı hava akımları ile etkileşimi sonucunda tutuşma başlamaktadır. Türbülansın modellenmesi için iki denklemlilik modellerden yararlanılmıştır. Belirli bir tutuşma gecikmesi sonucunda, yakıt demetinin türbülanslı yanması başlamaktadır. Yakıt-hava karışımı oranları, türbülans, basınç ve sıcaklık gibi bir çok parametresi bulunan yanma modeli için ise, literatürde bulunan modeller incelenmiş ve bu modeller arasındaki farklar ortaya konulmuştur. Yapılan çalışmalarda dizel ortamına en uygun sonucu veren kısmi karışımli reaktör modeli sıklıkla kullanılmıştır. Yanma

modeli için, hem tek basamaklı yanma reaksiyonunu içeren basit yanma mekanizması, hem de 68 bileşen, 291 reaksiyondan oluşan kısaltılmış detaylı yanma mekanizması kullanılmıştır. NO_x oluşumu için ise genişletilmiş Zeldovich mekanizması kullanılmıştır.

KIVA3V sayısal akışkanlar dinamiği kodunun kullanıldığı çalışmalarda, sabit hacim (bomba) modelleri ve dizel motor modelleri çözümlenmiştir. Sabit hacim modellerinin basit oluşu ve daha kısa sürede çözüm elde edilmesi sebebiyle yakıt demeti üzerinde yapılan incelemelerde sıklıkla kullanılmıştır. Bu çalışmada, sabit hacimde yapılan modeller ile literatürde bulunan sonuçlar karşılaştırılarak, yakıt demetinin buharlaşması, tutuşma gecikmesi süresi ve yanma modelleri incelenmiştir. Dizel motor modelinde ise deneysel verileri bulunan bir dizel motor ele alınarak değişik yüklerdeki sayısal çözümler ile deneysel sonuçlar karşılaştırılmıştır. Sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçlar arasında bazı uyumsuzluklar bulunmuş olup, bu sorun; yakıtın parçalanmasını sağlayan reaksiyonun çarpışma frekansı katsayısının değiştirilmesi ile giderilebilmiştir. Elde edilen sonuçlar yardımıyla bir gemi dizel motoru ele alınarak modellenmiştir.

Bu çalışmada unix tabanlı işletim sistemlerine sahip PC, SGI ve SUN bilgisayarları kullanılmış olup, model sonuçları GMV (General Mesh Viewer) ile görüntülenmiştir. Ayrıca geometrik modelin oluşturulmasında AUTOCAD programından yararlanılmıştır.

MULTIDIMENSIONAL MATHEMATICAL MODEL OF THE MIXTURE FORMATION IN MARINE DIESEL ENGINES

SUMMARY

Diesel engines have the highest thermal efficient among the internal combustion engines. Though, it is well known what comes out and what goes into the engine, the mixture formation, autoignition and combustion processes, starting after the injection of fuel into the combustion chamber are the result of the complex chemical and physical phenomena which are not well known. These processes have been investigated by many researchers to obtain a mathematical model. Diesel engine development processes are made by both experimental and numerical studies. Beside it needs expensive laboratory equipments, the experimental studies are very expensive and time consuming. In order to reduce the costs and number of the experiments it is necessary to develop numerical models. The basis of the numerical models is the Computational Fluid Dynamics. Computational Fluid Dynamics have been used in internal combustion engine studies after 1970's.

The scope of the numerical solutions which are obtained by using the finite volume methods are getting expanded by the improvements in computer technology. The combustion chamber is divided into the finite volumes and then the mass, momentum and energy conservation equations are applied. Some problems arise when the combustion chamber of the diesel engine is modeled. One of them is that, there are both liquid and gas phase in the same environment. For the compressible fluid gas phase equations, for the incompressible fluid the liquid phase equations are used and the correlations of these equations are taken into account. Another problem is the change in the geometrical shape of the combustion chamber, due to movement of the piston. The geometrical shape must be changed in time. The equations of gas and liquid phases, and the re-arrangement of the geometrical shape were handled in three consecutive stages. In the A and B stages, the liquid and gas phase equations were solved and in the C stage, the mesh is re-mapped.

Formation of the fuel spray that is obtained by using multidimensional models, consists of the break-up, collision and evaporation sub-models. In this study different break-up and collision sub-models are investigated. After the evaporation of the fuel, the vapor of the fuel is mixed with turbulent air and autoignition occurs. For the turbulence, two equation models are used. Turbulent diesel spray combustion starts after autoignition. There are many parameters for the combustion, e.g., equivalence ratio, turbulence, pressure and temperature. Different combustion models which are used in the literature are investigated and the differences are revealed. The "Partially Stirred Combustion model" of which results are the most appropriate for the diesel engine is commonly used in these studies. Both simple single step oxidation mechanism and reduced complex mechanism which consists of 68 species and 291 reactions are used for combustion model. The NO_x formation is obtained by using extended Zeldovich mechanism.

Constant volume bomb models and diesel engine models were solved by using KIVA3V Computational Fluid Dynamics code. Because of simplicity, the constant volume calculations are chosen for the spray model investigations. Spray model, autoignition and combustion results of the constant volume calculations were compared with the results that were published in the literature. Diesel engine calculations were performed for an engine at different loads. Numerical results were compared with the experimental data. There were some disagreements between the results. This was handled by changing the collision frequency coefficient of the fuel decomposition reactions. By using the information that was obtained from the numerical studies, a marine engine combustion chamber is modeled.

In this study PC, SGI and SUN computers which have UNIX based operating system, were used and the numerical results were viewed by the GMV (General Mesh Viewer). Beside this AUTOCAD program was used to make geometrical models.



1. GİRİŞ

Dizel motorlar termal veriminin yüksek ve yakıt tüketiminin düşük olması sebebiyle ile deniz, kara, hava taşıtlarında ve enerji üretimi için oldukça yaygın olarak kullanılmaktadır. Motor hacimleri, model motorlarında; 10^{-3} litre/silindir ile büyük gemi motorlarında; 10^3 litre/silindir arasında değişmektedir. Motor üreticileri yakıt tüketiminin ve egzoz kirletici bileşenlerinin azaltılması için bir çok araştırma ve geliştirme faaliyetleri yapmaktadırlar. Son yirmi yılda deneysel olarak veya sayısal modeller ile yapılan çalışmalar hız kazanmış ve yeni teknikler geliştirilmiştir.

Dizel motorlarında yakıt-hava karışımı, emme zamanı sırasında yanma odasına emilen hava içerisine, sıkıştırma zamanının sonlarına doğru yakıt püskürtülerek oluşturulmaktadır. Püskürtme sonucunda yakıt küçük damlacıklara ayrılmakta, hava ile temas eden yüzeylerin artması ile buharlaşma ve yanma gerçekleşmektedir. Teknolojideki ilerlemelere paralel olarak gelişen yakıt püskürtme sistemlerinde 1000-1500 bar gibi yüksek basınçlara çıkılabilmektedir. Yanma odasına yüksek basınç ile püskürtülen yakıtın parçalanarak damlacıklara ayrılması karmaşık olayların sonucunda gerçekleşmektedir. Yakıtın püskürtülmesi ve yanması sürecinde, etkin olan olayların matematiksel ifadesi ise bazı kabuller altında yapılabilmektedir.

Deneysel olarak karışım oluşumu ve yanma parametrelerinin zamana göre değişimlerinin ölçülmesi oldukça zor ve pahalıdır. Bununla birlikte halihazırda motor üretimi deneysel çalışmalar ile yapılmakta ve bir çok test gerektirdiğinden zaman almaktadır.

Sayısal yöntemler ise bir çok avantaja sahip olmasına rağmen, bu karmaşık fiziksel ve kimyasal olayı tam anlamıyla modelleyememektedir. Bu yüzden sayısal modeller de akademik alanda yapılan yeni çalışmalarla birlikte gelişmektedir. Deneysel çalışmalar ve sayısal yöntemler kullanılarak elde edilen çözümler beraber yürütülmektedir. Sayısal modeller, deneysel çalışmaların sayısını azalttığı gibi zamandan da tasarruf sağlamaktadır. Ayrıca sayısal yöntemler ile, deneysel çalışmalarla gözlemlenemeyen, fakat motor araştırma ve geliştirme sürecinde önemli yer tutan bir çok detay ve parametrenin değişimi izlenebilmektedir.

Dizel motorlar için geliştirilen matematiksel modeller, termodinamik modeller (sıfır boyutlu modeller) ve çok boyutlu modeller olmak üzere iki ana başlık altında incelenmektedir. Benzinli motorlar için tek boyutlu modeller olmasına karşın dizel motorlar için tek boyutlu modeller uygun değildir.

Termodinamik modeller, silindir içerisinde tek bir homojen karışım bölgesinin olduğu, tek bölgeli model ve birden fazla homojen karışım bölgesinin bulunduğu, çok bölgeli model olarak ikiye ayrılmaktadır. Bu modellerde bölgeler; basınç, sıcaklık ve yakıt-hava karışım oranı ile ifade edilmektedir. Tutuşma gecikmesi, yanma, ısı kayıpları, silindir içerisindeki hava hareketlerinin etkisi gibi bir çok parametre için ampirik ifadeler kullanılabilmekte fakat lokal parametreler için bir bilgi edinilememektedir. Bununla birlikte yakıtın damlacıklara ayrılarak buharlaşması, silindir geometrisinin etkisi, yakıtın nüfuz derinliği gibi boyutsal parametreler incelenememektedir.

Çok boyutlu modeller ise iki veya üç boyutlu olmaktadır. Akış alanı, zamanın ve boyutların bir fonksiyonu olarak ifade edilmekte, böylece lokal parametrelerdeki değişim incelenebilmektedir. Silindir içerisinde sıvı ve gaz fazında, iki farklı akışkan bulunduğundan, sıvı fazdan gaz fazına geçişin zamana ve konuma göre değişimi bir çok akış parametresini etkilemektedir. Yakıt damlacıklarının hareketi, buharlaşması, yanma ve türbülans parametreleri, silindir içerisindeki bileşen konsantrasyonların zamana ve konuma göre değişimi gibi bir çok değişken, çok boyutlu modeller ile analiz edilebilmektedir.

Çok boyutlu modeller ilk olarak 1973 yılında Watkins tarafından geliştirilen içten yanmalı motor modeli ile kullanılmaya başlanmıştır. 1979 yılında Bulter tarafından yanma hesapları yapılmıştır. Bu tarihten sonra çalışmalar hız kazanmış ve bir çok araştırma yapılarak, çok boyutlu motor modelleri içerisinde kullanılmak üzere değişik matematiksel alt-modeller geliştirilmiştir. Bilgisayar teknolojisindeki gelişmelere paralel olarak çok boyutlu modellerin çözüm alanları genişlemekte, daha önce ihmal edilen veya hesaplanamayan bazı fiziksel ve kimyasal olaylar da göz önüne alınabilmektedir. Günümüzde, sayısal yöntemler kullanılarak çok boyutlu modellerin yapılabilirdiği bir çok bilgisayar programı geliştirilmiştir. CFX, FIRE, KIVA3V, FLUENT, STAR-CD bunlardan birkaçıdır. Fakat bu programların modellemeye çalıştığı fiziksel veya kimyasal olayların matematiksel olarak tam anlamıyla çözülememiş olduğunu unutmamak gerekir. Yakıt demetinin çarpışma,

parçalanma ve birleşmesi, türbülanslı akım, kimyasal reaksiyonlar, türbülans ve yanma parametrelerinin etkileşimi gibi, yanma odası içerisinde gerçekleşen bir takım olaylar için farklı modeller ve yaklaşımlar bulunmaktadır.

Bu tez kapsamında KIVA3V programı ile bir dizel motoru modellenecek ve sayısal çözümler ile deneysel çözümler karşılaştırılacaktır. Öncelikle kullanılan matematiksel alt-modeller tanımlanacaktır. Bu çalışmada elde edilen bilgilerin ve sonuçların daha sonraki çalışmalara temel teşkil edeceği ve diğer makina mühendisliği öğrencilerine rehber olacağı düşünülmektedir.



2.TEMEL DENKLEMLER

Bu bölümde Sayısal Akışkanlar Dinamiğinin (SAD) (Computational Fluid Dynamics-CFD) temel denklemleri olan kütle, enerji ve momentumun (Navier-Stokes) korunum denklemleri ve $k-\epsilon$ türbülans modeli tanıtılacaktır.

Tüm Sayısal Akışkanlar Dinamiği çözümlerinin temelinde üç ana denklem bulunmaktadır. Bunlar süreklilik, momentum ve enerji denklemleridir. Bu üç denklem matematiksel olarak

1. Kütle korunumu (süreklilik denklemi)
2. Newton'un ikinci kanunu, $F=ma$ (momentum denklemi)
3. Termodinamiğin birinci kanunu (enerji denklemi)

ifadelerinden hareketle elde edilmektedir.

Akışkan hareketlerini modelleyebilmek katı cisimlere göre oldukça zordur. Katılar elle tutulabilen, gözle rahatça görülebilen cisimlerdir. Sıvılar ve gazlar (akışkanlar) ise bulundukları kabı dolduran, hareketlerinin izlenmesi açısından katılara göre daha zor olan maddelerdir. Doğrusal bir yörünge üzerinde hareket eden katı bir cismin her yerinde hızı aynıdır. Oysa bu durum akışkanlarda farklıdır. Akışkan hareket modelleri, temel olarak bu farklı hızları modellemeye çalışmaktadır. Bir çok farklı yaklaşım metodu ile Navier-Stokes denklemleri elde edilebilir (Anderson, 1989). Fakat bunun için öncelikle matematiksel bir hatırlatma yapmak, yapılan işlemlerin fiziksel anlamlarının daha iyi anlaşılması açısından önemlidir.

Tam diferansiyel :

Kartezyen koordinatlarda hız vektörü $\mathbf{u} = u \mathbf{i} + v \mathbf{j} + w \mathbf{k}$ şeklinde tanımlıdır. $u=u(x,y,z,t)$; $v=v(x,y,z,t)$; $w=w(x,y,z,t)$; $\rho=\rho(x,y,z,t)$; olmak üzere zamana ve konuma bağlıdır.

$t = t_1$ anında $\phi_1 = \phi(x_1, y_1, z_1, t_1)$ ve $t = t_2$ anında $\phi_2 = \phi(x_2, y_2, z_2, t_2)$ ise ϕ_2 'yi bulmak için 1 noktasında Taylor serisi açılımından;

$$\phi_2 = \phi_1 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_1 (x_2 - x_1) + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_1 (y_2 - y_1) + \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_1 (z_2 - z_1) + \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_1 (t_2 - t_1) + Y.M.T \quad (2.1)$$

Y.M.T : Yüksek Mertebeden Terimler

Yüksek mertebeden terimler ihmal edilerek (2.1) denklemi $(t_2 - t_1)$ 'e bölündükten sonra, $t_2 \rightarrow t_1$ limiti alınarak;

$$\frac{D\phi}{Dt} = u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2.2)$$

tam diferansiyeli elde edilir.

Vektör operatörü ∇ kartezyen koordinatlarda $\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}$ şeklinde

tanımlıdır. Dolayısıyla tam diferansiyel ifadesi vektörel olarak $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$

şeklinde yazılabilir. $\frac{\partial}{\partial t}$ terimi lokal diferansiyel anlamındadır. Fiziki anlamı ise sabit

noktadaki zamana göre değişimdir. $\mathbf{u} \cdot \nabla$ hareket diferansiyeli ise, akışkan elemanı bir noktadan diğerine hareket ettiğinde akışkan özelliklerinde olan değişimin ifadesidir.

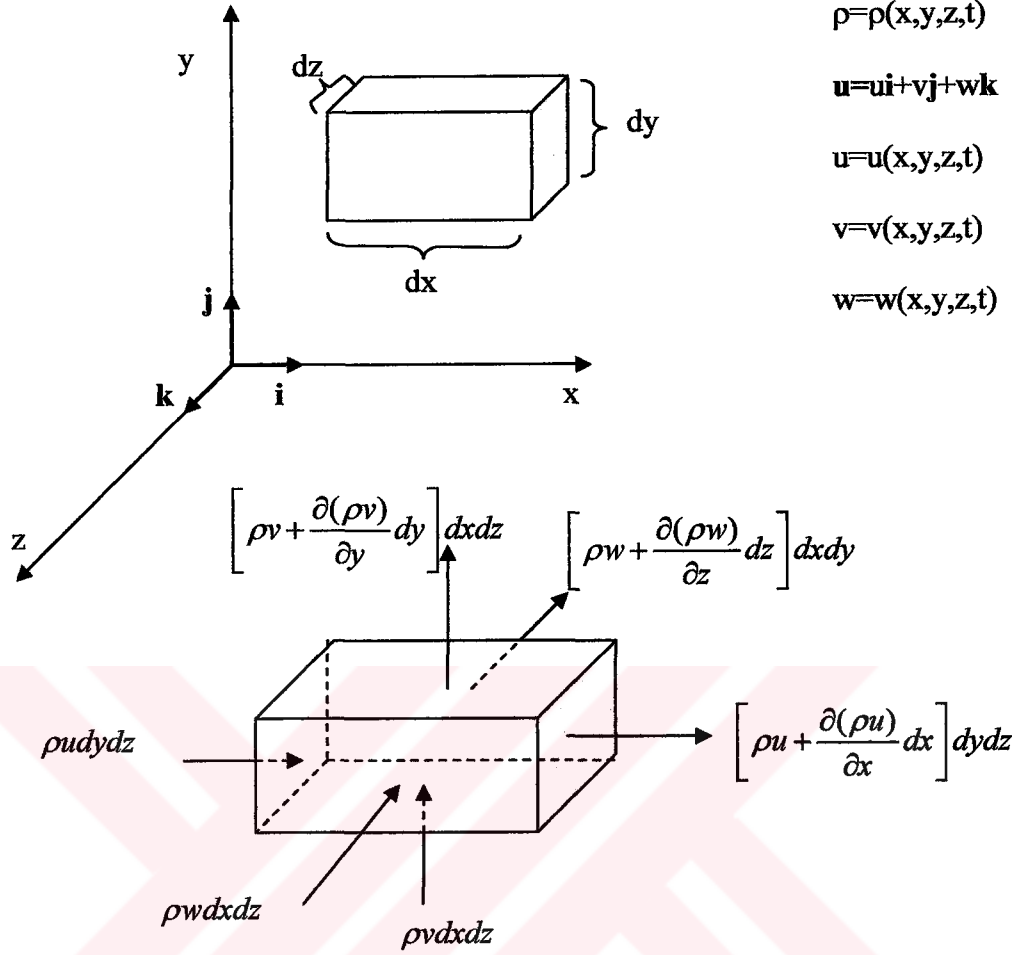
Sıkça karşılaşılabilecek olan bir diğer ifade ise hız vektörünün diverjansı olan, $\nabla \cdot \mathbf{u}$ ifadesidir. Bu ifade vektör alanına uygulanan bir skaler çarpımdır. Fiziki olarak hız vektörünün diverjansı; akışkan elemanının, hacmindeki zamana göre değişimi ifade etmektedir.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.3)$$

2.1 Gaz Fazı (Eulerian) Denklemleri

Bu kısımda hız, basınç, yoğunluk, sıcaklık, konum gibi akışkanın makroskobik özelliklerini ve türevlerini tanımlayabileceğimiz sonsuz küçük fakat moleküler boyuttan büyük olan bir akışkan elemanı ele alınarak Navier-Stokes denklemleri ve diğer temel denklemler elde edilecektir. İçten yanmalı motorlarda, akış alanlarının çözümünde kullanılan bu denklemler KIVA3V'de kullanılan şekilleriyle de tanımlanacaktır.

2.1.1 Süreklilik Denklemi



Şekil 2.1 : Ele alınan akışkan elemanına gelen kütle akıları

x yönündeki net akış :

$$\left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dx \right] dy dz - (\rho u) dy dz = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dx dy dz \quad (2.4a)$$

y yönündeki net akış :

$$\left[\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dy \right] dx dz - (\rho v) dx dz = \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dx dy dz \quad (2.4b)$$

z yönündeki net akış :

$$\left[\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dz \right] dx dy - (\rho w) dx dy = \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dx dy dz \quad (2.4c)$$

$$\text{Akıştan kaynaklanan net kütle çıkışı} : \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] dx dy dz \quad (2.5)$$

$$\text{Kütlenin zamana göre değişimi} : \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz \quad (2.6)$$

Kütlenin korunabilmesi için bu iki terimin büyüklükleri birbirine eşit, işaretleri ise birbirinin tersi olmalıdır. Örneğin; kütlenin zamana göre azalması akıştan kaynaklanan net kütle çıkışının pozitif olmasını gerektirmektedir. Bu iki denklemi eşitlediğimizde;

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.7)$$

denklemi elde edilir. Basit bir akışkan elamanı için elde edilen bu denkleme ileriki bölümlerde kaynak terimleri de eklenecektir. Kaynak terimleri; akışkan elamanı içerisinde buharlaşma, kimyasal reaksiyonların varlığı gibi bazı özel etkileri göz önüne almaktadır.

Sıkıştırılamaz akışla çalışılması durumunda yoğunluğun zamana göre değişimi ihmal edilebilecek; $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, böylelikle süreklilik denklemi $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$ şeklinde incelenebilecektir. Fakat bu tezde ele alınan yanma odası içerisinde gaz bulunmakta ve yanma odası hacmi zamana bağlı olarak değişmektedir. Dolayısıyla, yoğunluk değişiminin ihmal edilmesi söz konusu değildir.

Eğer kütlenin korunumu toplam kütle için değil, sadece bir kimyasal bileşen için yazılacaksa, (2.7) denkleminde difüzyon teriminin eklenmesi gereklidir. Herhangi bir ϕ bileşeni için difüzyon ve kaynak terimleriyle beraber kütlenin korunumu denklemi aşağıdaki formdadır.

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma_{\phi} \nabla \phi) + S_{\phi} \quad (2.8)$$

Eşitliğin solundaki ilk terim zamana göre ϕ 'nin değişimini, ikinci terim taşınımıyla olan net kütle akışını vermektedir. Eşitliğin sağındaki ilk terim ise difüzyonla olan ϕ

bileşenin transferini, ikinci terim ise kaynak terimini temsil etmektedir. Γ_ϕ ; difüzyon katsayısıdır.

KIVA3V programında süreklilik denklemi, $\rho = \sum_m \rho_m$ (m; ele alınan hacimdeki bileşen sayısı, ρ_m ; kısmi yoğunluk) olmak üzere

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{\rho}^s \quad (2.9)$$

şeklinde verilmektedir. Burada $\dot{\rho}^s$ buharlaşma kaynak terimidir. Ele alınan hacim içerisinde sıvı, yani yakıt damlacığı bulunuyor ise, bu sıvı kütlesinin buharlaşması durumunda kütle değişimi buharlaşan miktar kadar olacaktır. Buharlaşma kaynak terimi, $\dot{\rho}^s$,

$$\sum_p N_p \dot{m}_d = - \int_V \dot{\rho}_s dV = -V \dot{\rho}_s \quad (2.10)$$

eşitliğinden elde edilmektedir. Burada V; hücre hacmi, N_p ; damlacık sayısı, $\dot{m}_d$; denklem (2.106) ile verilen tek bir damlacığın buharlaşma hızıdır (g/s).

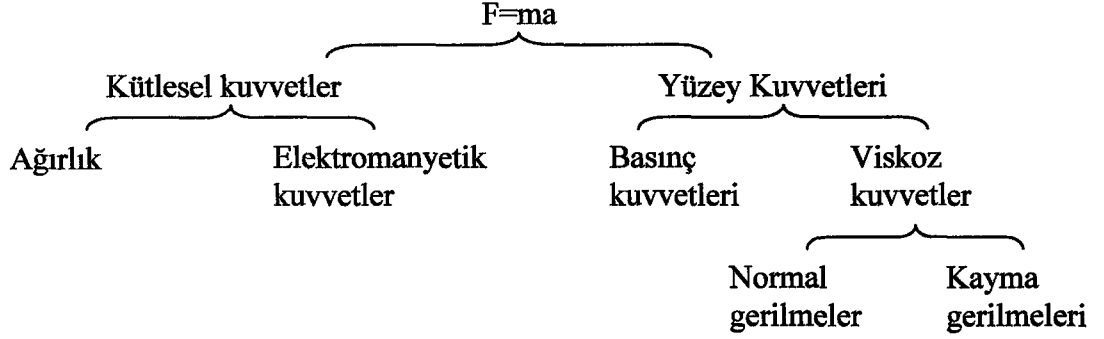
Ele alınan kontrol hacminde kütle korunumu denkleminin sağlanması gerekmektedir. Çoğu zaman kontrol hacminin içerisindeki gazı oluşturan bileşenlerin hareketi incelendiğinden bir bileşenin korunumunu ifade eden denklem, benzer şekilde, aşağıda verilmiştir.

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + f_m + \dot{\rho}_s \delta_{m1} \quad (2.11)$$

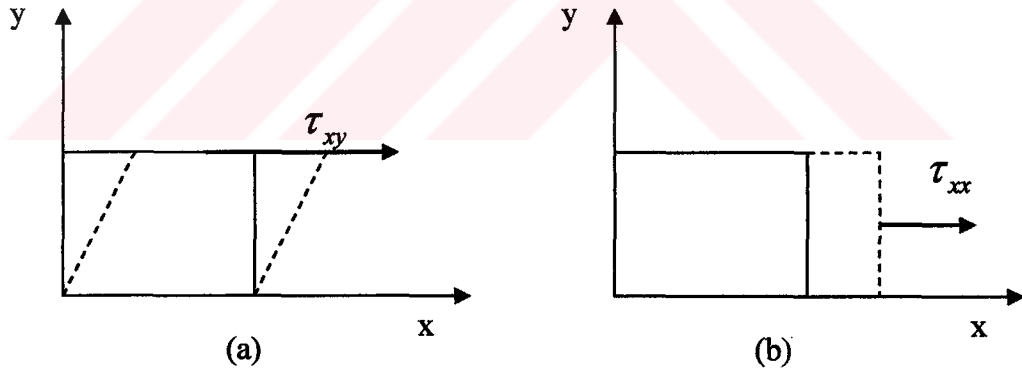
Bu denklemde eşitliğin sağındaki ilk terim difüzyon terimidir. (2.8) denkleminde Γ_ϕ ile gösterilen difüzyon katsayısının yerini, ρD almış olup burada D; Fick'in kütle difüzyon kanunundan gelen difüzyon katsayısıdır (2.88). f_m ; m bileşenine ait kimyasal reaksiyonla oluşan üretim/tüketim terimi (2.90), $\dot{\rho}^s$: sıvı kütlesinin buharlaşmasından gelen kaynak terimdir. δ_{ij} ; Dirac fonksiyonu olmakla birlikte modelde tek bileşenli yakıt kullanıldığından ve ilk bileşen yakıt olarak ele alındığından j=1 ile sınırlandırılmıştır.

2.1.2 Momentum Denklemi

Momentum denkleminde kullanacağımız temel fiziksel prensip Newton'un ikinci kanunudur. Akışkan elemanına etki eden kuvvetler, kütsel ve yüzeysel kuvvetler olmak üzere iki kısma ayrılmaktadır. Bu kuvvetler aşağıdaki diyagramda gösterilmiştir.



Newton'un ikinci kanunu vektörel olarak geçerli bir ifade olduğu için x yönünde; $F_x = ma_x$ şeklinde yazılabilir. Viskoz kuvvetlerden kaynaklanan gerilmelerin akışkan elemanına olan etkisi Şekil 2.2'te gösterilmiştir.

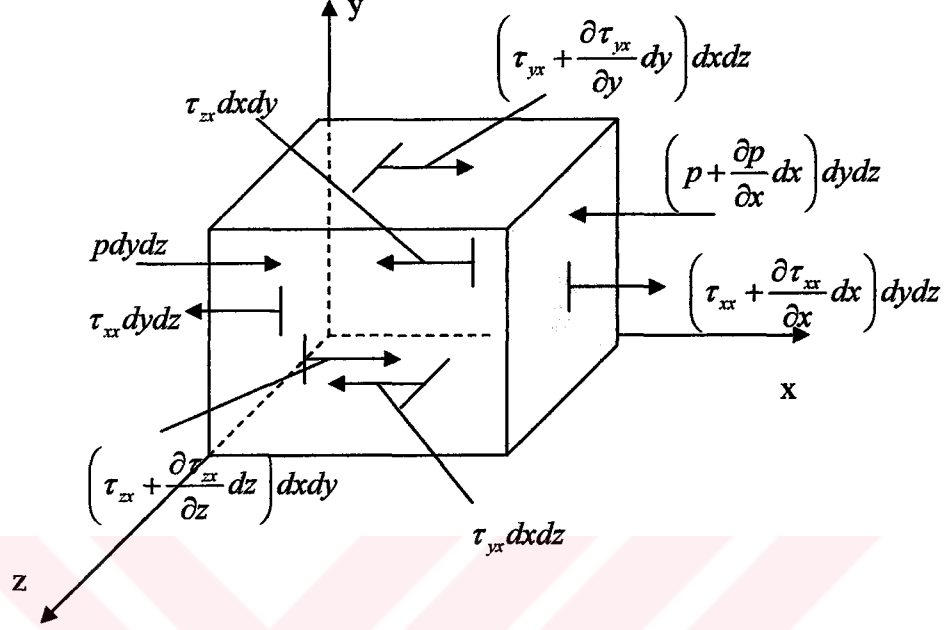


Şekil 2.2 : (a) Kayma gerilmesi, (b) Normal gerilme

Çoğu sıkıştırılamaz akış probleminde normal gerilmeler kayma gerilmelerine göre oldukça küçüktür ve ihmal edilirler. Fakat hız değişiminin $(\partial u / \partial x)$, büyük olduğu durumlarda, örneğin şok dalgalarda, x yönündeki normal gerilme (τ_{xx}) , önem kazanır.

Akışkan elemanına etki eden x yönündeki yüzey kuvvetleri Şekil 2.3'te gösterilmiştir. Her bir hız bileşeninin koordinat ekseninin pozitif yönlerine doğru artış gösterdiği kabul edilerek kuvvet yönleri tayin edilmiştir. Üst yüzeyde gösterilen

yüzey gerilmesi pozitif x koordinatı yönünde, alt yüzeyde ise negatif yöndedir. Basınç kuvvetlerinin yönleri ise her zaman akışkan elamanının merkezi doğrultusundadır.



Şekil 2.3 : Akışkan elamanına x yönünde etkiyen kuvvetler

x yönündeki net yüzey kuvvetleri ;

$$\begin{aligned} & \left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dydz + \left[\left(\tau_{xz} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xz} \right] dydz \\ & + \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dxdz + \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dxdy \end{aligned} \quad (2.12)$$

x yönündeki kütleli kuvvetler $\rho f_x (dxdydz)$, (örneğin; $\rho f_x (dxdydz) = mg_x$) olmak üzere, toplam kuvvet aşağıdaki gibi olacaktır;

$$F_x = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] dxdydz + \rho f_x dxdydz \quad (2.13)$$

Akışkan elemanın kütlesi $m = \rho dxdydz$, ve x yönündeki hızın tam diferansiyeli, yani ivmesi, $a_x = Du / Dt$ 'dir. Böylelikle momentum denkleminin x bileşeni;

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (2.14a)$$

şeklinde elde edilmiş olur. Aynı işlemler y ve z bileşenleri için yapıldığında

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (2.14b)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (2.14c)$$

denklemleri elde edilir.

Elde edilen momentum denklemlerinden Navier-Stokes denklemlerinin elde edilişi aşağıda olduğu gibidir. (2.14a) denkleminin sol tarafı

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla u \quad (2.15)$$

şeklinde de yazılabilir. $\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = \rho \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial t}$ denklemi ;

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} - u \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.16)$$

ve skaler bir büyüklükle çarpılmış hız vektörünün diverjansı;

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = u \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) + (\rho \mathbf{u}) \cdot \nabla u$$

$$(\rho \mathbf{u}) \cdot \nabla u = \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - u \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \quad (2.17)$$

şeklinde yazıldıktan sonra (2.16) ve (2.17) denklemleri (2.15) denkleminde yerlerine yazılırsa;

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} - u \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \right] + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \quad (2.18)$$

denklemi elde edilir. Bu denklemde köşeli parantez içerisindeki terim süreklilik denkleminde, yani sıfıra eşittir. Böylelikle;

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \quad (2.19)$$

denklemi elde edilmiş olur. (2.19) denklemini (2.14a) denkleminde yerine yazarsak;

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (2.20a)$$

ve benzer işlemler y ve z bileşenleri için yapılırsa aşağıdaki denklemler elde edilir.

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (2.20b)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (2.20c)$$

Bu denklemlerin çözülebilmesi için yüzey gerilmelerinin bilinmesi gereklidir. Newton akışkanlarının (yüzey gerilmeleri, akışkan hız değişimleri ile orantılı olan akışkanlar) yüzey gerilmeleri için Stokes 1845 yılında aşağıdaki bağıntıları vermiştir.

$$\tau_{xx} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.21a); \quad \tau_{yy} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.21b)$$

$$\tau_{zz} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.21c); \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right] \quad (2.21d)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left[\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right] \quad (2.21e); \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left[\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right] \quad (2.21f)$$

μ ; moleküler viskozite, λ ; ikincil viskozite.

Yüzey gerilme denklemlerini (2.20) denklemlerinde yerlerine koyacak olursak aşağıdaki Navier-Stokes denklemleri elde edilir.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{u}) = & -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \rho f_x \end{aligned} \quad (2.22a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \mathbf{u}) = & -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + \rho f_y \end{aligned} \quad (2.22b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \mathbf{u}) = & -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} [\lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}] + \rho f_z \end{aligned} \quad (2.22c)$$

Gaz fazı için KIVA3V’de kullanılan momentum denklemi tensör notasyonu ile gösterilirse;

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + F^s + \rho \mathbf{g} - \frac{2}{3} \nabla(\rho k) \quad (2.23)$$

şeklindedir. Burada $\boldsymbol{\sigma}$; (2.24) ile verilen viskoz gerilme tensörü, F^s ; yakıt demetinden kaynaklanan birim hacimdeki momentum kazanç/kayıp terimi, $\mathbf{g}$; yerçekimi ivmesidir (Amsden, 1989). ((2.22) denkleminde kütleli kuvvetler f ile gösterilmiştir). Bu denklemin (2.22) denklemlerinden farkı, F^s yakıt demetinin etkisini ve k (2.78) türbülans kinetik enerjisini içeren terimlerin eklenmesidir. İleride özel başlıklar altında incelenecek olmasına rağmen bu terim için kısaca; “Türbülanslı akışta, çalkantı bileşenlerinin sahip olduğu kinetik enerji, akışın sahip olduğu momentum üzerinde azaltıcı bir etki yaratır” diyebiliriz. Dizel motorlarda yanma odasındaki akış türbülanslı yapıda olduğundan ve yakıt demeti bu türbülanslı ortama püskürtüldüğünden momentum denkleminde bu terimler eklenmiştir. Tensörel notasyon ile gösterilen viskoz gerilmeler;

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \mathbf{S} + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{I} \quad (2.24)$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (2.25)$$

şeklinde tanımlıdır. $\mathbf{I}$; köşegen üzerindeki bileşenleri 1 diğer bileşenleri 0 olan birim vektör (unit dyadic), üst simge T; transpoze anlamındadır. Yakıt demetinden kaynaklanan kazanç terimi ile türbülanslı akışın çalkantı bileşenlerinden kaynaklanan kinetik enerji terimi sıfır alındığında ve (2.24), (2.25) eşitlikleri açılıp (2.23) denkleminde yerlerine konulursa (2.22) denklemleri elde edilir. KIVA3V kodunda momentum denkleminde Pressure Gradient Scaling (PGS) metodu uygulanmaktadır (Amsden, 1989). Bu metod ile daha hızlı hesaplamalar yapılabildiğinden çözümler daha kısa zamanda elde edilmektedir.

2.1.3 Enerji Denklemi :

Termodinamiğin birinci kanunu seçilen akışkan elemanına uygulanırsa enerjinin korunumu eşitliğinin sağlanması gerekmektedir.;

$$\underbrace{\text{Akışkan elemanı içerisindeki net enerji değişimi}}_A = \underbrace{\text{Akışkan elemanın net ısı alışverişi}}_B + \underbrace{\text{Akışkan elemanın yüzeysel ve kütleli kuvvetlerinin yaptığı iş}}_C$$

Kütleli ve yüzeysel kuvvetlerin yaptığı iş olan C teriminden başlayacak olursak, u hızıyla hareket eden bir akışkan elemanına kütleli kuvvetler tarafından birim zamanda yapılan iş;

$$\rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} (dx dy dz) \quad (2.26)$$

olacaktır. Yüzeysel kuvvetlerinin yaptığı iş, basınç kuvvetleri ve yüzeysel gerilmelerinin yaptığı işlerin toplamı olarak alınacaktır. Şekil 2.3'te gösterilen sol ve sağ yüzeylere etkiyen basınç kuvvetlerinin yaptığı iş;

$$\left[up - \left(up + \frac{\partial(up)}{\partial x} dx \right) \right] dy dz = - \frac{\partial(up)}{\partial x} dx dy dz \quad (2.27)$$

üst ve alt yüzeyler için viskoz gerilmelerinin yaptığı iş;

$$\left[\left(u\tau_{yx} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} dy \right) - u\tau_{yx} \right] dx dz = \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} dx dy dz \quad (2.28)$$

olacaktır. Benzer şekilde tüm yüzeyler için yüzeysel gerilmelerinin yaptığı işi elde edip basınç kuvvetlerinin yaptığı iş ile toplarsak, yüzeysel kuvvetlerinin yaptığı iş;

$$\left[- \frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right] dx dy dz \quad (2.29)$$

olarak bulunur. Elde edilen (2.29) denklemi x, y, z yönleri için yazıldıktan sonra kütleli kuvvetlerin yaptığı iş (2.26), ile toplanırsa;

$$C = \left[\begin{aligned} & - \left(\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right) \\ & + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \\ & + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \\ & + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \end{aligned} \right] dx dy dz + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} (dx dy dz) \quad (2.30)$$

C terimi elde edilir.

Akışkanın ısı alışverişini temsil eden B terimi akışkan elemanın yüzeylerinden iletimle olan ısı alışverişini ve radyasyon yoluyla hacimsel olarak akışkan elemanın ısı alışverişini içermektedir. Hacimsel ısı akısı $\dot{q}$ ile ifade edilirse, radyasyon yoluyla akışkan elemanın ısınması;

$$\rho \dot{q} dx dy dz \quad (2.31)$$

olacaktır. Şekil 2.4'teki akışkan elemanın sol yüzeyinden olan ısı iletimi;

$$\dot{q}_x dy dz \quad (2.32a)$$

sağ yüzeyinden olan ısı iletimi;

$$\left[\dot{q}_x + \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} \right) dx \right] dy dz \quad (2.32b)$$

olacaktır. x yönündeki ısı iletimi ise (2.32a) ile (2.32b) terimlerinin toplamı;

$$\left[\dot{q}_x - \left(\dot{q}_x + \frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} \right) dx \right] dy dz = - \frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} dx dy dz \quad (2.33)$$

olur. Benzer şekilde y ve z yönlerindeki ısı iletimleri elde edildikten sonra x,y,ve z yönlerindeki ısı iletimleri toplandığında;

$$- \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{q}_z}{\partial z} \right) dx dy dz \quad (2.34)$$

denklemini elde edilir. Böylelikle B terimi (2.31) ve (2.34) terimlerinin toplamından oluşacaktır.

$$B = \left[\rho \dot{q} - \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{q}_z}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (2.35)$$

κ ısı iletim katsayısı, T sıcaklık olmak üzere Fourier ısı iletim kanunundan gelen

$$\dot{q}_x = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}; \quad \dot{q}_y = -\kappa \frac{\partial T}{\partial y}; \quad \dot{q}_z = -\kappa \frac{\partial T}{\partial z}; \text{ eşitlikleri (2.35) denkleminde yerlerine}$$

konulursa;

$$B = \left[\rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (2.36)$$

şeklinde elde edilir.

Akışkan elamanının toplam enerjisinin, kinetik enerji ve iç enerji terimlerinin toplamından oluştuğu kabulü ile A terimi;

$$A = \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \right) dx dy dz \quad (2.37)$$

şeklinde yazılabilir. A,B,C terimlerini yerine yazarsak enerji denklemi aşağıda olduğu gibi elde edilecektir.

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \right) = \left[\begin{aligned} & \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ & - \frac{\partial(u\rho)}{\partial x} - \frac{\partial(v\rho)}{\partial y} - \frac{\partial(w\rho)}{\partial z} \\ & + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \\ & + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \\ & + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \end{aligned} \right] + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \quad (2.38)$$

İç enerji denklemini elde etmek için momentum denklemlerinden (2.14) yararlanarak elde edilen;

$$\rho \frac{D(u^2/2)}{Dt} = -u \frac{\partial p}{\partial x} + u \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + u \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + u \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho u f_x \quad (2.39a)$$

$$\rho \frac{D(v^2/2)}{Dt} = -v \frac{\partial p}{\partial y} + v \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + v \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho v f_y \quad (2.39b)$$

$$\rho \frac{D(w^2/2)}{Dt} = -w \frac{\partial p}{\partial z} + w \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + w \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + w \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho w f_z \quad (2.39c)$$

denklemleri toplandığında;

$$\begin{aligned} \rho \frac{1}{2} \frac{D(u^2 + v^2 + w^2)}{Dt} = & -u \frac{\partial p}{\partial x} - v \frac{\partial p}{\partial y} - w \frac{\partial p}{\partial z} + \\ & u \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + v \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) + \\ & w \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) + \rho (u f_x + v f_y + w f_z) \end{aligned} \quad (2.40)$$

kinetik enerji denklemi elde edilir. Bu denklem (2.38) denkleminden çıkartılıp düzenlendiğinde aşağıdaki iç enerji denklemi bulunur.

$$\rho \frac{De}{Dt} = \left[\begin{aligned} & \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ & - p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} \\ & + \tau_{yx} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \tau_{zx} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \tau_{xz} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{aligned} \right] \quad (2.41)$$

(2.41) denkleminin sol tarafı için, (2.19) denkleminin elde edilişinde olduğu gibi, süreklilik denkleminin yararlanılarak $\rho \frac{De}{Dt} = \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u})$ elde edilip, denklemin sağ tarafında görülen yüzey gerilmeleri için (2.21) denklemleri yerlerine yazılırsa, enerji denklemi aşağıdaki hali alır.

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u}) = \rho \dot{q} + \nabla \cdot (\kappa \nabla T) - p \nabla \cdot \mathbf{u} + M \quad (2.42)$$

M açık halde yazılırsa ;

$$M = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \mu \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (2.43)$$

şeklindedir.

KIVA3V’de iç enerji denklemi;

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u}) = -p \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho \varepsilon + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s \quad (2.44)$$

olarak verilmektedir. (2.42) denkleminde farklı olarak $\mathbf{J}$; ısı akısı vektörü, $\dot{Q}^c$; kimyasal reaksiyonlarla ısı girişinden ve $\dot{Q}^s$; yakıt demeti ile gaz fazı arasındaki enerji değişiminden gelen kaynak terimleri kullanılmıştır (Amsden, 1989). Isı akısı vektörü (2.45) denkleminde de görüldüğü gibi ısı iletimi ve entalpi difüzyonunu içeren terimleri ihtiva etmektedir. Türbülans kinetik enerjisinin sönüm hızı olan ε ’ nin tanımı ise türbülans modeli kısmında, denklem (2.88) ile verilmiştir.

$$\mathbf{J} = -\kappa \nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \quad (2.45)$$

$$\dot{Q}^c = \sum_{r=1}^{N_r} q_r \dot{\omega}_r \quad (2.46)$$

$\dot{\omega}_r$, denklem (2.94) ile verilecek olup q_r ; r reaksiyonunun referans sıcaklıktaki reaksiyon ısısı, $(h_s)^{ref}$; s bileşenine ait referans sıcaklıktaki formasyon entalpisi olmak üzere;

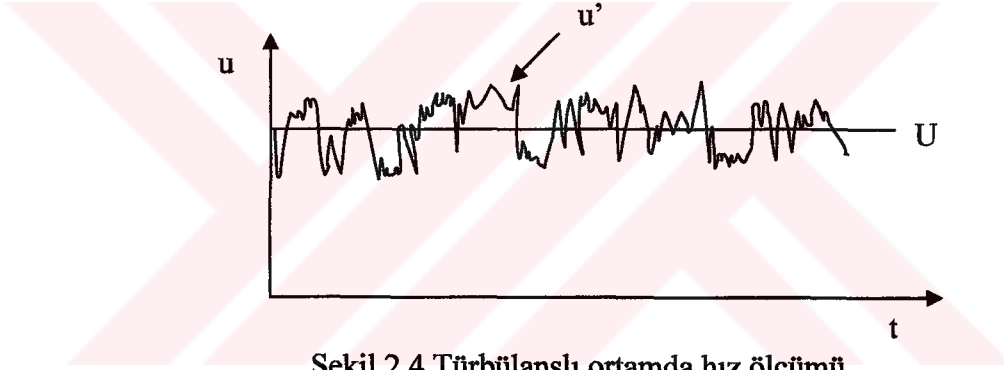
$$q_r = \sum_{s=1}^{N_s} (v_{sr}' - v_{sr}'') (h_s)^{ref} \quad (2.47)$$

şeklinde tanımlıdır.

Böylelikle gaz fazının modellenmesi için gerekli olan temel denklemler elde edilmiştir. Sıvı fazı denklemlerini vermeden önce türbülanslı akış ve kullanılan türbülans modellerinin anlatılması yerinde olacaktır.

2.1.4 Türbülans Denklemleri

Çoğu mühendislik uygulamalarında karşılaşılan akış türbülanslı yapıdadır. Akış üzerinde yapılan deneyler sonucunda belirli bir Reynolds sayısı altında akışın laminar olduğu bilinmektedir. Kritik Reynolds değerinin üzerinde ise rasgele ve karmaşık bir yapı söz konusudur. Bu bölgedeki akışa türbülanslı akış denilmektedir. Eğer türbülanslı ortamda bir noktadaki hız ölçülmek istenirse Şekil 2.4'tekine benzer bir yapı görülecektir. İçten yanmalı motorların sahip olduğu yüksek türbülanslı yapının modellenmesi motor modelinin doğru sonuçlar vermesi açısından oldukça önemlidir.



Şekil 2.4 Türbülanslı ortamda hız ölçümü

Türbülanslı akım durumunda tüm akış özellikleri, ϕ , akış özelliğinin ortalama değeri, Φ , (U, V, W, P) ile çalkantı bileşeninin toplamı şeklinde tanımlanırlar, ϕ' , (u', v', w', p') .

$$\phi = \Phi + \phi' \quad (2.48)$$

Türbülanslı akıma ait hareket denklemleri Reynolds denklemleri olarak adlandırılırlar. Bu denklemler öncelikle daha basit olması açısından sıkıştırılamaz akış için elde edilecektir. Türbülans modelleri kısmında ise, elde edilen Reynolds denklemlerinden hareketle KIVA3V'de kullanılan sıkıştırılabilir akış için türbülans denklemleri verilecektir.

Akışkanın zamana bağlı bir ϕ özelliğinin ortalama değeri Φ ;

$$\Phi = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \varphi(t) dt \quad (2.49)$$

şeklinde tanımlıdır. Çalkantı bileşeninin zaman ortalaması sıfır olacağından çalkantı bileşenine ait ortalama değer, rms değeri olarak bilinen, karesinin ortalamasının karekökü şeklinde tanımlıdır.

$$\varphi_{rms} = \sqrt{(\varphi')^2} = \left[\frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} (\varphi')^2 dt \right]^{1/2} \quad (2.50)$$

Aşağıda iki akış özelliği olan, $\varphi = \Phi + \varphi'$, $\psi = \Psi + \psi'$ ve bir vektörel özellik olan ; $\mathbf{a} = \mathbf{A} + \mathbf{a}'$ için kullanılan temel matematiksel bağıntılar özetlenmiştir.

$$\overline{\varphi'} = \overline{\psi'} = 0 ; \quad \overline{\Phi} = \Phi ; \quad \overline{\varphi + \psi} = \Phi + \Psi ; \quad \overline{\varphi \psi} = \Phi \Psi + \overline{\varphi' \psi'} ;$$

$$\overline{\varphi' \Psi} = 0 ; \quad \overline{\varphi \Psi} = \Phi \Psi ; \quad \frac{\partial \varphi}{\partial s} = \frac{\partial \Phi}{\partial s} ; \quad \overline{\int \varphi ds} = \int \Phi ds \quad (2.51)$$

$$\overline{\nabla \cdot \mathbf{a}} = \nabla \cdot \mathbf{A} ; \quad \overline{\nabla \cdot (\varphi \mathbf{a})} = \nabla \cdot (\overline{\varphi \mathbf{a}}) = \nabla \cdot (\Phi \mathbf{A}) + \nabla \cdot (\overline{\varphi' \mathbf{a}'});$$

$$\overline{\nabla \cdot (\nabla \varphi)} = \nabla \cdot (\nabla \Phi) \quad (2.52)$$

Sıkıştırılamaz akış için Navier-Stokes denklemleri aşağıdaki gibidir.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (u \mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \nabla \cdot (\nabla u) \quad (2.54a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (v \mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \nabla \cdot (\nabla v) \quad (2.54b)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (w \mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \nabla \cdot (\nabla w) \quad (2.54c)$$

ν : Kinematik viskozite (μ/ρ)

Bu denklemlerde çalkantıların etkisini incelemek için; $\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}'$; $u = U + u'$; $v = V + v'$; $w = W + w'$; $p = P + p'$ şeklinde yazıldıktan sonra Navier-Stokes denklemlerinde, (2.51)

ve (2.52) bağıntılarını kullanarak elde edilen; $\overline{\nabla \cdot (\mathbf{u})} = \nabla \cdot (\mathbf{U})$, $\frac{\partial \overline{u}}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial t}$,

$$\overline{\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})} = \nabla \cdot (U\mathbf{U}) + \overline{\nabla \cdot (\mathbf{u}'\mathbf{u}')}, \quad -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x}, \quad \overline{\nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u})} = \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{U}) \quad \text{eşitlikleri}$$

yerlerine konulursa;

$$\nabla \cdot (\mathbf{U}) = 0 \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (U\mathbf{U}) + \overline{\nabla \cdot (\mathbf{u}'\mathbf{u}')} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla \cdot (\nabla U) \quad (2.56a)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot (V\mathbf{U}) + \overline{\nabla \cdot (\mathbf{v}'\mathbf{u}')} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \nabla \cdot (\nabla V) \quad (2.56b)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot (W\mathbf{U}) + \overline{\nabla \cdot (\mathbf{w}'\mathbf{u}')} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \nabla \cdot (\nabla W) \quad (2.56c)$$

denklemleri elde edilmiş olur. Burada zaman ortalaması alınmış momentum denklemlerinde görülen terimler, eşitliğin sol tarafındaki terim hariç (2.54) denklemine benzer terimler içermektedir. Ortalama hıza olan etkisini görmek için, türbülansın yüzey gerilmelerini ifade eden bu terim eşitliğin sağ tarafına alınırsa;

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (U\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla \cdot (\nabla U) + \left[-\frac{\partial \overline{u'^2}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial z} \right] \quad (2.57a)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot (V\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \nabla \cdot (\nabla V) + \left[-\frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'^2}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial z} \right] \quad (2.57b)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot (W\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \nabla \cdot (\nabla W) + \left[-\frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z} \right] \quad (2.57c)$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemler incelenecek olursa üç adet normal, ve üç adet kayma gerilmesinden oluşan altı adet ek bilinmeyen terimin geldiği görülür.

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= -\rho \overline{u'^2} \quad ; \quad \tau_{yy} = -\rho \overline{v'^2} \quad ; \quad \tau_{zz} = -\rho \overline{w'^2} \quad ; \\ \tau_{xy} &= \tau_{yx} = -\rho \overline{u'v'} \quad ; \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = -\rho \overline{u'w'} \quad ; \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = -\rho \overline{v'w'} \end{aligned} \quad (2.58)$$

Bu terimler Reynolds gerilmeleri ve (2.57) denklemleri ise Reynolds denklemleri olarak adlandırılırlar. Zaman ortalamalı ϕ skaleri için genel transfer denklemi (2.59) ile gösterilmiştir.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\Phi \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\Gamma_{\Phi}^* \nabla \Phi) + \left[-\frac{\partial \overline{u' \phi'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v' \phi'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w' \phi'}}{\partial z} \right] + S_{\Phi} \quad (2.59)$$

Yoğunluk değişimlerinin göz önünde bulundurulması gereken (fakat yoğunluk çalkantı bileşenlerinin ihmal edildiği) sıkıştırılabilir akış için yoğunluğa bağlı ortalamaları (Favre-averaged) alınmış olan türbülanslı akış denklemleri aşağıda verilmiştir (Versteeg ve Malalasekera, 1995).

Süreklilik denklemi:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (2.60)$$

Reynolds denklemleri:

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \mathbf{U}) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \nabla \cdot (\mu \nabla U) + \left[\frac{\partial (\overline{\rho u'^2})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{\rho u' v'})}{\partial y} - \frac{\partial (\overline{\rho u' w'})}{\partial z} \right] + S_{Mx} \quad (2.61a)$$

$$\frac{\partial \rho V}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V \mathbf{U}) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \nabla \cdot (\mu \nabla V) + \left[\frac{\partial (\overline{\rho u' v'})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{\rho v'^2})}{\partial y} - \frac{\partial (\overline{\rho v' w'})}{\partial z} \right] + S_{My} \quad (2.61b)$$

$$\frac{\partial \rho W}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho W \mathbf{U}) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \nabla \cdot (\mu \nabla W) + \left[\frac{\partial (\overline{\rho u' w'})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{\rho v' w'})}{\partial y} - \frac{\partial (\overline{\rho w'^2})}{\partial z} \right] + S_{Mz} \quad (2.61c)$$

Skaler transfer denklemi :

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \Phi \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\Gamma_{\Phi} \nabla \Phi) + \left[-\frac{\partial (\overline{\rho u' \phi'})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{\rho v' \phi'})}{\partial y} - \frac{\partial (\overline{\rho w' \phi'})}{\partial z} \right] + S_{\Phi} \quad (2.62)$$

Bu denklemlerde görülen Reynolds gerilmeleri ek olarak altı bilinmeyen, eğer bir transfer fonksiyonu kullanılacaksa bu denklemden gelen üç adet ek bilinmeyen

getirecektir. Fakat elimizde 4 denklem, skaler transfer fonksiyonu ile beraber 5 denklem bulunmaktadır. Karmaşık olan türbülans yapısı için, bahsedilen ek bilinmeyenleri verebilecek birtakım formüller geliştirilerek bu kapalılık problemi aşmaya çalışılmıştır. Çoğu uygulamada türbülans çalkantılarının detaylarını çözmek gereksizdir ve türbülansın ortalama değerlere etkisi araştırılır. Ancak bazı durumlarda Reynolds gerilmeleri ve türbülanslı skaler transfer fonksiyonlarını ifade eden terimlere ihtiyaç duyulmaktadır. Türbülans modellerinin asıl amacı yeterince doğru olacak şekilde bu Reynolds gerilmelerini ifade eden denklemler üretmektir. Reynolds denklemlerine dayanan klasik türbülans modelleri;

1. Sıfır denklemlili modeller - Prandtl Karışım Uzunluğu Modeli
2. İki denklemlili modeller – $k-\varepsilon$ modeli
3. Reynolds Gerilme Denklem modeli
4. Cebri Gerilme modelleri

başlıkları altında incelenebilir. Karışım uzunluğu modeli ve $k-\varepsilon$ modeli en çok kullanılan modellerdir. Bu modeller ortalama akış denklemlerindeki viskoz gerilmeler ile Reynolds gerilmeleri arasında bir ilişki olduğu varsayımına dayanmaktadır. Hatırlanacak olursa sıkıştırılamaz akış için, bir Newton akışkanının viskoz gerilmeleri, lineer deformasyon oranıyla ilişkilendirilmiştir.

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.30)$$

Boussinesq tarafından 1877 yılında Reynolds gerilmelerinin ortalama deformasyon oranı ile ilişkilendirilebileceği ortaya konulmuştur.

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'v'} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.63)$$

μ_t : türbülans (veya eddy) viskozitesi boyutu (Pa s) olmakla birlikte kinematik türbülans viskozitesi ν_t (m^2/s)'dir.

Isı, kütle veya skaler bir özelliğin türbülanslı ortamda transfer eşitliği de benzer bir ilişki kurularak yazılabilir. Skaler bir ϕ özelliğinin türbülanslı ortamda transferi, transfer edilen özelliğin ortalama değerinin gradyanı ile doğru orantılı olacaktır.

$$-\overline{\rho u_i' \phi'} = \Gamma_i \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \quad (2.64)$$

Γ_i : türbülans yayılım katsayısıdır. Momentum, ısı, kütle transferi aynı mekanizma ile yani eddy karışımı ile gerçekleştiğinden türbülans viskozitesi ile türbülans yayılım katsayısı arasında *türbülans Prandtl/Schmidt sayısı* ile belirtilen bir ilişki kurulabilir.

$$\sigma_i = \frac{\mu_i}{\Gamma_i} \quad (2.65)$$

Karışım uzunluğu modeli (2.63) denklemindeki türbülans viskozitesini konumun fonksiyonu olan basit bir formülle ifade ederek Reynolds gerilmelerini tanımlamaya çalışır. $k-\varepsilon$ ise daha karmaşık olmakla birlikte türbülans özellikleri, türbülansın oluşumu, azalışı ve yayılımı için tanımlar getirmeye çalışır. Reynolds gerilme denklem modeli ise türbülans viskozitesinin izotropik olmadığı durumlar için yani gerilmenin ortalama deformasyon ile orantılı olmadığı durumlar için ortaya konulmuş bir modellerdir.

Bu tezde türbülans modeli olarak kullanılan $k-\varepsilon$ modeli anlatılacaktır, fakat bu modelin daha iyi ifade edilebilmesi için öncelikle Karışım Uzunluğu Modeli'nden bahsedilecektir.

2.1.4.1 Karışım Uzunluğu Modeli

Eğer türbülans hız ölçeği $\mathcal{g}$ (m/s) ve uzunluk ölçeği ℓ (m) birleştirilerek, türbülans kinematik viskozitesi ν_i (m²/s) ifade edilecek olursa, boyut analizi sonucu, C boyutsuz bir katsayı olmak üzere;

$$\nu_i = C \mathcal{g} \ell \quad (2.66)$$

yazılabilir. Bu durumda dinamik türbülans viskozitesi ;

$$\mu_i = C \rho \mathcal{g} \ell \quad (2.67)$$

olacaktır. Türbülanslı yapıyı karakterize eden eddy'lerin boyutunun türbülans uzunluk ölçeği olan, ℓ olduğu düşünülecek olursa ve ortalama akış ile bu büyük eddy'lerin davranışı arasında bir bağ olduğu kabul edilirse, karakteristik hız ölçeği

ortalama akış özellikleri ile ifade edilebilir. Bu kabulün iki boyutlu akışlarda (Reynolds gerilmesinin sadece $\tau_{xy} = \tau_{yx} = -\rho \overline{u'v'}$ ve ortalama hız gradyanının $\partial U / \partial y$ olduğu akışlar) oldukça doğru sonuçlar verdiği görülmüştür. Bu tür akışlarda hız ölçeğini, c boyutsuz bir katsayı, ℓ eddy uzunluk ölçeği olmak üzere,

$$g = c\ell \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \quad (2.68)$$

şeklinde yazmak, boyutsal olarak doğru olacaktır. Denklem (2.66) ile (2.68) birleştirildiğinde C ve c sabitleri yeni bir uzunluk ölçeği olan ℓ_m içerisine alınacak olursa;

$$v_t = \ell_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \quad (2.69)$$

elde edilir. Bu kabullerle elde edilen model Prandtl karışım uzunluğu modelidir. İki boyutlu akış için kayma gerilmesi ise;

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = -\rho \overline{u'v'} = \rho \ell_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \frac{\partial U}{\partial y} \quad (2.70)$$

şeklinde yazılabilecektir. Türbülanslı transfer denklemi için ise benzer şekilde;

$$-\rho \overline{v'\phi} = \Gamma_t \frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad (2.71)$$

$\Gamma_t = \mu_t / \sigma_t$ olmak üzere, yazılabilir. σ_t için çeşitli akış türlerine göre deneylerle ortaya konmuş, farklı akış durumlarına bağlı olarak değişen ampirik değerler literatürde mevcuttur.

2.1.4.2 k-ε Modeli

Türbülans parametrelerinin taşınım ve yayılımı ihmal edilebilir boyutta ise türbülans modeli olarak Prandtl karışım uzunluğu modelini kullanmak uygun olacaktır. Fakat taşınım ve yayılımı ihmal edemiyorsak, türbülansın dinamiğini göz önünde bulunduran bir modele ihtiyaç duyulacaktır. $k-\varepsilon$ modeli türbülans kinetik enerjisinin doğuşu ve bu enerjinin sönmümlenme dengesi üzerine kurulmuştur.

$$\begin{array}{ccccccc}
k'nın & + & k'nın & = & k'nın & + & k'nın & + & k'nın \\
değişimi & & taşınım & & basınç & & viskoz & & Reynolds \\
& & transferi & & gradiyeni & & gerilme & & gerilme \\
& & & & ile transferi & & r ile & & r ile \\
& & & & & & transferi & & transferi \\
& & & & + & k'nın & + & Türbülans \\
& & & & & sönümlenme & & üretimi \\
& & & & & hızı & &
\end{array}$$

Türbülansın kinetik enerji denklemi, akışın ortalama kinetik enerji denklemine benzemekle birlikte son terimin işaretinde farklılık görülür. Bunun nedeni, genelde hız gradyanını, örneğin; $\partial U / \partial y$, pozitif ise, türbülansın kinetik enerji denkleminde, $-\overline{\rho u'_{ij} u'_{ij}}$ Reynolds gerilme teriminin değeri pozitifken, türbülansın ortalama kinetik enerjisi denkleminde bu terimin negatif olmasıdır. Türbülans üretimi akışın ortalama kinetik enerjisini azaltan bir nedendir.

Türbülansın kinetik enerjisi denkleminde viskoz sönüm terimi,

$$-2\mu \overline{e'_{ij} \cdot e'_{ij}} = -2\mu \left(\overline{e'^2_{11}} + \overline{e'^2_{22}} + \overline{e'^2_{33}} + 2\overline{e'^2_{12}} + 2\overline{e'^2_{13}} + 2\overline{e'^2_{23}} \right) \quad (2.75)$$

çalkantı deformasyon terimlerinin, e'_{ij} , kareleri ile k 'nın değişimine negatif bir etki yaratmaktadır. Türbülansın kinetik enerjisi en küçük edyy boyutundaki (türbülansın Kolmogorof ölçeği) akış alanı içinde viskoz sürtünme ile kaybolmaktadır. Birim kütle için sönüm hızı (m^2 / s^3);

$$\varepsilon = 2\mu \overline{e'_{ij} \cdot e'_{ij}} \quad (2.76)$$

türbülansın dinamiği açısından oldukça önemli bir büyüklüktür.

Standart $k - \varepsilon$ modelinde k ve ε terimleri için iki ayrı denklem bulunmaktadır. k ve ε terimleri büyük ölçekli türbülansın hız, $\mathcal{G}$, ve uzunluk, ℓ , ölçeğini tespit etmekte kullanılmaktadır.

$$\mathcal{G} = k^{1/2} \quad ; \quad \ell = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$$

Burada küçük eddy değişkeni olan ε , büyük eddy değişkeni olan uzunluk ölçeğini (ℓ), tespit etmekte kullanılmaktadır. Bunun nedeni; yüksek Reynolds sayılarında büyük eddy'lerin ortalama akıştan aldıkları enerji oranının, viskoz etkiler nedeniyle yok olan eddy'lerin kaybettiği enerji oranına eşit olmasıdır.

Karışım uzunluğu modelinde kullanılan yaklaşıma benzer bir yaklaşımla C_μ ; boyutsuz bir katsayı olmak üzere;

$$\mu_t = C_\mu \rho \ell^2 = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.77)$$

yazılabilir.

Akış uygulamalarında $k-\varepsilon$ modelinde başlangıç şartı olarak k ve ε dağılım değerleri verilmelidir. Simetri veya çıkış değerleri için; $\partial k / \partial n = 0$ ve $\partial \varepsilon / \partial n = 0$ serbest akışta $k = 0$ ve $\varepsilon = 0$; katı yüzeylerde ise Reynolds sayısına göre sınır şartları belirlenmektedir (Versteeg ve Malalasekera, 1995).

Bu tezde standart $k-\varepsilon$ türbülans modeli ve onun RNG versiyonu kullanılacaktır. Aslında $k-\varepsilon$ modeli sıkıştırılamaz akışlar için geliştirilmiş olmasına rağmen içten yanmalı motorlar için sıkıştırılabilir akış ($\sigma : \nabla \mathbf{u}$) ve yakıt demeti ile gaz fazı etkileşim terimleri ($\dot{W}^s$) eklenerek model geliştirilmiştir (Amsden, 1989).

Yakıt demetinin türbülanslı yapısının gaz fazı içerisinde modellenebilmesi oldukça zordur. KIVA3V kodunda yakıt demeti kaynak terimi, k denkleminde türbülans kinetik enerjisini azaltıcı bir kayıp terim olarak alınmaktadır. Sıvının hacimsel oranının ihmal edilebilecek boyutta olması ve damlacıkların türbülans uzunluk ölçeği ile karşılaştırıldığında oldukça küçük olması sebebiyle bu kabul geçerlidir. (Nordin, 2001).

Standart $k-\varepsilon$ modelinde kullanılan denklemler aşağıda verilmiştir.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{u} + \sigma : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_k} \right) \nabla k \right] - \rho \varepsilon + \dot{W}^s \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) = -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} \right) \rho \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right]$$

$$+\frac{\varepsilon}{k}\left[C_{\varepsilon 1}\sigma:\nabla\mathbf{u}-C_{\varepsilon 2}\rho\varepsilon+C_s\dot{W}^s\right] \quad (2.79)$$

$\sigma:\nabla\mathbf{u}=\sigma_{ij}\partial u_i/\partial x_j$, ve kullanılan sabitler Tablo2.1’de verilmiştir.

Nordin (2001) tarafından C_s değeri için yakıt demeti/türbülans ilişkisi sonucunda sabit kalacak bir türbülans uzunluk ölçeği varsayımına dayanarak $C_s=1,5$ olması önerilmiş ve dizel yakıt demeti için iyi sonuçlar verdiği gözlenmiştir. Sabit yoğunluk ve gradyanların olmadığı durumda (2.78) ve (2.79) denklemleri;

$$\frac{\partial k}{\partial t}=\dot{W}^s, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}=C_s\dot{W}^s \quad (2.80)$$

halini alacaktır. Bu durumda ;

$$C_s\frac{\varepsilon}{k}\frac{\partial k}{\partial t}=\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \quad (2.81)$$

yazabiliriz. $\alpha=1,5$ olmak üzere türbülans uzunluk ölçeği $\ell_t=k^\alpha/\varepsilon$ olarak tanımlandığından $\partial \ell_t/\partial t$ diferansiyeli;

$$\frac{\partial \ell_t}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{k^\alpha}{\varepsilon}\right)=\frac{k^\alpha}{\varepsilon^2}\left(\alpha\frac{\varepsilon}{k}\frac{\partial k}{\partial t}-\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}\right) \quad (2.82)$$

şeklinde olacaktır. ℓ_t ’nin korunması için (2.82)’ün sıfıra eşit olması gerekir. (2.82)’ün sıfıra eşit olması için ise (2.81)’ denklemindeki katsayı $C_s=\alpha$ olmalıdır. Fakat iki fazın bir arada bulunduğu durumda, damlacıkların oldukça küçük olmasına rağmen türbülansın uzunluk ölçeğinin korunup korunmadığı tartışılabilir. Eğer damlacıklar $\mathbf{u}$ ’ nü etkilemeden bir sönüm yaratıyor ise ℓ_t ’nin azalması gerekecektir.

$$\frac{\partial \ell_t}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{k^\alpha}{\varepsilon}\right)=\frac{k^\alpha}{\varepsilon^2}\left(\alpha\frac{\varepsilon}{k}\frac{\partial k}{\partial t}-\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}\right)=\frac{k^{\alpha-1}}{\varepsilon^2}\dot{W}^s(\alpha-C_s)<0 \quad (2.83)$$

$\dot{W}^s<0$ olduğundan $C_s<\alpha=1,5$ olmalıdır. Bu durumda

$$\varepsilon\geq\left(\frac{C_\mu}{\text{Pr}_\varepsilon(C_{\varepsilon 2}-C_{\varepsilon 1})}\right)^{1/2}\frac{k^{3/2}}{L_{SGS}} \quad (2.84)$$

eşitsizliğinin sağlanması gerekmektedir. Alt grid uzunluk ölçeği olan L_{SGS} için, δx hücre boyutu olmak üzere, genelde $4\delta x$ değeri kullanılmaktadır. Böylelikle ℓ_i değerinin L_{SGS} değeri altına geçmemesi sağlanmış olacaktır. C_s değeri için daha detaylı bir irdeleme Nordin, (2001)'de verilmiştir.

RNG $k-\varepsilon$ modelinde ise;

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) = & - \left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} + \frac{2}{3} C_{\mu} C_{\eta} \frac{k}{\varepsilon} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \rho \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_{\varepsilon}} \right) \nabla \varepsilon \right] \\ & + \frac{\varepsilon}{k} \left[(C_{\varepsilon 1} - C_{\eta}) \sigma : \nabla \mathbf{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_s \dot{W}^s \right] \end{aligned} \quad (2.85)$$

denklemini kullanılmaktadır. Bu denklemde kullanılan değerler ise (2.86)'de ve Tablo 2.1 'de verilmiştir.

$$\begin{aligned} c_{\eta} &= \frac{\eta(1-\eta/\eta_0)}{1+\beta\eta^3}, \quad \eta = S_m \frac{k}{\varepsilon}, \quad S_m = (2S_{ij}S_{ij})^{1/2}, \\ S_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad \eta_0 = 4.38, \quad \beta = 0.012 \end{aligned} \quad (2.86)$$

İdeal gazlar için moleküler viskozite, $m=0.5$ olmak üzere, T^m ile doğru orantılıdır, $\mu_{air} \sim T^m$, denklem (2.88). Aynı zamanda $C_{\varepsilon 3}$ politropik üst olan n 'ye bağlıdır, $n \sim 1.3-1.4$,

$$\delta = \begin{cases} 1 \rightarrow \nabla \cdot \mathbf{u} \leq 0 \\ 0 \rightarrow \nabla \cdot \mathbf{u} > 0 \end{cases} \quad \text{olmak üzere, } C_{\varepsilon 3} \text{ aşağıda verilmiştir.}$$

$$C_{\varepsilon 3} = \frac{-1 + 2C_{\varepsilon 1} - 3m(n-1) + (-1)^{\delta} \sqrt{6} C_{\mu} C_{\eta} \eta}{3} \quad (2.87)$$

Tablo 2.1 Standart ve RNG $k-\varepsilon$ modellerinde kullanılan sabitler.

MODEL	C_{μ}	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	Pr_k	Pr_{ε}	C_s
Standart	0.09	1.44	1.92	-1.0	1.0	1.3	1.5
RNG	0.0845	1.42	1.68	Denklem(2.87)	0.7194	0.7194	1.5

KIVA3V’de kullanılan transfer katsayıları, Pr ve Sc Prandtl ve Schmidt sayıları olmak üzere,

$$\begin{aligned} \nu &= \nu_{air} \left[1 + \sqrt{\frac{C_\mu}{\nu_{air}}} \frac{k}{\sqrt{\epsilon}} \right]^2, & \nu &= \frac{\mu}{\rho}, & \mu_{air} &= \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2}, \\ \lambda &= -\frac{2}{3} \mu, & \kappa &= \frac{\mu c_p}{Pr}, & D &= \frac{\nu}{Sc} \end{aligned} \quad (2.88)$$

şeklinde verilmiştir. $A_1=1.457 \cdot 10^{-5}$, $A_2=110.0$ olarak kullanılacak olup, A_1 , A_2 Pr, Sc, değerleri KIVA3V kodunun giriş datalarında verilmektedir.

2.1.5 Kimyasal Reaksiyon Denklemleri

Kimyasal reaksiyonları Tablo 2.2’deki gibi verilen, çok bileşenli karışımların reaksiyonları matematiksel olarak aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\sum_{j=1}^{N_s} \mathcal{G}'_{jk} c_j \rightleftharpoons \sum_{j=1}^{N_s} \mathcal{G}''_{jk} c_j, \quad k=1, N_r \quad (2.89)$$

Burada N_s : bileşen sayısı, N_r : reaksiyon sayısı, $\mathcal{G}'$: ileri reaksiyon (reaktants) stokyometrik katsayıları, $\mathcal{G}''$: geri reaksiyon (ürün) stokyometrik katsayıları, c_j : j inci bileşenin mol sayısıdır.

Tablo 2.2 Kimyasal reaksiyon örneği

1.	C_7H_{16}	+	O_2	$\rightarrow$	CH_2O	+	H_2O
...	...		...		...		...
N_r .	C_7H_{16}	+	O	$\rightarrow$	C_7H_{15}	+	OH

Bu durumda (2.11) ile verilen süreklilik denklemindeki f_m kaynak terimini aşağıdaki gibi yazabilir.

$$f_m = M_m \sum_{r=1}^{N_r} (\mathcal{G}''_{mr} - \mathcal{G}'_{mr}) \dot{\omega}_r \quad (2.90)$$

$$\dot{\omega}_r = k_f^r \prod_{s=1}^{N_s} c_s^{\mathcal{G}'_{sr}} - k_b^r \prod_{s=1}^{N_s} c_s^{\mathcal{G}''_{sr}} = k_f^r \Pi_f - k_b^r \Pi_b \quad (2.91)$$

$$k' = A_r T^{Nr} \exp\left(-\frac{E'_a}{RT}\right) \quad (2.92)$$

Burada n_r , A_r , E_a sırasıyla ihtimal faktörü, çarpışma frekansı ve aktivasyon enerjisidir.

2.2. Sıvı Fazı (Langrangian) Denklemleri

Gaz fazı denklemlerinde kaynak terimler olarak karşımıza çıkan sıvı-fazı terimleri dizel motorların simülasyonunda önemli rol oynamaktadır. Gaz ile sıvının etkileşimi; çarpışma, birleşme, parçalanma, buharlaşma işlemlerini içermektedir.

Yakıt demeti modelleri lokal olarak homojen akış modeli (Locally homogeneous flow, LHF model) ve ayrık akış modeli (Separated Flow model) olarak iki temel kategoriye ayrılmaktadır. KIVA3V kodunda kullanılan ayrık damlacık modeli ikinci tip model içerisine girmektedir. Bu modelde yakıt demetini temsil eden, yakıt parselleri bulunmaktadır. Bir yakıt parseli içerisinde bulunan yakıt demeti damlacıklarının aynı boyut, hız, yer ve sıcaklığa sahip oldukları kabul edilmektedir (Tao, 2003).

Ayrık damlacık modelinde yapılan genel kabuller aşağıdaki gibidir.

1. Damlacıklar küre şeklindedir.
2. Kütle, momentum ve enerji değişimleri sanki-sürekli rejimde olmaktadır.
3. Gaz fazı ile kütle, momentum ve enerji transferleri ampirik olarak ifade edilmekte ve civarda bulunan diğer damlacıklardan bağımsız olarak gerçekleşmektedir.

Damlacıkların hareketini ve değişimini incelemek, damlacıkları gaz fazı içerisinde izlemek için lagrangian formülasyon geliştirilmiştir. Böylelikle gaz fazı denklemleri ile ayrık damlacıklar arasındaki kütle, enerji ve momentum değişimleri olasılık yoğunluk fonksiyonu, f , ile belirlenebilecektir.

$f(t, \mathbf{x}_d, \mathbf{u}_d, r_d, T_d, y_d, \dot{y}_d) d\mathbf{u}_d, dr_d, dT_d, dy_d, d\dot{y}_d$ olmak üzere on bağımsız değişkenin bir fonksiyonudur. $\mathbf{x}_d$; konum vektörü, $\mathbf{u}_d$; hız vektörü, r_d ; denge halindeki yarıçap ($2 r_d = D$), T_d ; sıcaklık, y_d ; küresel şekilden olan bozulma, $\dot{y}_d = dy_d / dt$; bozulma hızıdır. Böylelikle her bir damlacığın hareketini tanımlayan

denklemler bilindiğinde gaz fazı denklemlerinde görülen kaynak terimler belirlenmiş olacaktır.

2.2.1 Hareket Denklemi

Newton'un ikinci kanunundan gelen momentum denklemi ayrık bir yakıt damlacığına uygulandığında oldukça basit bir görünüme sahiptir.

$$\mathbf{F} = m_d \frac{\partial \mathbf{u}_d}{\partial t} \quad (2.93)$$

m_d : damlacık kütlesi, $\mathbf{u}_d$: damlacık hızı, $\mathbf{F}$: damlacık üzerine gelen kuvvetler. Bununla beraber damlacık üzerine etkiyen kuvvetler oldukça karmaşık bir yapıdadır. Basset (1888), Boussinesq (1903) ve Oseen (1927) tarafından en genel haliyle tanımlanan $\mathbf{F}$ denklemi, bu bilim adamlarının isimlerinin baş harfleriyle, BBO denklemi olarak anılmaktadır. Damlacık yoğunluğunun, kendisini çevreleyen akışkan yoğunluğuna göre çok küçük olması sebebiyle BBO denkleminde Basset, Magnus, Saffman basınç kuvvetleri ihmal edilerek sadece direnç ve yerçekimi kuvvetlerinin (Dizel yakıt demetinde yerçekimi kuvveti de ihmal edilebilecek boyuttadır) etkisi hesaba katılmıştır. Bu durumda damlacığa etkiyen kuvvetler;

$$\mathbf{F} = -\frac{\pi D^2}{8} \rho C_D |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}| (\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) + m_d \mathbf{g} \quad (2.94)$$

olmaktadır. Direnç katsayısı C_D için birçok farklı değer önerilmiştir olup bu değerler değişik literatürlerde mevcuttur. Bu tezde kullanılacak olan değerler ise aşağıda verilmiştir.

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{2/3} \right) \rightarrow Re < 1000 \\ 0.424 \dots \dots \dots \rightarrow Re > 1000 \end{cases} \quad (2.95)$$

Genelde momentum denklemini çözerken denklem (2.96) ve (2.97) birleştirilerek;

$$\frac{d\mathbf{u}_d}{dt} = -\frac{\mathbf{u}_d - \mathbf{u}}{\tau_u} + \mathbf{g} \quad (2.96)$$

$$\tau_u = \frac{8m_d}{\pi \rho C_D D^2 |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}|} = \frac{4}{3} \frac{\rho_d D}{\rho C_D |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}|} \quad (2.97)$$

şeklinde yazılır. τ_u ; momentum relaxation zamanı olarak tanımlanmaktadır.

2.2.2 Damlacık Enerji Denklemi

Sıvı damlacığın yakıt buharı oluşturabilmesi için damlacık sıcaklığı, çevresinde bulunan gazlardan enerji alarak buharlaşma sıcaklığının üzerine çıkması gerekmektedir. Eğer gaz, yakıt buharına doymamış ise buharlaşma devam eder, $\dot{m}_d < 0$. Buharlaşma işlemi sırasında enerji damlacıktan alınmaktadır, eğer damlacığın çevresindeki gazdan aldığı enerji yeterli değilse damlacık sıcaklığı azalacaktır. Damlacık ısıl enerjisinin değişimi aşağıda verilmiştir.

$$m_d \frac{dh_d}{dt} = \dot{m}_d h_v(T_d) + \pi D \kappa Nu (T - T_d) f \quad (2.98)$$

$$f = \frac{z}{e^z - 1}, \quad z = -\frac{c_{p,v} \dot{m}_d}{\pi D \kappa Nu} \quad (2.99)$$

f ; kütle transferi olması durumunda ısı alışverişi için bir düzeltme faktörüdür. Nusselt sayısı (Nu) için kullanılan bağıntı ise aşağıda verilmiştir.

$$Nu = 2.0 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.100)$$

$$Pr = \mu \frac{c_p}{\kappa} \quad (2.101)$$

Film sıcaklığını kullanan tüm özellikler 1/3 kuralı ile

$$T_f = \frac{2T_d + T}{3} \quad (2.102)$$

eşitliğinden elde edilmektedir.

Pratikte (2.98) denkleminin çözümü için, karakteristik ısı transferi relaxation zamanı aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$\tau_h = \frac{m_d c_{l,d}}{\pi D \kappa Nu} \quad (2.103)$$

$c_{l,d}$: sıvının özgül ısısıdır.

$h_d = c_{l,d}(T_d - T_{ref})$ olmak üzere, kütle transferi için (2.106) denklemi kullanarak (2.101) denklemi tekrar düzenlendiğinde;

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{T - T_d}{\tau_h} f - \frac{1}{c_{l,d}} \frac{h_v(T_d)}{\tau_e} \quad (2.104)$$

elde edilir. τ_e ; denklem (2.109) ile verilmiştir.

2.2.3 Damlacık Kütle Denklemi

Dizel motorlarda sıkıştırma sonu sıcaklık ve basınç oldukça yüksek değerlerde, buna karşılık hidrokarbonların kritik basınç ve sıcaklığı oldukça düşük değerlerdedir. Örneğin n-heptan için kritik basınç ve sıcaklık 2.74 MPa, 540.2 K'dir. Bu yüzden klasik anlamda buharlaşma olmamaktadır. Fakat bu durum ayrı bir araştırma konusu olmakla birlikte bu tezde ele alınmayacaktır.

Yoğuşma işlemi, dizel ortamında gerçekleşmediği için kütle transferi sadece sıvı fazdan gaz fazına geçişte ele alınacaktır. Küre halindeki sıvı damlacığın, D^2 kanununa göre buharlaştığı deneysel olarak gözlenmiştir (Nordin, 2000).

$$\frac{dD^2}{dt} = C_{evap} \quad (2.105)$$

Bununla beraber buharlaşma hızı genelde, kütle veya yarıçapa bağlı olarak ifade edilmektedir.

$$\frac{dm_d}{dt} = \dot{m}_d = -\pi D \mathcal{D} \rho_v Sh \ln \frac{P - P_{v,\infty}}{P - P_{v,s}} = -\pi D \mathcal{D} \rho_v Sh \ln \left(1 + \frac{X_{v,s} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,s}} \right) \quad (2.106)$$

Burada ρ_v , ideal gaz kanunuyla öngörülen damlacık yüzeyine yakın yakıt buharı yoğunluğu, $\mathcal{D}$, kütle difüzyon katsayısıdır.

$$\rho_v = \frac{P}{R_v T} \quad (2.107)$$

Buharlaşma hızı bağıl hıza bağlı olarak artabilir. Ranz-Marshall eşitliği ile verilen Sherwood sayısı (Sh);

$$Sh=2.0+0.6Re^{1/2}Sc^{1/3} \quad (2.108)$$

olarak tanımlıdır.

Pratikte (2.106) denklemi buharlaşma relaxation zamanı (τ_e) kullanılarak çözülmektedir.

$$\tau_e = \frac{m_d}{\pi D D Sh \rho_v \ln(1+B)} \quad (2.109)$$

$$B = \frac{X_{v,s} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,s}} \quad (2.110)$$

Bu eşitlikleri kullanarak buharlaşma hızı;

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_e}, \quad \frac{dD}{dt} = -\frac{D}{3\tau_e} \quad (2.111)$$

ifadeleri ile bulunur.

Kütle veya yarıçap devamlı küçüldüğünden yukarıdaki denklemler implicit olarak çözülmelidir. Böylelikle eğer çok büyük zaman adımı seçilirse yarıçap veya kütlenin negatif değer alması önlenmiş olur.

Sıvının kaynaması durumunda buhar basıncı, çevre basıncının üzerine çıkacak ve B değeri sonsuza gidecektir. Bu durumda buharlaşma relaxation zamanı sıfıra yaklaşacak, dizel motorlarda basınç, kritik basıncın üstünde olmasına rağmen, $\dot{m}_d$ sonsuz hıza sahip olacaktır. Aslında böyle bir durumda (2.106) denklemi geçerli olmaz. Sıvının sonsuz buharlaşma hızı kaynama noktası civarı dışında geçerli değildir. Buharlaşma hızını kaynama noktası civarında, enerji denklemi (2.98) ile ilişkilendirilerek buharlaşma hızı için sıvıya verilen enerji ile bağlantılı bir sonuç elde edilebilir. Kaynama durumunda kütle transfer hızı;

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{\pi D \kappa Nu}{c_{p,v}} \ln \left(\frac{c_{p,v}}{h_v} (T - T_d) + 1 \right) \quad (2.112)$$

veya bir karakteristik kaynama relaxation zamanı kullanarak;

$$\frac{dD}{dt} = -\frac{D}{\tau_{boil}} \quad (2.113)$$

$$\tau_e = \frac{D\rho_d c_{p,v}}{2\kappa Nu \ln\left(\frac{c_{p,v}}{h_v}(T - T_d) + 1\right)} \quad (2.114)$$

şeklinde yazılabilir. Kaynama noktası civarında kütle transferi için (2.106) denklemi yerine (2.112) denklemi kullanılmalıdır (Nordin, 2001).

2.2.4 Atomizasyon Modeli

Dizel yakıtı enjektörler vasıtasıyla yanma odasına gönderildiğinde bir sıvı jeti oluşturmaktadır. Bu sıvı jeti ortamda bulunan gazın aerodinamik etkisiyle karşılaşır. Aerodinamik ve yüzey gerilme kuvvetlerinin bileşkesi, sıvı jeti yüzeyinin bozulma ve salınım hareketlerini kuvvetlendirir. Bu durumda sıvı jeti artan salınım hareketleriyle parçalanarak küçük damlacıklara bölünür. Bu fiziksel olay atomizasyon olarak tanımlanmaktadır.

Literatürde birçok atomizasyon modeli tanımlanmıştır. Enjektör deliği civarında çok küçük boyutlardaki ağ yapısı ile yakıt demetinin lif ve ligamentlere ayrılarak atomizasyonu sağlanabilmektedir. Fakat bu durum oldukça yüksek hesap zamanı ve bilgisayar kapasitesi gerektirecektir. Bu yüzden KIVA3V kodunda atomizasyon modeli ele alınmamış, onun yerine bu karmaşık yapıyı basitleştirecek yakıt demeti çıkış açısı, damlacık başlangıç büyüklükleri, yakıt demetini temsil edecek damlacık parsel sayısı gibi özellikler giriş değeri olarak alınmaktadır.

2.2.5 Parçalanma Modeli

Damlacığın kendisini çevreleyen gaz içerisindeki hareketinden doğan bağıl hız, damlacık üzerinde düzgün olmayan bir basınç ve yüzey gerilmesi oluşturur. Bu durum damlacığın aerodinamik kuvvetler etkisinde daha küçük parçalara ayrılmasına sebebiyet verir.

Damlacık parçalanması ile ilgili değişik araştırma grupları tarafından farklı parçalanma modelleri kullanılmaktadır. Orijinal KIVA3V kodunda Taylor Anology Breakup (TAB) modeli ile damlacık parçalanması modellenmiştir. Nordin tarafından

Kelvin-Helmoltz Rayleigh-Taylor (KHRT) parçalanma modeli KIVA3V koduna aktarılmıştır (Nordin, 2001). Bu modeller kısaca tanıtılacaktır.

2.2.5.1 Taylor Anology Breakup (TAB) Parçalanma Modeli

Bu model parçalanmayı ve damlacığın deforme oluşunu kütle-yay sistemi ile benzeşim kurarak modellemektedir. Damlacık yüzeyinin damlacığın denge halinden olan yer değişimine bağlı y_d terimi ve yer değişim hızı $\dot{y}_d$ olmak üzere iki önemli parametre tanımlanmaktadır. y_d terimi, C_b ($=1/2$) model sabiti olmak üzere, damlacık yüzeyinin damlacığın denge halinden olan yer değişimi (η_d)'nin, damlacık yarıçapına oranı ile doğru orantılı olarak;

$$y_d = \frac{\eta_d}{C_b r_d} \quad (2.115)$$

tanımlanmaktadır. $\dot{y}_d$, zamana göre değişim ise aşağıdaki denklemden elde edilmektedir.

$$y(t) = \frac{C_F We}{C_k C_b} + \exp\left(-\frac{1}{t_d}\right) \left[\left(y_0 - \frac{C_F We}{C_k C_b} \right) \cos \omega t + \frac{1}{\omega} \left(\dot{y}_0 + \frac{y_0 - \frac{C_F We}{C_k C_b}}{t_d} \right) \sin \omega t \right] \quad (2.116)$$

Burada C_F ($=1/3$), C_k ($=8$) model sabitleri ve

$$We = \frac{\rho u^2 r_d}{\sigma} \quad (2.117)$$

$$\frac{1}{t_d} = \frac{C_d}{2} \frac{\mu_d}{\rho_d r_d^2} \quad (2.118)$$

$$\omega^2 = C_k \frac{\sigma}{\rho_d r_d^3} - \frac{1}{t_d^2} \quad (2.119)$$

olarak tanımlanmaktadır. Weber sayısı, We , damlacık üzerinde bozucu etkisi olan aerodinamik kuvvetlerin, damlacığı küresel olarak tutmaya çalışan yüzey gerilme kuvvetlerine oranı olarak tanımlanır. t_d ; viskoz sönümlenme zamanı, ω ; salınım frekansı, u ; bağıl hız, σ ; yüzey gerilme bileşeni, ρ_d ; yoğunluk, μ_d ; damlacığın viskozitesi, C_d ;($=5$) model sabitidir.

Her bir damlacık için parçalanma ancak aşağıdaki şartlar sağlandığında gerçekleşmektedir.

$$\omega^2 > 0, \quad \frac{C_F We}{C_k C_b} + A > 1.0 \text{ ve } t^n < t_{bu} < t^{n+1} \quad (2.120)$$

Burada A;

$$A = \left(y_p - \frac{C_F We}{C_k C_b} \right)^2 + \left(\frac{\dot{y}_p}{\omega} \right)^2 \quad (2.121)$$

şeklinde verilmektedir. Parçalanma zamanı, t_{bu} , terimi ise (2.125) denkleminin $t_{bu} < t^{n+1}$ şartını sağlayacak en küçük köküdür.

$$\frac{C_F We}{C_k C_b} + A \cos[\omega(t - t^n) + \phi] = 1 \quad (2.122)$$

Burada $\cos \phi = \frac{y_p^n - \frac{C_F We}{C_k C_b}}{A}$ ve $\sin \phi = -\frac{y_p^n}{A\omega}$ şeklinde tanımlıdır.

2.2.5.2 Kelvin-Helmoltz Rayleigh-Taylor (KHRT) Parçalanma Modeli

KHRT modelinde parçalanma iki ayrı modda gerçekleşir. KH modu aşağıdaki gibi çalışmaktadır.

Yeni küçük damlacık boyutu;

$$r_c = B_0 \Lambda \quad (2.123)$$

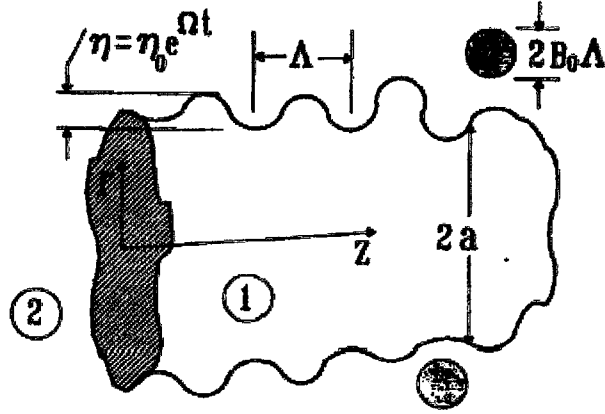
olmak üzere büyük (ana) damlacıktan kopar. Ana damlacığın yarıçapı ise

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_c}{\tau_{kh}}, \quad \tau_{kh} = \frac{3.788 B_1 D}{\Omega \Lambda} \quad (2.124)$$

denklemini ile küçülür. Burada $B_0=0.61$, $B_1=40$ değerleri model sabitleri,

$$\Omega = \frac{0.34 + 0.38 We^{1.5}}{(1 + Oh)(1 + T^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_d r^3}} \quad (2.125)$$

$$\Lambda = 9.02 r \frac{(1 + 0.45 \sqrt{Oh})(1 + 0.4 T^{0.7})}{(1 + 0.865 We^{1.67})^{0.6}} \quad (2.126)$$



Şekil 2.5 : KH modunda damlacık oluşumunun şematik gösterimi

Λ ; en hızlı büyüyen Ω dalgasının dalga boyu (Şekil 2.6), We gaz için Weber sayısı;

$$We = \frac{\rho |\mathbf{u}_{rel}|^2 r}{\sigma} \quad (2.127)$$

Ohnesorge sayısı $Oh = \sqrt{We} / Re$, Taylor sayısı $T = Oh \sqrt{We}$ olarak tanımlanmaktadır. Sıvı için Weber sayısı, gaz için We sayısına benzer şekilde, gaz yoğunluğu yerine sıvı yoğunlu kullanılarak verilmekte ve sıvı Reynolds sayısı;

$$Re = \frac{\rho |\mathbf{u}_{rel}|^2 r}{\mu} \quad (2.128)$$

olarak tanımlanmaktadır.

RT parçalanma modu ise tamamen farklı bir şekilde çalışmaktadır.

$$K = \sqrt{\frac{|g_r(\rho_l - \rho)|}{3\sigma}}, \quad g_r = \left(\mathbf{g} + \frac{d\mathbf{u}_d}{dt} \right) \cdot \frac{\mathbf{u}_d}{|\mathbf{u}_d|} \quad (2.129)$$

Olmak üzere dalga boyu $\Lambda_r = \pi / K$ damlacık büyüklüğü ile karşılaştırılır. Eğer $\Lambda_r < r$ ise RT dalgası damlacık yüzeyinde büyümeye başlar. Damlacık hızı (2.96) denkleminde elde edilmektedir. Büyüyen RT dalgasının ömrü karakteristik RT zamanını ($\tau_r = 1/\Omega_r$), geçtiğinde çok küçük damlacıklar oluşturan katastrofik parçalanma olur.

$$\Omega_r = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{27}\sigma} \frac{|g_r(\rho_l - \rho)|^{3/2}}{\rho_l - \rho}} \quad (2.130)$$

RT modunda sıvı parseli bölülerek istatistik'i sayı, r/Λ , faktörüyle artırılmış olur. Oluşan yeni damlacıkların büyüklüğü kütlenin korunumunu sağlayacak şekilde düzenlenir (Nordin, 2001). TAB modeli ile KHRT modeli karşılaştırıldığında parçalanma sonrası KHRT modelinde daha büyük damlacıklar oluşmaktadır.

2.2.5 Çarpışma Modeli

Damlacıkların çarpışmaları sonucunda kütle, momentum ve enerji damlacıklar arasında transfer edilmektedir. Çarpışma 3 modda incelenebilir.

1. **Bölünme** : Damlacıkların çarpışma sonucunda yeni damlacıklara ayrılması.
2. **Birleşme** : İki ayrı damlacığın tek bir damlacık halini alması.
3. **Bouncing** : Çarpışan iki damlacık arasında momentum değişiminin olup kütle ve enerji değişiminin olmaması.

KIVA3V'de kullanılan çarpışma modelinde bir parselde temsil edilen damlacıklar kendi aralarında etkileşim içinde olmazlar. A damlacık parseli B damlacık parseli ile çarpıştığında A'daki tüm damlacıkların B ile çarpıştıkları varsayılır.

Çarpışma modelinde damlacıklar aynı hücre içerisinde ise çarpışırlar. Daha büyük damlacığa sahip olan parseller toplayıcı parsel olarak isimlendirilmektedir. Çarpışma sonucunda eğer birleşme olursa küçük damlacıklar toplayıcılar tarafından absorbe edilirler.

Aşağıda KIVA3V'de kullanılan kinetik gaz teorisinin temel konseptlerinden olan damlacıkların Langmuir çarpışma verimliliği, E_{12} , verilmiştir.

$$E_{12} = \begin{cases} \left[1 + 0.75 \frac{\ln(2K)}{K - 1.214} \right] \dots K > 1.214 \\ 0 \dots \dots \dots K \leq 1.214 \end{cases} \quad (2.131)$$

Boyutsuz olan K durma mesafesi;

$$K = \frac{\rho_{d,2} |\mathbf{u}_{d,1} - \mathbf{u}_{d,2}| D_{d,2}^2}{9\mu_m D_{d,1}} \quad (2.132)$$

olarak tanımlanmaktadır.

Toplayıcı damlacığın diğer damlacıklarla olan çarpışma frekansı ν_{12} ;

$$v_{12} = \frac{N_2}{\delta V} \pi (r_{d,1} + r_{d,2})^2 |\mathbf{u}_{d,1} - \mathbf{u}_{d,2}| E_{12} \quad (2.133)$$

şeklinde verilmektedir. Burada N_2 toplayıcı olmayan parsel sayısı, δV hücre hacmidir.

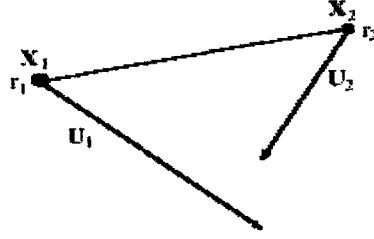
Δt zaman aralığında toplayıcı damlacığın diğer damlacıklarla olan n adet çarpışma olasılığı Poisson dağılımı ile ifade edilmiştir.

$$P_n = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!} \quad (2.134)$$

$\bar{n}$ ortalama değeri $\bar{n} = v_{12} \Delta t$ olarak tanımlanmaktadır.

$[0,1]$ aralığında rasgele sayılar olan Z_1 ve Z_2 eğer, $Z_1 < P_0$ ise (P_0 : sıfır çarpışma olasılığı) çarpışma olmaz. $Z_1 \geq P_0$ olması durumunda, eğer $b \geq b_{cr,sep}$ ise bölünme olur veya $b \geq b_{cr,coal}$ ise birleşme olur. $b = Z_2(r_1 + r_2)$, $b_{cr,sep}$; bölünme kritik etki parametresi, $b_{cr,coal}$; birleşme kritik etki parametresidir. Diğer durumda ise bouncing meydana gelir (Tao, 2003).

Damlacık alt modelleri arasında en zayıf model çarpışma modelidir. Bunun nedeni sonuçların hücre boyutlarına bağımlı olmasından kaynaklanmaktadır. (2.133) denkleminde hücre boyutlarını küçültmek aynı hücrede bulunan damlacıkların çarpışma olasılığını yükseltirken aynı zamanda bu damlacıkların çarpışabileceği alanı küçültecektir. Eğer damlacıklar aynı hücre içerisinde değilse birleşme olmayacaktır. Bu denkleme göre çarpışma olasılığını daha küçük hücrelerle sağlamak aynı hücreyi paylaşmayan damlacıklar için anlamsızdır. Bu modeldeki diğer bir zayıf nokta ise; çarpışma olasılığının damlacık yönlerinden bağımsız olarak verilmesidir. Bu yüzden Nordin çarpışma modelini “Çarpışmanın olabilmesi için iki damlacık yörüngesinin integrasyon zaman adımı içerisinde birbiri ile çakışıyor olması gerekir” varsayımı üzerine geliştirmiştir (Nordin, 2001). Fakat bu şartı tüm damlacıklara uygulamak oldukça fazla hesap gerektirecektir. Bu yüzden, çarpışmanın olmayacağı damlacıkları hesap dışında tutmak için, damlacık yörüngelerinin birbirine doğru olması şartını kullanmıştır. Şekil 2.6.



Şekil 2.6 : Birbirine doğru hareket eden damlacıklar.

İlk şart olarak $U_{12} > 0$ olmalıdır.

$$U_{12} = (\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2) \cdot \frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1}{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|} \quad (2.135)$$

İkinci şart olarak ise, damlacıkların nispi yer değişimlerinin aralarındaki mesafeden büyük olması şartı sağlanmalıdır, $U_{12}\Delta t > |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| - (r_1 + r_2)$. Bu iki şart sağlandığı takdirde damlacıkların çarpışma olasılığı var demektir.

Matematiksel olarak; eğer $\alpha_0 \in [0, \Delta t]$, $\beta_0 \in [0, \Delta t]$ olmak üzere α_0 ve β_0 sistem çözümleri ise;

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{x}_1 + \alpha \mathbf{U}_1, \quad \mathbf{p}_2 = \mathbf{x}_2 + \beta \mathbf{U}_2, \quad \frac{\partial |\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1|}{\partial \alpha, \beta}(\alpha_0, \beta_0) \quad (2.136)$$

çarpışma, rasgele sayı olan $\xi \in [0, 1]$ 'nin çarpışma olasılık sayısından, P , küçük olması durumunda gerçekleşir.

$$P = \left(\frac{r_1 + r_2}{\max(r_1 + r_2, \Delta_{12})} \right)^{C_1} e^{C_2 |\alpha_0 - \beta_0| / \Delta t} \quad (2.137)$$

Burada $\Delta_{12} = |\mathbf{p}_2(\beta_0) - \mathbf{p}_1(\alpha_0)|$ iki yörünge arasındaki minimum mesafe, C_1 ve C_2 model sabitleridir. C_1 olasılık sabiti, birbirine yakın olan yörüngelerin çarpışma olasılığını vermektedir. α_0 ve β_0 terimleri birleşmenin olacağı zamanı ifade ettiklerinden $e^{C_2 |\alpha_0 - \beta_0| / \Delta t}$ terimi parçacıkların aynı yer ve zamanda bulunup bulunmadığını dikkate alan terimdir.

3. TÜRBÜLANS VE KİMYASAL REAKSİYONLARIN ETKİLEŞİMİ

Bu bölümde denklem (2.11)'de verilen kimyasal kaynak teriminin nasıl modellendiği ele alınacaktır. Model *referans bileşenler* tekniğini kullanarak reaksiyon hızını ve karakteristik zaman adımını hesaplamaktadır.

Günümüzde bilgisayar teknolojisi hızla ilerlemesine rağmen hala alev yapısını tam olarak çözebilecek bilgisayar kapasitelerine erişilememiştir. Alevin ince ve karmaşık yapısının doğrudan çözümü, şu anda kullanılan grid boyutlarından çok daha küçük boyutlar gerektirmektedir. Bu yüzden yanma bölgesinin parametreleri grid seviyesindeki değişkenlerden ziyade, alt-grid seviyesindeki değişkenler ile ilişkilendirilmektedir. Hücre boyutlarına bağlı olarak, grid seviyesindeki bilgiler ile bileşenlerin konsantrasyonu, akışkan hızları gibi bazı değişkenler bilinebilir, fakat süreklilik denkleminde verilen kimyasal kaynak terimi yanma bölgesi parametrelerinin bir fonksiyonudur. Bu yüzden sadece grid seviyesindeki bilgileri kullanmak çoğu zaman yanma bölgesinin yapısının çözümü için uygun değildir. Tek bilgi kaynağı grid seviyesindeki bilgiler olduğu için; alt-grid şartları ile grid seviyesindeki bilgiler arasında ilişki kurularak bu durum aşılmaya çalışılmıştır.

3.1. Yanma Modelleri

Magnussen ve Hjertager tarafından sunulan Eddy Break-Up (EBU) modeli ile türbülanslı difüzyon yanma başarılı bir şekilde modellenebilmiştir. Basit olması ve diğer modellerin henüz geliştirilememiş olmasından dolayı bu model bir çok CFD kodunda kullanılmaya başlanmıştır (Nordin, 2001). Flamelet modeli, Probability Density Function (PDF) yaklaşımı, Langrangian yaklaşımı gibi modeller geliştirilmiş aynı zamanda EBU uzantılı modeller de kullanılmıştır. Bununla birlikte geliştirilen diğer modeller arasında EBU en kullanışlı olanıdır. Karmaşık kimyasal model kullanılmak istendiğinde Langrangian yaklaşımı hariç diğer modelleri kullanmak oldukça zordur. Flamelet modeli, kimyasal zaman ölçeğinin türbülans zaman ölçeğinden çok daha küçük olduğu varsayımına dayanmaktadır. Bu yüzden türbülans ve kimyasal reaksiyonlar birbirinden ayrılarak laminar akış yaklaşımı ile çözüm

aranmaktadır. Bu durum dizel yakıt demetinin yanması için doğru değildir. Çünkü dizel yanmasında oldukça önemli olan yavaş kimyasal reaksiyonlar da gerçekleşmektedir. PDF yaklaşımı ise teorik olarak uygun olmasına rağmen, detaylı bir yanma mekanizmasında, çok fazla bileşen olması ve bileşenler ile sıcaklık arasında bir çok ilişki kurma zorunluluğu, modeli uygulanamaz kılmaktadır. Langrangian yaklaşımı kullanarak oluşturulan Probabilistic Eulerian Lagrangian (PEUL) modeli karmaşık kimyasal reaksiyonlar için uygun olmakla birlikte, denge reaksiyonlarının oluşması problem teşkil etmektedir (Nordin, 2001).

Partially Stirred Reactor (PaSR) modeli ise EBU yaklaşımının bir uzantısıdır. Dizel yakıt demetinin türbülanslı yanması ve karmaşık kimyasal reaksiyonların uygulanması için uygun sonuçlar vermektedir.

3.2. Referans Bileşenleri Tekniği

Detaylı mekanizma reaksiyonlarının hepsini birbiriyle ilişkili olarak, eşzamanlı çözebilmek oldukça zordur. Bu yüzden reaksiyonlar birbirini takip edecek şekilde, reaksiyon sonunda çıkan ürünler diğer bir reaksiyonu besleyerek ve güncellenerek çözüm aranmaktadır.

Referans bileşenleri tekniği, integrasyon zaman adımının, en küçük kimyasal zaman ölçeğinden büyük olduğu durumlar için uygulanabilir. Böylelikle, reaksiyonların hızlı veya yavaş olduğunu kontrol edilmeden, tüm reaksiyonlara aynı algoritma uygulanabilecektir. Bu yaklaşımı kullanmanın tehlikesi ise, bileşen konsantrasyonlarının negatif değer almasıdır. Bu, integrasyon zaman adımını kısıtlayan bir durumdur.

Elementer reaksiyonun aşağıdaki gibi olduğunu farz edelim.



$\mathcal{G}_i$; reaksiyonun stokiyometrik katsayısı c_i ; molar konsantrasyon.

Reaksiyon hızı (2.91) denkleminde benzer şekilde;

$$\frac{dc_1}{dt} = \frac{dc_2}{dt} = -\dot{\omega}, \quad \frac{dc_3}{dt} = \frac{dc_4}{dt} = \dot{\omega}, \quad (3.2)$$

olacaktır. Reaksiyon hızı, hem sıcaklık hem de konsantrasyona bağlı olduğundan, reaksiyon ilerlerken değişik değerler alacaktır. Bu yüzden çözüm implicit şekilde olmalıdır. (3.2) denklemini için $\dot{\omega} > 0$ olması durumunda;

$$\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\tau} = -\dot{\omega}^x \quad \Rightarrow \quad c_1^{n+1} = c_1^n - \tau \dot{\omega}^x \quad (3.3)$$

olacaktır. $x \rightarrow n$, $x \rightarrow n+1$ veya her ikisi birden kullanılarak $\dot{\omega}^x$ için çözüm elde edilir. $x \rightarrow n$ ile çözüm aranırsa τ yeterince büyük bir zaman adımı olması durumunda, c_1^{n+1} 'in negatif değer alma tehlikesi ile karşılaşılacaktır. Bunun yanlış olduğu aşikardır, konsantrasyonların denge durumunda $\dot{\omega} = 0$,

$$c_1^{eq} = \left(\frac{k_b c_3 c_4}{k_f c_2} \right)^{eq} \quad (3.4)$$

olmalıdır. Böyle bir durumun üstesinden gelebilmek için yarı-implicit çözüm kullanılır. $\dot{\omega}$ 'nin zamana göre türevini alırsak (k_f ve k_b sabit kabul edilerek)

$$\frac{d\dot{\omega}}{dt} = k_f \left(\frac{dc_1}{dt} c_2 + c_1 \frac{dc_2}{dt} \right) - k_b \left(\frac{dc_3}{dt} c_4 + c_3 \frac{dc_4}{dt} \right) \quad (3.5)$$

denklem (3.2) ile birlikte;

$$\frac{d\dot{\omega}}{dt} = -\left(k_f (c_2 + c_1) + k_b (c_4 + c_3) \right) \dot{\omega} = -\alpha \dot{\omega} \quad (3.6)$$

$$\alpha = k_f (c_2 + c_1) + k_b (c_4 + c_3) \quad (3.7)$$

olacaktır. (3.5) denklemini yarı-implicit şekilde ayırklaştırsak;

$$\frac{\dot{\omega}^{n+1} - \dot{\omega}^n}{\tau} = -\alpha^n \dot{\omega}^{n+1} \quad \Rightarrow \quad \dot{\omega}^{n+1} = \frac{\dot{\omega}^n}{1 + \alpha^n \tau} \quad (3.8)$$

elde edilir. $\dot{\omega}^{n+1}$ 'i kullanarak bileşenleri güncellemek uygun olmayacaktır, çünkü τ büyüdükçe bu ifade

$$c_1^{n+1} = c_1^n - \tau \frac{\dot{\omega}^n}{1 + \alpha^n \tau} \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} c_1^{n+1} = c_1^n - \frac{\dot{\omega}^n}{\alpha^n} = c_1^n \left[\frac{k_f c_1 c_2 - k_b c_3 c_4}{k_f (c_1 + c_2) + k_b (c_3 + c_4)} \right]^n \quad (3.9)$$

şeklinde olacak ve denge konsantrasyonunu sağlamayacaktır. Bu durumda, negatif olması en muhtemel bileşen, referans bileşeni olarak tanımlanır. Bu bileşen reaksiyon tarafından tüketilen ve en düşük konsantrasyona sahip olan bileşendir. Referans bileşeni (c_r) olarak c_1 seçilirse, $c_2 > c_1$ olduğundan, (3.7) denkleminde $k_f c_2$ teriminin diğer terimlerden büyük olduğu kabulü ile

$$\alpha^n \approx (k_f c_2)^n \quad (3.10)$$

elde edilecektir. (3.9) denkleminde α^n yerine, yukarıdaki eşitliği kullanarak, referans bileşeni için ;

$$c_1^{n+1} = c_1^n - \tau \frac{\dot{\omega}^n}{1 + \alpha^n \tau} \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} c_1^{n+1} = c_1^n - \frac{\dot{\omega}^n}{\alpha^n} = c_1^n - \left(\frac{k_f c_1 c_2 - k_b c_3 c_4}{k_f c_2} \right)^n = \left(\frac{k_b c_3 c_4}{k_f c_2} \right)^n \quad (3.11)$$

eşitliği elde edilecektir. Böylelikle her bir reaksiyon için denge şartı, denge reaksiyonlarını diğer kinetik reaksiyonlardan ayırmadan sağlanmış olacaktır.

3.3. Partially Stirred Reactor (PaSR) Modeli

Bu modelde hücre iki farklı bölgeye ayrılmaktadır. Tüm reaksiyonlar bu bölgelerden birinde gerçekleşirken diğerinde hiç reaksiyon olmamaktadır. Reaksiyon bölgesiyle kütle transferi sonucunda tüm hücrede karışım oranları değişmektedir. Reaksiyon bölgesi mükemmel karışımlı bölge yani karışımın homojen olduğu bölge olarak ele alınmakta, bu da kimyasal kaynak terimlerinin hesaplanmasında bir dalgalanma meydana getirmesini engellemektedir (Nordin, 2001).

Ele alınan hücrenin ikiye bölünmesi beraberinde nasıl bölüneceği, kütle oranlarının ne kadar olacağı ve karışımı neyin yönlendireceği gibi bir takım problemleri de beraberinde getirmektedir. Bu sorunlar grid seviyesindeki bilgiler ile alt-grid seviyesindeki bilgiler arasında bir ilişki kurularak cevaplandırılabilir.

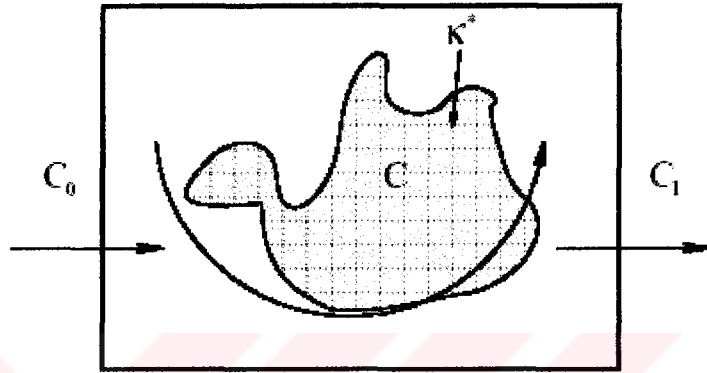
Reaksiyon kütle oranları, hesap c_0 'dan c_1 'e bir zaman adımı ilerlediğinde aşağıda olduğu gibi tanımlanmaktadır.

İlk olarak model bu zaman adımı içerisinde üç ayrı molar konsantrasyonu birbirinden ayırır.

c_0 ; hücrenin girişindeki ortalama konsantrasyonu yani başlangıç konsantrasyonu,

c ; reaksiyon bölgesindeki bilinmeyen konsantrasyonu (alt-grid seviyesindeki bilinmeyen hücre bileşenlerinin oranı),

c_1 ; bulunması gereken reaktör çıkış konsantrasyonunun zaman ortalamasıdır. Bu aynı zamanda hücre içerisindeki ortalama konsantrasyondur.



Şekil 3.1 : PaSR modelinin şematik gösterimi

Reaksiyon çıkış konsantrasyonu kütlenin korunumundan yararlanarak şu şekilde yazılabilir.

$$c_1 = \kappa^* c + (1 - \kappa^*) c_0 \quad (3.12)$$

κ^* ; reaksiyona giren karışım kütle oranı.

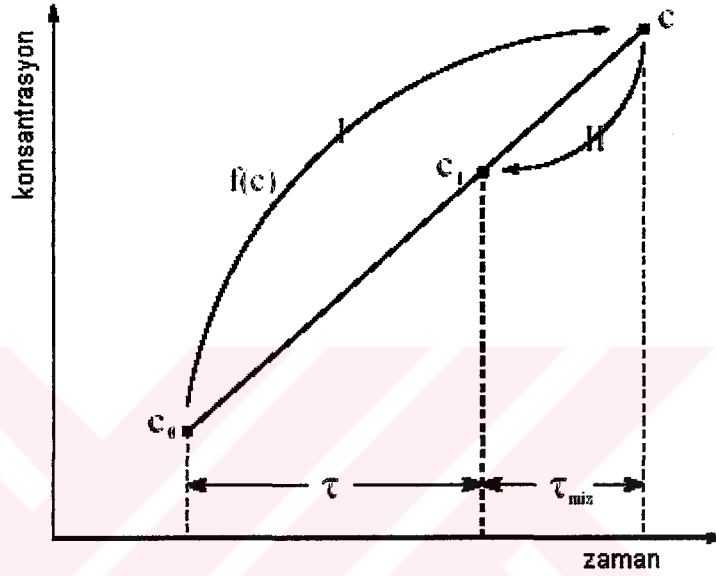
Denklem (3.12) c_1 değerini, c_0 ve c değerleri arasındaki lineer bir interpolasyon ile vermektedir. Şekil 3.2 de bir diyagram üzerinde gösterilen bu değerler için şu gözlemler yapılabilir.

Tüm işlem paralel olarak, birlikte ilerleyen, I ve II ile gösterilmiş iki alt modele ayrılmıştır.

I : Reaksiyon bölgesindeki başlangıç konsantrasyonu, reaksiyon sonucunda c_0 'dan c 'ye değişir.

II : Reaksiyona girmiş olan karışım (c) ve reaksiyona girmemiş karışım (c_0), türbülanslı karışım sonucunda c_1 'i oluşturur.

c_1 bir sonraki adım için başlangıç değeri olacağından, integrasyon zaman adımı; c_0 ile c_1 arasındaki zaman adımı olmalıdır. c ile c_0 türbülans ile karışıklarından, c ile c_1 arasındaki zaman adımı, türbülans karakteristik zaman adımı, τ_{mix} , olmalıdır. Dolayısıyla toplam reaksiyon zaman adımı, integrasyon zaman adımından, τ_{mix} kadar artırılarak $\tau + \tau_{mix}$ olması gerekmektedir.



Şekil 3.2 : Reaksiyon / Karışım adımının hesaplanması

Şekil 3.2'deki eğimin reaksiyon bölgesi olan c 'deki reaksiyon hızına eşit olduğu kabulü ile aşağıdaki eşitlikler yazılabilir.

$$\frac{c_1 - c_0}{\tau} = f_m(c) \quad (3.13)$$

$$\frac{c - c_1}{\tau_{mix}} = f_m(c) \quad (3.14)$$

(3.14) ifadesi flamelet yaklaşımı ile uyumludur.

$$\frac{c_1 - c_0}{\tau} = \frac{c - c_1}{\tau_{mix}} \quad (3.15)$$

(3.13) ve (3.14) eşitlikleri ve (3.12) denklemini kullanarak;

$$c_1 = \kappa^* c + (1 - \kappa^*) c_0, \quad \kappa^* = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}} \quad (3.16)$$

elde edilir. Bu durumda, integrasyon zaman adımının türbülans karakteristik zaman adımından yeterince büyük olması durumunda, $\kappa^* \approx 1$, olacak ve reaktör çıkışında elde edilenler, reaksiyon bölgesinden çıkanlar olacaktır. κ^* elde edildikten sonra c_1 'i elde etmek için kullanacağımız, c bilinmeyen teriminin elde edilmesi gereklidir.

Süreklilik denkleminde geçen kimyasal bileşenlerin kaynak terimi;

$$\begin{aligned} f_m(c) &= \sum_{r=1}^{Nr} (\mathcal{G}_{mr}'' - \mathcal{G}_{mr}') \left(k_f^r \prod_{s=1}^{Ns} c_s^{\mathcal{G}_{sr}'} - k_b^r \prod_{s=1}^{Ns} c_s^{\mathcal{G}_{sr}''} \right) \\ &= M_m \sum_{r=1}^{Nr} \underbrace{\left(\mathcal{G}_{mr}'' k_f^r \prod_{s=1}^{Ns} c_s^{\mathcal{G}_{sr}'} + \mathcal{G}_{mr}' k_b^r \prod_{s=1}^{Ns} c_s^{\mathcal{G}_{sr}''} \right)}_{\xi_1} - M_m \sum_{r=1}^{Nr} \underbrace{\left(\mathcal{G}_{mr}' k_b^r \prod_{s=1}^{Ns} c_s^{\mathcal{G}_{sr}'} + \mathcal{G}_{mr}'' k_f^r \prod_{s=1}^{Ns} c_s^{\mathcal{G}_{sr}''} \right)}_{\xi_2} \\ &= \sum_{r=1}^{Nr} (\xi_1^r - \xi_2^r) = \xi_1 - \xi_2 \end{aligned} \quad (3.17)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ξ_1 ve ξ_2 terimleri pozitif değerdedir. Yukarıda yazılan reaksiyon hızı, c reaksiyon bölge şartları içindir. Ancak c , alt-grid seviyesi ile ilgili bilgi olduğundan, bilinen seviye, yani grid seviyesi ile değiştirilmesi gerekir.

Taylor açılımını kullandığımızda;

$$f_m(c) = f_m(c_1) + \frac{\partial f_m}{\partial c}(c - c_1) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_m}{\partial c^2}(c - c_1)^2 \quad (3.18)$$

ikinci mertebeden olan $\partial^2 f / \partial c^2$ terimin sıfır olduğu, diğer yüksek mertebeden terimlerin ihmal edildiği ve referans bileşenlerine göre baskın olan terimin $\partial f_m / \partial c_r$ olduğu kabulü ile, kimyasal zaman adımı;

$$\frac{1}{\tau_c} = - \frac{\partial f_m}{\partial c_r} \quad (3.19)$$

olarak elde edilir. Kimyasal zaman adımının elde edilişi (3.10) denkleminin elde edilişi ile aynı kabulleri içermektedir. Böylece (3.18) denklemi;

$$f_m(c) = f_m(c_1) - \frac{c - c_1}{\tau_c} \quad (3.20)$$

şeklini alacaktır. (3.13) ve (3.16) denklemlerini kullanarak;

$$\frac{c_1 - c_0}{\tau} = f_m(c) = f_m(c_1) - \frac{1}{\tau_c} \left[\left(\frac{c_1}{\kappa^*} - \frac{1 - \kappa^*}{\kappa^*} c_0 \right) - c_1 \right] \quad (3.21)$$

$$\frac{c_1 - c_0}{\tau} = f_m(c) = f_m(c_1) - \frac{1}{\tau_c \kappa^*} (c_1 - \kappa^* c_1 - (1 - \kappa^*) c_0) = f_m(c_1) - \frac{1 - \kappa^*}{\tau_c \kappa^*} (c_1 - c_0) \quad (3.22)$$

$$\left(\frac{1}{\tau} + \frac{1 - \kappa^*}{\tau_c \kappa^*} \right) (c_1 - c_0) = f_m(c_1) \quad (3.23)$$

elde edilir. (3.16) denklemi ile

$$\left(\frac{1}{\tau} + \frac{1 - \kappa^*}{\tau_c \kappa^*} \right) (c_1 - c_0) = \frac{c_1 - c_0}{\tau} \frac{\tau_c + \tau_{mix}}{\tau_c} = f_m(c_1) \quad (3.24)$$

haline gelerek

$$\frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_{mix}} = \kappa \quad (3.25)$$

tanımı ile

$$\frac{c_1 - c_0}{\tau} \frac{1}{\kappa} = f_m(c_1) \quad (3.26)$$

elde edilecektir. Özet olarak en son elde edilen denklem aşağıdaki gibidir.

$$f_m(c) = \kappa f_m(c_1) \quad (3.27)$$

Bu ifade, kimyasal kaynak teriminin alt-grid seviyesindeki ilişki denklemidir. $f_m(c_1)$ terimi önceki bölümde anlatıldığı gibi bir sonraki zaman adımı bilgileri kullanılarak elde edilmektedir. Reaksiyona girmemiş terimlerle yanmış gazlar arasındaki transfer, türbülans karakteristik zaman adımı kullanılarak hesaplanmaktadır.

Türbülanslı akışta görülen büyük eddy'ler ile moleküler seviyedeki eddy'ler için sadece tek bir türbülans ölçeği kullanmak aslında büyük bir basitleştirme yapmaktır. Türbülans zaman adımı için **Nordin (2001)**'de üç değişik seçenek üzerinde durulmuştur. Kolmogorov zaman ölçeğine bağlı olarak;

$$\tau_k \sim (\nu / \varepsilon)^{1/2}$$

Taylor zaman ölçeğine bağlı olarak;

$$\tau_t \sim k / \varepsilon$$

Kolmogorov ve Taylor zaman ölçeğinin geometrik ortalamasına bağlı olarak;

$$\tau_{kc} \sim \sqrt{\tau_t \tau_k}$$

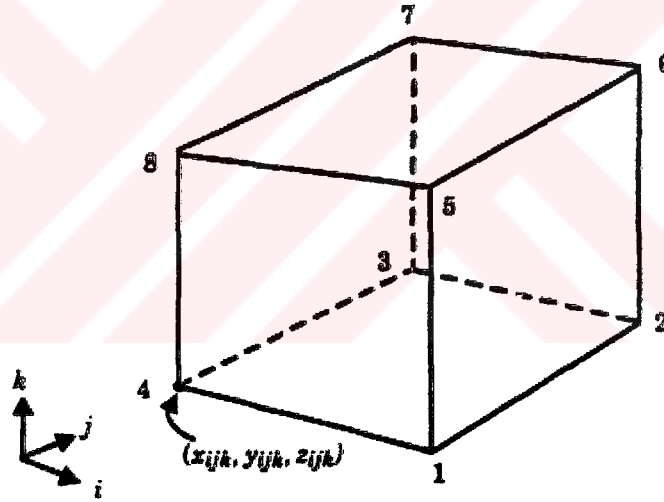
Bunlar arasında en iyi sonucu Taylor zaman ölçeğinin verdiği belirtilmiştir. (**Nordin, 2001**).

PaSR modeli ile ilgili sonuçlar ve diğer modellerle olan farklılıklar **Nordin, (2001)**'de bulunabilir. Bununla beraber bu modelde hücreyi ikiye ayırarak kimyasal reaksiyonları modellemenin NO oluşumuna nasıl bir etki yapacağı üzerinde durulmamış ileriki bir araştırma konusu olarak bahsedilmiştir.

4. SAYISAL YÖNTEMİN YAPISI VE BİLGİSAYAR PROGRAMI

Bu bölümde tezde kullanılan sayısal yöntemin yapısı ve önemli noktaları ile ilgili genel bilgi verilecektir. Bu konuda detaylı bilgi **Amsden (1989)**'da bulunabilir.

Hesaplamaların yapılacağı bölge altı yüzlü prizmatik hacimlere bölünmekte (Şekil 4.1) ve denklemler sonlu hacimler metodu ile çözümlenmektedir. Hücre köşeleri i, j, k indeksleri ile gösterilmekte ve her hücre dördüncü köşesinden etiketlenmektedir. Hız bileşenleri hücrelerin köşelerinde tanımlanmakta, $u_{ijk} = u(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk})$ ve diğer özellikler hücrelerin orta noktalarında tanımlanmaktadır, $Q_{ijk} = Q(x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c)$, ($Q \rightarrow p, \rho, T, e, k, \epsilon \dots$).



Şekil 4.1 : KIVA3V’de kullanılan tipik bir hücre elemanı

4.1. Denklemler ve Sınır Koşulları

KIVA3V’de kullanılan denklemler Bölüm 1’de genel haliyle verilmiştir. Bu denklemlerden momentum denklemi, basınç teriminin sayısal olarak verimli bir sonuç verebilmesi için modifiye edilmiştir (**Amsden, 1989**).

Katı bir cidarın bulunduğu bölgede türbülanslı akışın yapısı, serbest akışın olduğu bölgeden oldukça farklı olacaktır. Reynolds sayısına baktığımızda ince bir sınır tabakasında akış yönündeki Reynolds sayısı oldukça yüksek bir değer almaktadır.

($U=1\text{m/s}$, $L=0.01\text{ m}$ ve $\nu=10^{-6}$ ise $Re=10^4$). Bu atalet kuvvetlerinin viskoz kuvvetlerden çok büyük olduğunu göstermektedir.

Böyle bir durumda Reynolds sayısını cidardan olan uzaklık, y , ile ilişkilendirirsek cidar bölgesi için Reynolds sayısına, Re_y , bağlı bir denklem elde etmiş oluruz ($Re_y=Uy/\nu$). Böylece y sıfıra yaklaştığında viskoz kuvvetler ile atalet kuvvetlerinin dengelendiği bir $Re\sim 1$ değeri elde edilir ve bu bölge içerisinde viskoz kuvvetler etkilidir diyebiliriz.

Kullanılan programda katı yüzeylerdeki sınır koşulları için modifiye edilen cidar fonksiyonları kullanılmıştır. Cidar fonksiyonlarına $1/7$ kuvvet kanunu uygulanarak elde edilen ve türbülans denklemlerinden elde edilen analitik çözümler için yapılan kabuller aşağıdadır.

1. Akış sanki-sürekli akıştır.
2. Akışkan hızı cidara paraleldir ve cidarın normali doğrultusunda değişim gösterir.
3. Akış yönünde basınç gradyanları yoktur.
4. Cidar yüzeyine yakın yerlerde kimyasal reaksiyonlar olmamaktadır.
5. Bu bölgede yakıt demeti kaynak terimleri sıfırdır.
6. Boyutsuz ısı kaybı terimi, ζ , ihmal edilebilir seviyededir.
7. Yüksek Reynolds sayıları mevcuttur.
8. Türbülans kinetik enerjisinin kayıp teriminden gelen iç enerji değişimi ihmal edilebilir düzeydedir.

Bu kabuller içten yanmalı motorlardaki cidar koşulları göz önünde bulundurularak yapılmış ve doğru sonuçlar verdiği deneylerle kanıtlanmıştır. Kullanılan cidar fonksiyonları basitlik ve hesap ekonomisi düşünülerek seçilmiştir (Tao, 2003).

Cidar fonksiyonları olarak bilinen ve cidara yakın olan akış parametrelerini içeren bu denklemler KIVA3V kodunda aşağıdaki gibi ele alınmıştır. Bu denklemlerde geçen y ; cidarın normali yönündeki koordinat, u cidara teğet yöndeki hız bileşenidir. Kimyasal reaksiyonların bu bölgede olmaması bileşenlerin kütle kesirlerinin değişmediği anlamına gelmektedir. Boyutsal özellikler: cidar kayma gerilimi τ_w ,

cidar ısı kaybı terimi J_w , cidar sıcaklığı T_w , bu özelliklerle tanımlı olan kayma hızı (veya sürtünme hızı);

$$u_\tau = \sqrt{\frac{T_w}{\rho}} = \sqrt{\nu_{air} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0}} \quad (4.1)$$

şeklindedir. Uzunluk için verilen tek özellik y , cidardan olan uzaklıktır. y^+ değeri için; u hızını u_τ ile, T sıcaklığını T_w ile, k 'yi $(u_\tau)^2$ ile ve ε 'yi $(u_\tau)^3/y$ ile boyutsuzlaştırdığımızda ve gerekli ara işlemler sonucunda 1/7 kuvvet kanunundan elde edilen eşitlikler aşağıda verilmiştir (Amsden, 1989).

Hız :

$$u^+ = \frac{1}{\theta} \ln[E(y^+)^{7/8}] + B, \quad y^+ \geq R_c \quad (4.2)$$

$$u^+ = (y^+)^{7/8}, \quad y^+ < R_c$$

Bu denklemlerde geçen sabitler KIVA3V'de $B=5.5$, $E=0.15$, $\theta=0.4327$, $R_c = yu / \nu_t = 114$ ve boyutsuz değişkenler;

$$u^+ = \frac{|\mathbf{u} - w_{wall} \mathbf{k}|}{u_\tau}, \quad y^+ = \frac{y|\mathbf{u} - w_{wall} \mathbf{k}|}{\nu_{air}(T)} \quad (4.3)$$

olarak tanımlıdır.

Sıcaklık ve Isı Akıları :

$$\text{Adyabatik} \quad : J_w = k \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (4.4)$$

$$\text{Sabit Sıcaklık} \quad : T^+ = \text{Pr}_t u^+, \quad y^+ \geq R_c \quad (4.5)$$

$$T^+ = \text{Pr} \left[u^+ + \left(\frac{\text{Pr}_t}{\text{Pr}} - 1 \right) R_c^{1/2} \right], \quad y^+ < R_c$$

Burada Pr_t ; laminar akış için Prandtl sayısı, T_w ; cidar sıcaklığı ve T^+

$$T^+ = \frac{\rho u_\tau c_p (T - T_w)}{J_w} \quad (4.6)$$

eşitliğini sağlayan boyutsuz sıcaklık değeridir.

Yakıt Demeti : Demeti oluşturan her bir damlacık tek tek incelenmeye çalışılırsa tipik bir içten yanmalı motor için 2 milyonun üzerinde damlacığın izlenmesi gerekir ki bu oldukça uzun hesap zamanı ve oldukça fazla bilgisayar kapasitesi gerektirir. Bu yüzden yakıt demeti, Bölüm 2’de de bahsedildiği üzere, birçok damlacıktan oluşan damlacık parsellerine bölünerek modellenmektedir. Yakıt demeti diferansiyel denklemleri, korunum denklemlerinden oluşmakta ve her bir damlacık parseli için, konumunu, hız vektörünü, çapını ve sıcaklığını verecek şekilde çözümler elde edilmektedir.

Yakıt damlacıklarının küre şeklinde olduğu, yoğunluğunun içerisinde bulunduğu ortam yoğunluğuna göre çok yüksek olduğu ve çevresiyle etkileşiminde aerodinamik kuvvetlerin etkili olduğu varsayımları yapılmıştır.

Enjektör deliğinin geometrik olarak yeri, yakıt demetinin enjektör deliğinden çıkış açısı giriş dataları olarak programa verilmektedir. Yakıt demetinin nozul çıkış hızları damlacık parsel sayısı, damlacık çıkış büyüklükleri ve dağılım şekilleri, hangi hızlarda püskürtülecekleri yapılan deneyler sonuçlarına ve literatürde kullanılan datalara göre kullanıcı tarafından girilmektedir (Amsden, 1989).

4.2 Çözüm Yöntemi

KIVA3V gaz fazı ve sıvı fazı denklemlerinin bir arada çözülmesi için Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE) metodu kullanılmaktadır. Bu yöntemde sonlu fark denklemleri Lagrangian faz ve Eulerian faz olmak üzere iki ayrı faz içerisinde çözümlenmektedir. Krank açısının değişmesi ile yeni bir ağ yapısının oluşturulması Eulerian faz içerisinde gerçekleşmektedir. Yakıt demeti ve gaz fazı denklemlerini çözümleri birbirini izleyen A, B, C safhalarında çözümlenmektedir. A ve B Lagrangian, C ise Eulerian akış çözümlerini içermektedir. A, B ve C safhalarını içeren KIVA3V programının genel akış diyagramı, ana hatlarıyla Şekil 5.2’de gösterilmiştir.

4.2.1 A Safhası

Yakıt demeti birleşme , parçalanma kaynak terimleri ve kimyasal reaksiyonlardan gelen kaynak terimler A safhasında hesaplanmaktadır.

4.2.2 B Safhası

Bu safhada momentum denklemlerindeki yakıt demeti kaynak terimi, kütle momentum ve enerji denklemlerindeki difüzyon terimleri ile türbülans denklemlerindeki kaynak terimler çözülmektedir. Düşük Mach sayılarında hesap verimliliğini sağlamak için Pressure Gradient Scaling (PGS) metodu momentum denkleminde uygulanmaktadır (Amsden, 1989).

Çözüm yöntemi temel olarak SIMPLE yöntemine dayandırılmaktadır. Bu yöntemde temel sayısal iterasyon iki basamaktan oluşmaktadır.

1. Öngörülen basınç alanı dondurularak diğer akış özellikleri difüzyon terimleri için implicit olarak, sonlu farklar yöntemi ile çözülmektedir.
2. Difüzyon terimleri için elde edilen değerler dondurularak basınç terimi için denklem çözümü elde edilmektedir. Bu basamak sonunda tahmin edilen ve düzeltilen basınç terimleri karşılaştırılmaktadır. Yaklaşım toleransı dışında bir çözüm varsa düzeltilmiş basınç terimi yeni basınç değeri olarak alınır ve iterasyon tekrarlanır

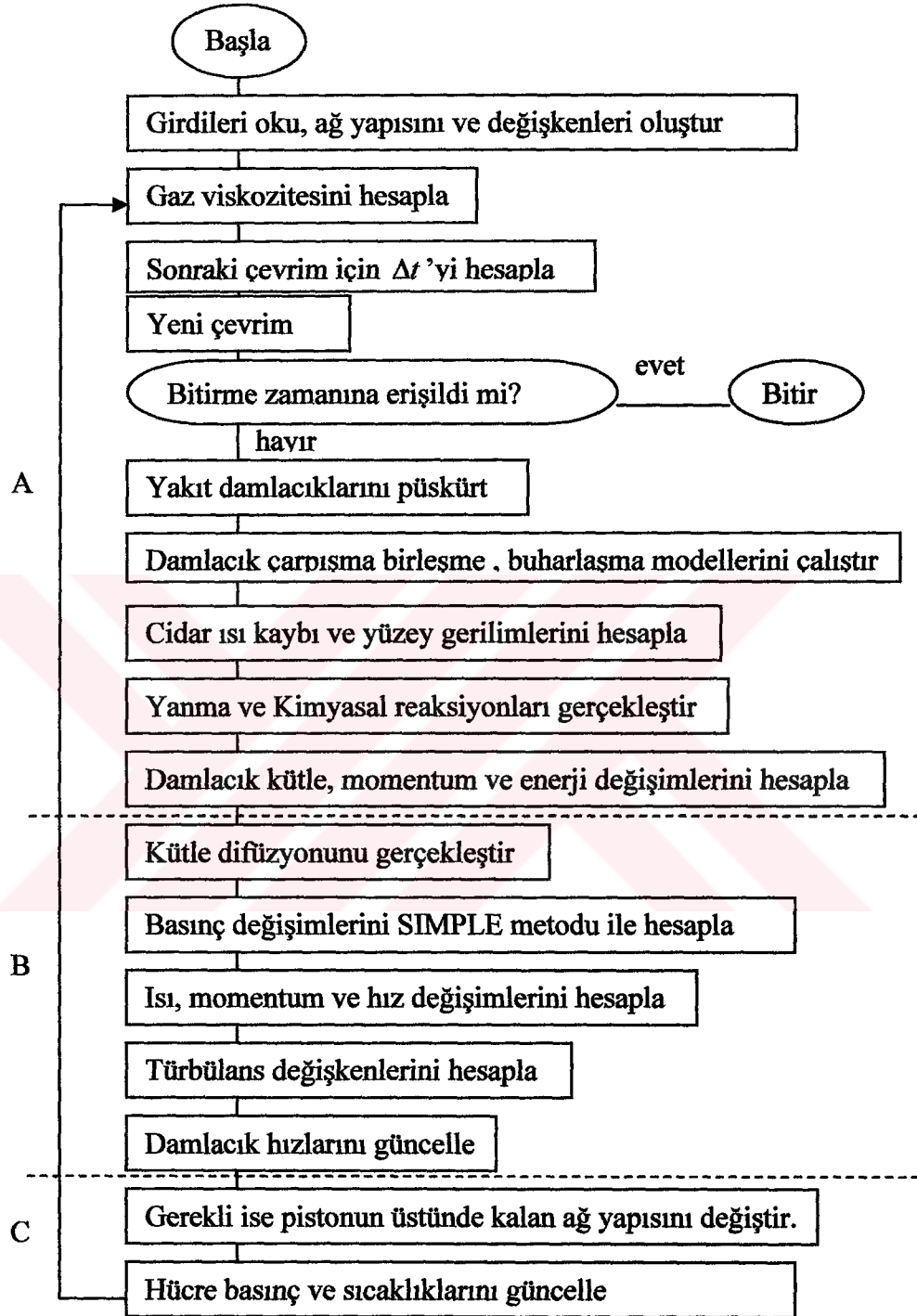
4.2.3 C Safhası

Bu safha yeniden ağ yapısının oluşturulduğu safhadır. Taşınım terimleri, Quasi Second Order Upwind (QSOU) veya Partial Donor Cell (PDC) yöntemleri ile hesaplanabilmektedir (Amsden, 1989). Bu seçim kullanıcı tarafından yapılabilmeyle birlikte QSOU yöntemi Amsden (1989) tarafından önerilmektedir.

4.3 Bilgisayar Programı

Amerika Birleşik Devletlerinde Los Alamos ulusal laboratuvarı tarafından üretilen KIVA programı Fortran bilgisayar dilinde yazılmış ve ilk olarak 1985 yılında kullanılmaya başlanmıştır. Gelişen bilgisayar kapasite ve hızlarına paralel olarak 1989 yılında KIVA II, 1993 yılında KIVA3 ve 1997 yılında KIVA3V ve 1998 KIVA3V rel2 versiyonları geliştirilmiştir. Kullanılan bilgisayar kodu 1998 yılında modifiye edilmiş olan versiyondur. Bu program Cray, IBM, SGI, SUN, PC işlemcilerle Unix veya Linux işletim sisteminde F77 derleyicisi ile çalıştırılabilmektedir. Bu tezde yapılan çalışmada SGI, SUN ve kişisel bilgisayardan

yararlanılmıştır. Kullanılan bilgisayar sisteminin kapasitesine bağlı olarak programın çalışma süresi değişmektedir.



Şekil 4.2 : Genel akış diyagramı

KIVA3V bilgisayar programı ele alınan hacim sınırlarını ve yapısının tanıtıldığı K3PREP, sonuçların görüntülendiği K3POST ve çözümlerin yapıldığı KIVA3V bilgisayar programından oluşmaktadır. Bu tezde KIVA3V'den alınan sonuçlar K3POST yerine General Mesh Viewer (GMV) ile görüntülenmiştir.

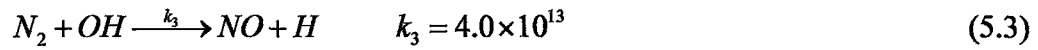
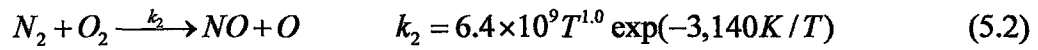
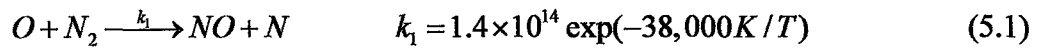
5. NO_x OLUŞUMU VE YANMA MEKANİZMASI

Atmosferdeki kirlenici bileşenlerden olan azot oksitler, Nitrikoksit (NO), Nitrojenioksit (NO₂), Nitrousoksit (N₂O) bileşenleridir. İlk iki bileşen genelde NO_x olarak tanımlanmakla birlikte içten yanmalı motorlarda oluşan azot oksitler arasında en fazla olanı Nitrikoksit , NO'dur (Heywood, 1988). Bununla birlikte ozon tabakasındaki azalmaya sebep olan başlıca bileşenler NO_x'lerdir. NO_x Stratosferde bulunması durumunda ozon tabakasını azaltan reaksiyonlarda bir katalizör görevi görmekte, aynı zamanda asit yağmuru oluşumuna da katkı sağlamaktadır. Birçok araştırmacı NO_x oluşumunun azaltılması yönünde çalışmalar yapmaktadır. Aşağıda NO_x oluşum mekanizmaları hakkında kısa bilgiler ile tezde kullanılan yanma mekanizması verilecektir.

5.1 NO_x Oluşum Mekanizmaları

5.1.1 Zeldovich-NO (Termal-NO)

Zeldovich-NO veya Termal-NO mekanizması aşağıdaki üç temel reaksiyonu içermektedir.



N₂ molekülündeki üçlü bağı bölmek için gerekli olan enerji yüksek olduğundan (5.1) denklemindeki aktivasyon enerjisi yüksektir. Bu yüzden (5.1) reaksiyonu Zeldovich-NO oluşum mekanizmasını sınırlandıran reaksiyondur. Yüksek hızlarda yeterince hızlı geliştiğinden bu mekanizma Termal-NO oluşumu olarak da adlandırılmaktadır. Yukarıdaki reaksiyonlardan ilk iki reaksiyon Zeldovich tarafından önerilmiş daha sonra üçüncü reaksiyon eklenerek mekanizma geliştirilmiştir.

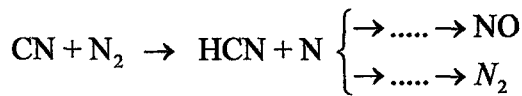
Zeldovich-NO mekanizması O atomu ve OH bileşenini ihtiva ettiğinden, bu mekanizmayı yakıtın oksidasyonu ile birleştirmek gereklidir. Fakat yakıt oksidasyon mekanizması ile karşılaştırma yapıldığında, NO mekanizmasının genel hızı yavaş olduğundan reaksiyon hızının hesaplanması yakıt oksidasyon kinetiğinden ile ayrılarak yapılmaktadır. Çoğu durumda O_2 , N_2 , O ve OH bileşenlerinin belirtilen sıcaklıkta denge konsantrasyonları alınır ve N atom konsantrasyonunun sürekli rejimde olduğu kabul edilir. Bu kabul ile birlikte NO oluşum hızı **Heywood (1988)**'de aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{6 \times 10^{16}}{T^{0.5}} \exp(-69,090/T) [O_2]_e^{0.5} [N_2]_e \quad (5.4)$$

Burada $[]_e$ denge konsantrasyonunu belirtmektedir. NO üretiminin sıcaklığa bağıllığı (5.4) denkleminde açıkça görülmektedir. Sıcaklık, oksijen ve nitrojen konsantrasyonlarının artması ile birlikte NO oluşumunu artıracaktır. Yakıt / hava oranının, ϕ , 0.8 ile 1 arasında olduğu durumda Zeldovich-NO mekanizması NO oluşumunda etkin rol oynamaktadır (**Tao, 2003**).

5.1.2 Prompt-NO (Fenimore-NO)

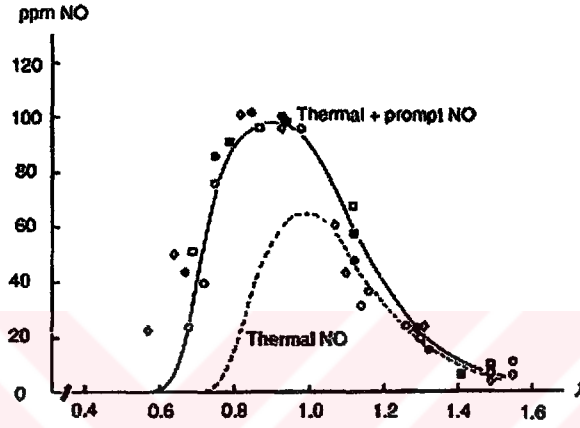
İlk olarak Fenimore tarafından önerilen Prompt-NO mekanizması, NO oluşumunu, yüksek sıcaklık bölgelerinde Zeldovich-NO mekanizmasının öngördüğü gibi azotun direk olarak oksijen ile birleşmesinden ziyade, hidrokarbonların hava ile yanması sonucunda oluşan hidrokarbon bileşenleri ile azot arasındaki reaksiyonlara bağlamaktadır. Alev ön cephesinde oluşan hidrokarbon bileşenleri, CH, havadaki azot ile birleşerek hidrosiyanik asit, HCN, oluşturmakta ve daha sonra diğer ara mekanizmalar ile NO oluşumu gerçekleşmektedir (**Warnatz, 1996**).



Prompt-NO mekanizması NO oluşumu için üç ana kaynak tanımlanmaktadır. Bunlar;

1. Zeldovich mekanizması ile üretilmiş dengede olmayan O ve OH bileşenleri
2. Fenimore prompt-NO mekanizması
3. N_2O mekanizması şeklinde tanımlanmaktadır.

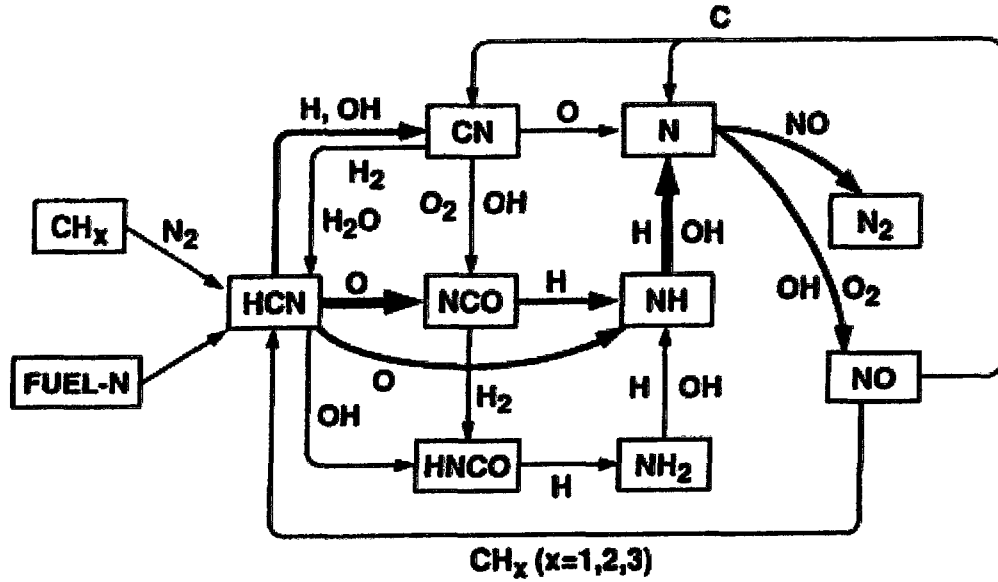
Yanma sistemine bağılı olarak bu üç mekanizmadan biri diğerlerine göre göreceli olarak önem kazanmaktadır. Prompt-NO oluşumunun bir kısmı, Zeldovich-NO mekanizmasını hızlandıran, O ve OH bileşenlerinin denge değerlerinden yüksek olmasından kaynaklanmaktadır. Düşük basınçlı, ön karışımli yanmada Zeldovich-NO mekanizması ile dengede olmayan O ve OH bileşenlerinin konsantrasyonu NO oluşumunun %80 ini teşkil edebilir. Aynı zamanda ön karışimsız yanmada ve karışım reaktörlerinde fakir yanmada önemli rol oynamaktadır Şekil 5.1.



Şekil 5.1: Yakıt Hava karışımına bağılı olarak karışım reaktöründe NO oluşumu. Warnatz (1996)'den alınmıştır.

Zengin karışım durumunda ise baskın olan Prompt-NO mekanizmasıdır. NO oluşumunun izlediği yol Şekil 5.2'de gösterilmiştir. Zengin ön karışımli yanmada ve difüzyon alevinde hidrokarbon bileşenleri ile moleküler nitrojen mekanizması toplam NO üretiminin %50 sini teşkil etmektedir (Tao, 2003). Azot ile hidrokarbon bileşenleri arasındaki reaksiyonlarla hidrosiyaniğin oluşumu aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.





Şekil 5.2 Prompt-NO oluşumundaki genel reaksiyon diyagramı (Tao, 2003).

Şekil 5.2’de aynı zamanda azot bileşeni içeren yakıtlar ile NO oluşumu da gösterilmiştir. Fakat dizel yakıtında bu miktar oldukça az olduğundan bu konuya değinilmeyecektir.

Nitrousoksit mekanizması Zeldovich-NO mekanizmasına benzer şekilde, azot molekülü ve oksijen atomu içermektedir. Fakat direk olarak N_2O oluşturmazlar. Üçüncü bir bileşenin (M) olması durumunda N_2O oluşumu aşağıdaki gibidir.



N_2O hızla O ve H atomları ile birleşerek NO oluşturabilir.



Fakat bu reaksiyonların toplam NO oluşumuna katkıları oldukça küçüktür. Bu yüzden bu reaksiyonlar çoğu zaman göz önüne alınmazlar.

5.1.2 NO_2 Oluşumu

Nitrojendioksit, NO_2 , oluşumu NO ile HO_2 arasındaki aşağıdaki reaksiyonla gerçekleşir.



Fakat oluşan NO_2 hidrojen, H ve oksijen, O , atomları ile reaksiyona girerek hızla azalır.



NO_2 'nin tekrar parçalanması çok hızlı olduğundan yüksek sıcaklıktaki alev bölgesinde bir geçiş bileşenidir. Yanma sistemlerinde oluşan NO_2 alev bölgesi civarında görülmektedir. Yüksek sıcaklık bölgesinde oluşan NO düşük sıcaklık bölgelerine difüzyonla yayılarak HO_2 ile reaksiyona girmekte ve NO_2 oluşturmaktadır.

5.2 Dizel Motorlarda NO Oluşumunun Modellenmesi

NO oluşumunun modellenmesinde birçok araştırmacı Zeldovich mekanizmasını kullanmaktadır. Bunun iki önemli nedeni vardır. Birincisi; NO oluşumu Zeldovich mekanizmasında kısmi denge kabulleri ile oksijen atomu konsantrasyonuna dayandırılmıştır. Bu yaklaşım birçok karmaşık reaksiyon içeren dizel yakıtının yanma modeli için uygundur. İkinci olarak; Zeldovich- NO oluşumu ısı açığa çıkaran diğer reaksiyonlardan daha yavaş geliştiğinden NO oluşumunun zaman ölçeği, diğer akış ölçeklerinden ayrılabilir nitelikte olmasından kaynaklanır.

Bununla birlikte önceki kısımda anlatıldığı gibi NO oluşumuna dengede olmayan gaz fazı bileşenlerinin de etkisi vardır. Birçok araştırmacı tarafından alternatif NO oluşum mekanizmaları önerilmiştir. Bu tezde ise Zeldovich- NO mekanizması kullanılmıştır.

5.3 Yanma Mekanizması

Tez çalışmasında tek basamaklı oksidasyon mekanizması ve detaylı yanma mekanizması kullanılmıştır. Sabit hacimde yapılan modellerde yakıt olarak C_7H_{16} (n-heptan) ve $\text{C}_{14}\text{H}_{28}$, dizel motor modelinde ise $\text{C}_{14}\text{H}_{28}$ kullanılmıştır.

Zeldovich mekanizması ile birlikte 12 bileşen içeren tek basamaklı yanma mekanizması ve kullanılan denge reaksiyonları Tablo 5.1'de verilmiştir. Tablo 5.1'de verilen reaksiyonlardan ilk dört adedi kinetik reaksiyon, sonraki altı adedi ise denge reaksiyonlarıdır.

Alev sıcaklığı, tek basamaklı yanma mekanizması kullanıldığında adyabatik alev sıcaklığı civarında olmaktadır. Bununla birlikte NO oluşumu için Heywood (1988)'de önerilen katsayılar ile başarılı sonuçlar alınabilmektedir.

Tablo 5.1 : Tek basamaklı kimyasal yanma mekanizması

C14H28	+	42 O2	→	14 CO2	+	14 H2O
N2	+	O	↔	N	+	NO
O2	+	N	↔	O	+	NO
N	+	OH	↔	H	+	NO
H2			↔	2H		
O2			↔	2O		
N2			↔	2N		
O2	+	H2	↔	2OH		
O2	+	2H2O	↔	4OH		
O2	+	2CO	↔	2CO2		

C14H28 için detaylı yanma mekanizması Gustavsson ve Golovicthev (2003)'den alınmıştır. Bu mekanizma kullanıldığında alev sıcaklığı adyabatik alev sıcaklığından yaklaşık 600 K daha düşük çıkmaktadır. NO oluşumu için Heywood (1988)'de önerilen katsayılar ile başarılı sonuçlar alınamamıştır. Bu makalede verilen No mekanizması değiştirilerek, deneysel verilerle uyumlu sonuçların elde edildiği çözümler Ek G'de verilmiştir. Detaylı yanma mekanizması Ek H'de verilmiş olup, 68 bileşen ve 291 reaksiyondan oluşmaktadır.

6. TÜRBÜLANSLI YANMA MODELİ

Daha önceki bölümlerde bahsedildiği gibi dizel motor ortamında yanma türbülanslı bir yapıya sahiptir. Bu yüzden, türbülanslı ortamda yakıtın oksidasyonunu kontrol eden kimyasal kinetik reaksiyonların modellenmesi daha da karmaşık bir yapıya sahiptir. Türbülans denklemleri Bölüm 2’de verilmişti. Bu bölümde ise türbülansın yapısından bahsedilecek ve türbülans ile kimyasal reaksiyonların etkileşimi anlatılacaktır.

6.1 Türbülansın Yapısı

Bölüm 2’de kısaca değinildiği üzere genellikle türbülanslı akış, ortalama bir akış özelliği ve bu özelliğin çalkantı bileşenleri ile ifade edilir.

$\psi = \bar{\psi} + \psi'$ ve çalkantı bileşeninin ortalaması $\overline{\psi'} = 0$ ’dır.

6.1.2 Moment Metodu

Türbülans rasgele ve karmaşık bir işlem olarak düşünüldüğünden, istatistik’i teoriler uygulanarak olasılık yoğunluk fonksiyonları (probability density function - pdf) ile türbülanslı akışın ψ değişkeni tanımlanmaya çalışılır. Eğer ψ bilinmeyen teriminin pdf’i, $P(\psi; \mathbf{x}, t)$ ise, değişkenin ortalama değeri ;

$$\bar{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi P(\psi; \mathbf{x}, t) d\psi \quad (6.1)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. İki bileşenin çarpımının ortalaması ise aşağıdaki gibidir.

$$\overline{\psi_1 \psi_2} = \bar{\psi}_1 \bar{\psi}_2 + \overline{\psi'_1 \psi'_2} \quad (6.2)$$

Burada, $\overline{\psi'_1 \psi'_2}$ ilişki teriminin değeri, çoğu uygulamada sıfır olmayan ve bilinmeyen bir değerdir.

(6.2) ifadesi $P(\psi; \mathbf{x}, t)$ 'in sıfırdaki birinci momenti olarak ifade edilmektedir. n inci momenti ise

$$\overline{\psi^n} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^n P(\psi; \mathbf{x}, t) d\psi \quad (6.3)$$

şeklindedir. ψ' değişkenin karesinin ortalama değeri, $\overline{\psi'^2}$, ise ortalama değer civarındaki ikinci momentidir ve genellikle ikinci merkez momenti olarak adlandırılır ve aşağıdaki eşitlikle ifade edilir.

$$\overline{\psi'^2} = \sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \bar{\psi})^2 P(\psi; \mathbf{x}, t) d\psi = \overline{\psi^2} - \bar{\psi}^2 \quad (6.4)$$

ψ'_1 ve ψ'_2 değişkenleri arasındaki ilişki ise aşağıdaki şekildedir.

$$\overline{\psi'_1 \psi'_2} = \sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1 - \bar{\psi}_1)(\psi_2 - \bar{\psi}_2) P(\psi_1, \psi_2; \mathbf{x}, t) d\psi_1 d\psi_2 \quad (6.5)$$

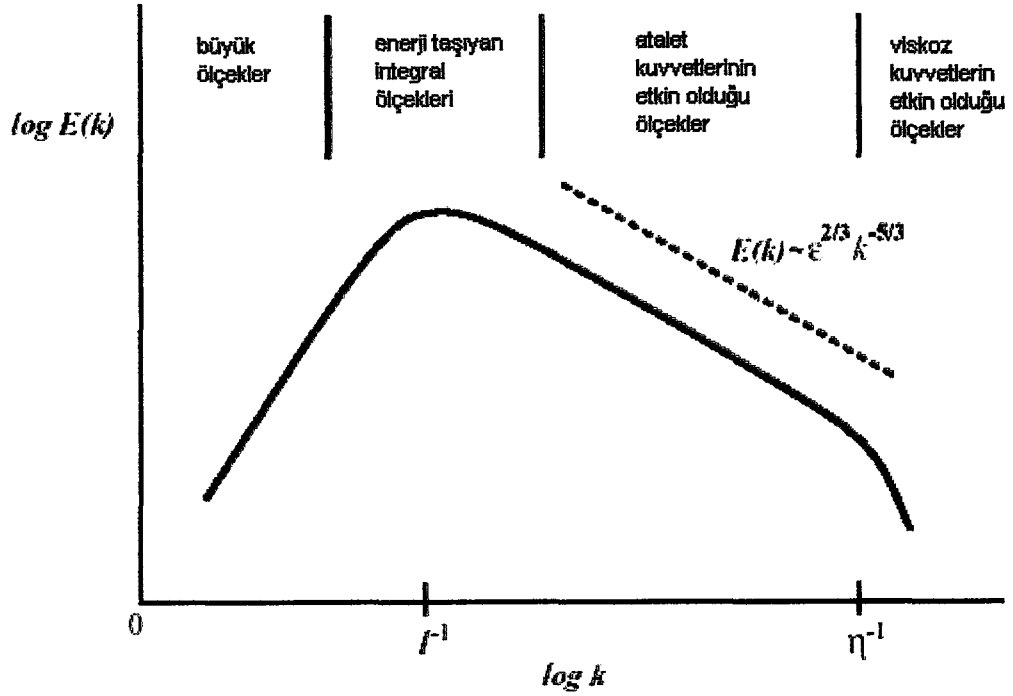
6.1 Türbülansın Spektral Gösterimi ve Enerji Kademeleri

Türbülanslı akışın karakteristik yapısı farklı ölçeklerde eddy akımları veya yüksek seviyede çalkantı hareketleri içermektedir. Türbülanslı eddy ölçeklerine göre sınıflandırmak için iki nokta arasındaki hız ilişkisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$R_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = \overline{u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t)} \quad (6.6)$$

Türbülans kinetik enerji spektrumu $E(\kappa)$, homojen ve izotropik türbülans için $R_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$ ilişkisinin Fourier analizi ile gösterilmektedir. κ birim dalga sayısı için kinetik enerji yoğunluğudur.

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} R_{ii}(\mathbf{x}, 0, t) = \int_0^{\infty} E(\kappa) d\kappa \quad (6.7)$$



Şekil 6.1 Türbülanslı akış için enerji spektrumunun şematik gösterimi.

Enerji spektrumunun logaritmik ölçekli şekli, Şekil 6.1'de gösterilmiştir. Buradan uzunluk ölçekleri tanımlanabilir. Birincisi integral uzunluk ölçeği, l_I ;

$$l_I = R_{ii}(\mathbf{x}, 0, t) = \int_0^\infty \frac{R_{ii}(\mathbf{x}, r, t)}{R_{ii}(\mathbf{x}, 0, t)} dr \quad (6.8)$$

ve ikincisi Kolmogorov uzunluk ölçeği, η ;

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (6.9)$$

şeklinde tanımlıdır. ν kinematik viskozite ve ε , türbülansın sönm oranıdır.

Büyük ölçekli eddy akımlarına karşılık gelen küçük dalga sayılarında enerji dağılımının genel bir ifadesi yoktur. Enerji dağılımı akışın lokal şartlarına bağlı büyük ölçekli kararsızlıkları ile tanımlıdır. Bu bölgede enerji yoğunluğu κ^2 ve κ^4 arasında bir kuvvet kanununa göre artarak, integral uzunluk ölçeğine karşılık gelen dalga sayısında maksimum değerine ulaşır. Büyük dalga sayılarında ise enerji yoğunluğu $\kappa^{-5/3}$ kanuna göre (örneğin; $E(\kappa) \sim \varepsilon^{2/3} \kappa^{-5/3}$) Kolmogorov ölçeğine

kadar azalır . Kolmogorov ölçeğinin altında ise moleküler viskoziteye bağlı biçimde exponansiyel olarak azalır.

Enerji spektrumu analizine bağlı olarak türbülanslı akış için kademelendirme işlemi yapılmaktadır. Türbülans alanı içerisindeki küçük ölçekli eddy akımlarının sahip oldukları enerji, büyük eddy akımlarından aldıkları enerji ile artar. Fakat bu akımlarda yakınlarındaki daha küçük akımlara enerji vererek, Kolmogorov ölçeğinin altındaki boyutlarda viskoz etkilere karşı gelemmez ve sönümlenirler.

6.1.4 Ortalama Parametreler ile Temel Denklemler

Temel denklemleri Favre ortalaması ile gösterecek olursak;

Toplam kütle;

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = \bar{\dot{\rho}}_s \quad (6.10)$$

Momentum ;

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = - \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{u}_j'')}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{P}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{f}_i^s \quad (6.11)$$

Kimyasal bileşenler ;

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k)}{\partial x_j} = - \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{Y}_k'')}{\partial x_j} - \frac{\partial (\bar{J}_k)_j}{\partial x_j} + \bar{M}_k \bar{\dot{\omega}}_k + \bar{\dot{\rho}}_k^s \quad (6.12)$$

Enerji ;

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{e})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{e})}{\partial x_j} = - \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{e}'')}{\partial x_j} - \frac{\partial (\bar{J}_q)_j}{\partial x_j} - \bar{P}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \bar{\dot{\rho}}^r + \bar{\dot{q}}^c + \bar{\dot{q}}^s \quad (6.13)$$

Gaz hal denklemi;

$$\bar{p} = \bar{\rho} R \sum_k^{N_s} (\tilde{T} \tilde{Y}_k + \overline{Y_k T''}) / M_k \quad (6.14)$$

şeklinde özetleyebiliriz.

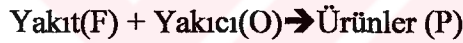
Bu denklemlerde kullanılan parametrelerin ortalamalarının alınmasıyla yeni bilinmeyen terimler gelmektedir. Bu yüzden denklemler kapalı değildir ve Bölüm 2’de bahsedilen türbülans modellerine ihtiyaç duyulmaktadır.

6.3 Türbülans ve Kimyasal reaksiyonların Etkileşimi

Yanma ile birlikte türbülanslı akış olduğunda, Reynolds gerilimlerinin dışında birçok bilinmeyen parametre oluşmaktadır. Reaksiyonlara bağlı olarak ortaya çıkan bu parametreler moleküler işlemlerle ilgili olmalarına rağmen, farklı büyüklükteki türbülans eddy akımlarından oldukça fazla etkilenmektedir. Yanma işleminin türbülansla etkileşimi açısından ortaya çıkan zorluklar çeşitli yanma modellerinin önerilmesine yol açmıştır. Bu bölümde yanma modelleri kısaca özetlenecektir.

6.3.1 Matematiksel Zorluk: Taylor açılımı Analizi

Basit bir kimyasal reaksiyonunu ele aldığımızda, Taylor analizi ile ortalama reaksiyon hızları için reaksiyona bağlı olarak bilinmeyen terimler matematiksel olarak gösterilebilir. Tek yönlü bir reaksiyonu ele alalım;



Reaksiyon hız sabiti k_r ve reaksiyon hızı $\dot{\omega}_F$ aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$\dot{\omega}_F = -k_r Y_F Y_O, \quad k_r = AT^b \exp(-E_A / RT) \quad (6.15)$$

$\dot{\omega}_F$ ’in Taylor açılımı;

$$\overline{\dot{\omega}_F} = -\overline{A} \overline{\rho}^2 \overline{T} \overline{Y}_F \overline{Y}_O \exp\left(-\frac{E_A}{R\overline{T}}\right) \left[1 +_o \frac{\overline{Y}_F'' \overline{Y}_O''}{\overline{Y}_F \overline{Y}_O} + (P_1 + Q_1) \left(\frac{\overline{Y}_F'' \overline{T}''}{\overline{Y}_F \overline{T}} + \frac{\overline{Y}_O'' \overline{T}''}{\overline{Y}_O \overline{T}} \right) + (P_2 + Q_2 + P_1 Q_1) + \left(\frac{\overline{Y}_F'' \overline{T}''^2}{\overline{Y}_F \overline{T}^2} + \frac{\overline{Y}_O'' \overline{T}''^2}{\overline{Y}_O \overline{T}^2} \right) + \dots \right] \quad (6.16)$$

şeklindedir. Burada P_n ve Q_n Taylor açılımından gelen polinomlardır. Reaksiyon hızının, $\dot{\omega}_F$, yüksek mertebeden nonlinear terimlere sahip olduğu açıkça görülmektedir. Eğer ortalama reaksiyon hızı, yüksek mertebeden terimler ihmal

edilerek veya termodinamik özelliklerin ortalama değerleri (örneğin; $\widetilde{Y}_F, \widetilde{Y}_O, \overline{\rho}, \widetilde{T}$) ile ifade edilmek istenirse büyük hatalar oluşacaktır. Diğer taraftan bu analiz tek yönlü ve basit bir oksidasyon reaksiyonu için yazılmıştır, detaylı kinetik yanma mekanizmaları kullanıldığında ortaya çıkan problem daha da karmaşık bir hal alır.

6.3.2 Önkarişım Yanma Rejimleri ve Ölçekleri

Türbülans ve kimyasal reaksiyonların etkileşimini anlamak için türbülanslı yanmayı etkileyen değişik ölçeklerin karşılaştırılması yerinde olacaktır.

Yüksek enerji taşıyan eddy'leri tanımlayan integral uzunluk ölçeğine karşılık gelen büyük eddy'lerin çevrim zamanı için bir zaman ölçeği tanımlanabilir. Bu zaman ölçeği integral zaman ölçeği, τ_I , olarak tanımlanır ve türbülansın rms hızından aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$\tau_I = \frac{l_I}{u_{rms}} \sim \frac{k}{\varepsilon} \quad (6.17)$$

Aynı zamanda Kolmogorov zaman τ_η , ve hız u_η , ölçekleri tanımlanabilir.

$$\tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad u_\eta = (\nu \varepsilon)^{1/4} \text{ ve } \eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (6.18)$$

l_I ve u_η ölçekleri arasında tanımlanan Taylor ölçeği λ , sönüm miktarı cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilmektedir.

$$u_{rms} \sim \lambda \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2} \equiv \lambda \tau_n^{-1} \quad (6.19)$$

Taylor ölçeği türbülanslı yanmada, u_{rms} ile birlikte, karışım işleminin açıklanması için bir ortalama hız gradyanı tanımlamaktadır.

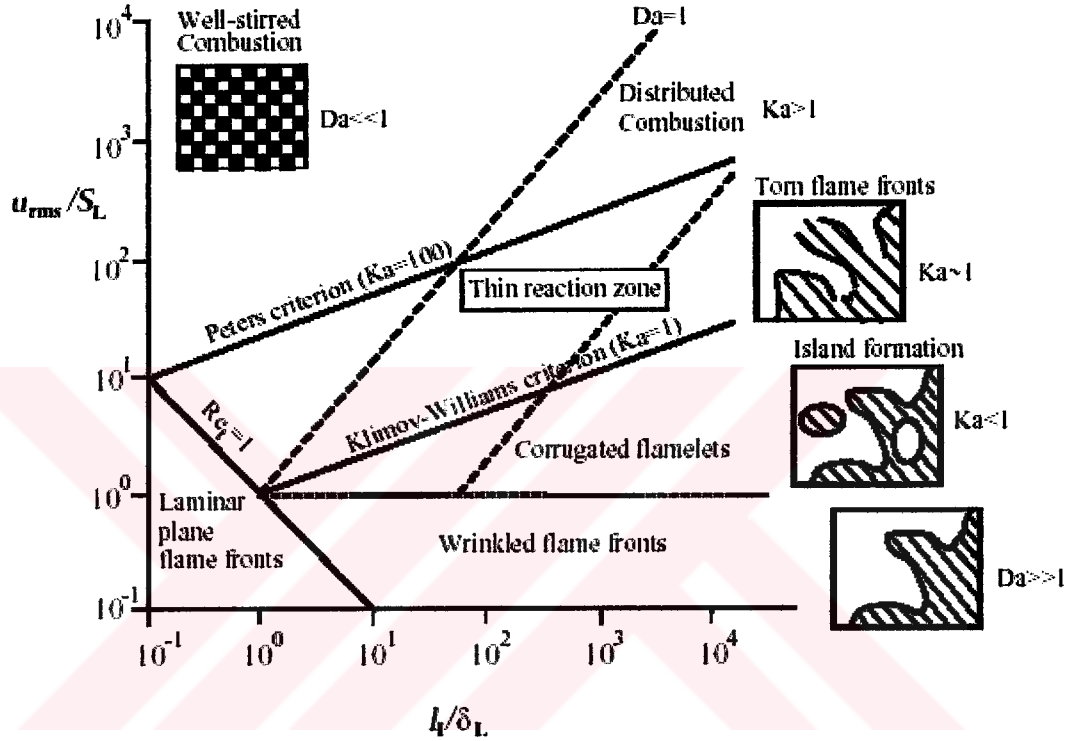
Yukarıdaki zaman ve uzunluk ölçeklerine bağlı olarak üç önemli boyutsuz parametre tanımlanabilir. Bunlar;

$$\text{Reynolds sayısı} : \quad \text{Re}_I = u_{rms} l_I / \nu \quad (6.20)$$

$$\text{Damköhler sayısı} : Da = \tau_I / \tau_{chem} \quad (6.21)$$

$$\text{Karlovitz sayısı} : Ka = \tau_{chem} / \tau_\eta \quad (6.22)$$

Burada τ_{chem} tek yönlü bir yanma reaksiyonu için kimyasal zaman ölçeğidir. Homojen, izotropik ve açığa çıkan ısıdan etkilenmeyen bir türbülansın olduğu kabulü ile ön karışımli yanma rejimleri Şekil 6.2 deki gibi gösterilmektedir (Tao, 2003).



Şekil 6.2 : Ön karışımli yanma rejimleri

Düşük Reynolds sayılarında laminar alev cepheleri oluşurken yüksek Reynolds sayılarında birtakım farklı alev cephelerinin oluştuğu görülmektedir. Kimyasal zaman ölçeğinin türbülans zaman ölçeğine göre çok küçük olduğu büyük Damköhler sayılarında ($Da \gg 1$), reaksiyon tabakaları akış tarafından dağıtılır ve taşınırlar. Bu durumda türbülans eddy'leri alevin iç yapısını etkilemez, sadece alev yüzeyinde girinti-çıkıntılar oluşturur. Alev yine laminar alev karakteristiğini taşır ve "Flamelets" olarak adlandırılırlar. Damköhler sayısının 1'e yaklaştığı durumda ise türbülans eddy'leri reaksiyon bölgesi içerisinde yer alır ve türbülans zaman ölçeği ile reaksiyon zaman ölçeği birbirleriyle karşılaştırılabilir boyutta olurlar. Düşük Damköhler sayılarında ise ($Da \ll 1$) kimyasal reaksiyonlar türbülansa nazaran çok

yavaş ilerler ve reaktantların, reaksiyon olmadan önce türbülans ile iyi bir karışım oluşturdıkları varsayılır.

Bunun dışında yanma rejimleri Karlovitz sayısına bağlı olarak da incelenmektedir. $Ka = 1$ hattı Klimov-Williams kriteri olarak tanımlanmakta ve iki ayrı rejimi ; kıvrımlı olan flamelet rejimi ve dağılımlı yanma rejimini birbirinden ayırmaktadır. Kıvrımlı olan $Ka < 1$ rejimi girintili-çıkıntılı olan ve alev adacıklarının olduğu rejime karşılık gelmektedir. $Ka = 1$ durumunda laminer alev kalınlığı Kolmogorov ölçeği ile eşit duruma gelir ve alev, Kolmogorov hızı ile hareket eder. Küçük ölçekli türbülans eddy'leri alev tabakası içerisinde alev cephesinin bozulmasına yol açar. Türbülans yoğunluğunun daha da artması durumunda, $Ka > 1$, yanmanın ayrı edilebilir bir alev cephesi oluşturmadığı gözlenmiştir. Bunlara ek olarak Peters (1999) yüksek aktivasyon enerjisine sahip olan reaksiyonlar için flamelet rejiminin $Ka = 100$ kriterine kadar uzadığını belirtmiştir.

Şekil 6.2'de gösterilen diyagram önkarişimli yanma reaksiyonları için geliştirilmiş olmasına rağmen bu modelleri difüzyon alev rejimi için de, yanma reaksiyonlarının stokiyometrik karışım civarında gerçekleştiği ve alev zaman ölçeğinin önkarişimli stokiyometrik alev zaman ölçeği ile aynı olduğu kabulleri altında, uygulayabiliriz.

6.4 Reynolds Ortalamalı Yanma Modelleri

Önkarişimsız yanma modelleri genellikle üç kategoride incelenmektedir. Bunlar (1) Reaktör modeli, (2) Flamelet modeli (3) Pdf modeli (Tao, 2003).

6.4.1 Reaktör Modeli

Reaktör modelinde ortalama reaksiyon hızları basitçe belirlenebilmektedir. Bu modelde yanmanın; lokal olarak, hacim sınırları mikro karışım zamanı ve reaksiyon işlemi tarafından belirlenen, küçük reaktör bölgelerinde gerçekleştiği kabul edilmektedir. Reaktör modeli hızlı yanmanın gerçekleştiği pratik uygulamalarda oldukça başarılı sonuçlar vermektedir. Aynı zamanda kompleks hız limitli yanma mekanizmaları kullanıldığında reaksiyon hızının doğru olarak belirlenebilmesi ve yeni modeller geliştirilebilmesi açısından da oldukça avantajlıdır.

Eddy-Break-Up (EBU) modeli **Spalding (1971)** tarafından önkarişimli yanma modeli için tanımlanmış bir reaktör modelidir. EBU modelinde ortalama reaksiyon hızı eddy parçalanma hızı ile verilmektedir.

$$\tilde{\omega}_F = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\sqrt{Y_F''^2}}{k/\varepsilon} \quad (6.23)$$

Burada C_{EBU} model sabiti ve Y_F'' yakıt kütle oranının çalkantı bileşenidir.

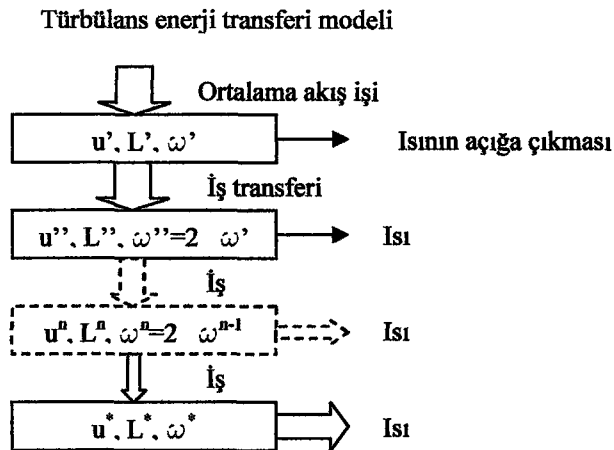
Magnussen ve Hjertager (1976) lokal reaksiyon hızının eddy parçalanma zamanı ve hız-limitli bileşenlerin ortalama konsantrasyonu ile orantılı olduğu Eddy-Dissipation-Concept (EDC) modelinin ilk versiyonunu önermiştir.

$$\tilde{\omega}_F = \alpha \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{s}, \beta \frac{\tilde{Y}_P}{(1+s)} \right) \quad (6.24)$$

Burada α ve β değiştirilebilir katsayılarıdır.

Daha sonraları **Magnussen (1989)** yanmanın reaksiyon hızı üzerinde enerji kademelendirme mekanizması ile sonlu Reynolds sayılarının ve moleküler dağılım işleminin etkilerini dikkate alan önemli bir EDC versiyonunu geliştirmiştir.

$$\varepsilon = \frac{4}{3} \xi^2 15 \nu (u^* L^*)^2, \quad u^* = 1.74 (\nu \varepsilon)^{1/4} \text{ ve } L^* = 1.43 (\nu^3 / \varepsilon)^{1/4} \quad (6.25)$$



Şekil 6.3 : Büyük türbülans yapılarından küçük türbülans yapılarına olan enerji transfer diyagramı

Burada reaksiyon hızının Kolmogorov eddy'leri ile çevre arasındaki kütle transferi tarafından belirlendiği varsayımına dayanarak kütle değişimi aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir.

$$\dot{m} = 23.6 \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \frac{\varepsilon}{k} \quad (6.26)$$

Böylece reaksiyon hızı aşağıdaki eşitlikten hesaplanabilmektedir.

$$\widetilde{\omega}_F = 23.6 \bar{\rho} \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\widetilde{Y}_F, \frac{\widetilde{Y}_O}{s}, \beta \frac{\widetilde{Y}_P}{(1+s)} \right) \quad (6.27)$$

6.4.2 Flamelet Modeli

Bir çok hızlı kimyasal reaksiyonlarla gerçekleşen türbülanslı yanmada reaksiyonlar ince, oldukça girintili çıkıntılı olan, fakat bir boyutlu ara yüzlerle sınırlandırılmıştır. Bu fiziksel olaya dayanarak hem önkarişimli türbülans alevi hem de önkarişimsız türbülans alevi, bu ara yüzlerin bir grubu şeklinde düşünülebilir.

Matematiksel olarak flamelet konsepti, bileşenler için korunum denklemleri ve difüzyon yanması ile açığa çıkan enerjinin, koordinat sistemi yerine korunmuş skaler uzayına aktarılmasıyla gerçekleştirilebilir. Bu (t, x_1, x_2, x_3) koordinat uzayında ifade edilen problemin, (τ, Z, x_2, x_3) uzayına transferi demektir. Böyle bir transfer Crocco-tipi transfer olarak adlandırılır ve $\varphi(t, x_1, x_2, x_3) \rightarrow \varphi(\tau, Z, x_2, x_3)$ formunda gösterilir. Burada $x_1 = x_1(\tau, Z, x_2, x_3)$ koordinatı lokal olarak stokiyometrik alev yüzeyinin normali doğrultusunda yerleştirilir. Korunmuş skaler $Z = Z(t, x_1, x_2, x_3)$ karışım oranını ve Z_{st} stokiyometrik karışım oranını ifade etmektedir.

Reaksiyona giren bileşenlerin kütle oranları için, korunum denklemlerinin transformasyonu sonucunda flamelet modeli için aşağıdaki bir boyutlu denklemler elde edilir.

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \frac{\rho}{Le_i} \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + M_i \omega_i \quad (6.28)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 T_i}{\partial Z^2} + \sum_i^{N_s} \frac{h_i M_i \omega_i}{c_p} \quad (6.29)$$

Korunmuş skalerin kayıp hızı χ ;

$$\chi = 2D(\nabla Z)^2 \quad (6.30)$$

şeklinde tanımlıdır.

Süreklilik kabulü ile (6.39) denklemi

$$\frac{\rho}{Le_i} \chi \frac{\partial^2 Y_i}{2 \partial Z^2} + M_i \omega_i = 0 \quad (6.31)$$

halini alacaktır. Verilen sıcaklık şartları ve bileşenlerin konsantrasyonları için bu denklemin çözümünden flamelet kütüphanesi $Y_i(Z, \chi)$ adı verilen değişik χ değerleri elde edilecektir. Bununla beraber özellikle süreksiz alev problemi için Stationary Flamelet Library Model (SFLM) modelinin bazı sınırlamaları vardır (**Peters, 2000**). Dizel yanması için ortaya çıkan bu problemleri gidermek için Representative Interactive Flamelet modeli geliştirilmiştir (**Pitsch ve diğ., 1996**).

Z ve χ 'in pdf'i bilinmesi durumunda alevin diğer skaler özellikleri

$$\overline{\widetilde{\rho Y_i}} = \int_0^\infty \int_0^\infty \rho(Z, \chi_{st}) Y_i(Z, \chi_{st}) P(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (6.32)$$

şeklinde hesaplanabilir.

Flamelet yaklaşımının önemli özelliği; bileşenlerin transfer denkleminin çözümünü, korunmuş bir skalere indirgeyerek basitleştirmesidir. Korunmuş skaler yöntemi bazı kriterler içerisinde reaksiyon bölgesinin Kolmogorov ölçeği kadar kalın bir bölge olması durumunda da uygulanabilmektedir (**Tao, 2003**).

6.4.3 PDF Transfer Denklemi Modeli

Eğer reaksiyona giren bileşenin ve sıcaklığın pdf'i biliniyor ise herhangi bir ortalama özelliği $Q(T, Y_1, \dots, Y_{N_s})$,

$$\iiint_{T, Y_1, Y_2} \dots \int_{Y_{N_s}} P(T, Y_1, \dots, Y_{N_s}) dT dY_1, \dots, dY_{N_s} \quad (6.33)$$

normalleştirme şartı ile ;

$$\bar{Q} = \int_T \int_{Y_1} \int_{Y_2} \dots \int_{Y_{N_s}} Q(T, Y_1, \dots, Y_{N_s}) P(T, Y_1, \dots, Y_{N_s}) dT dY_1, \dots, dY_{N_s} \quad (6.34)$$

denklemden hesaplanabilir. Bu yüzden türbülanslı kimyasal reaksiyonların olduğu akışlarda pdf in tespit edilmesi önemlidir.

Pdf transfer denkleminin çözümü

$$\begin{aligned} -\rho \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \rho \tilde{u}_k \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{\rho (u_k'' |Y = \Psi) \tilde{P}} \right] = \\ -\rho \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \frac{\partial}{\partial \Psi_j} \left[D \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} |Y = \Psi \right) \tilde{P} \right] \\ - \rho \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \left[\dot{\omega}(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N) \tilde{P} \right] \end{aligned} \quad (6.35)$$

şeklinde. Bu pdf transfer denkleminde kimyasal reaksiyon terimleri kapalı formdadır. Böylelikle kompleks kimyasal mekanizmalar da bu modelde rahatlıkla incelenebilir. Pdf transfer denkleminin asıl önemi; basınç çalkantıları ve viskoz etkiler altında mikro-karışım zamanının modellenmesi ve uygun sayısal yöntemle denklemin çözülebilmesidir. Bu modelde kullanılmak üzere karışım oluşumu için değişik modeller önerilmiş olmasına rağmen bilgisayar sistemlerindeki sınırlamalar yüzünden az sayıdaki kimyasal kinetik reaksiyon çözülebilmektedir (**Tao, 2003**).

Bu tezde kullanılacak model ise Magnussen ve Hjertager tarafından önerilen EDC modeli ve Bölüm3 de bahsedilen PaSR modelidir.

7. SONUÇLAR

Bu bölümde sabit hacim modelinin ve deney motoru modelinin sayısal ve deneysel sonuçları irdelenecektir. Sayısal sonuçlar üzerinde etkin olan parametrelerin optimizasyonu yapılacak ve deneysel sonuçlarla olan farklılıkları incelenecektir.

7.1 Sabit Hacimde Yapılan Model Sonuçları

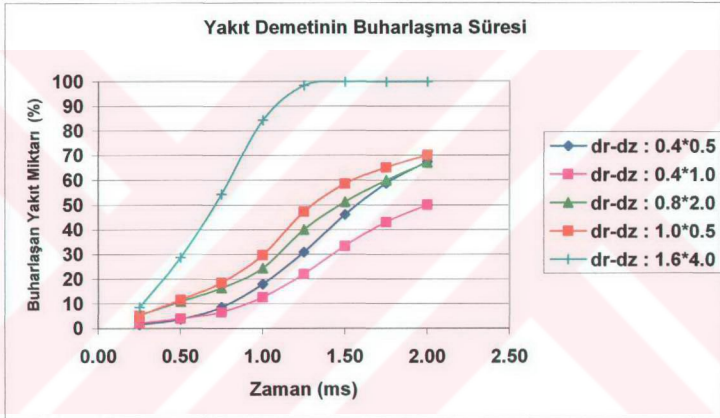
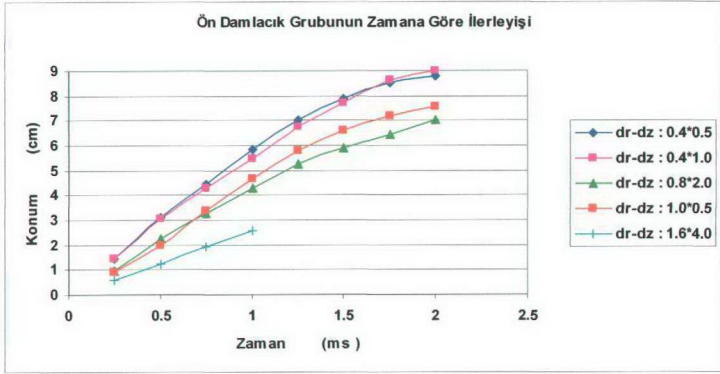
Sabit hacimde yapılan modellemeler, birçok parametrenin analizi açısından oldukça önemlidir. Dizel motoruna göre ölçüm yapılmasının daha kolay olması birçok araştırmacıyı sabit hacimde deneyler yapmaya itmiştir. Yapılan deney sonuçlarının değişik literatürlerde yer alması, sayısal çözümlerin doğruluğunu karşılaştırma imkanı sunmaktadır.

İki boyutlu olarak ele alınan silindirik oda 4 cm çap ve 9 cm uzunluğundaki bir silindirden oluşmaktadır. Başlangıç şartı olarak silindir içerisindeki sıcaklığın 800 K ve basıncın 50 bar olduğu varsayılmıştır.

7.1.1 Ağ Yapısının Etkisi

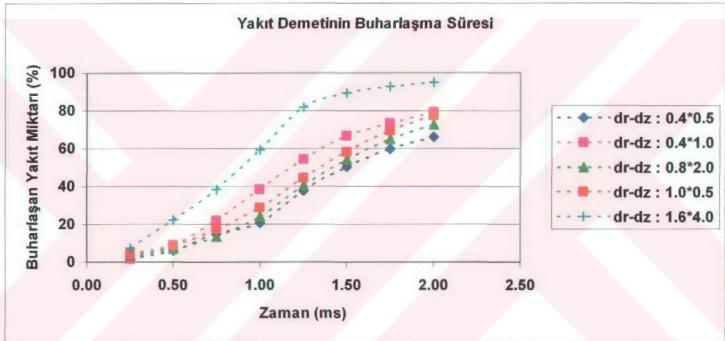
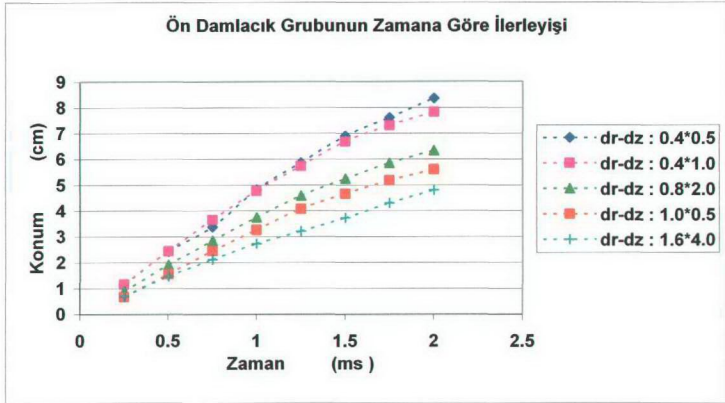
Çeşitli grid boyutları kullanılarak oluşturulan ağ yapısı içerisinde damlacıklar farklı mesafelere ilerlemektedir. 2 milisaniye içerisinde yakıt demetinin en ön bölümünde bulunan damlacıkların aldığı yol Şekil 7.1'de gösterilmiştir. Ağ yapısına bağlı olarak elde edilen sonuçlar, yarıçap ekseni (r) ve silindir uzunluk ekseni (z) üzerindeki ağ boyutları değiştirilerek elde edilmiştir. Her iki boyutta yapılan değişim sonucunda farklı sonuçlar elde edilmiş olmasına rağmen, damlacık ilerleyişinin r ekseninde yapılan değişime daha hassas olduğu gözlenmiştir.

Şekil 7.1 deki sonuçlar TAB parçalanma modeli ile birlikte KIVA3V standart buharlaşma ve çarpışma modelleri kullanılarak elde edilen sonuçlardır. Türbülans kinetik enerjisi $1000 \text{ cm}^2/\text{sn}^2$ ve türbülans uzunluk ölçeği 1 cm olarak alınmıştır



Şekil 7.1 : Farklı ağ yapılarında damlacıkların ilerleyişi ve buharlaşma yüzdesi.

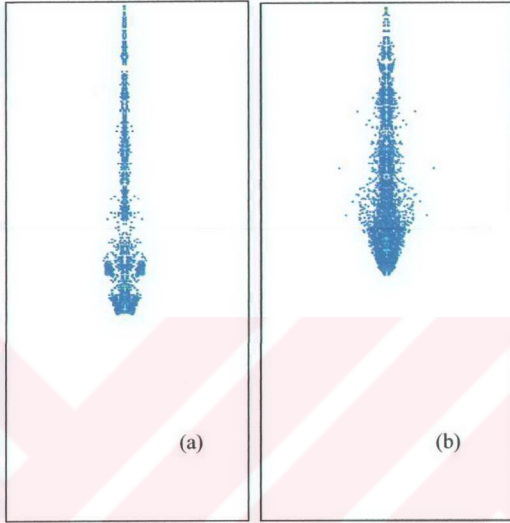
Ağ yapısı boyutları birçok sayısal sonucu etkilemektedir. Enjektör deliği civarında büyük boyutlu hücreler kullanılması durumunda, ortamda bulunan akışkanın hızı (grid hızları) ile damlacıklar arasındaki nispi hız da büyük olacak, bu da damlacıkların ilerlemesi ve buharlaşması gibi birçok olayı etkileyecektir. Bunun önlenmesi için; damlacık nispi hızlarının hücre boyutlarına bağlılığını azaltmak düşüncesinden hareketle, nispi hızın damlacık büyüklüklerine göre interpolasyon ile tespit edilmesi için **Nordin (2001)**'de önerilen model kullanılarak elde edilen sonuçlar Şekil 7.2 ve 7.3'de verilmiştir.



Şekil 7.2 : İnterpolasyon uygulanan damlacık grubunun ilerleyişindeki ve buharlaştırma sürecindeki farklılık.

Şekil 7.2 incelendiğinde, istenildiği gibi, damlacıkların ağ yapısından bağımsız hareketi sağlanamamış olmasına rağmen, yakıt damlacıklarının enjektörden uzaklıklarında bir düşüş görülmektedir. Bununla birlikte yakıt demetinin buharlaşmasında önemli bir farklılık göze çarpmaktadır. İnterpolasyon uygulanmayan modelde en büyük ağ yapısı ile yapılan çözümde, damlacıklar nispi hız büyükluğu için hızla buharlaşmakta ve 1 ms sonunda ortamda yakıt damlacığı kalmamaktadır. İnterpolasyon uygulanması ile büyük ağ yapısındaki bu durum kısmen giderilmiş olmasına rağmen daha küçük ağ yapısı ile elde edilen neticelerden oldukça farklıdır. Ağ yapısının etkisi her zaman göz önünde bulundurulması gerekmektedir.

Bunun dışında interpolasyon ile yakıt demetinin şeklinde de bir takım farklılıklar ortaya çıkmaktadır. Yakıtın püskürtülmeye başlamasından 1 ms sonra yakıt demetinin şeklinde olan farklılıklar Şekil 7.3 de görülmektedir.

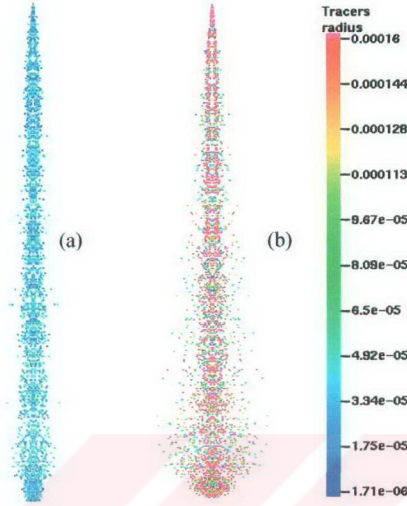


Şekil 7.3 : (a) İnterpolasyon uygulanmamış ve (b) interpolasyon uygulanan yakıt demeti şekilleri.

İnterpolasyon uygulanmayan yakıt demetinde, damlacıkların gruplar halinde yakıt demetinden ayrıldığı görülmektedir. İnterpolasyon uygulanması ile elde edilen yakıt demetinin şekli **Nordin, (2001)**'de verilen deneysel yakıt demeti şekline daha uygundur.

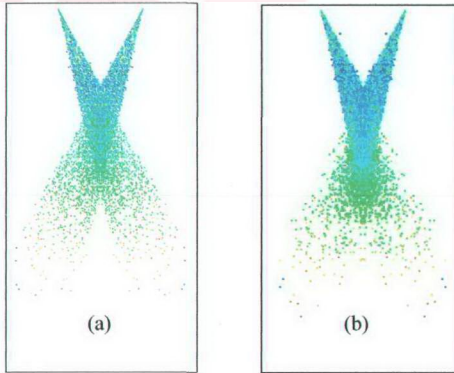
7.1.2 Farklı Parçalanma ve Çarpışma Modellerinin Etkisi

Bölüm 2 de verilen parçalanma modelleri arasındaki farklılıklar Şekil 7.4'de görülmektedir. TAB modelinde elde edilen yakıt demeti içerisinde KHRT modeline göre çok daha küçük boyuttaki damlacıkların oluştuğu görülmektedir. Model farklılıklarının daha iyi gözlenebilmesi amacıyla Şekil 7.4'de görülen yakıt demetleri, her hangi bir çarpışma modeli kullanılmadan elde edilmiştir. Böylelikle damlacıkların çarpışarak yeni damlacıklara bölünmesi engellenmiştir.



Şekil 7.4 : (a) TAB ve (b) KHRT parçalanma modelleri ile elde edilen damlacık yarıçapları (cm).

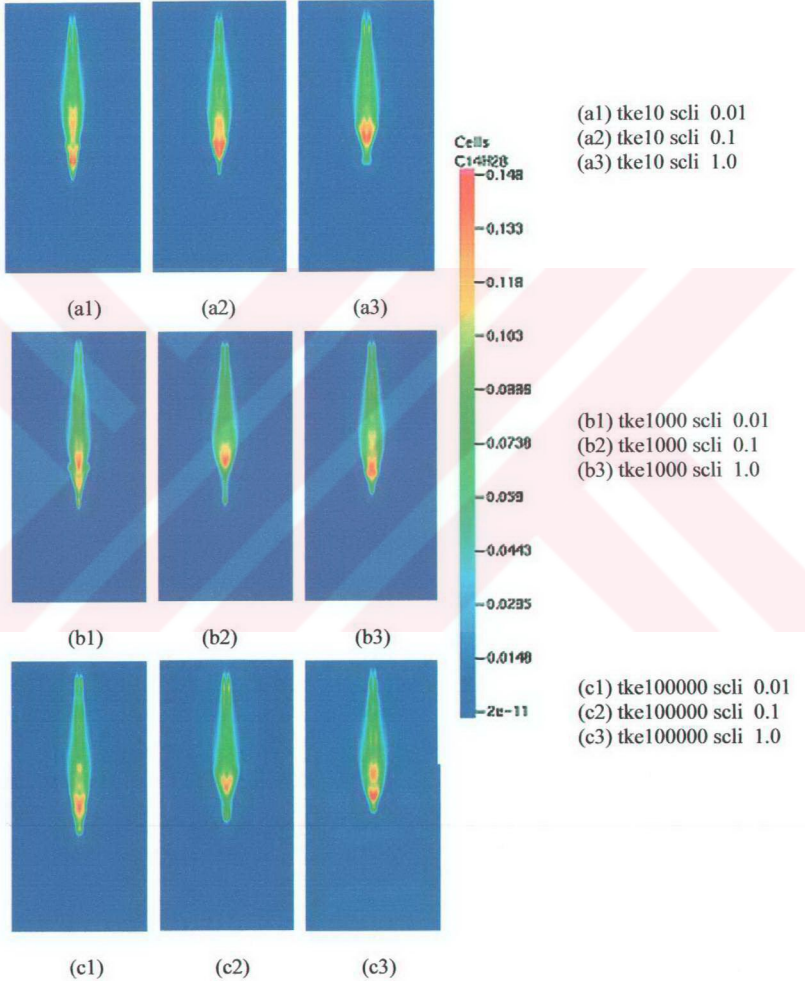
Bölüm 2'de damlacıkların çarpışma modelinden bahsedilmiş idi. Orjinal KIVA3V kodunda ki çarpışma modelinin grid yapısına olan bağımlılığı, **Nordin (2001)**'de detaylı olarak ele alınmış ve grid yapısındaki küçük değişimlerin sonuçları etkileyebileceği belirtilmiştir. Fakat tez kapsamında kullanılan ağ boyutları için çarpışma modelinde çok büyük farklılıklar gözlenmemiştir. Şekil 7.5



Şekil 7.5: Farklı çarpışma modelleri ile elde edilen sonuçlar

7.1.3 Türbülans Parametrelerinin Etkisi

Türbülansın doğru olarak modellenenebilmesi oldukça önemlidir. Genelde sabit hacim deneylerinde kullanılan başlangıç parametreleri; türbülans kinetik enerjisi için 1000-10000 cm^2/sn^2 ve türbülans uzunluk ölçeği için ise 0.5-1 cm arasındadır.



Şekil 7.6: Farklı türbülans parametreleri ile yakıt buharının ilerleyişi ($t=1$ ms)

Türbülans; damlacıkların ilerleyişini, taşınım katsayılarını ve dolayısıyla oluşan yakıt buharının konumunu etkilemektedir.

Yakıt püskürtüldükten 1 milisaniye sonra elde edilen yukarıdaki şekillerden, buharlaşma üzerinde, genelde türbülans uzunluk ölçeğinin türbülans kinetik enerjisine nazaran daha etkin olduğu görülmektedir. Bu durum türbülans viskozitesinin, dolayısıyla taşınım katsayılarının, türbülans uzunluk ölçeği ile orantılı olarak artmasından kaynaklanmaktadır.

Tablo 7.1 Farklı türbülans parametreleri ile buharlaşan yakıt miktarları.($t=1.5\text{ms}$)

	tke 10	tke 1000	tke 100000
scli 0,01	% 32,5	% 32,7	% 36
scli 0,1	% 35,3	% 37,7	% 36,6
scli 1	% 36,3	% 38,3	% 39,5

Türbülans viskozitesi aynı zamanda türbülans kinetik enerjisinin karekökü ile doğru orantılıdır. Sırasıyla türbülans kinetik enerjisi için 10, 1000 ve 100000 cm^2/sn^2 ile uzunluk ölçeği için 0.01, 0.1 ve 1 cm başlangıç şartları ile $t=1\text{ ms}$ 'de elde edilen yakıt buharı konumları Şekil 7.6'da, $t=1.5\text{ ms}$ 'de buharlaşan yakıt miktarı ise Tablo 7.1'de görülmektedir.

7.1.4 Sayısal Sonuçlar

Yapılan çalışmalarda yanma modeli olarak PaSR modeli kullanılmıştır. Bunun nedeni, Magnussen-Hjertager modelinde yanmanın, tutuşma gecikmesinden hemen sonra çok hızlı gerçekleşmesidir. Tutuşma gecikmesine kadar olan yanma, PaSR modelinde ve Magnussen-Hjertager modelinde önkarişimli yanma şeklinde beklenmekte ve sonuçlar birbirine uymaktadır. Tutuşma gecikmesinden sonra ise türbülanslı karışım hızının, yanma üzerinde etkili olması gerekir. İki model arasındaki farklılıkları incelemek için n-heptan detaylı mekanizması kullanılarak elde edilen sıcaklık dağılımları Ek A'da verilmiştir. Yanma modelleri dışında tüm parametrelerin aynı olmasına rağmen, Magnussen-Hjertager modelinde tutuşma sonrasında, sıcaklıkların hızla artmasının, yanma modelinin sayısal koda doğru aktarılamamasından ve türbülans etkileşiminde hata yapılmasından kaynaklandığı düşünülmektedir.

Yapılan bu analizler sonucunda PaSR modeli kullanılarak dizel yakıtı için Tablo 7.2'de verilen giriş parametreleri ile Ek B'de bulunan sonuçlar elde edilmiştir. Kullanılan detaylı yanma mekanizması **Gustavsson ve Goloviethev (2003)**'den alınmış olup Ek H'de verilmiştir.

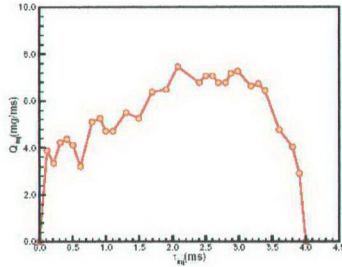
Tablo 7.2 Model değişkenleri

Sabit Hacim Model Değişkenleri			
Strok	9 cm	Türbülans Modeli	$k-\varepsilon$
Çap	4 cm	Tke	1000
Dr	0.04 cm	Scli	1
Dz	0.1 cm	Yakıt (C ₁₄ H ₂₈)	6 mg
Basınç	50 bar	Yanma Modeli	PaSR
Sıcaklık	800 K	Smr	0.005cm
Yakıt püskürtülme süresi	$1.25 \cdot 10^{-3}$ sn	Parçalanma Modeli	TAB

Literatürde bulunan sonuçlar ile karşılaştırma yapılması amacıyla 21 mg n-Heptan'ın Tablo 7.3'deki giriş verileri ve Şekil 7.7'deki gerçek püskürtme debileri ile **Tao ve diğ.(2001)**'de verilen sayısal sonuçlar, Şekil 7.9'da gösterilmiştir.

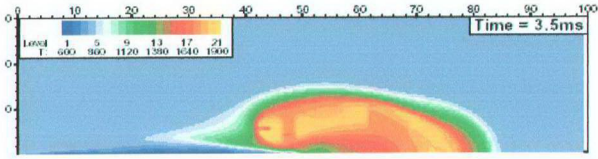
Tablo 7.3 : 21 mg n-Heptan için giriş verileri [**Tao ve diğ.(2001)**]

Püskürtme süresi	4 ms
Damlacık giriş sıcaklığı	350 K
Püskürtme açısı	22.5
Damlacık SMR	0.1 mm
Enjektör delik çapı	0.2 mm
Başlangıç sıcaklığı	800 K
Başlangıç basıncı	50 bar
Tke	1000
Scli	1

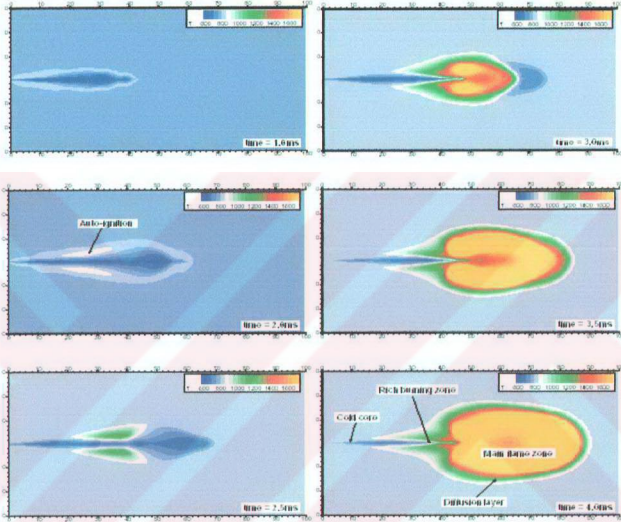


Şekil 7.7: 21 mg n-Heptan için gerçek püskürtme debisi[**Tao ve diğ.(2001)**]

Sonuçlar incelendiğinde maksimum sıcaklık 1600 K civarında olduğu görülmekte, fakat aynı makalede hacimsel olarak %21 O₂ bulunan yanma odası içerisinde elde edilen sıcaklığın 1900 K'e kadar çıktığı belirtilmektedir, Şekil 7.8.

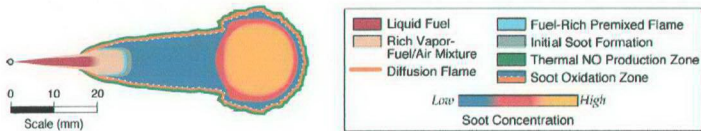


Şekil 7.8: Başlangıç şartı olarak %21 O₂ ile elde edilen sıcaklık dağılımı [Tao ve diğ.(2001)]



Şekil 7.9: Tao ve diğ.(2001)' de 21 mg n-Heptan için elde edilen sonuçlar

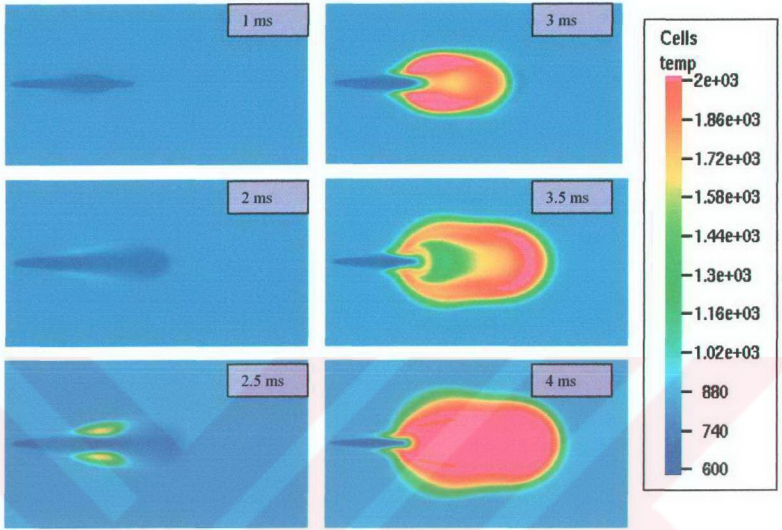
Tablo 2.2'deki veriler, ağ yapısı hakkında ve silindir içerisindeki O₂ miktarı hakkında bilgi vermemektedir. Tez kapsamında 0.4 x 1 mm ağ boyutları ve %21 O₂ miktarı ile elde edilen sonuçlar birbirine oldukça yakındır Şekil 7.11.



Şekil 7.10 Dizel yakıtı demetinin yanma modeli Dec (1997)

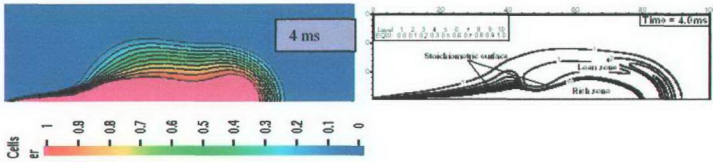
Bir çok araştırmacı tarafından yakıt demetinin yanması ile elde edilen sonuçlar, yaygın olarak kabul görmüş olan Dec (1997) yanma modeli ile karşılaştırılmaktadır.

Şekil 7.11’de elde edilen sonuçlar **Dec (1997)**’de verilen yanma modeli ile oldukça uyumludur.



Şekil 7.11: 21 mg n-Heptan için elde edilen sayısal sonuçlar

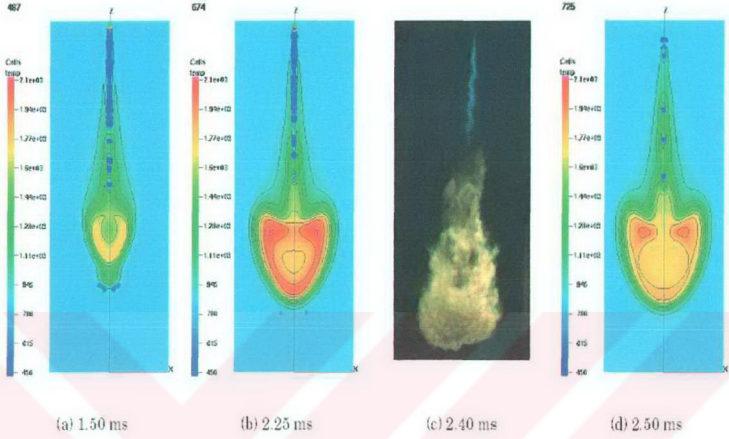
Püskürtme başlangıcından 2 ms sonra yakıt hava oranının 1 olduğu bölgede tutuşma başlamaktadır. Fakat kendiliğinden tutuşmanın başlaması ağ yapısı, başlangıç sıcaklık ve basıncı, kullanılan kimyasal reaksiyon mekanizmaları, türbülans parametreleri, püskürtme açısı ve debisi gibi birçok parametreye bağlı olarak değişmektedir. Yakıtın püskürtülmesinden 4 ms sonra elde edilen yakıt hava karışım oranı ise Şekil 7.12’de görülmektedir. Şeklin sağ tarafında Tao tarafından elde edilen yakıt hava oranı görülmektedir. Zengin karışım orta bölgededir.



Şekil 7.12 : $t = 4 \text{ ms}$ ’de yakıt hava karışım oranı ($1/\lambda$).

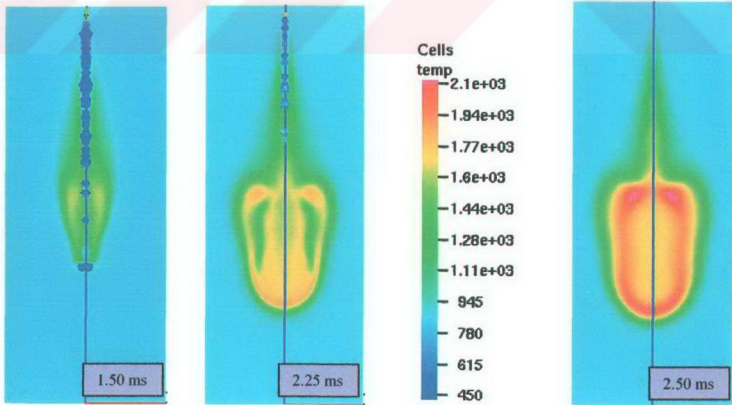
Bir diğer karşılaştırma ise Şekil 7.13 ve Şekil 7.14’te verilmiştir. Şekil 7.13’te verilen sonuçlar, **Golovitchev ve diğ.(2003)**’den alınmış olup bu makalede sabit

hacim deneyi için başlangıç şartları olarak sadece sıcaklık (823 K), basınç (60 bar), püskürtme süresi ($t=2.3$ ms) ve püskürtülen yakıt miktarı (30 mg) verilmiştir. Dizel yakıtı kullanılan bu deneyde gerçek yanma fotoğrafı ile karşılaştırma yapılmaktadır.



Şekil 7.13: $P_0=60$ bar $T_0=823$ K’de yapılan deney sonuçları. Golovitchev ve diğ.(2003)

Yapılan çalışmada diğer büyüklükler tahmini olarak alınmış olup bu makale ile uyuşan en yakın sonuç 15 mg püskürtülerek elde edilmiştir. Karşılaşılan en büyük problem yakıtın püskürtme debisi ve enjektör delik çapının bilinmemesidir.



Şekil 7.14: 15 mg C14H28 ile elde edilen sayısal sonuçlar.

7.2 Dizel Motor Modeli Sayısal Sonuçları

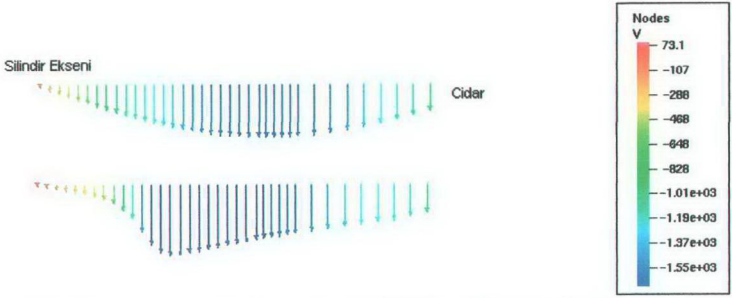
Sabit hacim modelleri iki boyutta yapılmasına karşın dizel motor modelleri üç boyutta yapılmıştır. Bunun nedeni, çok delikli enjektör kullanıldığında, motor modellerinin θ yönünde simetrik olmamasıdır. Genelde çok delikli enjektörler kullanılan modellerde, kullanılan enjektörün delik sayısına bağlı olarak, 360^0 'lik hacim delik sayısına bölünerek elde edilen tek bir hacim modellenmektedir.

Ele alınan NHDD motorunun deney sonuçları ile sayısal sonuçlarının karşılaştırılması bu bölümde yapılacaktır. 6 silindirli ve 270 BG'nde olan bu motorun genel özellikleri Tablo 7.4'de verilmiştir. Kullanılan enjektör 8 delikli olduğundan sadece bir deliği temsil eden 45^0 'lik hacmin modellenmesi yeterli olacaktır. Emme ve egzoz sistemi bu tez kapsamında ele alınmamış olup yanma odası içerisinde emme kanalının yapısından kaynaklanan çevresel hava hareketi başlangıç şartı olarak alınmaktadır.

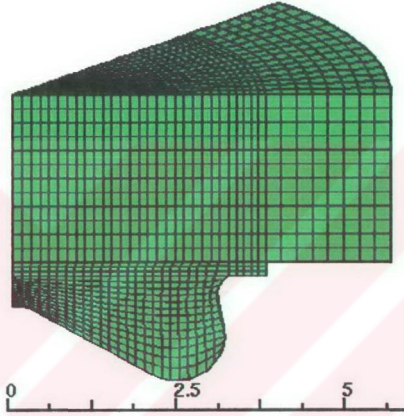
Tablo 7.4 : Modellenen 4 zamanlı dizel motorunun genel özellikleri

Silindir sayısı	6	Rolanti devri	600 rpm
Silindir çapı	112 mm	Maksimum devir	3150 rpm
Strok boyu	224 mm	Yakıt sistemi	Common-rail
Motor hacmi	7330cm ³	Emme valfi açılışı	28° KMA ÜÖNÖ
Sıkıştırma oranı	18:1	Emme valfi kapanışı	42° KMA AÖNS
Maksimum güç	220.7 kw (2200 rpm)	Egzoz valfi açılışı	59° KMA AÖNÖ
Maksimum tork	750 Nm (1495 rpm)	Egzoz valfi kapanışı	27° KMA ÜÖNS

Sayısal modelde, 0^0 KMA ÜÖN olarak alınmaktadır. Emme valflerinin kapanışı - 138^0 KMA (ÜÖNÖ) olduğundan sayısal çözüm bu krank açısından başlamaktadır. Emme ve egzoz valflerinin altında kalan ve segmanların üstünde kalan bir takım ölü hacimler sıkıştırma oranı aynı kalacak şekilde ölü hacim yüksekliğine dahil edilmiştir. Modelde ölü hacim yüksekliği 0.204 mm olarak alınmıştır. Çevri profili için ise içten yanmalı motorlar için, silindir cidarında belirli bir hıza sahip olan ve Bessel fonksiyonu kullanılarak belirlenen $\alpha=3.11$ (α : Boyutsuz hız profili katsayısı) hız profili kullanılmıştır **Amsden (1989)**. Ele alınan 45^0 'lik geometrik model Şekil 7.14'te, çevri oranı 1.7 olarak alındığında - 138^0 ve - 10 KMA'da radyal yönde oluşan hız vektör büyüklükleri Şekil 7.15'te ve ağ yapısı Şekil 7.16'da görülmektedir.



Şekil 7.15 Çevri oranı 1.7 iken radyal yöndeki hız vektörünün değişimi (cm/s)



Şekil 7.16 Ağ yapısı, piston tacında 29x15x16 ve silindir kısmında 37x15xZ ile elde edilmiştir.

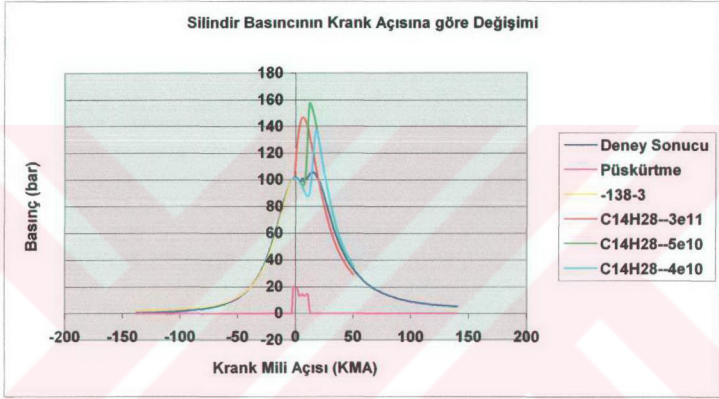
Farklı ağ yapılarının etkisini incelemek için yapılan çalışma Ek C'de verilmiştir. Ağ yapısında kullanılan hücre sayısı arttıkça çözüm süresi uzamaktadır.

Ele alınan dizel motorda, yanma odası içerisinde sıkıştırma sonu basınç ve sıcaklık için yanma olmadan elde edilen değerler, deneysel sonuçlarla oldukça uyumludur. Fakat yanma olayının başlaması ile kullanılan yanma modellerine bağlı olarak deneysel sonuçlardan farklı sayısal sonuçlar elde edilmiştir.

7.2.1 Tek Basamaklı Yanma Reaksiyonu ile Elde Edilen Sonuçlar

Deneysel sonuçlarla uyumlu neticelerin elde edilebilmesi için bir çok farklı giriş parametreleri ile denemeler yapılmıştır. Silindir içerisinde açığa çıkan ısı miktarı üzerinde en önemli etkenlerden biri de yanma mekanizmasıdır. Orjinal KIVA-3V

kodunda tek basamaklı yanma mekanizması verildiğinden tez çalışmalarına ilk önce bu yanma mekanizması ile başlanmıştır. Yakıt, 1850 rpm devirde, tam yükte, -3 krank mili açısında (ÜÖNÖ) püskürtülmeye başlamaktadır. 16 krank mili boyunca 0,091 gr yakıt püskürtülmektedir. 0.130 mm çapında enjektör deliğinden püskürtülen yakıt debisi profili Şekil 7.17’da görülebilir. Bölüm 6’da verilen tek basamaklı yanma mekanizması ile elde edilen neticeler aşağıda verilmiştir. Motor modellerinde TAB parçalanma modeli ve k-ε türbülans modeli kullanılmıştır. Silindir cidarlarının 500 K sıcaklığında olduğu varsayılmıştır.

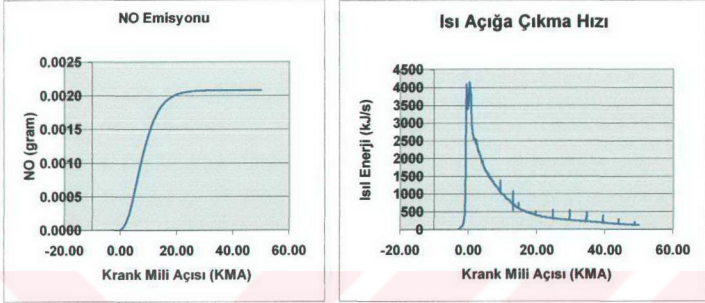


Şekil 7.17: Tek basamaklı yanma reaksiyonu ile tam yükte değişik çarpışma frekansı katsayıları ile basıncın krank açısına göre değişimi

Yanma mekanizmasının çarpışma frekansı katsayılarının, farklı mesh yapısına göre değiştiği **Amsden, (1993)**'te belirtilmiştir. Sonuçlar incelendiğinde farklı çarpışma frekansı katsayıları ile deneysel sonuçlara uygun çözümlerin elde edilemediği görülmektedir. Önerilen çarpışma frekansı katsayısı 3×10^{11} 'dir. Kırmızı çizgi ile gösterilen bu değer azaltıldığında yanma daha geç başlamakta, fakat bu süre içerisinde biriken yakıt buharının ani olarak yanması ile büyük bir basınç farkı ortaya çıkmaktadır. Daha düşük değerlerde ise yanma olmamakta ve yakıt demetinin piston cidarında birikmesi ile program hata vererek çalışmamaktadır.

Burada belirtilmesi gereken bir diğer nokta ise yanmanın başlaması ile elde edilen sıcaklıkların adyabatik yanma sıcaklığına çok yakın olmasıdır. Tam yükte sıkıştırma işlemi sonunda silindir içerisindeki basınç 102 bar ve sıcaklık 950°K 'dir. Farklı krank açılarında elde edilen sıcaklık dağılımı Ek D'de verilmiştir.

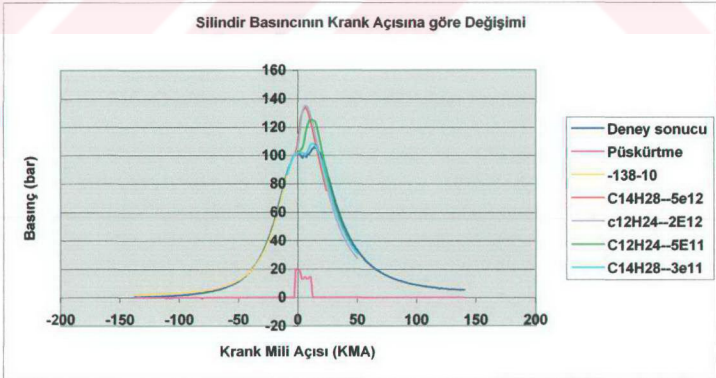
NO emisyonu açısından ise önerilen çarpışma frekansı katsayısı ile tam yükte elde edilen değerler deneysel sonuçtan %16,8 daha azdır. Deneysel sonuca göre tam yükte NO emisyonu 0,00250 gramdır. Şekil 7.18’de NO emisyonu ve tek basamaklı reaksiyon ile elde edilen ısıl enerjinin krank açısına göre değişimi (ısı açığa çıkma hızı) görülmektedir.



Şekil 7.18: Tek basamaklı yanma reaksiyonu ile tam yükte NO emisyonu ve ısıl enerji

7.2.2 Detaylı Yanma Mekanizması ile Elde Edilen Sonuçlar

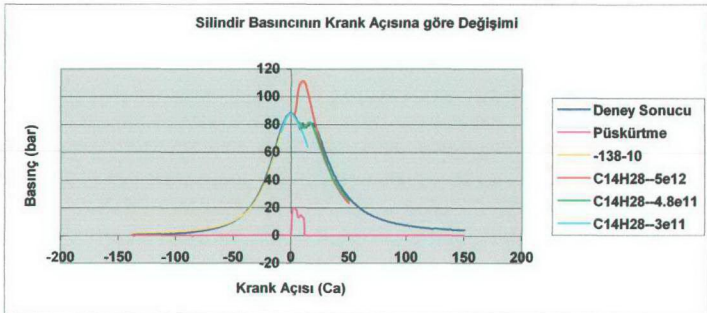
Detaylı yanma mekanizması, yanma olayının modellenmesi açısından daha uygundur. İleride is emisyonu ve değişik yanma modellerinin analizi düşünüldüğünden bu tez kapsamında çoğu sayısal sonuç, detaylı yanma mekanizması kullanılarak elde edilmiştir. Çeşitli denemeler ile 1850 rpm devir ve %100 yükte sayısal sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması Şekil 7.19’da verilmektedir.



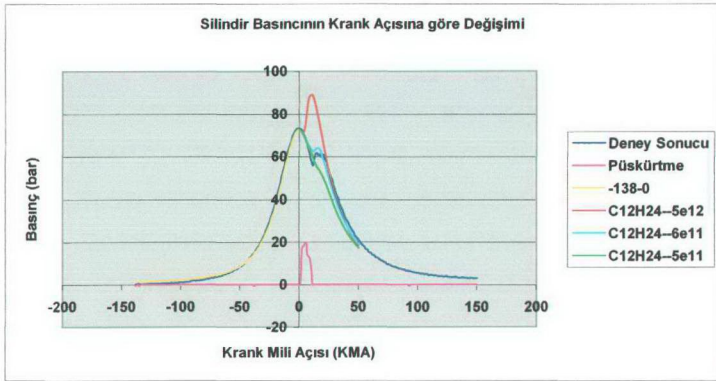
Şekil 7.19: Tam yükte değişik çarpışma frekansı katsayıları ile basıncın krank açısına göre değişimi

Yanma mekanizması sabit hacim deneylerinde kullanılan detaylı mekanizma ile aynıdır (Ek H). **Gustavsson ve Golovicthev (2003)**' de kullanılmış olan bu mekanizma ile elde edilen değerlerin deneysel sonuçlar ile uygun olmaması, silindir sonu sıcaklık ve basıncın ilgi makalede kullanılan değerlerden farklı olmasından ileri geldiği düşünülmektedir. Ek H'de verilen yanma mekanizmasında yakıtı ayrıştıran ilk beş reaksiyon global reaksiyonlar olarak tanımlanmaktadır. Diğer reaksiyonlar ise n-heptan'ın kinetik yanma mekanizmasını oluşturmaktadır. İlk global reaksiyon dizel yakıtını ($C_{12}H_{24}$) C_7H_8O ve H_2O 'ya ayırmaktadır. Bu reaksiyonun çarpışma frekansı katsayısı değiştirilerek yakıtın daha geç parçalanması sağlanmaktadır. İstenilen tutuşma gecikmesi süresi sonunda sayısal sonuçların deneysel sonuçlara en uygun olduğu çarpışma frekansı katsayısının 3×10^{11} olduğu görülmektedir. **Gustavsson ve Golovicthev (2003)**'da ise bu katsayının değiştirildiğine dair bir bilgi bulunmamakta ve çarpışma frekansı katsayısı 5×10^{12} olarak verilmektedir. Bu fark, modellerin fiziğinin farklılığından (ağ yapısına bağlı olarak buharlaşma ve karışma) kaynaklanıyor olabilir.

Kısmi yükte aynı ağ yapısı ile elde edilen sayısal sonuçlar ve deneysel sonuçlar ise Şekil 7.20 ve Şekil 7.21 de verilmiştir. %80 yükte 12 krank mili açısı boyunca 0,072 gr, %60 yükte ise 9 krank mili açısı boyunca 0,051 gr yakıt püskürtülmektedir. %80 ve %60 yükte çarpışma frekansı katsayısı sırasıyla 4.8×10^{11} ve 6×10^{11} olduğunda deneysel sonuca yaklaşılmaktadır. Dikkat edilecek olursa silindir sonu basınç azaldıkça deneysel sonuca uygun olan çarpışma frekansı değeri artmaktadır. Bu da ilk parçalanmayı simüle eden reaksiyonun çarpışma frekansı katsayısının, aslında buharlaşma ve karışmayı da içermekte olduğu izlenimini kuvvetlendirmektedir.



Şekil 7.20: %80 yükte değişik çarpışma frekansı katsayıları ile basıncın krank açısına göre değişimi



Şekil 7.21: %60 yükte değişik çarpışma frekansı değerleri ile basıncın krank açısına göre değişimi

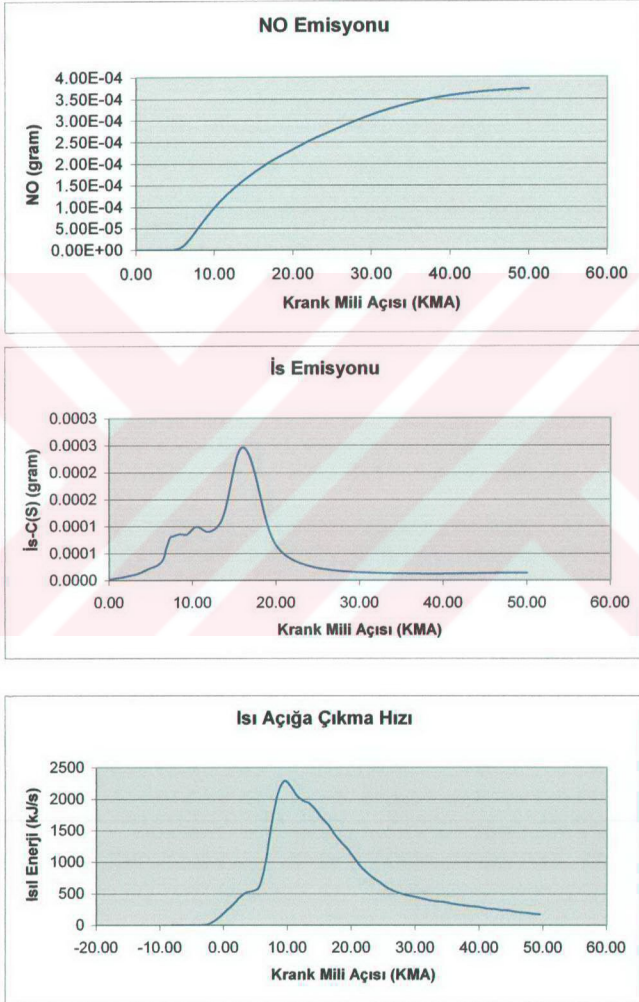
Detaylı mekanizma ile elde edilen sonuçlarda dikkati çeken bir değişim, silindir içerisinde elde edilen maksimum sıcaklıkta görülmektedir. Silindir içerisindeki maksimum sıcaklık tek basamaklı yanma mekanizması ile 2850 K'i bulurken detaylı mekanizma ile 2300 K'i geçmemektedir. Tek basamaklı yanma mekanizması kütle ve ısı transferi açısından yanma olayının fizikini tam yansıtmamakta ve erişilen sıcaklıklar adyabatik yanma sıcaklıklarına yaklaşmaktadır. Farklı krank açılarında detaylı mekanizma ile elde edilen sıcaklık dağılımı Ek E'de verilmiştir.

Emisyonlar açısından ise detaylı mekanizma NO emisyonunu, deneysel sonuçların çok altında hesaplanmaktadır. Bunun nedeni olarak, silindir içerisinde elde edilen düşük sıcaklık dağılımı gösterilebilir. NO emisyonunun alt-grid bazında daha yüksek sıcaklıklarda oluştuğu ve grid bazında sıcaklıkların düştükçe denge değerine ulaştığı düşünülmektedir. Daha önce de belirtildiği gibi kullanılan NO mekanizması genişletilmiş Zeldovich mekanizmasıdır. Tam yükte NO ve is emisyonları ile açığa çıkan ısı enerjisi Şekil 7.22'de verilmektedir.

Deneysel sonuçlar ile tam yükte 0.00250 gr NO ve 1.64×10^{-5} gr is emisyonu elde edilmiş olmasına rağmen sayısal sonuçlar ile 0.000374 gr NO ve 1.31×10^{-5} gr is elde edilmiştir. Bu sayısal sonuçlar 50 KMA'da alınmıştır.

Dizel motor geometrik modelinin oluşturulduğu K3PREP ve sayısal çözümlerin elde edildiği KIVA3V kodları için giriş verilerini içeren, "iprep" ve "itape5" dosyaları Ek I ve Ek J'de, detaylı kimyasal yanma mekanizmasını içeren reaksiyonların

bulunduđu “chem” dosyası ise Ek H’de verilmiřtir. NO emisyonundaki hatalı sonucu düzeltmek üzere farklı bir NO mekanizması kullanılarak, deęiřik yüklerde elde edilen sayısal çözümler Ek G’de verilmiřtir. Ek G’de elde edilen sayısal çözümler 119 KMA ya kadar çalıştırılarak elde edilmiřtir



Şekil 7.22: Detaylı yanma mekanizma ile tam yükte NO, is emisyonu ve ısı enerjisi

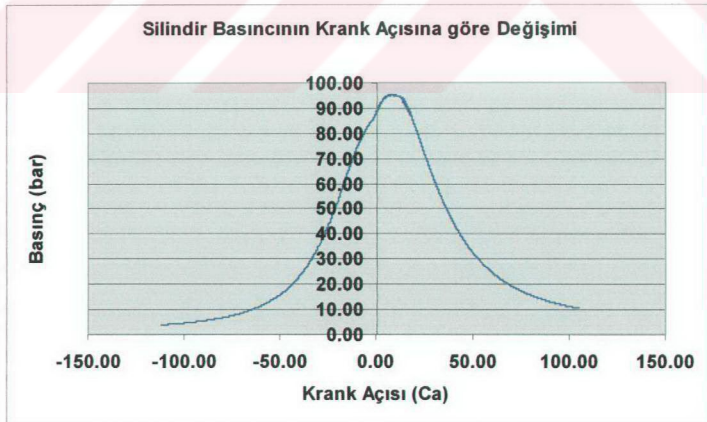
7.2.2 MTU 396 TB 63 Motoru ile Elde Edilen Sonuçlar

Gemi yardımcı makinası olarak kullanılan bu motorun genel özellikleri Tablo 7.5’ de verilmiştir. 5 delikli enjektör kullanılan motorda, geometrik model için 72⁰’lık açı modellenmiştir.

Tablo 7.5 : MTU 396 TB 63 motorunun genel özellikleri

Silindir sayısı	16	Yakıt tüketimi	212 gr/Kw-saat
Silindir çapı	165 mm	Maksimum devir	2100 rpm
Strok boyu	185 mm	Emme valfi açılışı	28 ⁰ KMA ÜÖNÖ
Motor hacmi	62600cm ³	Emme valfi kapanışı	42 ⁰ KMA AÖNS
Sıkıştırma oranı	12:1	Egzoz valfi açılışı	59 ⁰ KMA AÖNÖ
Güç	650 Kw (1650 rpm)	Egzoz valfi kapanışı	27 ⁰ KMA ÜÖNS

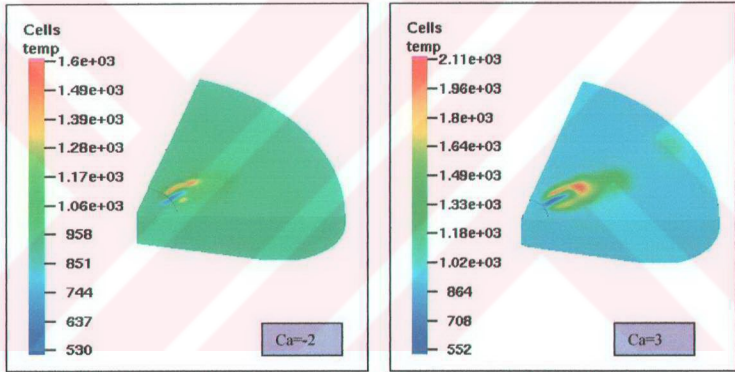
350 mg yakıt, -10 krank mili açısında (ÜÖNÖ) püskürtülmeye başlamakta ve 22 krank mili açısı boyunca püskürtülmektedir. Modelde yakıt 0.4 mm çapında enjektör deliğinden püskürtülmektedir. Enjektör deliğinin kesit alanında, yakıt demetinin hızı 200-400 m/sn arasındadır. Püskürtme esnasında silindir içerisindeki ortalama sıcaklık 870 K, basınç 75 bar’dır. Çevri oranı 0,4 olarak alınmıştır. Krank açısına bağlı olarak basınç değişimi için elde edilen sayısal sonuç Şekil 7.23’de gösterilmiştir.



Şekil 7.23: MTU motorunda silindir basıncının değişimi

MTU motor modelinde diğer dizel motorunda olduğu gibi Ek H'deki detaylı mekanizma kullanılmıştır. **Gustavsson ve Golovicthev (2003)**'de kullanılan reaksiyon katsayıları değiştirilmeden elde edilen modelde, sıkıştırma oranı düşük olduğundan, püskürtme esnasındaki basınç ve sıcaklık miktarı da düşük olmaktadır. Bununla birlikte yakıt demetinin enjektör deliği kesit alanındaki hızları da diğer motor modeline göre daha düşüktür. Yakıt demetinin buharlaşma sürecini etkileyen bu parametreler yanma mekanizmasında kullanılan reaksiyon katsayılarını da etkilemektedir.

Yakıtın püskürtülmesi ile -2 ve 3 KMA'da, piston tacında elde edilen sıcaklık dağılımı Şekil 7.24'de, diğer krank açılarındaki sıcaklık dağılımları ise Ek F'de verilmiştir.



Şekil 7.24: -2 ve 3 krank açılarında yakıt demeti civarında sıcaklık dağılımı

MTU motor modeli piston tacında $r \times \theta \times z$ yönlerinde $49 \times 18 \times 22$ hücre silindirik bölümünde $59 \times 18 \times 25$ hücre kullanılarak elde edilmiş olup çözüm için geçen süre 18.2 saat'tir.

7.3 Değerlendirme ve Öneriler

Yapılan bu çalışmada dizel motorlarda karışım oluşumu ve yanma modellenmiş ve deneysel sonuçlar ile uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Karışım oluşumunun modellenmesinde, oluşturulan ağ yapısının yakıt demeti modeli üzerinde büyük bir etkisinin olduğu gözlenmiştir. Ağ yapısı için her modelde çalışan bir grid

boyutlarının önerilmesi mümkün olmasa da, tez kapsamında yapılan çalışmalarda ve literatürde yayınlanmış olan modellerde, grid boyutları 0,25-2 mm aralığında değiştiği görülmüştür. Yapılan her model için ayrı bir grid çalışmasının yapılması gereklidir. Yakıt demetinin parçalanma modeli için TAB modelinin daha uygun sonuçlar verdiği gözlenmiştir.

PaSR modelinin dizel yakıt demetinin yanması için daha uygun olduğu gözlenmiştir. Bu model ile sıcaklıkların adyabatik alev sıcaklığından çok düşük olması sebebi ile deneysel NO_x emisyon değerlerine uygun olan sayısal sonuçlar Zeldovich mekanizması kullanılarak elde edilememiştir. Zeldovich mekanizması, alev sıcaklığının yüksek olduğu tek basamaklı yanma mekanizması ile kullanıldığında istenilen NO_x emisyon değerlerini vermektedir.

Bu tezde kullanılan yanma mekanizmasının, istenilen tutuşma gecikmesini sağlayabilmesi için yakıtın enjektörden çıkış hızı 200-450 m/s, yanma odası sıcaklığı 850-900 K ve basıncının 50-60 bar arasında olması gerekmektedir. Daha yüksek değerler, tutuşma gecikmesini kısalttığı için hatalı sonuçların elde edilmesine yol açmaktadır. Bu yüzden, kullanılan detaylı yanma mekanizmada yakıtın parçalanmasını sağlayan ilk reaksiyonların çarpışma frekansı katsayıları değiştirilmiştir. Böyle bir değişim, doğal olarak, diğer tüm reaksiyonları etkilemektedir.

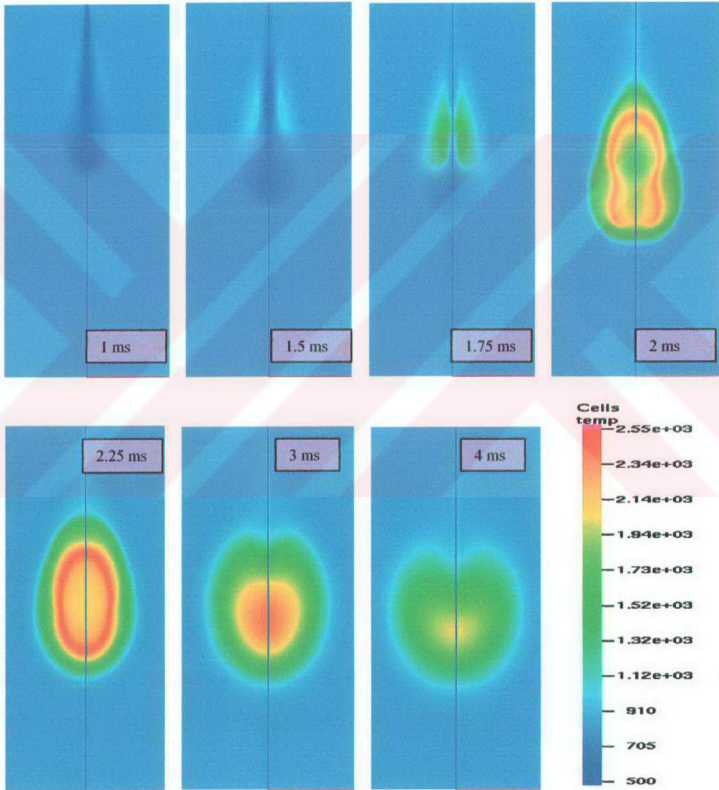
KAYNAKLAR

- Amsden, A.A.**, 1997. KIVA-3V: A Block Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves, Los Alamos National Laboratory, New Mexico.
- Amsden, A.A.**, 1993. KIVA-3: A KIVA Program with Block Structured Mesh for Complex Geometries, Los Alamos National Laboratory, New Mexico.
- Amsden, A.A., O'Rourke, P.J. and Butler, T.D.**, 1989. KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays, Los Alamos National Laboratory, New Mexico.
- Anderson, J.D.**, 1989. Computational Fluid Dynamics, McGraw-Hill Book Company, New York.
- Bedford, F.C.**, 2001. Modeling Production and Abatement of Nitrogen Oxide Pollutants in Direct Injection Diesel Engines, PhD Thesis, University of Wisconsin, Madison.
- Dec, J.E.**, 1997. A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging, SAE Paper, 970873.
- Gustavsson, J. and Golovitchev V.I.**, 2003. Spray Combustion Simulation Based on Detailed Chemistry Approach for Diesel Fuel Surrogate Model, SAE Paper, 2030137.
- Golovitchev V.I., Atarashiya, K., Tanaka, K. and Yamada, S.**, 2003. Towards Universal EDC-Based Combustion Model for Compression Ignited Engine Simulations, JSAE, 20030181.
- Heywood, J.B.**, 1988. Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill Book Company, New York
- Magnussen, B.F.**, 1989. The Eddy Dissipation Concept, The Leaders Meeting (Subtask 3.1.C), Lund, Sweden.
- Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H.**, 1976. On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion, 16th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 719-729.
- Nordin, N.**, 2001. Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion, PhD Thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg.
- Kuo, K. K.**, 1986. Principles of Combustion, John Wiley & Sons Inc., New York.
- Peters, N.**, 2000. Turbulent Combustion, Cambridge University Press, Cambridge.

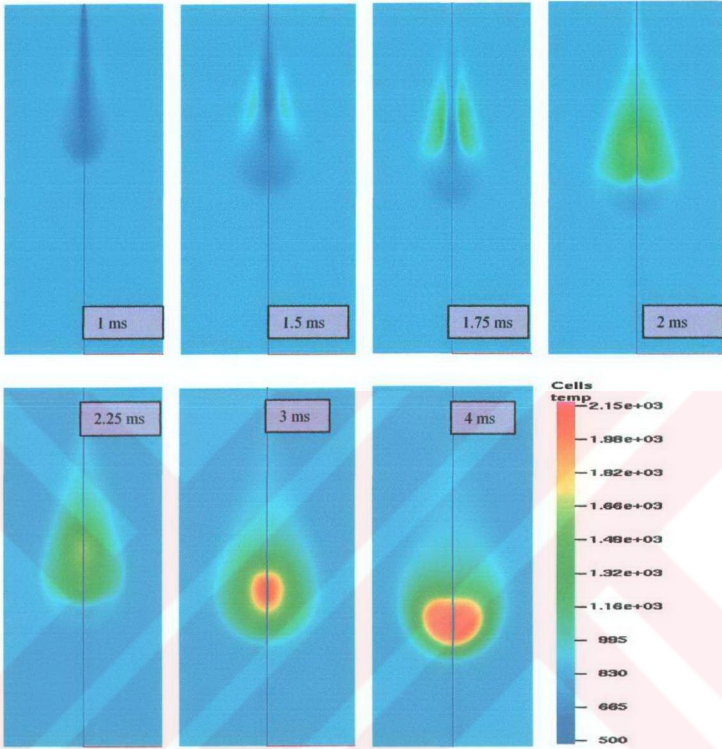
- Peters, N.**, 1999. The Turbulent Burning Velocity for Large-scale and Small-scale Turbulence, *Journal of Fluid Mechanics*, **384**, 107-132
- Ramos, J.I.**, 1989. Internal Combustion Engine Modeling, Hemisphere Publishing Corporation, New York.
- Soruşbay, C.**, 1998, Diesel Motorlarında Karışım Oluşturulması Yüksek Lisans Ders Notları, İTÜ Makine Fakültesi, İstanbul
- Safgönül, B., Ergeneman M., Arslan, H.E. and Soruşbay, C.**, 1999. İçten Yanmalı Motorlar, Birsen Yayınevi, İstanbul.
- Sonntag, R. E., Borgnakke C. and Van Wylen, G.J.**, 2003. Fundamentals of Thermodynamics, John Wiley & Sons Inc., New York.
- Spalding, D. B.**, 1971. Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames, 13th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 649-657.
- Tao, F.**, 2003. Numerical Modeling of Soot and NOx Formation in Non-Stationary Diesel Flames with Complex Chemistry, PhD Thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg.
- Tao, F., Golovitchev, V.I. and Chomiak, J.**, 2001. Application of Complex Chemistry to Investigate the Combustion Zone Structure of DI Diesel Sprays under Engine-Like Conditions, Proceedings of COMODIA, Nagoya, Japan.
- Versteeg, H.K. and Malalasekera, W.** 1995. An Introduction To Computational Fluid Dynamics, Longman, Edinburg.
- Warnatz, J., Maas, U. and Dibble, R.W.**, 1996. Combustion, Springer Verlag, Berlin.
- Yüksel, Y.**, 2000. Teori ve Çözümlü Problemler ile Bilgisayar Uygulamalı Akışkanlar Mekaniği ve Hidrolik, Beta Basım Yayım Dağıtım, İstanbul.

EK A

Magnussen-Hjertager modeli ve PaSR modeli ile sabit hacimde yapılan sayısal sonuçlar Şekil A.1'de ve Şekil A.2'de gösterilmiştir. 1.75 ms sonrasında Magnussen-Hjertager modelinde yanma çok hızlı gerçekleşmektedir.



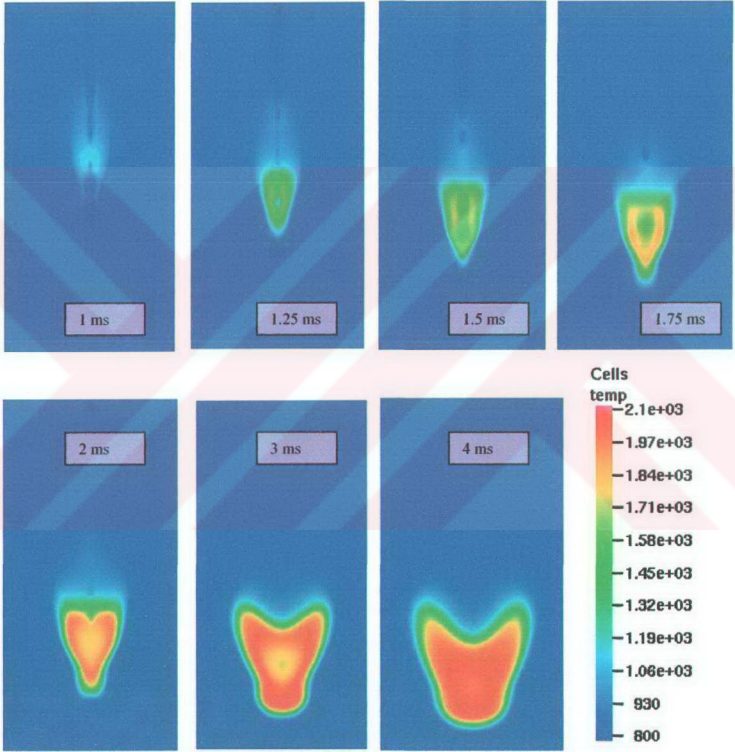
Şekil A.1: Magnussen-Hjertager modeli ile 6 mg C7H16 püskürtülerek elde edilen sayısal sonuçlar.



Şekil A.2: PaSR modeli ile 6 mg C7H16 püskürtülerek elde edilen sayısal sonuçlar.

EK B

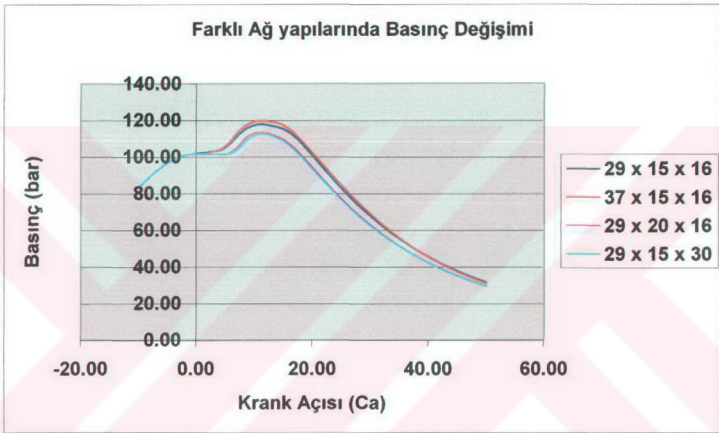
Tablo 7.2’de verilen giriş parametreleri ile 6 mg dizel yakıtının ($C_{14}H_{28}$) kullanıldığı sonuçlar Şekil B.1’de gösterilmiştir.



Şekil B.1: Sabit hacimde 6 mg $C_{14}H_{28}$ ile elde edilen sayısal sonuçlar.

EK C

Dizel motor modelinde farklı ağ yapılarının etkisini incelemek için $r \times \theta \times z$ yönlerinde yapılan değişimin silindir basıncı üzerine etkisi Şekil C.1’de verilmiştir. Bu değişimler piston tacının ağ yapısında yapılmıştır



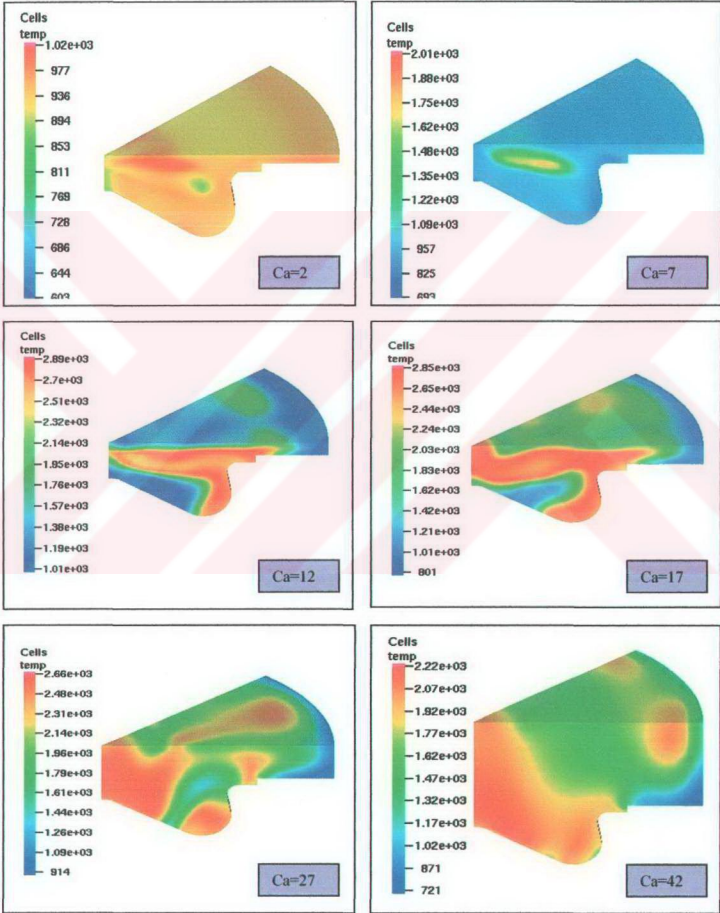
Şekil C.1: Farklı ağ yapıları ile basınç değişimi.

Maksimum basınca bakılacak olursa, hücre boyutlarının r yönünde artırılması ile yaklaşık 2 barlık bir artma, θ yönünde artırılması ile 6 barlık bir azalma, z yönünde artırılması 7 barlık bir azalma gözlenmiştir. Pentium 4 - 2400 GHz işlemci ile elde edilen, çözüm süreleri Tablo C.1’de verilmiştir.

Tablo C.1 : Sayısal çözüm zamanları

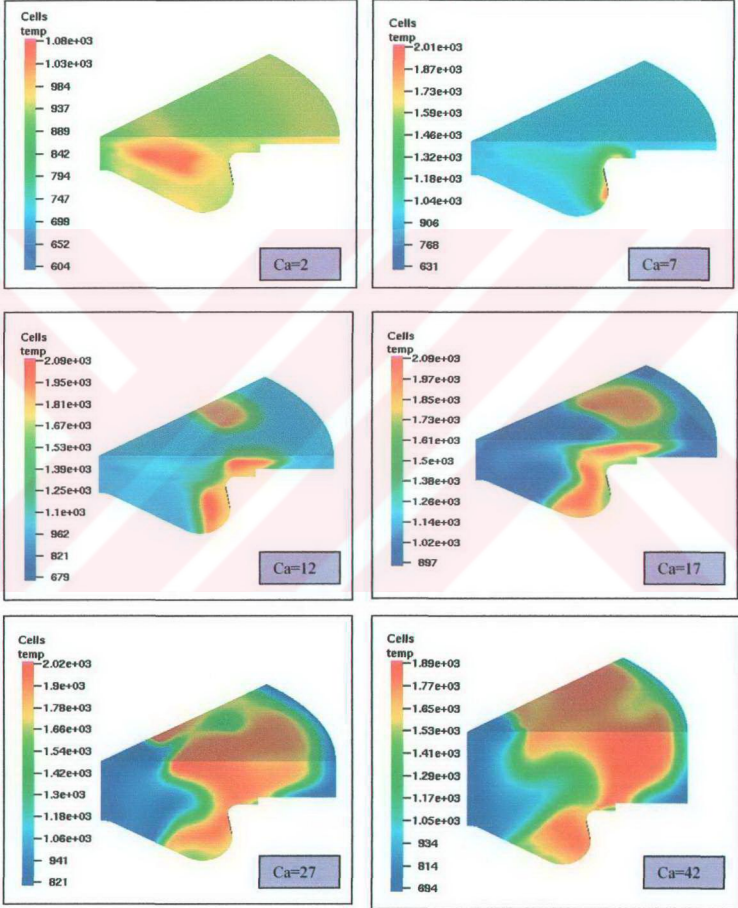
Ağ yapısı ($r \times \theta \times z$)	Zaman (saat)
29 x 15 x 16	10.2
37 x 15 x 16	14.1
29 x 20 x 16	15.2
29 x 15 x 30	13.7

EK D



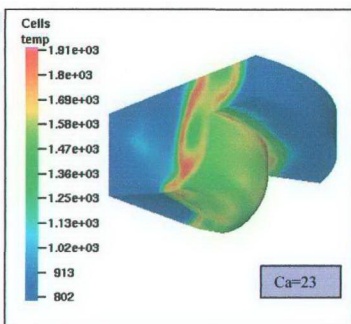
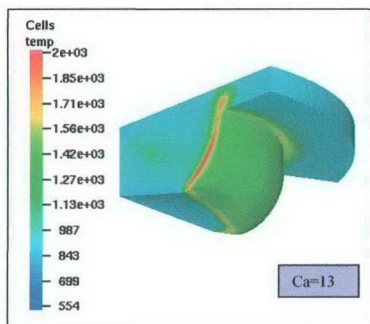
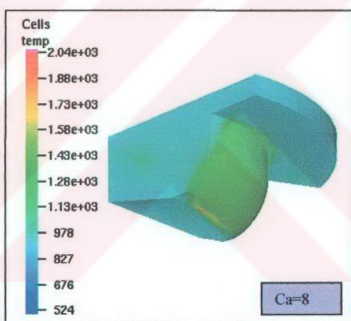
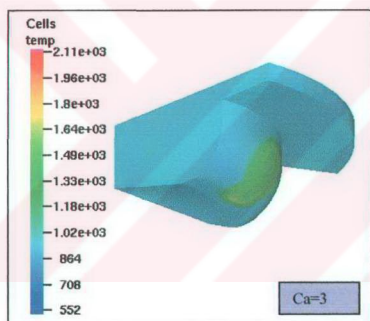
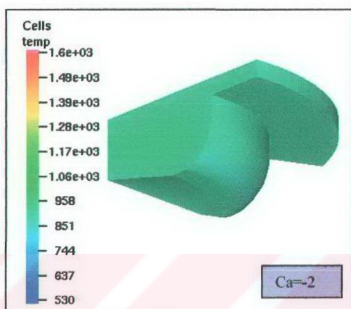
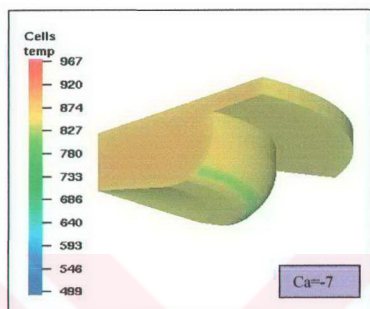
Şekil D.1: Tek basamaklı yanma mekanizması ile elde edilen sıcaklık dağılımı.

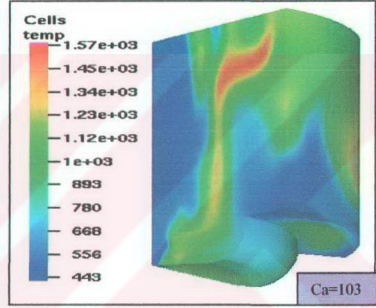
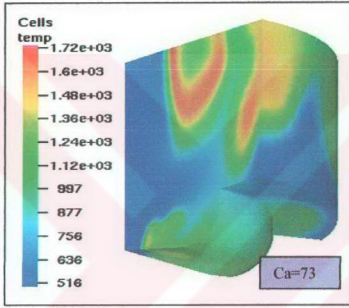
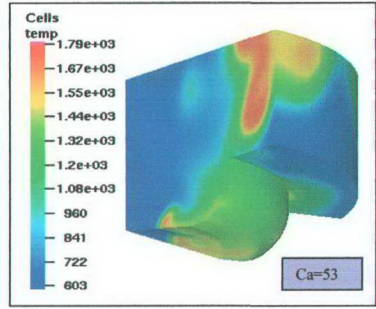
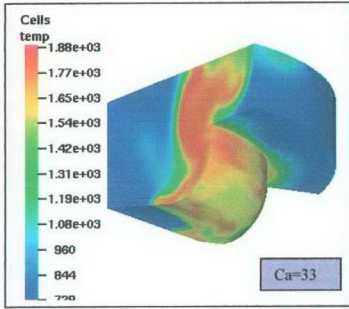
EKE



Şekil E.1: Detaylı yanma mekanizması ile elde edilen sıcaklık dağılımı.

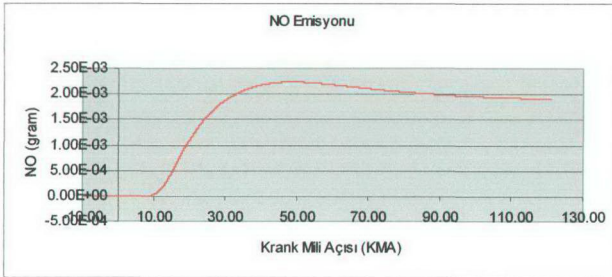
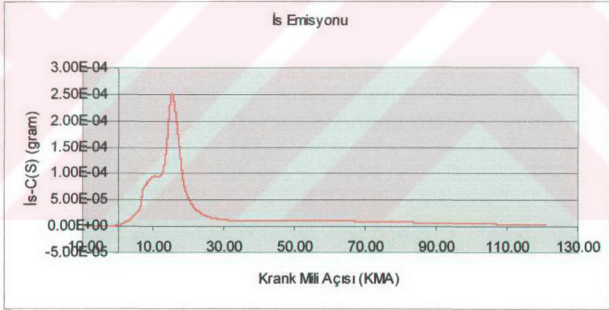
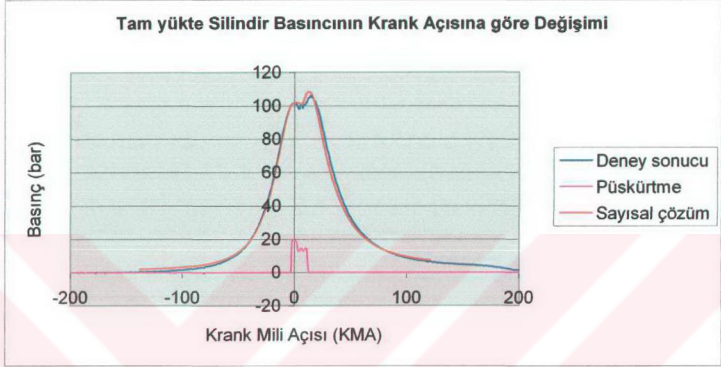
EK F





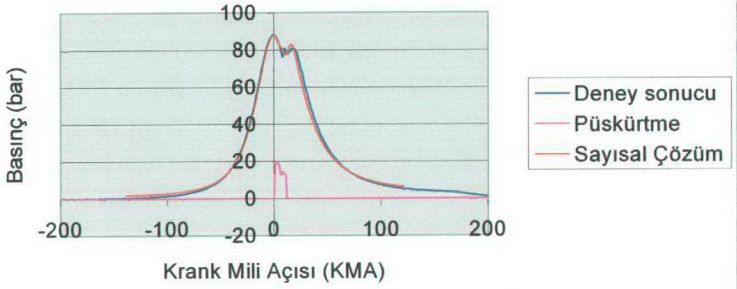
Şekil F.1: MTU motorunda detaylı yanma mekanizması ile elde edilen sıcaklık dağılımı.

EK G

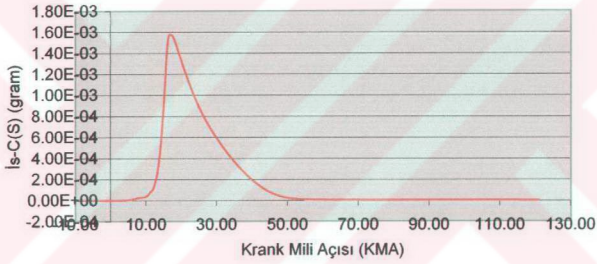


Şekil G.1: NHDD motorunda tam yükte elde edilen değerler.

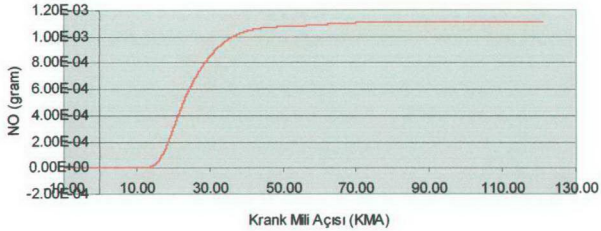
%80 yükte Silindir Basıncının Krank Açısına göre Değişimi



Is Emisyonu

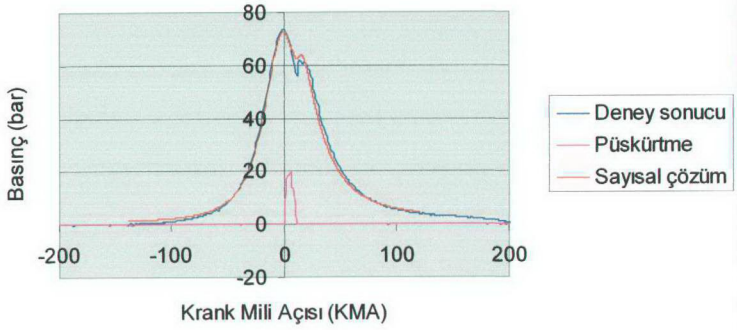


NO Emisyonu

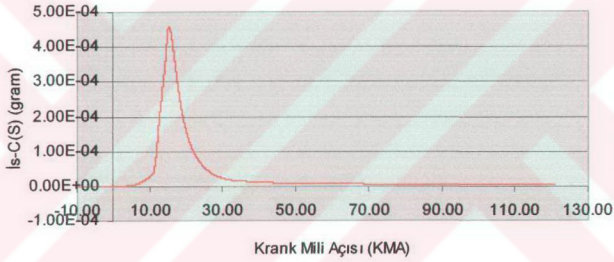


Şekil G.2: NHDD motorunda %80 yükte elde edilen değerler.

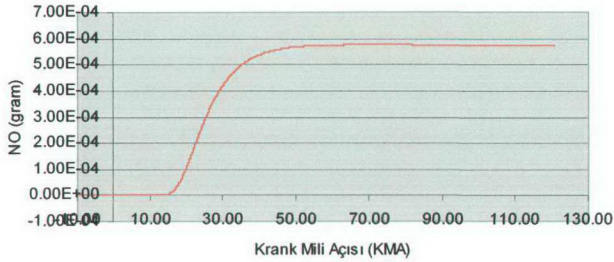
% 60 yükte Silindir Basıncının Krank Açısına göre Değişimi



Is Emisyonu



NO Emisyonu



Şekil G.3: NHDD motorunda %60 yükte elde edilen değerler.

Tablo G.1 : NHDD motorunda elde edilen emisyon değerleri

Tam yük	Deneyisel emisyon sonuçları	Sayısal emisyon sonuçları	% Fark
İs emisyonu	1.64×10^{-5} gr	3.18×10^{-6} gr	80
NO emisyonu	643 ppm	667 ppm	-3.73

%80 yük	Deneyisel emisyon sonuçları	Sayısal emisyon sonuçları	% Fark
İs emisyonu	1.865×10^{-5} gr	9.49×10^{-7} gr	95
NO emisyonu	462 ppm	457ppm	1

% 60 yük	Deneyisel emisyon sonuçları	Sayısal emisyon sonuçları	% Fark
İs emisyonu	1.800×10^{-5} gr	1.39×10^{-6} gr	92
NO emisyonu	307 ppm	285ppm	8

Tablo G.2 : Ek G’de elde edilen değerler için kullanılan NO mekanizması

NO Mekanizması	A	b	E
(1) N + CO ₂ = NO + CO	C 1.900E+11	0.00	3400.0 CGS
(2) N ₂ + O = NO + N	C 1.800E+14	0.00	76100.0 CGS
(3) N + O ₂ = NO + O	C 9.000E+09	1.00	6500.0 CGS
(4) NO + M = N + O + M	C 9.640E+14	0.00	148300.0 CGS
(5) NO + NO = N ₂ + O ₂	C 3.000E+11	0.00	65000.0 CGS
(6) N ₂ O + M = N ₂ + O + M	C 1.300E+13	0.00	51600.0 CGS
(7) N ₂ O + O = N ₂ + O ₂	C 1.000E+14	0.0	28200.0 CGS
(8) N ₂ O + O = NO + NO	C 6.920E+13	0.00	26630.0 CGS
(9) N ₂ O + N = N ₂ + NO	E 1.000E+13	0.00	20000.0 CGS

Tablo G.2 de verilen (6) reaksiyonun NO oluşumu üzerinde etkisinin oldukça yüksek olmakla birlikte ve incelenen makalelerde bu reaksiyon için değişik çarpışma frekansı katsayılarının kullanıldığı görülmüştür. Bu çalışmada (6) reaksiyonunun çarpışma frekansı katsayıları;

tam yük için 8.600E+12,

% 80 yük için 1.300E+13,

% 60 yük için 1.300E+13 olarak alınmıştır.

EK H

Detaylı yanma mekanizmasında kullanılan reaksiyonlar ve reaksiyon katsayıları aşağıda verilmiştir.

Reaksiyonlar			A	b	E
0 C14H28	+ O2	= C7H8O + H2O	G 5.00E+12	0	27000
0 C14H28	+ H2O	= C7H16 + O2	G 5.00E+12	0	28000
0 C7H16	+ O2	= HCO + H2O	G 5.00E+11	0	29300
0 C4H2		= C(S) + H2	G 2.00E+06	0	0
0 A2R5		= C(S) + H2	G 2.00E+03	0	0
1 C7H16	+ O2	= C7H15-1 + HO2	C 4.50E+13	0	48810
2 C7H16	+ O2	= C7H15-2 + HO2	C 3.00E+14	0	47380
3 C7H16	+ H	= C7H15-1 + H2	C 5.60E+07	2	7667
4 C7H16	+ H	= C7H15-2 + H2	C 4.38E+07	2	4750
5 C7H16	+ OH	= C7H15-1 + H2O	C 8.61E+09	1.1	1815
6 C7H16	+ OH	= C7H15-2 + H2O	C 7.80E+09	1.3	690.5
7 C7H16	+ HO2	= C7H15-1 + H2O2	C 8.00E+12	0	19300
8 C7H16	+ HO2	= C7H15-2 + H2O2	C 1.00E+13	0	16950
9 C7H16		= C4H9 + C3H7	C 3.40E+16	0	80710
10 C7H15-1	+ O2	= C7H15O2	C 2.00E+12	0	0
11 C7H15-2	+ O2	= C7H15O2	C 2.50E+12	0	0
12 C7H15O2		= C7H14O2H	C 6.00E+11	0	20380
13 C7H14O2H	+ O2	= C7H14O4H	C 4.00E+11	0	0
14 C7H14O4H		= C7KET21 + OH	C 2.97E+13	0	26700
15 C7KET21		= C5H11CO + CH2O + OH	C 1.05E+16	0	4.24E+04
16 C5H11CHO	+ O2	= C5H11CO + HO2	C 2.00E+13	0.5	4.22E+04
17 C5H11CHO	+ OH	= C5H11CO + H2O	C 1.00E+13	0	0.00E+00
18 C5H11CHO	+ H	= C5H11CO + H2	C 4.00E+13	0	4.20E+03
19 C5H11CHO	+ O	= C5H11CO + OH	C 5.00E+12	0	1.79E+03
20 C5H11CHO	+ HO2	= C5H11CO + H2O2	C 2.80E+12	0	1.36E+04
21 C5H11CHO	+ CH3	= C5H11CO + CH4	C 1.70E+12	0	8.44E+03
22 C5H11CHO	+ CH3O2	= C5H11CO + CH4O2	C 1.00E+12	0	9.50E+03
23 C5H11CO		= C5H11 + CO	C 1.00E+11	0	9.60E+03
24 C5H11		= C2H5 + C3H6	C 3.20E+13	0	28300
25 C7H15-1		= C2H4 + C5H11	C 2.50E+13	0	28810
26 C7H15-2		= CH3 + C6H12	C 3.00E+13	0	29800
27 C6H12		= C3H7 + C3H5	C 1.00E+16	0	68000
28 C6H12		= C3H6 + C3H6	C 1.00E+16	0	68000
29 C7H15-2		= C4H9 + C3H6	C 1.50E+13	0	28600
30 C7H15-1		= C7H15-2	C 2.00E+11	0	18050
31 C4H9		= C3H6 + CH3	C 2.23E+17	-1.4	30830
32 C4H9		= C2H5 + C2H4	C 2.50E+13	0	28810
33 C3H7		= C2H4 + CH3	C 9.60E+13	0	30950
34 C3H7		= C3H6 + H	C 1.25E+14	0	36900
35 C3H7	+ CH3	= C2H5 + C2H5	C 1.90E+13	-0.3	0
36 C3H7	+ O2	= C3H6 + HO2	C 1.00E+12	0	4980
37 C3H7	+ H	= CH3 + C2H5	C 4.06E+06	2.19	890
38 C3H6		= C2H3 + CH3	C 6.25E+15	0	85500
39 C3H6	+ H	= C3H5 + H2	C 5.00E+12	0	1500
40 C3H6	+ CH3	= C3H5 + CH4	C 9.00E+12	0	8480
41 C3H6	+ O2	= C3H5 + HO2	C 4.00E+12	0	39900
42 C3H5	+ HO2	= C2H3 + CH2O + OH	C 1.00E+12	0	0
43 C3H5	+ H	= C3H4 + H2	C 1.00E+13	0	0
44 C3H5	+ O2	= CH3 + CH2O + CO	C 4.00E+12	0	0
45 C3H4	+ OH	= C2H3 + CH2O	C 1.00E+12	0	0

46 C3H4	+ OH	= C2H4	+ HCO	C	1.00E+12	0	0
47 C3H4	+ O2	= C3H3	+ HO2	C	4.00E+13	0	39160
48 CH3O	+ CO	= CH3	+ CO2	C	1.57E+14	0	11800
49 CH3O	+ H	= CH2O	+ H2	C	2.00E+13	0	0
50 CH3O	+ H	= CH3	+ OH	C	1.00E+14	0	0
51 CH3O	+ OH	= CH2O	+ H2O	C	5.00E+12	0	0
52 CH3O	+ O	= CH2O	+ OH	C	1.00E+13	0	0
53 CH3O	+ O2	= CH2O	+ HO2	C	4.28E+13	7.6	-3530
54 CH3O		= CH2O	+ H	C	3.00E+12	0	27420
55 CH3O2	+ HO2	= CH4O2	+ O2	C	4.63E+11	0	-2583
56 CH3O2	+ CH4	= CH4O2	+ CH3	C	1.81E+11	0	18480
57 CH3O2	+ CH3	= CH3O	+ CH3O	C	2.41E+13	0	0
58 CH3O2	+ O	= CH3O	+ O2	C	3.61E+13	0	0
59 CH3O2	+ H	= CH3O	+ OH	C	9.64E+13	0	0
60 CH3O2	+ CH2O	= CH4O2	+ HCO	C	1.00E+12	0	11665
61 CH3O2	+ C2H6	= CH4O2	+ C2H5	C	2.95E+11	0	14944
62 CH3O2	+ CH3O2	= CH3O	+ CH3O + O2	C	2.80E+11	0	-780
63 CH3O2	+ H2O2	= CH4O2	+ HO2	C	2.40E+12	0	10000
64 CH4O2		= CH3O	+ OH	C	3.00E+16	0	42920
65 CH3O2	+ C2H4	= C2H3	+ CH4O2	C	7.10E+11	0	17110
66 CH4O2	+ OH	= CH3O2	+ H2O	C	1.00E+13	0	-258
67 CH4O2	+ O	= CH3O2	+ OH	C	2.00E+13	0	4750
68 CO	+ O + M	= CO2	+ M	C	6.17E+14	0	3000
69 CO	+ OH	= CO2	+ H	C	3.51E+07	1.3	70
70 CO	+ O2	= CO2	+ O	C	1.60E+13	0	41000
71 CO	+ HO2	= CO2	+ OH	C	6.50E+13	0	23650
72 H2	+ O2	= OH	+ OH	C	1.70E+13	0	47780
73 H2	+ OH	= H2O	+ H	C	1.17E+09	1.3	3626
74 O	+ OH	= O2	+ H	C	4.00E+14	-0.5	0
75 O	+ H2	= OH	+ H	C	5.06E+04	2.7	6290
76 H	+ HO2	= O	+ H2O	C	3.10E+10	0	3590
77 O	+ OH + M	= HO2	+ M	C	1.00E+16	0	0
78 H	+ O2 + M	= HO2	+ M	C	3.61E+17	-0.7	0
79 OH	+ HO2	= H2O	+ O2	C	7.50E+12	0	0
80 H	+ HO2	= OH	+ OH	C	1.70E+14	0	874
81 O	+ HO2	= O2	+ OH	C	1.40E+13	0	1073
82 OH	+ OH	= O	+ H2O	C	6.00E+08	1.3	0
83 H	+ H + M1	= H2	+ M1	C	1.00E+18	-1	0
84 H	+ H + H2	= H2	+ H2	C	9.20E+16	-0.6	0
85 H	+ H + H2O	= H2	+ H2O	C	6.00E+19	-1.3	0
86 H	+ H + CO2	= H2	+ CO2	C	5.49E+20	-2	0
87 H	+ OH + M	= H2O	+ M	C	1.60E+22	-2	0
88 H	+ O + M	= OH	+ M	C	6.20E+16	-0.6	0
89 O	+ O + M	= O2	+ M	C	1.89E+13	0	-1788
90 H	+ HO2	= H2	+ O2	C	1.25E+13	0	0
91 HO2	+ HO2	= H2O2	+ O2	C	2.02E+12	0	0
92 H2O2	+ M	= OH	+ OH + M	C	4.30E+16	0	45500
93 H2O2	+ H	= HO2	+ H2	C	1.60E+12	0	3800
94 H2O2	+ OH	= H2O	+ HO2	C	1.00E+13	0	1800
95 H2O2	+ H	= H2O	+ OH	C	1.00E+13	0	3590
96 H2O2	+ O	= H2O	+ O2	C	8.40E+11	0	4260
97 H2O2	+ O	= OH	+ HO2	C	2.00E+13	0	5900
98 H2	+ HO2	= H2O	+ OH	C	6.50E+11	0	18800
99 CH2O	+ O2	= HCO	+ HO2	C	1.00E+14	0	40000
100 CH2O	+ HO2	= HCO	+ H2O2	C	3.00E+12	0	8000
101 CH2O	+ CH3	= HCO	+ CH4	C	5.54E+03	2.81	5.86E+03
102 CH2O	+ M	= HCO	+ H + M	C	3.30E+16	0	8.10E+04
103 HCO	+ HCO	= CH2O	+ CO	C	3.01E+13	0	0
104 HCO	+ OH	= H2O	+ CO	C	1.00E+14	0	0
105 HCO	+ H	= H2	+ CO	C	1.19E+13	0.3	0
106 HCO	+ O	= OH	+ CO	C	3.00E+13	0	0
107 HCO	+ O	= H	+ CO2	C	3.00E+13	0	0
108 HCO	+ O2	= HO2	+ CO	C	3.30E+13	-0.4	0
109 HCO	+ M	= H	+ CO + M	C	1.87E+17	-1	17000
110 HCO	+ HO2	= CO2	+ OH + H	C	3.00E+13	0	0

111 CH4	+ O2	= CH3	+ HO2	C	7.90E+13	0	56000	
112 CH4	+ H	= CH3	+ H2	C	6.60E+08	1.6	10840	
113 CH4	+ OH	= CH3	+ H2O	C	1.60E+06	2.1	2460	
114 CH4	+ O	= CH3	+ OH	C	1.02E+09	1.5	8604	
115 CH4	+ HO2	= CH3	+ H2O2	C	1.00E+13	0	18700	
116 CH4	+ CH2	= CH3	+ CH3	C	4.00E+12	0	-570	
117 CH3	+ CH2O	= CH4	+ HCO	D	5.50E+03	2.8	5860	
118 CH3	+ HCO	= CH4	+ CO	C	1.20E+14	0	0	
119 CH3	+ HCO	= CH2O	+ CH2	C	3.00E+13	0	0	
110 CH3	+ H	= CH4		C	1.90E+36	-7	9050	
120 CH3	+ H	= CH2	+ H2	C	9.00E+13	0	15100	
121 CH3	+ CH3O	= CH4	+ CH2O	C	4.30E+14	0	0	
122 CH3	+ CH3	= C2H6		C	2.12E+16	-0.97	620	
123 CH3	+ CH3	= C2H5	+ H	C	4.99E+12	0.1	10600	
124 CH3	+ O	= CH2O	+ H	C	8.00E+13	0	0	
125 CH3	+ OH	= CH2	+ H2O	C	7.50E+06	2	5000	
126 CH3	+ OH	= CH2O	+ H2	C	4.00E+12	0	0	
127 CH3	+ CH2	= C2H4	+ H	C	3.00E+13	0	-570	
128 CH3	+ HO2	= CH3O	+ OH	C	5.00E+13	0	0	
129 CH3	+ O2	= CH3O	+ O	C	4.67E+13	0	30000	
130 CH3	+ O2	= CH2O	+ OH	C	1.00E+11	0	9000	
131 CH3	+ C2H4	= CH4	+ C2H3	C	6.62E+00	3.7	9482	
132 CH3	+ CH3	= C2H4	+ H2	C	1.00E+15	0	31000	
133 CH2	+ OH	= CH2O	+ H	C	2.50E+13	0	0	
134 CH2	+ O2	= HCO	+ OH	C	4.30E+10	0	-500	
135 CH2	+ O2	= CO2	+ H2	C	6.90E+11	0	500	
136 CH2	+ O2	= CO	+ H2O	C	2.00E+10	0	-1000	
137 CH2	+ O2	= CH2O	+ O	C	5.00E+13	0	9000	
138 CH2	+ O2	= CO2	+ H	+ H	C	1.60E+12	0	1000
139 CH2	+ O2	= CO	+ OH	+ H	C	8.60E+10	0	-500
140 CH2	+ CH2	= C2H2	+ H2	C	1.20E+13	0	800	
141 CH2	+ CH2	= C2H2	+ H	+ H	C	1.20E+14	0	800
142 CH2	+ CO2	= CH2O	+ CO	C	1.00E+11	0	1000	
143 C2H4	+ H	= C2H3	+ H2	C	1.10E+14	0	8500	
144 C2H4	+ O	= CH3	+ HCO	C	1.60E+09	1.2	746	
145 C2H4	+ O	= CH2O	+ CH2	C	3.00E+04	1.88	180	
146 C2H4	+ O	= C2H3	+ OH	C	1.51E+07	1.91	3790	
147 C2H4	+ OH	= CH2O	+ CH3	C	6.00E+13	0	960	
148 C2H4	+ HO2	= C2H3	+ H2O2	C	7.10E+11	0	17110	
149 C2H4	+ OH	= C2H3	+ H2O	C	6.02E+13	0	5955	
150 C2H4	+ M	= C2H2	+ H2	+ M	C	1.50E+15	0	55800
151 C2H4	+ M	= C2H3	+ H	+ M	C	2.60E+17	0	96570
152 C2H4	+ H	= C2H5		C	2.60E+43	-9.25	52580	
153 C2H6	+ O2	= C2H5	+ HO2	C	1.00E+13	0	48960	
154 C2H5	+ O2	= C2H4	+ HO2	C	2.00E+10	0	-2200	
155 C2H4	+ O2	= C2H3	+ HO2	C	4.20E+14	0	57590	
156 C2H4	+ C2H4	= C2H5	+ C2H3	C	5.00E+14	0	64700	
157 C2H5	+ HO2	= C2H4	+ H2O2	C	3.00E+11	0	0	
158 C2H2	+ O2	= HCO	+ HCO	C	4.00E+12	0	28000	
159 C2H2	+ O	= CH2	+ CO	C	1.02E+07	2	1900	
160 C2H2	+ H	+ M	= C2H3	+ M	C	5.54E+12	0	2410
161 C2H3	+ H	= C2H2	+ H2	C	4.00E+13	0	0	
162 C2H3	+ O2	= CH2O	+ HCO	C	4.00E+12	0	-250	
163 C2H3	+ OH	= C2H2	+ H2O	C	3.00E+13	0	0	
164 C2H3	+ CH2	= C2H2	+ CH3	C	3.00E+13	0	0	
165 C2H3	+ HCO	= C2H4	+ CO	C	6.03E+13	0	0	
166 C2H3	+ C2H3	= C2H2	+ C2H4	C	1.45E+13	0	0	
167 C2H3	+ O	= C2H2	+ OH	C	1.00E+13	0	0	
168 C2H2	+ OH	= CH3	+ CO	C	4.83E-04	4	-2000	
169 C2H2	+ CH2	= C3H3	+ H	C	1.20E+13	0	6620	
170 C3H3	+ OH	= C3H2	+ H2O	C	1.00E+13	0	0	
171 C3H3	+ O	= CH2O	+ C2H	C	1.00E+13	0	0	
172 C2H3		= C2H2	+ H	C	4.60E+40	-8.8	46200	
173 C2H2		= C2H	+ H	C	2.37E+32	-5.28	130688	
174 C2H	+ O2	= HCO	+ CO	C	5.00E+13	0	1500	

175 C2H	+ H2	= H	+ C2H2	C	4.90E+05	2.5	560		
176 C2H2	+ O	= C2H	+ OH	C	4.60E+19	-1.41	28950		
177 C2H2	+ OH	= C2H	+ H2O	C	3.37E+07	2	14000		
178 C2H2	+ C2H	= C4H2	+ H	C	9.60E+13	0	0		
179 C4H	+ H2	= H	+ C4H2	C	4.90E+05	2.5	560		
180 C4H2	+ OH	= C4H	+ H2O	C	3.37E+07	2	14000		
181 C4H2	+ O	= C3H2	+ CO	C	2.70E+13	0	1720		
182 C3H2	+ O	= C2H2	+ CO	C	5.80E+13	0	0		
183 C3H2	+ OH	= HCO	+ C2H2	C	5.80E+13	0	0		
184 C3H2	+ CH2	= C4H3	+ H	C	3.00E+13	0	0		
185 C3H3	+ C3H3	= C6H5	+ H	C	2.00E+12	0	0		
186 C3H2	+ HCCO	= C4H3	+ CO	C	1.00E+13	0	0		
187 C2H2	+ OH	= CH2CO	+ H	C	2.18E-04	4.5	-1000		
188 CH2CO	+ H	= HCCO	+ H2	C	5.00E+13	0	8000		
189 CH2CO	+ H	= CH3	+ CO	C	1.13E+13	0	3428		
190 CH2CO	+ O	= HCCO	+ OH	C	1.00E+13	0	8000		
191 C2H2	+ C2H2	= C4H2	+ H2	C	1.00E+17	0	81000		
192 C2H2	+ C2H	= C4H3		C	4.50E+37	-7.68	7100		
193 C2H3	+ C2H2	= C4H5		C	8.10E+37	-8.09	13400		
194 C4H5	+ O2	= C2H4	+ CO	+ HCO	C	4.16E+10	0	2500	
195 C4H2	+ H	= C4H3		C	1.10E+42	-8.72	15300		
196 C4H3	+ H	= C2H2	+ C2H2		C	6.30E+25	-3.34	10014	
197 C4H3	+ H	= C4H2	+ H2		C	1.50E+13	0	0	
198 C4H3	+ OH	= C4H2	+ H2O		C	5.00E+12	0	0	
199 C4H3	+ C2H2	= C6H5			C	3.80E+21	-3.17	6400	
200 C3H3	+ C3H3	= A1			C	2.00E+10	0	0	
201 C6H7		= A1	+ H		C	5.30E+25	-4.42	17300	
202 C4H3	+ C2H2	= A1-			C	1.90E+63	-15.25	30600	
203 C4H5	+ C2H2	= A1	+ H		C	1.60E+18	-1.88	7400	
204 C6H5		= A1-			C	3.50E+46	-10.44	33600	
205 A1	+ H	= A1-	+ H2		C	2.59E+14	0	16000	
206 A1	+ OH	= A1-	+ H2O		C	1.06E+08	1.42	1450	
207 A1-	+ H	= A1			C	1.00E+14	0	0	
208 C4H3	+ C4H2	= A1C2H-			C	1.90E+63	-15.25	30600	
209 A1	+ C2H	= A1C2H	+ H		C	5.00E+13	0	0	
210 A1-	+ C2H2	= A1C2H2			C	7.90E+29	-5.15	13700	
211 A1-	+ C2H2	= A1C2H	+ H		C	2.50E+29	-4.43	26400	
212 A1C2H	+ H	= A1C2H2			C	1.60E+32	-5.72	11090	
213 A1C2H	+ H	= A1C2H-	+ H2		C	2.50E+14	0	16000	
214 A1C2H	+ OH	= A1C2H-	+ H2O		C	1.60E+08	1.42	1450	
215 A1C2H-	+ H	+ M	= A1C2H	+ M		C	1.00E+14	0	0
216 A1-	+ C2H3	= A1C2H2	+ H		C	9.40E+00	4.14	23234	
217 A1C2H2	+ H	= A1C2H	+ H2		C	1.50E+13	0	0	
218 A1C2H2	+ OH	= A1C2H	+ H2O		C	2.50E+12	0	0	
219 A1C2H-	+ C2H2	= A2-1			C	5.10E+48	-10.53	28000	
220 A1C2H-	+ C2H2	= A1C2H)2	+ H		C	2.10E+10	0.85	13700	
221 A1C2H)2	+ H	= A2-1			C	1.50E+51	-10.77	25500	
222 A1C2H	+ C2H	= A1C2H)2	+ H		C	5.00E+13	0	0	
223 A1C2H2	+ C2H2	= A2	+ H		C	1.60E+18	-1.88	7400	
224 A2	+ H	= A2-1	+ H2		C	2.50E+14	0	16000	
225 A2	+ OH	= A2-1	+ H2O		C	1.60E+08	1.42	1450	
226 A2-1	+ O2	= A1C2H	+ HCO	+ CO	C	2.10E+12	0	7470	
227 A2-1	+ C2H2	= A2R5	+ H		C	1.10E+07	1.71	3900	
228 A2R5	+ O	= A2-1	+ HCCO		C	2.20E+13	0	4530	
229 A2R5-	+ O2	= A2-1	+ CO	+ CO	C	2.10E+12	0	7470	
230 A2R5	+ H	= A2R5-	+ H2		C	2.50E+14	0	16000	
231 A2R5	+ OH	= A2R5-	+ H2O		C	1.60E+08	1.42	1450	
232 A2R5-	+ H	= A2R5			C	1.00E+14	0	0	
233 C2H	+ OH	= H	+ HCCO		C	2.00E+13	0	0	
234 C2H2	+ O	= HCCO	+ H		C	1.02E+07	2	1900	
235 C2H2	+ O	= C2H	+ OH		C	4.60E+19	-1.41	28950	
236 HCCO	+ O2	= OH	+ CO	+ CO	C	1.60E+12	0	854	
237 HCCO	+ CH2	= C2H3	+ CO		C	3.00E+13	0	0	
238 C2H	+ C2H	= C4H2			C	1.80E+13	0	0	
239 C3H4	+ O	= HCCO	+ CH3		C	6.30E+12	0	2010	

240 HCCO	+ HCCO	= C2H2	+ CO	+ CO	C	1.00E+13	0	0
241 CH2O	+ O	= HCO	+ OH		C	3.80E+13	0	3540
242 CH2O	+ H	= HCO	+ H2		C	2.30E+10	1.05	3270
243 CH2O	+ OH	= HCO	+ H2O		C	2.43E+10	1.2	-447
244 C(S)	+ O2	= O	+ CO		C	1.00E+11	0	6800
245 C(S)	+ CH3	= H	+ C2H2		C	1.00E+11	0	2800
246 C(S)	+ OH	= CO	+ H		C	5.00E+11	0	2800
247 C(S)	+ NO	= CO	+ N		C	2.00E+11	0	2800
248 CH2CO	+ O	= CH2	+ CO2		C	1.75E+12	0	1350
249 CH2CO	+ OH	= HCCO	+ H2O		C	7.50E+12	0	2000
250 C2H3	+ O	= CH2CO	+ H		C	3.00E+13	0	0
251 C3H3	+ O2	= CH2CO	+ HCO		C	3.00E+10	0	2878
252 C3H4	+ O	= CH2CO	+ CH2		C	2.00E+07	1.8	1000
253 C4H3	+ O2	= HCCO	+ CH2CO		C	7.86E+16	-1.8	0
254 C6H5	+ O2	= CH2CO	+ CH2CO + C2H		C	7.86E+16	-1.8	0
255 A1C2H	+ OH	= A1-	+ CH2CO		C	2.18E-04	4.5	-1000
256 A1C2H)2	+ OH	= A1C2H-	+ CH2CO		C	2.18E-04	4.5	-1000
257 A2	+ OH	= A1C2H	+ CH2CO + H		C	1.30E+13	0	10600
258 A2	+ O	= CH2CO	+ A1C2H		C	2.20E+13	0	4530
259 A2R5	+ OH	= A2-1	+ CH2CO		C	1.30E+13	0	10600
260 C6H8	+ H	= C6H7	+ H2		C	1.33E+06	2.53	12240
261 C6H8	+ OH	= C6H7	+ H2O		C	6.20E+06	2	3430
262 CH2CO	+ M	= CH2	+ CO	+ M	C	2.00E+16	0	6.00E+04
263 C7H8		= C6H5	+ CH3		C	1.40E+16	0	99800
264 C7H8	+ O2	= C7H7	+ HO2		C	5.00E+14	0	39080
265 C7H8	+ OH	= C7H7	+ H2O		C	1.56E+13	0	2583
266 C7H8	+ O	= C7H7	+ OH		C	5.00E+08	1.5	8000
267 C7H8	+ H	= C7H7	+ H2		C	3.98E+02	3.4	3120
268 C7H7	+ O	= C6H5CHO	+ H		C	2.50E+14	0	0
269 C7H7	+ O	= C6H5	+ CH2O		C	8.00E+13	0	0
270 C7H7	+ HO2	= C6H5CHO	+ H	+ OH	C	5.00E+14	0	0
271 C7H7	+ HO2	= C6H5	+ CH2O	+ OH	C	8.00E+12	0	0
272 C7H7	+ OH	= C7H8O			C	6.00E+13	0	0
273 C7H8O	+ OH	= C6H5CHO	+ H2O	+ H	C	8.43E+12	0	2583
274 C7H8O	+ O2	= C6H5CHO	+ H	+ HO2	C	2.00E+14	0	41400
275 C7H8O	+ H	= C6H5CHO	+ H	+ H2	C	8.00E+13	0	0
276 C7H8O	+ C7H7	= C6H5CHO	+ C7H8	+ H	C	2.11E+11	0	9500
277 C6H5CHO	+ O2	= C6H5CO	+ HO2		C	1.02E+13	0	38950
278 C6H5CHO	+ OH	= C6H5CO	+ H2O		C	1.71E+09	1.18	-447
279 C6H5CHO	+ H	= C6H5CO	+ H2		C	5.00E+13	0	4928
280 C6H5CHO	+ O	= C6H5CO	+ OH		C	9.04E+12	0	3080
281 C6H5CO		= C6H5	+ CO		C	3.98E+14	0	29400
282 C6H5	+ CH3	= C7H7	+ H		C	5.70E-02	5	15700
283 N	+ NO	= N2	+ O		C	2.70E+13	0	355
284 N	+ O2	= NO	+ O		C	9.00E+09	0	6500
285 N	+ OH	= NO	+ H		C	3.36E+13	0	385
286 N	+ CO2	= NO	+ CO		C	3.00E+12	0	11300
287 N2O	+ O	= N2	+ O2		C	1.40E+12	0	10810
288 N2O	+ O	= NO	+ NO		C	2.90E+13	0	23150
289 N2O	+ H	= N2	+ OH		C	3.87E+14	0	18880
290 N2O	+ OH	= N2	+ HO2		C	2.00E+12	0	21060
291 N2O	+ M	= N2	+ O	+ M	E	7.91E+10	0	56020

EK I

K3PREP’de motor modelinin oluşturulmasında kullanılan giriş verileri aşağıda verilmiştir.

Istanbul	Technical University	3102002 Diesel	Engine	Application with	45-deg		
bore	11.2						
stroke	12.4						
squish	0.204						
thsect	45						
nblocks	6						
1	24	15	13	62	1	1	0
5.6	5.6	0	0	5.6	5.6	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1.6504	1.6504	1.6504	1.6504
3	1	5	6	1	4		
-1	0	-1	-1	0	-1		
0	1.1754						
0.13	1.1754						
0.26	1.1408						
0.39	1.0657						
0.52	0.9906						
0.65	0.9156						
0.78	0.8405						
0.91	0.7655						
1.04	0.6904						
1.17	0.6154						
1.3	0.5403						
1.43	0.4653						
1.56	0.3902						
1.69	0.3151						
1.82	0.2401						
1.95	0.165						
2.08	0.0901						
2.21	0.0335						
2.34	0.0048						
2.47	0.0048						
2.6	0.0209						
2.73	0.0674						
2.86	0.1468						
2.99	0.2769						
3.0776	0.4251						
3.1023	0.4902						
3.1269	0.5902						
3.1367	0.6902						
3.1228	0.7902						
3.1051	0.8902						
3.0875	0.9902						
3.0699	1.0902						
3.0522	1.1902						
3.0346	1.2902						
3.0246	1.3902						
3.0471	1.4902						
3.1148	1.5902						
3.2042	1.6504						
2.99	1.6504						
2.86	1.6504						

2.73	1.6504							
2.6	1.6504							
2.47	1.6504							
2.34	1.6504							
2.21	1.6504							
2.08	1.6504							
1.95	1.6504							
1.82	1.6504							
1.69	1.6504							
1.56	1.6504							
1.43	1.6504							
1.3	1.6504							
1.17	1.6504							
1.04	1.6504							
0.91	1.6504							
0.78	1.6504							
0.65	1.6504							
0.52	1.6504							
0.39	1.6504							
0.26	1.6504							
0.13	1.6504							
0	1.6504							
2	24	15	3	52	1	1	0	
3.2042	3.2042	0	0	3.2042	3.2042	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	
1.6504	1.6504	1.6504	1.6504	1.6504	1.6504	1.6504	1.6504	
3	4	5	6	4	4			
-1	-1	-1	-1	-1	-1			
0	1.6504							
0.13	1.6504							
0.26	1.6504							
0.39	1.6504							
0.52	1.6504							
0.65	1.6504							
0.78	1.6504							
0.91	1.6504							
1.04	1.6504							
1.17	1.6504							
1.3	1.6504							
1.43	1.6504							
1.56	1.6504							
1.69	1.6504							
1.82	1.6504							
1.95	1.6504							
2.08	1.6504							
2.21	1.6504							
2.34	1.6504							
2.47	1.6504							
2.6	1.6504							
2.73	1.6504							
2.86	1.6504							
2.99	1.6504							
3.2042	1.6504							
3.2042	1.7306							
3.2042	1.8122							
3.2042	1.8754							
2.99	1.8754							
2.86	1.8754							
2.73	1.8754							
2.6	1.8754							
2.47	1.8754							
2.34	1.8754							
2.21	1.8754							
2.08	1.8754							
1.95	1.8754							
1.82	1.8754							

1.69	1.8754						
1.56	1.8754						
1.43	1.8754						
1.3	1.8754						
1.17	1.8754						
1.04	1.8754						
0.91	1.8754						
0.78	1.8754						
0.65	1.8754						
0.52	1.8754						
0.39	1.8754						
0.26	1.8754						
0.13	1.8754						
0	1.8754						
3	5	15	3	0	1	1	0
3.7492	3.7492	3.2042	3.2042	3.7492	3.7492	3.2042	3.2042
0	0	0	0	0	0	0	0
1.6504	1.6504	1.6504	1.6504	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754
4	1	5	6	1	4		
-1	0	-1	-1	0	-1		
4	24	15	26	0	2	1	0
3.2042	3.2042	0	0	3.2042	3.2042	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754
3	4	5	6	4	2		
-1	-1	-1	-1	-1	-1		
5	5	15	26	0	2	1	0
3.7492	3.7492	3.2042	3.2042	3.7492	3.7492	3.2042	3.2042
0	0	0	0	0	0	0	0
1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754
4	4	5	6	4	2		
-1	-1	-1	-1	-1	-1		
6	8	15	26	0	2	1	0
5.6	5.6	3.7492	3.7492	5.6	5.6	3.7492	3.7492
0	0	0	0	0	0	0	0
1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754	1.8754
4	2	5	6	1	2		
-1	-1	-1	-1	0	-1		
ncopy	0						
tiltflag	0						
pentflag	0						
wedgeflag	0						
translate	0						
nlocxy	0						
reshape	0						
npentxy	0						
nvguide	0						
nvalvport	0						
nrunner	0						
nsiamese	0						
nround	0						
npatch	6						
2	5	1	1	1	2		
3	1	2	1	1	3		
4	5	2	1	1	4		
5	5	3	1	1	5		
5	1	4	1	1	5		
6	1	5	1	1	5		
nrelaxb	0						
nprovtop	0						
nprovfce	0						
nzcyliwall	0						
tilt	0						
ndish	0						
nscallop	0						
xoffset	0						

yoffset	0
write17	1
plotmesh	1
xband	0
yband	0
zband	0
nxplots	0
nyplots	0
nzplots	0
nvhide	0



EK J

KIVA3V'de motor modelinin çözümünde kullanılan giriş verileri aşağıda verilmiştir.

Istanbul	Technical University	3102002 Diesel Engine Application with 45-deg
irest	0	
nohydro	0	
lwall	1	
lpr	0	
irez	2	
ncfilm99999		
nctap8	1000	
nclast99999		
ncmon	1	
ncaspec	1	
	-135	
gmv	1	
cafilm	5	
cafin	-10	
angmom	1	
pgssw	1	
dti	5.00E-06	
dtmxca	1	
dtmax	1.00E-04	
tlind	1	
twfilm	9.99E+09	
twfin	9.99E+09	
fchsp	0.6	
bore	11.2	
stroke	12.4	
squish	0.204	
rpm	1850	
atdc	-138	
datdct	0	
revrep	2	
conrod	22.2	
swirl	1.7	
swipro	3.11	
thsect	45	
sector	1	
deact	0	
epsy	1.00E-03	
epsv	1.00E-03	
epsp	1.00E-04	
epst	1.00E-03	
epsk	1.00E-03	
epse	1.00E-03	
gx	0	
gy	0	
gz	0	
tcylwl	500	
thead	500	
tpistn	500	
pardon	0	
a0	0	
b0	1	

artvis	0
ecnsrv	0
adia	0
anu0	0
visrat-.66666667	
tcut	400
tcute	3520
epschm	0.02
omgchm	1
turbsw	1
sgsl	0
trbchem	0
capa	18
pmplict	0
lospeed	0
airmu1	1.46E-05
airmu2	110
airla1	252
airla2	200
pri	0.74
rpr	1.11
rsc	1.11
xignit	1.00E+04
t1ign	-1
tdign	-1
ca1ign	9999.9
cadign	10
xignl1	-0.125
xignr1	0.125
yignf1	1.9388
yignd1	2.1888
zignb1	9.5275
zignt1	9.7775
xignl2	-0.125
xignr2	0.125
yignf2	-2.1888
yignd2	-1.9388
zignb2	9.5275
zignt2	9.7775
kwikeq	0
numnoz	1
numinj	1
numvel	16
t1inj	-1
tdinj	-1
ca1inj	-3
cadinj	16
tspmas	0.0915
tnparc	5000
pulse	3
injdist	1
kolide	1
tpi	297.05
turb	1
breakup	1
evapp	1
dmoz	0.2
dznoz	14.2
dthnoz	22.5
tilbxy	22.5
tilbxz	75
cone	10
dcone	10
anoz	2.04E-04
smr	1.00E-02
amp0	0

19661.83	
19661.77	
19661.55	
19141.72	
18620.99	
17580.91	
13419.77	
12859.16	
13419.91	
14419	
13429.16	
12899.25	
13419.91	
14459.75	
13930.45	
14057.36	
nreg	1
'presi',	2.00E+06
'temp'i',	310
'tke'i',	0.2
'scli',	1
nvalves	0
isoot	0



ÖZGEÇMİŞ

Özgür Oğuz Taşkiran, 12. 11. 1977 tarihinde Ardahan'da doğdu. İlk ve orta öğrenimini İstanbul'da tamamladıktan sonra 1991 yılında Deniz Lisesi' ne girdi. 1999 yılında Makina Mühendisliği bölümünde lisans öğrenimini tamamlayıp, Deniz Harp Okulu'ndan Deniz Subayı ve Makina Mühendisi olarak mezun oldu. İki yıl çeşitli gemilerde görev yaptıktan sonra 2001 yılında İTÜ Makina Fakültesi'nde lisansüstü öğrenimine başladı.

