

Višezonski model izgaranja u HCCI-motoru primjenom kemijske kinetike

Kozarac, Darko

Doctoral thesis / Disertacija

2008

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:235:593901>

Rights / Prava: [In copyright/Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-25**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

**VIŠEZONSKI MODEL IZGARANJA U HCCI-
MOTORU PRIMJENOM KEMIJSKE KINETIKE**

DOKTORSKI RAD

DARKO KOZARAC

ZAGREB, 2008.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

**VIŠEZONSKI MODEL IZGARANJA U HCCI-
MOTORU PRIMJENOM KEMIJSKE KINETIKE**

DOKTORSKI RAD

Mentor:

Prof. dr. sc. IVAN MAHALEC

DARKO KOZARAC

ZAGREB, 2008.

BIBLIOGRAFSKA KARTICA

UDK: 621.43.019

Ključne riječi: HCCI, višezonski model, kemijska kinetika

Znanstveno područje: TEHNIČKE ZNANOSTI

Znanstveno polje: Strojarstvo

Institucija: Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje

Mentor: Prof. dr. sc. Ivan Mahalec

Broj stranica: 184

Broj slika: 87

Broj tablica: 9

Broj korištenih bibliografskih jedinica: 103

Datum obrane: 28. 11. 2008.

Povjerenstvo: Prof. dr. sc. Antun Galović (FSB, Zagreb)

Prof. dr. sc. Ivan Mahalec (FSB, Zagreb)

Prof. dr. sc. Zoran Lulić (FSB, Zagreb)

Prof. dr. sc. Sanja Singer (FSB, Zagreb)

Prof. dr. sc. Vladimir Medica (Tehnički fakultet Rijeka)

Institucija u kojoj je rad pohranjen: Fakultet strojarstva i brodogradnje

ZAHVALA

Ovim putem zahvalio bi se svim ljudima koji su mi na neki način pomogli da izradim ovu disertaciju.

Prije svega zahvalio bi se svom mentoru Prof. dr. sc. Ivanu Mahalcu na pomoći pri odabiru teme, a zatim i pri samoj razradi problema. Svojim sugestijama puno mi je pomogao pri obradi materije, a zatim i pri njenom jasnom prezentiranju.

Zahvalio bi se i svim članovima Katedre za motore i vozila (Zoran Lulić, Kruno Ormuž, Goran Šagi, Petar Ilinčić, Rudolf Tomić, Ognjen Tošanović, Josipa Kancir) što su me u posljednje vrijeme oslobodili određenog broja obaveza kako bih imao dosta vremena da dovršim ovaj rad, te zbog raznih tehničkih savjeta kada sam to trebao. Zahvalio bi se Mr. sc. Boženi Tokić koja mi uvijek provjerava prijevode na engleski, pa je tako to učinila i u dijelovima ovoga rada.

Isto tako zahvalio bi se Anti Šodi s kojim sam vrlo često vodio opsežne diskusije o razmatranim problemima, a iz kojih su proizašle mnoge ideje i rješenja nekih problema.

Zahvalio bih se i Vedranu Biondiću koji mi je svojim pristupom bazi podataka s radovima omogućio prikupljanje velike količine literature koja mi je bila potrebna za izradu ovog rada.

Osim toga zahvalio bi se tvrtki AVL – AST u čiji program (AVL Boost) je ugrađen moj višezonski model, a čiji djelatnici su mi pružili pomoć pri implementaciji modela u njihov software. Potrebno je napomenuti da je ovaj rad proizašao iz rada na projektu *Biogoriva – nužnost održive mobilnosti u Republici Hrvatskoj* (120-2012298-1810), financiranog od strane Ministarstva znanosti obrazovanja i športa Republike Hrvatske.

Na kraju bi se zahvalio svojoj obitelji koja mi je kontinuirano davala podršku, posebno svojoj Kseniji koja me je cijelo vrijeme poticala na rad i svojim entuzijazmom unosila veselje koje je tako nužno u kvalitetnom životu i radu svakog čovjeka.

SADRŽAJ

Predgovor	I
Sažetak	III
Ključne riječi	III
Summary	IV
Key words	IV
Popis oznaka	V
Popis slika	XI
Popis tablica	XVIII

1.	Uvod	1
1.1.	Motivacija.....	1
1.2.	Dosadašnje spoznaje.....	4
1.2.1.	Konvencionalni motori i HCCI.....	4
1.2.2.	HCCI kroz povijest.....	8
1.2.3.	Modeliranje.....	14
1.3.	Hipoteza.....	19
1.4.	Znanstveni doprinos.....	20
1.5.	Pregled rada.....	20
2.	Modeliranje i proračun HCCI procesa	21
2.1.	Uvod u modeliranje.....	21
2.2.	Kemijska kinetika.....	22
2.3.	Jednozonski proračunski model.....	31
2.3.1.	Opće jednadžbe jednozonskog modela.....	31
2.3.2.	Termodinamičke značajke kemijskih spojeva.....	34
2.3.3.	Početni uvjeti.....	37
2.3.4.	Integracija s programom AVL Boost.....	39
2.4.	Višeozonski proračunski modeli.....	42
2.4.1.	Opće jednadžbe višeozonskog HCCI modela.....	42
2.4.2.	Izmjena topline.....	45
2.4.3.	Model s četiri zone bez izmjene mase.....	49
2.5.	Postupak rješavanja.....	52
2.6.	Model sa šest zona i izmjenom mase.....	56
2.6.1.	Opći pristup.....	56
2.6.2.	Model izmjene mase.....	61
2.6.2.1.	Postupak izračunavanja izmjene mase.....	63

2.6.2.2. Inicijalizacija i izračunavanje početne matrice izmjene mase	64
2.6.2.3. Miješanje i promjena volumena	66
2.6.2.4. Provjera rješenja i priprema novog koraka	69
2.6.3. Priprema početnih uvjeta	72
2.6.3.1. Opće jednadžbe raspodjele mase na zone	73
2.6.3.2. Izračunavanje temperatura u rubnim zonama	74
2.6.3.3. Postupak izračunavanja raspodjele mase	76
3. Verifikacija i validacija proračunskog modela	79
3.1. Verifikacija četverozonskog modela	79
3.2. Validacija četverozonskog modela	81
3.3. Novi mehanizam izgaranja izoktana	86
3.4. Validacija šestzonskog modela	89
3.4.1. Novi rezultati eksperimentalnih ispitivanja	89
3.4.2. Proračunski model motora Cummins B	94
3.4.3. Utjecaj vremenske konstante izmjene topline	97
3.4.4. Utjecaj debljine rubnih zona	107
3.4.5. Utjecaj temperature usisa	115
3.4.6. Rezultati cijelog područja rada	117
4. Analiza utjecaja propuhivanja, zona i izmjene topline	125
4.1. Gonjen motor	125
4.1.1. Propuhivanje pored klipa	125
4.1.2. Podjela cilindra na više zona	127
4.1.3. Korelacije za koeficijent prijelaza topline	128
4.2. Radne točke s gorivom	131
5. Primjer primjene proračunskog modela	139
5.1. Opis problema	139
5.2. Pristupa analizi	140
5.3. Rezultati	143
5.3.1. Promjena volumena zone procjepa	143
5.3.2. Promjena temperatura stijenki prostora izgaranja	153
5.3.3. Zaključak	159
6. Zaključak	161
7. Literatura	167
Prilozi	175
Životopis	
Biography	

PREDGOVOR

Veliki tehnološki razvoj koji se posljednjih desetljeća javlja u gotovo cijelome svijetu i uslijed kojeg se sve veći broj ljudi vozi automobilom, dovodi do sada već evidentnih poteškoća u opskrbi gorivom, koja se za sad manifestira porastom njegove cijene, ali još gorim posljedicama vezanim uz porast emisije stakleničkih plinova. U takvim situacijama ljudi se uvek okreću znanstvenicima s nadom da će upravo oni pronaći rješenje za nastali problem.

Za problem emisija stakleničkih plinova, kao rješenje nameće se upotreba goriva bez ugljika, no te tehnologije još uvek su jako daleko od komercijalne primjene. Prema tome kao trenutno rješenje koje može dovesti do smanjenja negativnih trendova preostaje primjena raznih tehnologija kojima se kod motora s unutarnjim izgaranjem pogonjenih trenutno dostupnim gorivima snižava potrošnja goriva, a samim time i emisije stakleničkih plinova. Jedna od tih tehnologija je primjena HCCI izgaranja u određenim režimima rada motora, za koje se pokazalo da ima veliki potencijal u pogledu smanjenja specifične efektivne potrošnje goriva, posebno u radnim točkama s djelomičnim opterećenjem.

Današnji razvoj motora temelji se s jedne strane na eksperimentalnim ispitivanjima, no s druge strane sve značajniju ulogu dobivaju numeričke simulacije, kojima se u kraćem roku uz manja ulaganja mogu dobiti željeni rezultati. S obzirom na veliki broj različitih primjena, danas postoji i veliki broj tipova numeričkih simulacija. Sve se one kontinuirano razvijaju pri čemu se u nekim trenucima različiti tipovi simulacija međusobno i spajaju. S obzirom na način izgaranja u HCCI motoru, pokazalo se da je kod njega upotreba kemijske kinetike nužna, no s obzirom na današnji ubrzani razvoj računalnih resursa kemijska kinetika sve se više koristi i kod simulacija drugih tipova motora. Komercijalnih programa koji se bave simulacijama motora s unutarnjim izgaranjem, a koji pri tom koriste kemijsku kinetiku, gotovo da nema, a ono malo što postoji nije još ni približno dotjerano kao što su to programi koji na konvencionalan način izračunavaju izgaranja u motoru.

Simulacije rada motora s unutarnjim izgaranjem imaju višegodišnju tradiciju na Fakultetu strojarstva i brodogradnje. Pritom su to simulacije bazirane na konvencionalnim proračunima bez upotrebe kemijske kinetike. Jedna od namjena autora ovoga rada bila je proširivanje znanja o načinu izračunavanja procesa u motorima, pri čemu je fokus prebačen na proračune s kemijskom kinetikom, za koju se smatra da će sve više dobivati na važnosti i kod simulacija rada konvencionalnih procesa izgaranja.

SAŽETAK

S obzirom na sve veće zahtjeve koji se postavljaju na motore s unutarnjim izgaranjem, posebno u pogledu smanjenja emisija štetnih produkata izgaranja i potrošnje goriva, pored usavršavanja postojećih procesa izgaranja intenzivno se radi na razvoju novih procesa. Jedan od tih procesa je i tzv. izgaranje homogene smjese s kompresijskim paljenjem (HCCI), koji je tema ovoga rada u kome je za njega razvijen višezonski simulacijski model.

Model zbog pristupa rješavanja problema spada u tzv. bezdimenzionalne proračune, a prostorna raznolikost koja se javlja u cilindru simulira se većim brojem zona u kojima se izračunavaju različita stanja. Model se temelji na jednadžbama termodinamike i kemijske kinetike pa se stoga može reći da je termokinetički. Pored kemijske kinetike model uključuje međusobnu izmjenu topline između zona u dodiru, te izmjenu topline između rubnih zona i stijenki cilindra. Postavljeni sustav diferencijalnih jednadžbi uključuje sve zone istovremeno, pa se stoga rješavanjem takvog sustava dobiva rješenje koje nije potrebno korigirati. Osim toga simulacijski model uključuje i izmjenu mase između zona, koja se izračunava posebno razvijenim modelom, u bezvremenskom području.

Ispitivanje modela pokazalo je da se on može koristiti na više načina. S jedne strane model se može koristiti za izračunavanje općih fizikalnih veličina kao što su promjene tlaka, temperature, brzine oslobođanja topline itd. Pri tome se ove veličine mogu s dosta velikom točnošću izračunati i bez posebnog podešavanja proračunskih konstanti modela, u cijelom području rada HCCI motora. Pored ovih značajki moguće je izračunavati i emisije štetnih produkata izgaranja, a pregledom promjena sastava u pojedinim zonama moguće je analizirati izvore emisija, te moguće načine njihova smanjenja. Iako je točnost izračunavanja emisija i bez posebnog podešavanja proračunskih konstanti bila dosta dobra, pokazalo se da se njihovim podešavanjem ta točnost može još povećati.

Dalnjom analizom rezultata pokazano je da bi budući razvoj ovoga modela trebao ići u smjeru povećanja broja zona, uz razvoj modela za izmjenu topline i modeliranje proračunskih konstanti.

Ključne riječi: HCCI, višezonski model, kemijska kinetika.

SUMMARY

In view of ever increasing demands imposed on internal combustion engines, particularly regarding the lowering of harmful emissions and fuel consumption, common combustion processes are being improved and new ones are being developed. One of newly developed processes, i.e. the Homogeneous Charge Compression Ignition combustion (HCCI), is the subject of this paper. In order to give a contribution to a further development of the process, a new, multi zone combustion model of the HCCI process has been developed.

The model is classified as a so-called zero dimensional model due to its approach to the problem. The in-cylinder diversity is simulated by a larger number of zones in which different conditions are calculated. Since the model is based on thermodynamic and chemical kinetic equations, it can be considered as a thermo-kinetic model. In addition to chemical kinetics, the model also involves the heat transfer between zones in contact, as well as the heat transfer between boundary zones and the cylinder walls. Since the system of differential equations includes all the zones simultaneously, there is no need for the correction of the obtained results. The model also includes the mass transfer between the zones, which is modelled by a timeless model, developed for this particular purpose.

The testing of the model has shown that it can be used in different ways. On the one hand, it can be used for the calculation of general physical properties of the cylinder, such as changes in pressure, temperature and the rate of heat release, etc. These properties can be very accurately calculated in the entire operating window of the HCCI engine without a special adjustment of the model constants. On the other hand, the model can calculate harmful emissions of the engine. By examining the changes in mass fractions of species in each zone, the sources of these emissions and the possibilities of emission reductions can be analyzed. Although the calculation accuracy of emissions is rather good even without the adjustment of the model constants, the accuracy of the calculation can be further improved by adjusting them.

A further analysis of the results has shown that a future development of this calculation model should include an increased number of zones together with the development of a heat transfer model and the modelling of calculation constants.

Key words: HCCI, multi zone models, chemical kinetics.

POPIS OZNAKA

Oznaka	Opis	Jedinica
A	faktor frekvencije	promjenjiva
A_{glava}	površina stijenke glave motora	m^2
A_{klip}	površina čela klipa	m^2
$A_{\text{st.cil.GMT}}$	površina stijenke cilindra kada je klip u GMT	m^2
$A_{\text{st.cil.DMT}}$	površina stijenke cilindra kada je klip u DMT	m^2
$A_{x,j}$	površina dodira stijenke i fluida	m^2
B	konstanta za faktor frekvencije	promjenjiva
D_c	promjer cilindra	m
$D_{\text{gl, r}}$	računski promjer glave	m
$D_{\text{kl, r}}$	računski promjer klipa	m
c	koncentracija	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$
$\bar{c}_{p,j}$	specifični toplinski kapacitet mješavine plinova u j-toj zoni pri konstantom tlaku	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$
\bar{c}_v	specifični toplinski kapacitet mješavine pri konstantnom volumenu	$\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
$c_{v,i},$	specifični toplinski kapacitet kemijskog spoja i pri konstantnom volumenu	$\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
$\bar{c}_{v,j}$	specifični toplinski kapacitet mješavine plinova u j-toj zoni pri konstantom volumenu	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$
$C_{\text{m},p}^0$	standardni molarni toplinski kapacitet pri konstantnom tlaku	$\frac{\text{J}}{\text{kmol K}}$
$c_{v,j}\Big _{T_1}^{T_2}$	srednji specifični toplinski kapacitet j-te zone u temperaturnom intervalu (T_1, T_2)	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$
E_a	energija aktivacije	$\frac{\text{J}}{\text{kmol}}$
G_m	Molarna Gibbsova slobodna energija	$\frac{\text{J}}{\text{kmol}}$

Oznaka	Opis	Jedinica
G_m^0	standardna molarna Gibbsova slobodna energija	$\frac{\text{J}}{\text{kmol}}$
h	položaj klipa (udaljenost od GMT)	m
h_0	proračunska visina stijenke cilindra kada je klip u GMT	m
$h_{\text{st.cil, r}}$	proračunska visina stijenke cilindra	m
H	hod klipa	m
H_{uk}	trenutna visina prostora izgaranja	m
H_d	specifična donja ogrjevna vrijednost goriva	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$
H_m	molarna entalpija	$\frac{\text{J}}{\text{kmol}}$
H_m^0	standardna molarna entalpija	$\frac{\text{J}}{\text{kmol}}$
(ΔH_f^0)	molarna entalpija formacije	$\frac{\text{J}}{\text{kmol}}$
k	konstanta brzine reakcije	promjenjiva
k_f	konstanta brzine reakcije prema naprijed	promjenjiva
k_r	konstanta brzine reakcije prema nazad	promjenjiva
K_c	konstanta ravnoteže kemijske reakcije po koncentraciji	
K_p	konstanta ravnoteže po parcijalnom tlaku	
N_{reak}	broj reakcija	
N_{sp}	broj kemijskih spojeva	
N_{zn}	broj zona	
m_c	masa u cilindru	kg
m_i	masa i -tog kemijskog spoja	kg
m_j	masa u j -toj zoni	kg
$\Delta m_{i,j}$	masa koja se iz i -te zone prebacuje u zonu j	kg
M	Oznaka trećeg tijela u kemijskim reakcijama	
M_i	molarna masa i -tog kemijskog spoja	$\frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$

Oznaka	Opis	Jedinica
p_c	tlak u cilindru (jednozonski prikaz)	Pa
p_c^{UVZ}	tlak u cilindru u trenutku zatvaranja usisnih ventila	Pa
$p_{c,\text{gon}}$	tlak u cilindru koji bi se u tom trenutku postigao da je motor gonjen (bez izgaranja)	Pa
p_{mj}	tlak nakon miješanja	Pa
p_r	reducirani tlak	Pa
p_z	tlak razdvojenih masa u zonama	Pa
R	individualna plinska konstanta	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$
R_j	individualna plinska konstanta mješavine u j -toj zoni	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$
R_i	individualna plinska konstanta i -tog kemijskog spoja	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$
\mathfrak{R}	opća plinska konstanta	$\frac{\text{J}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}$
S_m	molarna entropija	$\frac{\text{J}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}$
S_m^0	standardna molarna entropija	$\frac{\text{J}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}$
t	vrijeme	s
Δt	vremenska konstanta izmjene topline između zona	s
t_{novi}	vrijeme na kraju promatranog intervala	s
t_{stari}	vrijeme na početku promatranog intervala	s
T	temperatura	K
T_c	temperatura u cilindru	K
T_c^{UVZ}	temperatura u cilindru u trenutku zatvaranja usisnih ventila	K
T_j	temperatura u j -toj zoni	K
$T_{j, \text{p}}$	prepostavljena temperatura u j -toj zoni	K
T_{mj}	temperatura nakon miješanja	K
T_w	temperatura stjenke	K

Oznaka	Opis	Jedinica
$T_{w,x}$	temperatura stjenke x	K
T_∞	temperatura u sredini prostora izgaranja	K
$u_j(T_j, x_{i,j})$	specifična unutarnja energija mase u j -toj zoni pri temperaturi T_j i uz sastav plinova s masenim udjelima $x_{i,j}$	$\frac{J}{kg}$
u_i	specifična unutarnja energija -toga kemijskog spoja u cilindru	$\frac{J}{kg}$
U	ukupna unutarnja energija	J
v	specifični volumen	$\frac{m^3}{kg}$
v_j	specifični volumen u j -toj zoni	$\frac{m^3}{kg}$
\bar{v}_{kl}	srednja brzina klipa	$\frac{m}{s}$
v_o	obodna brzina smjese u cilindru	$\frac{m}{s}$
V_c	volumen cilindra	m^3
V_c^{UVZ}	volumen cilindra u trenutku zatvaranja usisnih ventila	m^3
V_H	radni volumen cilindra	m^3
V_j	volumen u j -toj zoni	m^3
V_j^{geo}	geometrijski definiran volumen u j -toj zoni	m^3
V_K	kompresijski volumen cilindra	m^3
Q_j	toplina dovedena zoni j	J
ΔQ_{j-k}	potencijal izmjene topline između zona j i k	J
Q_w	toplina izmijenjena sa stijenkama prostora izgaranja	J
$Q_{w,k}$	toplina izmijenjena sa stijenkom klipa	J
$Q_{w,g}$	toplina izmijenjena sa stijenkom glave	J
$Q_{w,c}$	toplina izmijenjena sa stijenkom cilindra	J
x_i	maseni udio i -toga kemijskog spoja	$\frac{kg}{kg}$

Oznaka	Opis	Jedinica
$x_{i,j}$	maseni udio i -tog kemijskog spoja u j -toj zoni	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
$(x_i^k)_{\text{KVP}}$	maseni udio kemijskog spoja i na kraju visokotlačnog procesa	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
x_{IG}^b	maseni udio izgorjelog goriva u Boostovom proračunu	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
x_G^b	maseni udio goriva u Boostovom proračunu	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
x_Z^b	maseni udio zraka u Boostovom proračunu	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
x_{PI}^b	maseni udio produkata izgaranja u Boost-ovom proračunu	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
x_{Vzn}	udio volumena u rubnim zonama	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
$x_{Z,j}$	maseni udio plinova u zoni j u masi plinova u cilindru	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
(x_i^k)	maseni udio i -tog kemijskog spoja u proračunu s kemijskom kinetikom	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
y_i	molni udio i -tog kemijskog spoja	$\frac{\text{kmol}}{\text{kmol}}$

Grčka slova

Oznaka	Opis	Jedinica
α	kut zakreta KV	°
$\Delta\alpha$	Boostov korak izražen u stupnjevima	°
α	učinkovitosti trećih tijela	-
α_w	koeficijent prijelaza topline	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}}$
β	eksponent na temperaturi za faktor frekvencije	-
γ	faktor zaostalih plinova izgaranja	-
δ_{RZ}	debljina rubnih zona	m
λ	faktor pretička zraka	$\frac{\text{kg}}{\text{kg}}$
λ	toplinska provodnost	$\frac{\text{W}}{\text{m} \cdot \text{K}}$
ν	stehiometrijski koeficijenti	kmol

Oznaka	Opis	Jedinica
v_i'	stehiometrijski koeficijent i -tog reaktanta	-
v_i''	stehiometrijski koeficijent i -tog produkata	-
χ	oznaka kemijskog spoja	
χ_i	oznaka i -tog kemijskog spoja u reakciji	-
ω	brzina vrtnje motora	$\frac{\text{rad}}{\text{s}}$
$\dot{\omega}_i$	brzina stvaranja i -tog kemijskog spoja	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}$
$\dot{\omega}_{i,j}$	brzina stvaranja i -tog kemijskog spoja u j -toj zoni	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}$
ω_R	brzina kemijske reakcije	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}$

Kratice

- DMT – Donja mrtva točka
 GMT – Gornja mrtva točka
 HCCI – Homogeneous Charge Compression Ignition
 IRM – Izmjena radnog medija
 IVO – Ispušni ventila otvara
 IVZ – Ispušni ventil zatvara
 UVO – Usisni ventil otvara
 UVZ – Usisni ventil zatvara
 VP – Visokotlačni proces

POPIS SLIKA

Slika 2.1.	Promjena koncentracije reaktanata lijevo i produkata desno, te pripadajuće brzine promjene koncentracija u trenutku t_i	23
Slika 2.2.	Energetski profil kemijske reakcije.....	25
Slika 2.3.	Primjer određivanja energije aktivacije E_a	25
Slika 2.4.	Model jednozonskog proračuna: (lijevo) konvencionalnog, (desno) s primjenom kemijske kinetike.....	31
Slika 2.6.	Prikaz sastava smjese u programu Boost i u proračunu s kemijskom kinetikom.....	40
Slika 2.7.	Proizvoljna podjela prostora cilindra na N_{zn} zona.....	43
Slika 2.8.	Toplinski tok između zone j i njene okoline u proizvoljnem višezonskom modelu.....	46
Slika 2.9.	Grafički prikaz modela izmjene topline između zona. Lijevo: potpuno razdvojene zone s pripadajućim temperaturama. Desno: podjela zona nakon potpunog miješanja zona 1 i j	48
Slika 2.10.	Različite varijante jednostavne podjele cilindra na zone.....	50
Slika 2.11.	Višezonski model sa četiri zone bez izmjene mase.....	50
Slika 2.12.	Osnovna struktura proračuna u programu AVL Boost.....	52
Slika 2.13.	Osnovna struktura proračuna vremenskog koraka Δt	53
Slika 2.14.	Tok proračuna jednostavnog modela HCCI motora jednozonskim proračunskim modelom. (Oznake: IRM – izmjena radnog medija, VP – visokotlačni proces).....	56
Slika 2.15.	Prikaz prostora procjepa između klipa i cilindra.....	57
Slika 2.16.	Prikaz položaja i oblika zona šestzonskog proračunskog modela.....	58
Slika 2.17.	Promjena volumena zona u ovisnosti o kutu zakreta koljenastog vratila.....	59
Slika 2.18.	Modeliranje izmjene topline u šestzonskom modelu.....	60
Slika 2.19.	Skica promjena veličina stanja u zonama, pri rješavanju sustava diferencijalnih jednadžbi, a prije izmjene mase.....	61
Slika 2.20.	Shematski prikaz proračuna izmjene mase u trenutku t_{novi}	62
Slika 2.21.	Dijagram toka proračuna izmjene mase.....	63
Slika 2.22.	Mogući profili temperature uz stijenku cilindra.....	74
Slika 2.23.	Krivulje funkcije jednakosti unutarnjih energija u ovisnosti o T_6 , za tri slučaja prepostavljenog tlaka razdvojenih masa p_z	77

Slika 3.1.	Tok tlaka i temperature izračunat jednozonskim i četverozonskim proračunom u kojem je izostavljena izmjena topline između zona i izmjena topline između stijenki i rubnih zona.....	80
Slika 3.2.	Skica modela motora Cummins C u programu AVL Boost.....	82
Slika 3.3.	Usporedni rezultati promjene tlaka HCCI motora dobiveni eksperimentalnim ispitivanjem, jednozonskim i četverozonskim proračunom.....	82
Slika 3.4.	Usporedni rezultati promjene brzine oslobađanja HCCI motora dobiveni eksperimentalnim ispitivanjem, jednozonskim i četverozonskim proračunom.....	83
Slika 3.5.	Rezultati izračunatih promjene temperature; lijevo: srednje za jednozonski i četverozonski model; desno: temperature po zonama četverozonskog proračuna.....	83
Slika 3.6.	Promjena udjela izooktana (IC_8H_{18}), ugljikovog monoksida (CO) i ostalih ugljikovodika (HC) izračunata jednozonskim i četverozonskim proračunom. Lijevo: srednje vrijednosti za cijeli cilindar; Desno: samo IC_8H_{18} i CO po zonama.....	85
Slika 3.7.	Rezultati promijene tlaka izračunati jednozonskim proračunom modela motora Cummins C i primjenom Chenovog mehanizma oksidacije izooktana.....	87
Slika 3.8.	Rezultati promjene temperature (lijevo) i brzine oslobađanja topline (desno) izračunati jednozonskim proračunom modela motora Cummins C i primjenom Chenovog mehanizma oksidacije izooktana.....	88
Slika 3.9.	Promjene masenih udjela izooktana, ugljikovodika i ugljikovog monoksida izračunate jednozonskim proračunom modela motora Cummins C i primjenom Chenovog mehanizma oksidacije izooktana.....	89
Slika 3.10.	Tok tlaka eksperimentalnog motora izmjerен pri različitim udjelima goriva u smjesi sa zrakom.....	92
Slika 3.11.	Promjena neto brzine oslobađanja topline izračunata iz rezultata toka tlaka prikazanih na slici 3.10.....	92
Slika 3.12.	Izmjerena emisija ugljikovog dioksida (CO_2), ugljikovog monoksida (CO) i neizgorjelih ugljikovodika (HC) pri različitim količinama goriva prikazana kao udio mase ugljika (C) iz goriva pretvoren u određenu emisiju.....	93
Slika 3.13.	Usporedni rezultati jednozonskog i šestzonskog proračuna tlaka (lijevo) i neto brzine oslobađanja topline (desno) HCCI motora s $\phi=0.26$, te njihova usporedba s eksperimentalnim.....	95

- Slika 3.14. Usporedni rezultati temperature izračunate iz jednozonskog, šestzonskog i eksperimentalnog tlaka prikazanih na slici 3.13 (lijevo) i promjene temperature u svakoj zoni šestzonskog proračuna (desno). 96
- Slika 3.15. Promjena tlaka (lijevo) i neto brzine oslobođanja topline (desno) u zavisnosti o kutu zakreta KV, izračunat sa šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti vremenske konstante izmjene topline. 97
- Slika 3.16. Promjena temperature u ovisnosti o kutu zakreta KV, izračunat za šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti vremenske konstante izmjene topline (lijevo: područje od $330 - 390^\circ\text{KV}$; desno: povećani prikaz kraja kompresije). 98
- Slika 3.17. Promjena temperatura zona u ovisnosti o kutu zakreta KV, izračunate šestzonskim proračunom uz vremensku konstantu izmjene topline $\Delta t = 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ i $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$, pri $\phi = 0,26$ i $\delta_{RZ} = 1,2 \text{ mm}$ 98
- Slika 3.18. Promjena temperatura zona u ovisnosti o kutu zakreta KV, izračunate šestzonskim proračunom uz vremensku konstantu izmjene topline $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ i $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$, pri $\phi = 0,26$ i $\delta_{RZ} = 1,2 \text{ mm}$ 99
- Slika 3.19. Promjena tlaka i neto brzine oslobođanja topline HCCI motora, u radnoj točki s $\phi=0,14$, dobiveni jednozonskim i šestzonskim proračunom, te eksperimentalnim ispitivanjem. 100
- Slika 3.20. Rezultati promjene tlaka i neto brzine oslobođanja topline izračunati šestzonskim proračunom HCCI motora uz faktor sastava smjese $\phi=0,14$ i tri različite vrijednosti vremenske konstante izmjene topline Δt 101
- Slika 3.21. Rezultati promjene srednje temperature izračunati šestzonskim proračunom HCCI motora uz faktor sastava smjese $\phi=0,14$ i tri različite vrijednosti vremenske konstante izmjene topline Δt , te prikaz raspodjele temperature po zonama za dvije vrijednosti konstante Δt ($0,5 \cdot 10^{-3}$ i $1,0 \cdot 10^{-3}$). 102
- Slika 3.22. Rezultati mase HC u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti konstante Δt ($0,5 \cdot 10^{-3}$, $1,0 \cdot 10^{-3}$ i $1,5 \cdot 10^{-3}$). 104

- Slika 3.23. Rezultati mase CO u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti konstante Δt ($0.5 \cdot 10^{-3}$, $1.0 \cdot 10^{-3}$ i $1.5 \cdot 10^{-3}$). 105
- Slika 3.24. Promjena tlaka (lijevo) i neto brzine oslobođanja topline (desno) u zavisnosti o kutu zakreta KV, izračunat za šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone, uz opterećenje pri kojem je $\phi=0,26$ ($\lambda=3,8$). 108
- Slika 3.25. Promjena srednje temperature cilindra (desno) izračunata šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone, te usporedba izračunatih promjena temperatura u zonama za dvije krajnje debljine rubnih zona δ_{RZ} (0,9 i 1,5 mm), sve pri opterećenju kod kojeg je $\phi=0,26$ ($\lambda=3,8$). 108
- Slika 3.26. Promjena tlaka (lijevo) i neto brzine oslobođanja topline (desno) u zavisnosti o kutu zakreta KV, izračunat sa šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone uz opterećenje pri kojem je $\phi=0,14$ ($\lambda=7,1$). 109
- Slika 3.27. Promjena srednje temperature cilindra (desno) izračunata šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone, te usporedba izračunatih promjena temperatura u zonama za dvije krajnje debljine rubnih zona δ_{RZ} (0,9 i 1,5 mm), sve pri opterećenju kod kojeg je $\phi=0,14$ ($\lambda=7,1$). 110
- Slika 3.28. Rezultati mase HC u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti debljine rubne zone δ_{RZ} (0,9, 1,2, 1,5 mm) uz opterećenje kod kojeg je $\phi=0,26$ ($\lambda=3,8$). 112
- Slika 3.29. Rezultati mase CO u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti debljine rubne zone δ_{RZ} (0,9, 1,2, 1,5 mm), uz opterećenje kod kojeg je $\phi=0,26$ ($\lambda=3,8$). 114
- Slika 3.30. Rezultati toka tlaka i neto brzine oslobođanja topline izračunati šestzonskim proračunom uz tri različite temperature usisa, pri opterećenju kod kojeg je $\phi=0,26$ ($\lambda=3,8$), uz konstante proračuna: $\delta_{RZ} = 1,2$ mm , $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3}$ s. 116

- Slika 3.31. Rezultati toka tlaka i neto brzine oslobađanja topline izračunati šestzonskim proračunom uz tri različite temperature usisa, pri opterećenju kod kojeg je $\phi=0,14$ ($\lambda=7,1$), uz konstante proračuna: $\delta_{RZ}=1,2$ mm , $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3}$ s 117
- Slika 3.32. Rezultati tlaka šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0.26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9$ mm i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3}$ s 119
- Slika 3.33. Rezultati neto brzine oslobađanja topline šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0.26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9$ mm i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3}$ s 119
- Slika 3.34. Rezultati emisije CO₂ jednozonskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0.26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9$ mm i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3}$ s 120
- Slika 3.35. Rezultati emisije CO jednozonskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0.26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9$ mm i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3}$ s 121
- Slika 3.36. Rezultati emisije HC jednozonskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0.26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9$ mm i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3}$ s 122
- Slika 3.37. Rezultati učinkovitosti izgaranja jednozonskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0.04, \dots, 0.26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9$ mm i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3}$ s 122
- Slika 4.1. Rezultati promjene tlaka i temperature izračunati jednozonskim proračunom sa i bez uključenog propuhivanja pored klipa, te odgovarajući eksperimentalni rezultati; sve za slučaj gonjenog motora ($\phi=0,00$) 125
- Slika 4.2. Rezultati promjene tlaka i temperature izračunati jednozonskim i šestzonskim proračunom, te odgovarajući eksperimentalni rezultati; sve za slučaj gonjenog motora ($\phi=0,00$) 126

- Slika 4.3. Međusobna usporedba promjene temperature i neto brzine oslobađanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije za izmjenu topline u radnoj točki bez goriva..... 128
- Slika 4.4. Promjena tlaka i kumulativni iznos veličine površine ispod krivulje kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije izmjene topline i radnu točku bez goriva..... 129
- Slika 4.5. Promjene temperature i neto brzine oslobađanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije za izmjenu topline u radnoj točki s $\lambda=25$ ($\phi=0,04$)..... 131
- Slika 4.6. Promjene tlaka i kumulativni iznosi veličina površina ispod krivulja kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije za izmjenu topline i radnu točku s $\lambda=25$ ($\phi=0,04$)..... 131
- Slika 4.7. Promjene temperature i neto brzine oslobađanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije izmjene topline u radnoj točki s $\lambda=7,1$ ($\phi=0,14$)..... 132
- Slika 4.8. Promjene tlaka i kumulativnih iznosa veličina površina ispod krivulja kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije za izmjenu topline i radnu točku s $\lambda=7,1$ ($\phi=0,14$)..... 132
- Slika 4.9. Promjene temperature i neto brzine oslobađanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije za izmjenu topline u radnoj točki s $\lambda=3,8$ ($\phi=0,26$)..... 133
- Slika 4.10. Promjene tlaka i kumulativnih iznosa veličina površina ispod krivulja kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije za izmjenu topline i radnu točku s $\lambda=3,8$ ($\phi=0,26$)..... 133
- Slika 4.11. Promjene koeficijenta prijelaza topline u ovisnosti o kutu zakreta koljenastog vratila izračunate pomoću tri različite korelacije, u četiri različite radne točke..... 134
- Slika 4.12. Relativne emisije CO₂, CO i HC izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije za izmjenu topline u tri različite radne točke..... 135
- Slika 5.1. Promjena neto brzine oslobađanja topline pri promjeni volumena zone procjepa u radnim točkama s $\phi=0,16$, ..., 0,20 (lijevo) i s $\phi=0,22$, ..., 0,26 (desno)..... 139
- Slika 5.2. Promjena neto brzine oslobađanja topline pri promjeni temperaturi stijenki prostora izgaranja, u radnim točkama s $\phi=0,16$, ..., 0,20 (lijevo) i s $\phi=0,22$, ..., 0,26 (desno)..... 141

Slika 5.3.	Izračunata promjena emisije CO (lijevo) i HC (desno) pri promjeni volumena zone procjepa.....	141
Slika 5.4.	Relativna promjena emisija pri smanjenju i povećanju volumena zone procjepa za 15%, pri čemu je osnova izračunata emisija.....	142
Slika 5.5.	Relativna promjena emisija pri smanjenju i povećanju volumena zone procjepa za 15%, pri čemu je osnova eksperimentalno određena emisija.....	143
Slika 5.6.	Promjena udjela CO i HC svih zona, za vrijeme dijela ciklusa, izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,26$	144
Slika 5.7.	Promjena udjela CO i HC svih zona, za vrijeme dijela ciklusa, izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,20$	147
Slika 5.8.	Promjena udjela CO i HC svih zona, za vrijeme dijela ciklusa, izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,18$	149
Slika 5.9.	Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,16$	150
Slika 5.10.	Izračunata promjena emisija CO (lijevo) i HC (desno) pri promjeni temperatura stijenki prostora izgaranja.....	151
Slika 5.11.	Relativna promjena emisija pri sniženju i povišenju temperature stijenki prostora izgaranja za 20K, pri čemu je osnova izračunata emisija.....	152
Slika 5.12.	Relativna promjena emisija pri sniženju i povišenju temperature stijenki prostora izgaranja za 20K, pri čemu je osnova eksperimentalno određena emisija.....	152
Slika 5.13.	Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite razine temperatura stijenki prostora izgaranja, pri opterećenju s $\phi=0,26$	154
Slika 5.14.	Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite razine temperatura stijenki prostora izgaranja, pri opterećenju s $\phi=0,20$	155
Slika 5.15.	Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite razine temperatura stijenki prostora izgaranja, pri opterećenju s $\phi=0,16$	156

POPIS TABLICA

Tablica 2.1. Proračunski elementi za simulaciju elemenata motora u programu AVL Boost v. 3.1.1.....	39
Tablica 3.1. Značajke proizvoljnog modela motora i radne točke korištenog pri verifikaciji četverozonskog modela.....	80
Tablica 3.2. Značajke eksperimentalnog Cummins C motora, prerađenog na rad u HCCI modu, te promatrane radne točke [70].....	81
Tablica 3.3. Raspodjela mase po zonama kod četverozonskog proračuna.....	83
Tablica 3.4. Osnovne značajke eksperimentalnog motora [100].....	91
Tablica 3.5. Temperature površine stijenke glave.....	91
Tablica 3.6. Analiza promjene emisije pri promjeni vremenske konstante izmjene topline između zona Δt	103
Tablica 3.7. Analiza promjene emisije pri promjeni debljine rubne zone δ_{RZ}	111
Tablica 5.1. Temperature usisa proračunskih modela.....	140

1. UVOD

1.1. Motivacija

Motivaciju za istraživanja opisana ovim radom može se u osnovi podijeliti na tri dijela:

- a) Motivacija za istraživanje motora s unutarnjim izgaranjem;
- b) Motivacija za istraživanje izgaranja u motoru s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem (HCCI);
- c) Motivacija za istraživanje razvoja modela za simulaciju HCCI-motora.

Motor s unutarnjim izgaranjem jedan je od najznačajnijih izuma 19. stoljeća. Iako su se u međuvremenu pojavili brojni novi značajni pronalasci, njegova važnost i utjecaj na današnji svijet jedva da su time okrnjeni. Cjelokupan svjetski sustav prijevoza putnika i roba cestovnim vozilima i brodovima počiva gotovo isključivo na motoru s unutarnjim izgaranjem. Njime se pogone svi poljoprivredni strojevi, brojni radni strojevi, a još uvijek je značajna njegova primjena za pogon zrakoplova i lokomotiva. Postavši glavnim čimbenikom mobilnosti ljudi modernog industrijskog doba, motor s unutarnjim izgaranjem neizravno je doveo i do velikih socijalnih promjena u ljudskome društvu.

Pored svojih pozitivnih utjecaja na ljudske i ljudsko društvo, motor s unutarnjim izgaranjem ima i svoju tamniju stranu. Tehnološki razvoj dovodi do toga da je cijena transportnih sredstava, koja koriste motor s unutarnjim izgaranjem, sve pristupačnija, pa je i njihov broj u upotrebi sve veći. Kao neizbjegna popratna pojava sve većeg broja motora s unutarnjim izgaranjem javlja se povećana potrošnja nafte i njezino sve brže iscrpljivanje, te povećane emisije štetnih produkata izgaranja i stakleničkih plinova.

Povećana potrošnja nafte dovodi do niza gospodarskih i političkih efekata kao npr. porasta cijena energenata, ratova za teritorije na kojima je dokazano postojanje izvora nafte itd., a s druge strane povećana emisija štetnih produkata izgaranja¹ izravno utječe na ljudsko zdravlje, posebno u gradskim područjima. Iz tog razloga zakonodavci iz godine u godinu sve više snižavaju dopuštene granice emisija štetnih produkata izgaranja motornih vozila, a i ostalih transportnih sredstava koja koriste motor s unutarnjim izgaranjem. Osim toga, s obzirom na sve uočljivije učinke

¹ Emisije iz motora s unutarnjim izgaranjem u osnovi se mogu podijeliti na štetnu emisiju i na emisiju stakleničkih plinova. U štetnu emisiju spadaju plinovi koji izravno štete ljudskom zdravlju i kod motora s unutarnjim izgaranjem to su: ugljikov monoksid (CO), neizgorjeli ugljikovodici (HC), dušikovi oksidi (NO_x) i krute čestice. U emisiju stakleničkih plinova spadaju oni plinovi koji dovode do zagrijavanja zemlje uslijed efekta staklenika, a kod motora s unutarnjim izgaranjem najutjecajniji je ugljikov dioksid (CO_2)

globalnog zatopljenja, koje je u izravnoj vezi s povećanjem sadržaja stakleničkih plinova u atmosferi (prvenstveno CO₂), te imajući u vidu Kyoto protokol o smanjenju njihovih emisija, pitanje je dana kada će se početi ograničavati i emisije stakleničkih plinova iz motora s unutarnjim izgaranjem. Kako trenutno stanje tehnike sugerira da će motor s unutarnjim izgaranjem još neko dulje vrijeme biti glavni pokretač motornih vozila, svi gore navedeni efekti govore u prilog tomu da su istraživanja vezana uz motore s unutarnjim izgaranjem neophodna.

U pogledu štetnih produkta izgaranja, sve strože norme trenutno se zadovoljavaju optimiranjem postojećih procesa izgaranja u motorima s unutarnjim izgaranjem (Ottov i Dieselov motor), te razvojem metoda pročišćavanja produkata izgaranja. S obzirom da Ottov i Dieselov imaju bitno različite procese izgaranja, različiti su i štetni produkti izgaranja koje u povećanim količinama ti motori ispuštaju.

Ottov motor pri svom radu stvara značajne količine CO, HC i NO_x. Pri tome Ottov motor zbog načina paljenja i izgaranja mora u cijelom području svoga rada smjesu održavati približno stehiometrijskom¹, te zbog toga taj motor može učinkovito koristiti trokomponentni katalizator koji istovremeno reducira dušikove okside (NO_x), a kisikom iz tih spojeva oksidira ugljikov monoksid (CO) i neizgorjeli uglikovodike (HC). Ovakav katalizator uz precizno održavanje faktora pretička zraka približno jednakim jedan ($\lambda = 1.00 \pm 2\%$) ima visoki stupanj pretvorbe štetnih u neštetne plinove, ugljikov dioksid (CO₂) i vodenu paru (H₂O).

Dieselov motor, zbog viška zraka u cilindru prilikom izgaranja, stvara vrlo male količine ugljikovog monoksida (CO) i neizgorjelih uglikovodika (HC), ali s druge strane stvara povećane količine dušikovih oksida (NO_x) i krutih čestica. Istovremeno zbog viška zraka kod Dieselovog se motora ne mogu učinkovito reducirati dušikovi oksidi (NO_x), pa se glavne mјere smanjenja njihove emisije svode na smanjeno stvaranje tih spojeva u cilindru. Povoljnim odabirom zakona ubrizgavanja, oblika prostora izgaranja, tlakova ubrizgavanja, vrtloga itd. može se značajno utjecati na stvaranje dušikovih oksida (NO_x). Pored toga za zadovoljavanje trenutnih normi koristi se tzv. recirkulacija ispušnih plinova² kojom se snižava temperatura u cilindru, a time i stvaranje dušikovih oksida (NO_x), dok se u novije doba sve više razvijaju i koriste tzv. SCR i apsorpcijski katalizatori. SCR katalizator (engl. Selective Catalytic Reduction) za redukciju dušikovih oksida koristi vanjski

¹ Stehiometrijska smjesa goriva i zraka je ona smjesa u kojoj ima dovoljno kisika iz zraka da potpunim izgaranjem izgori cijelo gorivo, a da pri tom ne ostane viška kisika.

² Recirkulacija ispušnih plinova je pojam kojim se označava sustav kojim se dio ispušnih plinova vraća nazad u usisnu cijev gdje se, prije ulaska u cilindar, miješaju sa svježim radnim medijom. Ispušni plinovi mogu prije povratka biti ohlađeni pomoću posebnog hladnjaka. Ovaj pojam vrlo se često označava skraćenicom AGR (njem. Abgasrückführung) ili EGR (engl. Exhaust Gas Recirculation)

reaktant (uobičajeno amonijak NH_3), koji se u ispušnu cijev ubrizgava ispred samog katalizatora, te u katalizatoru dovodi do kemijskih reakcija kojima se dušikovi oksidi reduciraju u N_2 i H_2O . Rad apsorpcijskog katalizatora temelji se na hvatanju, tj. apsorbiranju čestica NO_x za vrijeme rada sa siromašnom smjesom. Kada se ovaj katalizator "napuni" motor se kratkotrajno pogoni s bogatom smjesom uslijed koje se u ispuhu nalazi dosta neizgorjelih ugljikovodika (HC) i ugljikovog monoksida (CO), koji se potom koriste kao reaktanti za redukciju i "čišćenje" nakupljenih dušikovih oksida (NO_x). Drugi značajniji štetni produkt Dieselovog motora, krute čestice, danas se sve više uklanja upotrebljom tzv. filtara čestica koji svojim oblikom zadržavaju čestice u sebi, a koji se povremeno prazne izgaranjem nakupljenih čestica uz pomoć povišene temperature ispušnih plinova nastale kasnim ubrizgavanjem goriva tijekom takta ekspanzije.

Emisija ugljikovog dioksida (CO_2), koji je glavni staklenički plin motora s unutarnjim izgaranjem, može se smanjiti smanjenjem potrošnje goriva i upotrebljom goriva koje sadrži manji udio ugljika ili koje ugljika uopće nema. Kao gorivo bez ugljika u posljednje vrijeme sve se češće spominje vodik (H_2), no zbog problema vezanih uz skladištenje vodika, infrastrukturu benzinskih crpki, cijenu pogonskih uređaja itd. pretpostavlja se da vodik kao pogonsko gorivo sigurno neće u široj primjeni biti narednih pedesetak godina. Prema tome da bi se, u bližoj budućnosti, smanjio drastičan porast emisije ugljikovog dioksida (CO_2) iz motora s unutarnjim izgaranjem, morati će se smanjiti potrošnja goriva motora, tj. smanjiti njihova snaga te istovremeno povećati stupanj djelovanja.

Postojeći procesi izgaranja, Ottov i Dieselov, razvijani su preko stotinu godina, pa se može očekivati da će se njihovim dalnjim optimiranjem potrošnja goriva vrlo polagano snižavati. Kao druga mogućnost javlja se istraživanje potpuno novog procesa izgaranja, koje ima potencijal postizanja visokog efektivnog stupnja djelovanja, na razini Dieselovih motora ili čak i višeg, uz nisku emisiju dušikovih oksida (NO_x) i krutih čestica. Riječ je o *izgaranju homogene smjese s kompresijskim paljenjem*, poznatim pod nazivom HCCI (engl. *Homogeneous Charge Compression Ignition*). Kako ovaj tip izgaranja, osim što posjeduje veliki potencijal, ima i niz problema, potrebna su opsežna istraživanja kako bi ga se dovelo do stupnja komercijalne primjene.

Kada se općenito govori o istraživanjima motora s unutarnjim izgaranjem onda su ta istraživanja uobičajeno eksperimentalna, ali isto tako u novije doba istraživanja su sve češće potpomognuta simulacijskim proračunima. Simulacijski proračuni mogu se upotrebljavati umjesto skupih eksperimentalnih ispitivanja, ili u kombinaciji s njima, za određivanje značajki rada motora, za identifikaciju glavnih upravljačkih veličina motora,

za definiranje racionalnih temelja usavršavanja i razvoja, te za bolji i detaljniji pogled na procese koji se u motoru odvijaju za vrijeme njegova rada. Da bi se pouzdano moglo provesti neko istraživanje potpomognuto simulacijskim ispitivanjima mora se, s obzirom na zahtjeve istraživanja, odabrati pogodan tip proračuna. Za Dieselove i Ottove motore razvijen je veliki broj simulacijskih modela. S druge pak strane za simulaciju HCCI-motora razvijen je mnogo manji broj modela, koji se još uvijek iz dana u dan usavršavaju. Prema tome postoji potreba za različitim proračunskim modelima izgaranja HCCI-motora, kako bi se za određeno istraživanje mogao odabrati povoljan tip.

1.2. Dosadašnje spoznaje

Izgaranje homogene smjese s kompresijskim paljenjem još je prilično novo i neistraženo područje. Iako bi se pregledom kroz povijest mogli naći pojedini motori čiji opis donekle odgovara HCCI-motoru, prvi znanstveni radovi o istraživanjima provedenim na ovim motorima pojavili su se pred manje od trideset godina [1, 2, 3, 4]. Kako bi se lakše istaknule posebnosti ovog novog izgaranja prethodno će se definirati osnovne značajke postojećih procesa izgaranja.

1.2.1. Konvencionalni motori i HCCI

Dieselovi motori u cilindar motora tijekom izmjene radnog medija usisavaju čisti zrak, koji se za vrijeme takta kompresije poprilično zagrije. U taj vrući zrak, malo prije gornje mrtve točke (GMT), pri visokom tlaku, ubrizgava se gorivo i ono uslijed visoke temperature zraka vrlo brzo isparava, a zatim i izgara. Za vrijeme izgaranja smjesa je u prosjeku siromašna¹. No, s obzirom da se priprema smjese odvija neposredno prije izgaranja i da nema dovoljno vremena da se zrak i gorivo dobro izmiješaju, smjesa je izrazito nehomogena. Na vanjskim rubovima mlaza goriva smjesa je siromašna, dok je u unutrašnjosti mlaza bogata². Zbog takvog oblika smjesa kaže se da Dieselovi motori imaju slojevito punjenje. Proces izgaranja vođen je zakonom ubrizgavanja goriva, oblikom prostora izgaranja, te oblikom i intenzitetom strujanja u cilindru, čime se utječe na oblik slojevitosti smjesa. Njihovom promjenom mijenja se brzina oslobođanja topline, te proizvodnja štetnih produkata izgaranja.

Ottovi motori, u načelu, u cilindar motora tijekom izmjene radnog medija usisavaju smjesu goriva i zraka, koja je manje-više homogena. Postoje i Ottovi motori koji usisavaju čisti zrak, a kojima se gorivo, za vrijeme takta usisa, ubrizgava izravno u cilindar. U oba slučaja pri kraju takta kompresije

¹ Siromašna smjesa goriva i zraka je ona smjesa u kojoj ima više zraka (manje goriva) u odnosu na stehiometrijsku smjesu.

² Bogata smjesa goriva i zraka je ona smjesa u kojoj ima manje zraka (više goriva) u odnosu na stehiometrijsku smjesu.

u cilindru motora nalazi se gotovo homogena smjesa goriva i zraka. Ta smjesa pali se vanjskim izvorom energije (uobičajeno svjećicom). Od mjesta inicijalnog zapaljenja plamen se širi prema neizgorjelim dijelovima smjese nekom svojom konačnom brzinom. Dolaskom fronte plamena do stijenki cilindra završava izgaranje. Brzina oslobađanja topline i proizvodnja štetnih produkata izgaranja kod Ottovih motora uvelike će ovisiti o brzini širenja plamena, koja pak ovisi o strujanjima u cilindru, te smjesi goriva i zraka.

Kao jedna vrsta mješavine ova dva tipa izgaranja postoje tzv. *Ottovi motori s izravnim ubrizgavanjem i slojevitim punjenjem*, koji su se u komercijalnoj upotrebi pojavili relativno nedavno (Mitsubishi - GDI, Alfa Romeo - JTS). Kod ovih motora gorivo je isto kao i kod Ottovih motora (benzin), paljenje smjese vrši se pomoću vanjskog izvora (svjećice), ali smjesa goriva i zraka nije homogena već je slojevita. U području oko svjećice smjesa je stehiometrijska ili malo bogata, dok je u ostalim dijelovima cilindra smjesa siromašna. Ovakva smjesa postiže se izravnim ubrizgavanjem goriva u cilindar motora u točno određenom trenutku. Pored toga potrebno je, u cilindru ovakvih motora, uspostaviti posebno strujanje koje će osigurati ciljani heterogeni sastav smjese. Takovo strujanje postiže se posebno oblikovanim usisnim kanalima i posebno oblikovanim čelom klipa. Osnovna prednost Ottovih motora sa slojevitom smjesom je povećanje stupnja djelovanja, a time i smanjenje potrošnje goriva, no kao jedan od nedostataka navodi se povećana emisija neizgorjelih ugljikovodika (HC), te nemogućnost korištenja trokomponentnog katalizatora.

HCCI-motor je isto tako na neki način mješavina između Dieselovog i Ottovog motora, samo u drugom smjeru. Kod izgaranja homogene smjese s kompresijskim paljenjem relativno homogena smjesa goriva i zraka, koja je više ili manje razrijeđena zrakom i zaostalom produktima izgaranja, kompresijom se, u području oko gornje mrtve točke (GMT), dovodi u stanje pri kojem dolazi do samozapaljenja, te izgaranja koje je u pravilu mnogo brže od izgaranja u Ottovim ili Dieselovim motorima. Karakteristika samog izgaranja je da nema fronte plamena koja napreduje nekom svojom konačnom brzinom već izgaranje započinje istovremeno na više mjesta gdje su zadovoljeni uvjeti zapaljenja (temperatura, tlak, sastav). U idealnom slučaju, ako bi smjesa po svim fizikalnim veličinama bila potpuno homogena, izgaranje bi nastupilo u cijelom cilindru istovremeno, a duljina trajanja izgaranja odgovarala bi trajanju kemijskog procesa oksidacije goriva. S obzirom da je oksidacija goriva izrazito brza, u takvom idealnom slučaju izgaranje bi u nekim slučajevima trajalo i manje od 3° zakreta koljenastog vratila (KV). Na taj način bi se izgaranje gotovo izjednačilo s idealnim Ottovim procesom kod kojeg se dovođenje topline odvija pri konstantnom volumenu. Kod realnih motora ipak postoji određeni stupanj nehomogenosti, posebno temperature, pa izgaranje ne započinje u svim

dijelovima istovremeno, no bez obzira na to ono je izrazito brzo i višestruko kraće od izgaranja u Dieselovom i Ottovom motoru. Upravo zbog velike brzine izgaranja goriva, uz povoljan odabir trenutka paljenja, može se postići smanjenje efektivne potrošnje goriva. To smanjenje pri sadašnjem stanju tehnike moglo bi biti 16 – 20 %, što bi pri vožnji europskim voznim ciklusom (NEDC – engl. New European Drive Cycle) dovelo do smanjenja potrošnje goriva vozila od 10-12 % [5].

Zbog brzine izgaranja, smjesa u cilindru mora biti dosta siromašna jer bi se u protivnom razvile velike brzine porasta tlaka i udaranje karakteristično za detonaciju u motoru. Kako izgaranje nastupa u cijelom prostoru izgaranja gotovo istovremeno, nema područja s lokalno visokim temperaturama, a kako je smjesa prilično razrijeđena temperature su relativno niske. Zbog toga je stvaranje dušikovih oksida kod HCCI-motora za dva reda veličine manje u odnosu na konvencionalne motore. Pored toga s obzirom da je smjesa više manje homogena i siromašna, nema mjesta na kojima postoji lokalno bogata smjesa, pa je stvaranja čađe zanemarivo malo. S druge pak strane zbog načina izgaranja smjese povećana je emisija ugljikovog monoksida (CO) i neizgorjelih ugljikovodika (HC). Naime spomenuto je da je temperatura izgaranja relativno niska, a i da ne postoji fronta plamena već da gorivo izgara uslijed temperature postignute kompresijom. Prema tome s obzirom da su temperature smjese u područjima uz stijenke cilindra, klipa i glave, te u procjepima između klipa i cilindra, zbog relativno niskih temperatura tih stijenki, snižene, oksidacija goriva u tim dijelovima je otežana i obično nepotpuna. Samim time je i stvaranje ugljikovog monoksida (CO) i neizgorjelih ugljikovodika (HC), odnosu na konvencionalne motore, povećano.

Pored povećane emisije ugljikovog monoksida i neizgorjelih ugljikovodika, postoje dva još utjecajnija nedostatka HCCI motora. *Prvi*, a moglo bi se reći i najvažniji problem je regulacija, tj. upravljanje, točkom paljenja. Već je ranije spomenuto da se smanjenje potrošnje HCCI motora može ostvariti uz prepostavku povoljno odabranog trenutka paljenja. Točka paljenja izrazito je važna i za Ottove i Dieselove motore, no za razliku od HCCI motora ovi motori imaju tzv. inicijator paljenja. Kod Ottovog motora smjesa goriva i zraka pali se svjećicom pa je trenutak preskakanja iskre inicijator paljenja Ottovog motora. Gorivo se kod Dieselovog motora pali uslijed visoke temperature zraka, no do izgaranja neće doći sve dok ne počne ubrizgavanje goriva, pa je inicijator paljenja trenutak početka ubrizgavanja goriva. Kod HCCI motora smjesa se pali uslijed visoke temperature smjese u cilindru, s time da za cijelo vrijeme trajanja kompresije u cilindru postoji pripremljena smjesa spremna za izgaranje. Glavni faktor koji utječe na trenutak početka izgaranja je temperatura smjese u cilindru, a tu je veličinu, s obzirom na brzinu rada motora, dosta teško kontrolirati. Osim toga ako se prepostavi da se može upravljati temperaturom smjese u cilindru, postoji

poteškoća mjerena početka izgaranja, a što je nužno da bi se njime moglo upravljati. Ove poteškoće posebno se odnose na motore za pogon motornih vozila, koji u svom radnom vijeku rade u izrazito dinamičkoj sredini s vrlo brzim promjenama radnih točaka.

Za podešavanje temperature smjese u cilindru postoji nekoliko potencijalnih rješenja kao npr. grijanje zraka na usisu, upotreba unutarnje ili vanjske recirkulacije ispušnih plinova, te ubrizgavanje goriva prije gornje mrtve točke (GMT) ispuha uz unutarnju recirkulaciju ispušnih plinova. Bez obzira na strategiju podešavanja temperature smjese u cilindru, za potrebe upravljanja trenutkom početka izgaranja morat će se razviti potpuno novi senzori (npr. senzor tlaka u cilindru motora) koji će iz ciklusa u ciklus osigurati sve podatke potrebne za izračunavanje početka izgaranja.

Kao *drugi* značajni problem javlja se relativno niska snaga po jedinici radnog volumena. S obzirom da je smjesa u cilindru HCCI-motora dosta razrijeđena, energija koju ta smjesa sadrži relativno je mala u usporedi s energijama smjese Ottovih i Dieselovih motora. Prema tome, da bi se HCCI-motorom razvila snaga današnjih Ottovih i Dieselovih motora on bi morao imati veći radni volumen. Veći radni volumen motora predstavlja veći utrošak materijala, veću masu, veće mehaničke gubitke itd. i nije prikladno rješenje problema smanjene snage motora. Kao jedno od izvedivih potencijalnih rješenja ovog problema javlja se dvostruki režim rada motora HCCI/Otto.

Ovakav motor bi u radnim točkama s izrazito niskim opterećenjem (u blizini praznog hoda) radio kao Ottov motor i palio smjesu svjećicom. U srednjem režimu rada motora radio bi kao HCCI-motor. Upravo u tom dijelu područja rada motori većine osobnih vozila provedu veći dio svog životnog vijeka, a upravo u tim radnim točkama Ottov motor, zbog prigušenja na usisu, pokazuje niski efektivni stupanj djelovanja, tj. visoku specifičnu efektivnu potrošnju goriva. U području najvećeg momenta takav motor bi se, zbog nemogućnosti rada s HCCI izgaranjem, vratio u Ottov način rada. Ako bi se upravljanje točkom paljenja u HCCI-modu vršilo unutarnjom recirkulacijom ispušnih plinova, tada se za postizanje te recirkulacije ispušni ventili moraju zatvoriti prije gornje mrtve točke (GMT) takta ispuha, a usisni ventili moraju se otvoriti nakon GMT takta usisa. Takvim se načinom otvaranja ventila postiže tzv. negativno prekrivanje ventila (engl. Negative Valve Overlap NVO). Negativno prekrivanje ventila u Ottovom načinu rada, pri velikom opterećenju, štetilo bi ispiranju i punjenju cilindra, te bi ga stoga u tom načinu rada trebalo maknuti. Prema tome u takvom motoru nameće se potreba za potpuno varijabilnim razvodnim mehanizmom koji se isto tako zadnjih godina sve više razvija. Ako bi se za regulaciju točke paljenja koristilo još i dodatno ubrizgavanje, za vrijeme negativnog prekrivanja ventila, tada bi takav motor morao imati i izravno ubrizgavanje goriva u

cilindar. Pored kombiniranog rada HCCI/Otto, rješenje problema male snage po jedinici radnog volumena mogao bi biti i kombinirani rad HCCI/Diesel.

HCCI motor s obzirom na način izgaranja može raditi s raznim gorivima, pa su tako u laboratorijskim uvjetima upotrebljavana i komercijalna (dizel, benzin, prirodni plin) ali i laboratorijska jednomolekularna goriva (n-heptan, izooctan, vodik, propan itd.). Laboratorijska goriva korištena su u laboratorijskim motorima za ispitivanje određenih pojava i procesa u motoru, posebno kada su eksperimentalna ispitivanja kombinirana s numeričkim simulacijama, s obzirom da je veliki broj simulacija i mehanizama izgaranja koncentriran upravo na takva jednomolekularna goriva. Kako se očekuje da će u prvoj fazi HCCI biti jedan od načina rada motora, tako se ne može očekivati da će se koristiti goriva s kojima nije moguć rad u drugom, konvencionalnom, načinu rada, a i komercijalna isplativost goriva sigurno je važan faktor kod njegovog odabira. Kod kombiniranog rada HCCI/Otto, za Ottov način rada u obzir dolaze benzin, etanol, te plin, a kada se govori o HCCI načinu rada, veći broj istraživanja proveden je s benzinom i nekim plinovima (vodik, propan, butan), dok se istraživanja u kojima se koristi etanol kao gorivo pojavljuju tek u zadnje vrijeme. No, kako etanol kao jedno od biogoriva dobiva sve više na značaju može se očekivati i veći broj istraživanja na tom području. Kod kombiniranog rada HCCI/Diesel za sada jedino ispitivano gorivo je komercijalni dizel.

1.2.2. HCCI kroz povijest

HCCI izgaranje ima relativno mladu povijest od svega nekih tridesetak godina, no to ne znači da u tom kratkom vremenu nije prikazano mnogo različitih istraživanja. Iako bi se u malo daljoj povijesti (1950. i 1920. g.) moglo naći motore koji po svom načinu rada odgovaraju HCCI-motoru, začetnicima dokumentiranih istraživanja smatraju se Onishi i sur. [1] i Noguchi i sur. [2]. Oba istraživanja provedena su na dvotaktnim motorima kod kojih su recirkulirani ispušni plinovi, a smjesa u cilindru je bila siromašna. U tim uvjetima zamijećeno je prilično glatko izgaranje uz vrlo male cikličke oscilacije, koje su mnogo manje nego što je to kod konvencionalnog Ottovog izgaranja. Onishi i suradnici upotrijebili su Schlierenovo fotografiranje kako bi vizualizirali izgaranje i usporedili ga s Ottovim. Dok se na fotografijama Ottovog izgaranja jasno moglo zamjetiti frontu plamena, kod novog tipa izgaranja fronta plamena nije se vidjela, te iz fotografija nije jednostavno odrediti početak i kraj izgaranja. Iz analize slika zaključeno je da se radi o posebnoj vrsti samozapaljenja kod kojeg u prostoru izgaranja postoji mnogo točaka gdje dolazi do disocijacije s postepenim reakcijama izgaranja. Onishi i suradnici taj su tip izgaranja nazvali ATAC (engl. Active Thermo-Atmosphere Combustion). Noguchi i suradnici proveli su pak spektroskopsku analizu izgaranja te snimili vremenske promjene radikala na raznim mjestima u cilindru. Kod izgaranja

u Ottovom motoru promjene radikala na različitim mjestima imaju vrlo slične krivulje, ali su te krivulje međusobno fazno pomaknute. Taj pomak posljedica je napredovanja izgaranja kroz cilindar. S druge pak strane kod HCCI izgaranja zamijećeno je da različita mjesta u cilindru imaju slične krivulje promjene radikala bez faznog pomaka što je dovelo do zaključka da izgaranje započinje na različitim mjestima istovremeno.

Najt i Foster [3] proveli su niz eksperimentalnih ispitivanja HCCI izgaranja na četverotaktnom CFR motoru, pri čemu su ispitivali utjecaj kompresijskog omjera, brzine vrtnje, stupnja punjenja, vrste goriva i količine recirkuliranih ispušnih plinova na sam proces izgaranja i na vanjske karakteristike motora. U njihovom radu HCCI izgaranje naziva se CIHC (engl. Compression Ignited Homogeneous Charge). Pored eksperimentalnog ispitivanja pomoći razvijenih poluempijskih modela paljenja i izgaranja napravljena je računalna analiza rezultata. Iz eksperimentalnih rezultata zaključeno je da se promjenama radnih parametara motora može ostvariti paljenje i glatko oslobađanje topline (izgaranje) u HCCI-motoru. Računalna analiza pokazala je da se eksperimentalno dobiveni rezultati mogu pojasniti primjenom opće kinetike ugljikovodika. Pokazalo se da je proces paljenja smjese upravljan kinetikom oksidacije ugljikovodika pri niskim temperaturama (ispod 950 K), dok je proces oslobađanja topline (izgaranje) upravljan kinetikom oksidacije ugljikovodika pri visokim temperaturama (iznad 1000 K).

Nadalje je 1989 g. Thring [4] proveo isto tako niz eksperimentalnih ispitivanja na CLR motoru sa ciljem određivanja dozvoljenih vrijednosti radnih parametara motora potrebnih za stabilan HCCI rad motora. Thring je pored benzina proveo i ispitivanja sa dizelskim gorivom. U radu su prikazane mape područja rada motora koje na apscisi imaju postotak recirkulacije ispušnih plinova, a na ordinati faktor pretička zraka kao mjeru opterećenja. U tim mapama određena su područja kao: područje stabilnog HCCI rada, područje s izraženim udaranjem, područje izostajanja paljenja, te područje s malom snagom. Na taj način jasno se mogu vidjeti moguće primjene HCCI izgaranja, te njegova ograničenja. Osim tog zaključeno je da je HCCI izgaranje s dizelskim gorivom moguće, no s obzirom na veliku količinu energije upotrijebljenu na zagrijavanje zraka, koje je potrebno za dobro isparavanje dizelskog goriva, nije se moglo točno odrediti da li taj način izgaranja dizelskog goriva dovodi do uštede u potrošnji goriva ili ne. Isto tako zaključeno je da viša temperatura isparavanja dizelskog goriva, u odnosu na temperaturu isparavanja benzina, može predstavljati problem pri njegovom korištenju u HCCI-motoru.

Nakon tih početnih izoliranih istraživanja devedesetih godina javlja se sve veći broj istraživača, a samim time i objavljenih radova. Pri tom bi se ta istraživanja mogla podijeliti u dvije osnovne grupe. Većina istraživača u to vrijeme bavi se pokušajima primjene HCCI izgaranja u raznim vrstama

motora (dvotaktni Otto, četverotaktni Otto i četverotaktni Diesel), dok manji broj njih pokušava analizirati sam proces izgaranja.

Za analizu procesa izgaranja uglavnom su korištene optičke metode, pa je tako Lida [6] pomoću slika luminescencije radikala iz prostora izgaranja analizirao mehanizam HCCI izgaranja (u njegovom radu naziva se ATAC¹). Izgaranje je prvo promatrano za vrijeme normalnog rada sa stranim paljenjem, te potom za vrijeme rada s kompresijskim paljenjem. Slike su dobivene kroz kvarcno staklo koje je postavljeno umjesto glave motora, a analiza je pokazala da HCCI izgaranje započinje u cijelom prostoru izgaranja, te da samo izgaranje ima nepropagirajuću karakteristiku. Kasnije su B. Johansson i sur. [7], [8] napravili niz ispitivanja na četverotaktnom motoru primjenom raznih goriva koristeći optičke metode. U [7] je napravljena spektralna analiza apsorpcije svjetla koje prolazi kroz prostor izgaranja, dok je u [8] analiza provedena pomoću slika kemiluminescencije. Emitirano svjetlo analizirano je snimanjem spektralnog sadržaja i primjenom filtara pomoću kojih su izolirani kemijski spojevi kao npr. OH i CH. Iz analize slika zaključeno je da kod približno 20° KV prije GMT postoji tzv. *hladni plamen*² jednoliko raspoređen kroz cijeli prostor izgaranja. U području oko GMT zabilježeno je glavno izgaranje, pri kojem smjesa istovremeno počinje izgarati na većem broju različitih točaka u prostoru. Kako je granični sloj uz stijenke bio nešto hladniji u tom području oslobađanje topline malo je kasnilo, a kao posljedica toga ukupno oslobađanje topline bilo je malo usporen.

Primjenom HCCI izgaranja u dvotaktnim Ottovim motorima nakon Onishia i Noguchia intenzivno su se bavili inženjeri u Hondi, s ciljem rješavanja problema nestabilnog rada pri niskom opterećenju. Taku je Ishibashi [9], [10] proveo niz ispitivanja na dvotaktnom motoru s radnim volumenom od 250 cm³. Motor je radio dvostrukim načinom rada, pa je pri malom opterećenju koristio HCCI izgaranje, a pri velikom opterećenju motor se prebacio na normalno izgaranje sa stranim paljenjem. Upotrebom HCCI izgaranja ostvarena su značajna poboljšanja u pogledu emisije ispušnih plinova i stupnja korisnog djelovanja pri malom opterećenju. Istraživanja u Hondi dovedena su do stupnja komercijalne primjene [11], pa je tako 1995. g. ista tvrtka nastupila na natjecanju *Granada – Dakar Rally* s motorom koji je koristio HCCI izgaranje, a razvijen je i proizvodni prototip motora od 250 cm³ koji isto tako koristi HCCI izgaranje. Osim u Hondi, ispitivanjima

¹ U većini starijih radova koji se bave izgaranjem homogene smjese kompresijskim paljenjem u dvotaktnom motoru, koristi se naziv ATAC s obzirom da je takav naziv korišten u prvom radu koji se odnosi na dvotaktne motore.

² Pri relativno niskim temperaturama smjese goriva i zraka može početi kemijski reagirati i stvarati vrlo slabi plamen koji se naziva hladni plamen. Za razliku od normalnog plamena kod kojeg se stvaraju velike količine topline i produkata izgaranja, kod hladnog plamena stvara se vrlo mala količina topline i male količine produkata.

dvotaktnih motora bavili su se i na raznim fakultetima [12, 13, 14]. Lida [14] je pored utjecaja radnih parametra na značajke rada motora analizirao utjecaj srednje temperature smjese na trenutak paljenja, te je došao do zaključka da je u različitim uvjetima, temperatura smjese na početku izgaranja karakteristična za upotrijebljeno gorivo.

Razvoj primjene HCCI izgaranja u četverotaktnim Ottovim motorima moglo bi se reći da kasni za razvojem u dvotaktnim motorima. Jedan od razloga leži u tome što je HCCI izgaranje u dvotaktnim motorima razvijano s ciljem rješavanja problema nestabilnog rada pri niskom opterećenju, pri kojem je stupanj djelovanja tih motora jako mali, a emisija neizgorjelih ugljikovodika (HC) i ugljikovog monoksida (CO) velika. Kako kod četverotaktnih Ottovih motora takvih poteškoća nije bilo, tako su i istraživanja kasnila. U drugoj polovici devedesetih godina grupa istraživača s *Lund Institute of Technology* (danac Fakultet strojarstva na Sveučilištu Lund) intenzivno se bavila ispitivanjem HCCI izgaranja u četverotaktnom Ottovom motoru [15, 16, 17, 18, 19, 20]. U [15] su prikazane razlike u performansama četverotaktnog motora s radnim volumenom od 1.6 dm^3 pri radu s izgaranjem potaknutim stranim paljenjem (Otto) i s HCCI izgaranjem. Pri radu s HCCI izgaranjem motor je koristio kompresijski omjer od 21:1, dok je pri radu sa stranim paljenjem on bio 12:1. Pri tom je izmjerena znatno manja indicirana potrošnja goriva, te vrlo niska emisija dušikovih oksida (NO_x) pri radu s HCCI izgaranjem. S druge pak strane izmjerena je povećana koncentracija HC i CO u odnosu na rad sa stranim paljenjem. Ispitivanja su provedena s izooktanom, etanolom te prirodnim plinom. Kako je i kod četverotaktnog motora zamijećeno da se HCCI izgaranje može primijeniti samo pri nižim opterećenjima, pri čemu je gornja granica opterećenja određena pojavom detonacije u motoru, tu granicu se pokušalo pomaknuti upotrebom recirkuliranih ispušnih plinova [16]. Tako se pri radu motora s etanolom uspjelo postići stabilan rad uz srednji indicirani tlak od 5 bara, pri čemu je indicirani stupanj djelovanja bio 50%. Pored toga zamijećeno je da se stabilan rad može postići uz čak 60% recirkuliranih ispušnih plinova. U [17] proširenje radnog područja HCCI motora pokušalo se postići upotrebom nabijanja. Ponovno su provedena ispitivanja s izooktanom, etanolom i prirodnim plinom, ovaj puta u motoru s kompresijskim omjerom od 17:1 i 19:1, te s tri različita predtlaka iza kompresora 0, 1 i 2 bara. Korištenjem prirodnog plina uspio se postići stabilan rad uz srednji indicirani tlak od 14 bara. U [18] proveden je nastavak prethodnih istraživanja, te je ispitana mogućnost upotrebe ubrizgavanja vode za kontrolu početka izgaranja i ublažavanje brzine izgaranja. Ispitivanja su pokazala da se pomoću ubrizgavanja vode može upravljati točkom paljenja, no isto tako da to dovodi do povećanja već relativno visokih vrijednosti emisije HC i CO. Za razliku od prethodnih ispitivanja, u [19] su korištena tzv. referentna goriva (PRF – primary reference fuel), kod kojih je različitim omjerima izooktana i

n-heptana postignut različiti oktanski broj, te mješavine komercijalnog benzina i dizelskog goriva. Time je analizirana podobnost raznih vrsta goriva za HCCI izgaranje zajedno s utjecajem oktanskog broja i kompresijskog omjera na rad u HCCI motoru. Općenito je zaključeno da se uz odgovarajuću temperaturu na usisu i odgovarajući kompresijski omjer svako gorivo može koristiti u HCCI motoru. Pri ispitivanjima je postignut najveći indicirani stupanj djelovanja od 43%, kod rada motora s kompresijskim omjerom od 21.5:1 i uz korištenje izooktana kao goriva. U [17 i 20] pored rezultata eksperimentalnih ispitivanja primijenjene su i neke pojednostavljene numeričke simulacije.

Kod četverotaktnog Dieselovog motora HCCI se pojavio kao rezultat potrage za načinom smanjenja emisije dušikovih oksida (NO_x) i čađe. Pri tome su primjenjeni različiti principi, pa su se pojavila tri načina rada.

Kod prvog načina rada [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28] dizelsko gorivo ubrizgava se izravno u cilindar, ali za razliku od klasičnog rada Dieselovog motora gorivo se ubrizgava u ranoj fazi kompresije kada još nisu postignute visoke temperature zraka, te se miješa sa zrakom, isparava, a zatim se pri kraju kompresije pali uslijed samozapaljenja. Ovaj način rada nazvan je PREDIC (engl. Premixed lean diesel combustion), tj. izgaranje predmiješane siromašne smjese s dizelskim gorivom. S obzirom da se ubrizgavanje odvija u taktu kompresije, nema dovoljno vremena da se smjesa potpuno izmiješa, pa stoga postoji određeni stupanj nehomogenosti. U [21] ovim načinom rada postignuto je smanjenje emisije dušikovih oksida sa 400 ppm na samo 20 ppm, ali je isto tako zamijećeno da kod PREDIC izgaranja postoji poteškoća s pripremom smjese. Krajem devedesetih godina grupa istraživača s *New ACE Institute Co.* intenzivno se bavila ispitivanjem PREDIC izgaranja, a posebno pokušajima rješavanja problema koji su se pojavili [23, 24, 25, 26]. Pri tom su analizirani razni oblici mlaznica kojima bi se omogućilo ubrizgavanje goriva bez prskanja po stijenkama cilindra, zatim je analiziran utjecaj dodavanja spojeva s kisikom (kao npr. alkohola) u dizelsko gorivo na pomak točka paljenja unazad čime bi se povećao stupanj djelovanja, a osim toga razmatrana je i mogućnost primjene EGR-a sa svrhom regulacije točke paljenja.

Kao druga mogućnost primjene homogene smjese i dizelskog goriva razmatrano je tzv. HCDC izgaranje (engl. Homogeneous Charge Diesel Combustion) [29, 30, 31]. Kod ovog izgaranja dio goriva ubrizgava se za vrijeme takta usisa. To gorivo sa zrakom stvara homogenu smjesu koja se kompresijom zagrije, a izgaranje se potakne drugim mlazom goriva ubrizganim izravno u cilindar pri kraju takta kompresije. Na taj način postiže se izgaranje homogene siromašne smjese kojim se ostvaruju niske vrijednosti emisije dušikovih oksida (NO_x) i čađe, ali bez poteškoća s regulacijom točke paljenja. Pokazalo se da, što je udio goriva ubrizganog tijekom takta usisa veći, to su emisije dušikovih oksida (NO_x) i čađe manje.

S druge pak strane, zbog sklonosti dizelskog goriva samozapaljenju, kod povećane količine goriva ubrizgane za vrijeme takta usisa može doći do pojave detonacije, pa je upravo pojava detonacije ograničavajući faktor količine predmiješanog goriva.

Pored ovih hibridnih verzija HCCI izgaranja postojali su i pokušaji uspostavljanja rada motora s potpunim HCCI izgaranjem koji za pogon koriste dizelsko gorivo [32, 33]. Kod njih se gorivo ubrizgava u zrak za vrijeme takta usisa, pa postoji dovoljno vremena da se stvori potpuno homogena smjesa, koja se pali samozapaljenjem kada temperatura uslijed kompresije naraste dovoljno visoko. Iako je s dizelskim gorivom moguće ostvariti potpuno HCCI izgaranje, pokazalo se da ono baš i nije pogodno za to. Dizelsko gorivo ima relativno visoku temperaturu isparavanja pa je za stvaranje homogene smjese isparenog goriva i zraka potrebna dosta visoka temperatura zraka na usisu, a osim toga ono ima sklonost samozapaljenju, pa tako zagrijana smjesa ima tendenciju prernog paljenja koje dovodi do smanjenja efektivnog stupnja djelovanja.

U novije vrijeme, s obzirom na sve veći značaj emisija štetnih produkata izgaranja i potrošnje goriva, još se više pažnje pridaje novim konceptima koji mogu u tome pomoći, pa se tako i HCCI izgaranje još više istražuje. Pored eksperimentalnih istraživanja sve veći zamah dobivaju istraživanja temeljena na numeričkim simulacijama, a koje se istovremeno sve više razvijaju i usavršavaju. Puno se pažnje posvećuje načinu kontrole točke paljenja, te proširenju područja rada motora. Kod Ottovih motora proširenje područja u prvoj fazi omogućit će kombinirani rad motora, pri čemu će pri niskim i visokim opterećenjima motor raditi sa stranim paljenjem, dok će pri umjerenim opterećenjima raditi sa samozapaljenjem (HCCI). U kasnijoj fazi moguće je očekivati rad sa samozapaljenjem (HCCI) u cijelom području rada motora. Kontrolu točke paljenja omogućiti će unutarnja recirkulacija ispušnih plinova, koja će se regulirati fleksibilnim razvodnim mehanizmom [34, 35], regulacijom kompresijskog omjera ili pak regulacijom temperature usisa [36]. Kod Dieselovih motora komercijalna primjena samozapaljenja homogene smjese pred samim je vratima. HONDA je za 2009. godinu najavila motor koji će raditi sa PCCI izgaranjem (novi naziv za prije spomenuti PREDIC) kao jednom od mjera za snižavanje emisije dušikovih oksida i čađe. Osim toga prema [37] u kamionima, autobusima i drugim teškim vozilima HCCI-motori pogonjeni dizelskim gorivom bit će sve značajniji faktor. Isto kao i kod Ottovog motora u prvoj fazi pojavit će se motori s miješanim načinom rada, HCCI pri nižim opterećenjima i Diesel pri višim, a očekuje se da će se naknadnim razvojem moći u potpunosti zadovoljiti potreba za snagom korištenjem isključivo HCCI izgaranja.

1.2.3. Modeliranje

Kao što je već ranije spomenuto računalno modeliranje HCCI izgaranja može se zamijetiti već u prvim radovima [3], ali značajniji zamah ono dobiva tek u novije vrijeme, kada razvoj računala omogućuje primjenu zahtjevnih proračunskih modela. Kako se HCCI izgaranje fundamentalno razlikuje od izgaranja u Ottovom ili Dieselovom motoru, tako su i modeli za njegovo opisivanje bitno različiti. Tijekom godina pokazalo se da HCCI izgaranjem u najvećoj mjeri upravlja kinetika kemijskih reakcija, pa je pri modeliranju izgaranja HCCI-motora težište stavljeni upravo na modeliranje kemijskih procesa. Vremenski ovisni kemijski procesi modeliraju se proračunima kemijske kinetike koji koriste određene mehanizme. Kemijski proces izgaranja u osnovi je oksidacija nekog određenog goriva, pa su prema tome i mehanizmi tih kemijskih procesa u načelu mehanizmi njihove oksidacije. Do danas razvijen je velik broj detaljnih ili pak reduciranih mehanizama izgaranja raznih goriva [37, 38, 39, 40, 41, 42] ili njihovih surogata [43, 44]. Upotreboom proračuna temeljenih na kemijskoj kinetici i složenih mehanizama izgaranja, točnost proračuna HCCI procesa može biti veća od one postignute uobičajenim proračunima procesa u Ottovim i Dieselovim motorima [45].

Proračunski modeli HCCI procesa izgaranja u motorima mogu se općenito podijeliti u tri osnovna grupe: jednozonski, višezonski i višedimenzionalan CFD proračuni. U svakoj od te tri grupe moguće je primijeniti kemijsku kinetiku i neki od definiranih mehanizama izgaranja.

Kod jednozonskih proračunskih modela [46, 47, 48, 49, 50, 51] pretpostavlja se da je masa u cilindru motora homogena s obzirom na sve fizikalne i kemijske značajke (temperaturu, sastav). Proračun se temelji na prvom glavnem stavku termodinamike, pri čemu se energija oslobođena izgaranjem dobije iz promjene sastava smjese, a promjena sastava smjese iz jednadžbi kemijske kinetike. Sam proračun se obično svodi na rješavanje sustava diferencijalnih jednadžbi prvoga reda gdje je broj jednadžbi jednak broju kemijskih elemenata u mehanizmu plus jedan.

U početnoj fazi modeliranja HCCI izgaranja korišteni su opći programi za izračunavanje kemijske kinetike, pa je tako u [46, 47 i 48] korišten model napravljen u programu HCT [52]. Prijenos topline modeliran je kao konvektivni, pri čemu je koeficijent prijelaza topline izračunavan naširoko korištenom Woschnijevom formulom [53]. Temperatura svih stijenki (glava, klip i cilindar) je jednaka, te se za cijelo vrijeme trajanja proračuna koristi neka njena srednja vrijednost. Za potrebe kemijske kinetike korišten je mehanizam izgaranja prirodnog plina sa 179 kemijskih spojeva i 1125 reakcija, te mehanizam izgaranja mješavine metana i dimetil-etera (DME) sa 102 kemijska spoja i 463 reakcije. S obzirom da je HCT općeniti program za izračunavanje kemijske kinetike, koji je za potrebe ovih analiza

prilagođen proračunima u cilindru motora, izmjena radnog medija se u njemu ne izračunava. Stoga su u [46 i 47] proračuni pokretani u DMT, pri čemu je stanje plina na početku kompresije prethodno izračunato uz prepostavljene vrijednosti faktora pretička zraka svježe smjese, te količine zaostalih produkata izgaranja. U [48] je dodan jednostavan model izmjene radnog medija, kako bi se proračun mogao provesti kroz cijeli ciklus i tako jednostavnije izračunao utjecaj recirkulacije ispušnih plinova.

Fiveland i Assanis [50] razvili su jednozonski proračunski model za simulaciju rada HCCI motora upotrebom CHEMKIN biblioteka [54]. Proračun izračunava promjene stanja za vrijeme cijelog ciklusa četverotaktnog motora. Stoga je u osnovi proračun podijeljen na dva dijela: proračun izmjene radnog medija u kojem se razmatra ulaz svježe smjese kroz usisni ventil i izlaz zaostalih produkata izgaranja kroz ispušni ventil, te na proračun visokotlačnog procesa koji počinje u trenutku zatvaranja usisnog ventila (UVZ), a završava trenutkom otvaranja ispušnog (IVO). Sam visokotlačni proces podijeljen je u tri dijela: kompresija, izgaranje i ekspanzija. Za vrijeme kompresije temperatura se mijenja zbog kompresije i izmjene topline sa stijenkama, dok je promjena sastava mješavine plinova zamrznuta. U nekom trenutku kompresije (kada temperatura smjese prijeđe graničnu vrijednost) počinju se izračunavati kemijske promjene sastava plina u cilindru, pa se osim jednadžbi za tlak i temperaturu rješavaju i jednadžbe promjene kemijskih spojeva, uslijed kojih se oslobađa toplina. Kada temperatura plinova padne ispod granične vrijednosti, izračunavanje promjene kemijskih spojeva ponovno se zamrzava, a promjena temperature i tlaka ponovno se izračunava samo na osnovi promjene volumena i topline izmijenjene sa stijenkama. I ovdje sve stijenke imaju jednaku temperaturu, a za određivanje koeficijenta prijelaza topline korišten je model Assanisa i Heywooda [55]. U modelu su upotrijebljeni mehanizmi za vodik (11 kemijskih spojeva i 23 reakcije) i prirodni plin (53 kemijska spoja i 325 reakcija).

Zanimljiv pristup prikazali su Ogink i Golovichev [51] koji su povezali dva programa, AVL Boost i SENKIN, kako bi dobili jedan koji izračunava promjene stanja u HCCI motoru primjenom kemijske kinetike. AVL Boost [56] je komercijalni simulacijski program koji služi za simulaciju procesa u cijelom motoru, kroz cijelo vrijeme trajanja ciklusa četverotaktnog ili dvotaktnog motora. AVL Boost koristi jednodimenzionalne proračune za izračunavanje strujanja kroz usisne i ispušne dijelove motora, dok u cilindru provodi tzv. bezdimenzionalni, jednozonski, proračun koji koristi razne modele izgaranja u Ottovim i Dieselovim motorima. S druge je pak strane SENKIN [57] program za izračunavanje vremenske promjene homogene reaktivne smjese plina u zatvorenom adijabatskom sustavu, s vremenski ovisnom promjenom volumena, koji za promjenu sastava koristi kemijsku kinetiku. Kako bi se u obzir ipak uzela izmjena topline, izvorni SENKIN-ov

program modificiran je tako što su ubaćene jednadžbe za izračunavanje prijelaza topline upotrebom pojednostavljene WOSCHNI-jeve formule. Za potrebe proračuna kemijske kinetike razvijen je mehanizam oksidacije niza goriva od metana do izooktana koji ima 101 kemijski spoj i 479 kemijskih reakcija.

S obzirom da su kod jednozonskih proračuna temperatura, tlak, sastav, a i sve ostale veličine u cijelom cilindru jednaki, izgaranje nastupa u cijelom cilindru istovremeno, što dovodi do određenih netočnosti. Jednozonski proračuni općenito predviđaju puno brže izgaranje, pa su u skladu s time i najveći tlak i temperatura u cilindru previsoki. Kako ne postoji temperaturna distribucija pa svi dijelovi imaju relativno visoku temperaturu, tako je i predviđanje neizgorjelih ugljikovodika (HC) i ugljikovog monoksida (CO) u pravilu nemoguće, s obzirom da su izvor njihovog nastajanja upravo dijelovi cilindra kod kojih se, iz nekog razloga, ne postiže dovoljno visoka temperatura koja bi osigurala potpuno izgaranje goriva. Prema nekim autorima jednozonskim proračunom može se [45, 58] dosta točno predvidjeti trenutak izgaranja, no pri tom je vrlo važno na koji način se taj trenutak definira. Kod nekih autora trenutak izgaranja definiran je kao trenutak kada se u cilindru oslobodi 10% od ukupne topline, drugi pak promatraju trenutak kada se oslobodi 50% od ukupne topline, a neki promatraju trenutak postizanja najveće vrijednosti brzine oslobađanja topline (ROHR – engl. Rate of Heat Release). S obzirom da je kod jednozonskih proračuna jedina temperatura u cilindru jednaka nekoj srednjoj vrijednosti, može se očekivati da će u realnom motoru lokalne temperature biti veće od te srednje temperature u cilindru. S obzirom da HCCI izgaranje započinje u trenutku kada temperatura plina naraste dovoljno visoko da se pokrenu kemijske reakcije, tako će i izgaranje na mjestima gdje su lokalne temperature veće započeti ranije. U skladu s time, izgaranje izračunato jednozonskim modelom započet će nešto kasnije od onog u realnim uvjetima. No, s obzirom da izgaranje izračunato jednozonskim modelom traje kraće nego što je to u realnim uvjetima, ako se promatra trenutak oslobađanja 50% od ukupne topline, može se desiti da se taj trenutak izračunat jednozonskim modelom poklapa sa onim iz realnih uvjeta. Stoga je vrlo važno znati što se točno želi promatrati. Ukoliko se općenito želi promatrati položaj izgaranja tada se on može promatrati i s trenutkom oslobađanja 50% od ukupne topline, za što se može koristiti i jednozonski proračun. No ukoliko se želi promatrati trenutak samog početka izgaranja, tada jednozonski model više neće dati zadovoljavajuće rezultate.

Kako bi se u proračun uvela prostorna raznolikost temperature i sastava, moguće je jednadžbe kemijske kinetike uvesti u višedimenzionalni CFD proračun. Tada se u svakoj ćeliji rješava sustav od onoliko diferencijalnih jednadžbi koliko ima kemijskih elemenata u mehanizmu. Ovakvi proračuni

bi s uobičajenim mehanizmima izgaranja trajali predugo, pa se obično koriste razna pojednostavljenja kojima se proračun ubrzava. Kong i sur. [59] integrirali su proračun kemijske kinetike sa CFD proračunom mehanike fluida, no da bi se ubrzalo rješavanje jednadžbi pretpostavljeno je da je kinetička vremenska konstanta svih kemijskih spojeva ista i da odgovara onoj izračunatoj za gorivo. Kusaka i Daisho [60] izravno su integrirali kemijsku kinetiku sa CFD proračunom mehanike fluida tako što se u svakoj ćeliji rješavaju sve diferencijalne jednadžbe upotrijebljenog mehanizma. Pri tom su koristili dvodimenzionalan proračun s relativno grubom mrežom (30 x 60) i mehanizmom sa 151 kemijskim spojem. Na posebno konstruiranom računalu ovakva simulacija zahtijevala je proračunsko vrijeme od 60 min/ $^{\circ}$ KV, što znači da bi za proračun jednog visokotlačnog procesa od 250 $^{\circ}$ KV trebalo više od 10 dana. Bourdon i sur. [61] razvili su reducirani mehanizam izgaranja izooktana i n-heptana koji koristi samo 5 reakcija (3 niskotemperaturne i 2 visokotemperaturne) i primijenili ga na CFD proračune. S takvim mehanizmom proračun dijela cilindra s približno 10000 ćelija traje približno 5 sati i s njime je moguće dobro predviđanje paljenja, oslobađanja topline, te toka tlaka i temperature, bez mogućnosti određivanja emisije pri takvom izgaranju. Colin i sur. [62] isto su se pozabavili razvojem pojednostavljenog modela izgaranja kojim bi u CFD proračunu skratili računsko vrijeme. Tako su razvili model temeljen na bazi podataka o samozapaljenju dobivenoj pomoću detaljnog kemijsko kinetičkog proračuna provedenog u programu SENKIN. Ovakav model isto kao i model Bourdona dobro predviđa paljenje i izgaranje, bez predviđanja emisije, ali bi se mogao nadograditi s bazama podataka o brzinama stvaranja nekih štetnih produkata, kao npr. ugljikovog monoksida (CO) i neizgorjelih ugljikovodika (HC), te time omogućiti izračunavanje emisija tih produkata.

Kao neka vrsta kvazidimenzionalnih proračuna razvijeni su tzv. višezonski proračuni. Kod višezonskog proračuna prostor i masa u cilindru dijele se na više dijelova (zona) kod kojih je masa unutar zone homogena, no između zona postoji razlika u temperaturi i sastavu. Pomoću više zona pokušava se simulirati prostorna nehomogenost smjese u cilindru. Proračuni se međusobno razlikuju s obzirom na broj zona, način međusobne interakcije između zona i interakcije s okolišom, te način izračunavanja fizikalnog modela.

Tako su npr. Fiveland i Assanis [63, 64] razvili dvozonski model kojim se pokušao uzeti u obzir utjecaj graničnog sloja na izmjenu topline, a time i na značajke izgaranja. Razvijen je model izmjene topline u graničnom sloju koji pored proračuna toplinskog toka kroz stijenke izračunava i debljinu graničnog sloja. S obzirom da se pokazalo da je za dobro predviđanje emisija štetnih plinova važno uključiti male volumene koje čini prostor zračnosti između klipa i cilindra, iznad klipnih prstenova (procjepi, engl.

Crevice), prethodnom modelu dodana je i treća zona [65] koja predstavlja upravo te volumene. Za potrebe modeliranja masenog protoka iz rubne zone u zonu procjepa razvijen je dinamički model klipnih prstenova sa šest volumena. Osim toga, zona graničnog sloja podijeljena je čvorovima na više manjih dijelova, pa se time u obzir uzima promjena volumena uz stijenkou cilindra koja se dešava zbog pomaka klipa.

Easley i sur. [66] proširili su broj zona na šest. Zone su podijeljene tako da jedna središnja zona ima oblik valjka, a ostale zone obavijaju prethodnu zonu s određenom deblijinom. Šesta zona predstavlja procjep između klipa i cilindra. Na početku proračuna definira se sastav i temperatura u svakoj zoni. Tri središnje zone su adijabatske, a zona procjepa je izotermna i ima temperaturu stijenke. Izmjena topline s rubne zone na stijenkou računa se Woschnijevim [53] modelom. Noda i Foster [67] u svom višezonskom (10 – 30 zona) modelu upotrijebili su mehanizam izgaranja vodika s relativno malim brojem elemenata i reakcija. Proračunski model nema izmjenu mase ili topline između zona, a izmjena topline sa stijenkama isto se tako izračunava Woschnijevom korelacijom.

Grupa znanstvenika sa LLNL-a (Lowrence Livermore National Laboratory) [58, 69, 70, 71] upotrijebila je kombinirani 10 zonski - CFD model pri simulaciji HCCI izgaranja propana i izooktana. Za vrijeme kompresije promjena stanja u cilindru računa se pomoću 2D CFD proračuna. Za cijelo to vrijeme odvija se paralelno i 10 zonski proračun baziran na kemijskoj kinetici koji prati temperaturu izračunatu CFD-om. U trenutku kada počinju kemijske reakcije izgaranja goriva, proračun se prebacuje isključivo na 10 zonski model, a po završetku izgaranja ekspanzija se ponovno izračunava CFD proračunom. U 10 zonskom modelu nema izmjene topline niti mase između zona, dok rubne zone izmjenjuju toplinu sa stijenkou, pri čemu se ta izmjena topline izračunava Woschnijevom korelacijom. Model koristi takozvani razdvojeni rješavač, pri čemu se diferencijalne jednadžbe svake pojedine zone rješavaju odvojeno, a nakon toga se rezultati uskladjuju kako bi se postigao jednak tlak u svim zonama. Proračun se pokreće u trenutku zatvaranja usisnih ventila (UVZ), s prepostavljenim vrijednostima tlaka, temperature i sastava, te se provodi do trenutka otvaranja ispušnog ventila (IVO). Model je kasnije proširen na 40 zona kako bi se postigla još veća prostorna raznolikost [72, 73, 74].

Ogink i Golovitchev [75, 76] povezali su svoj višezonski model s programom za simulaciju procesa u motoru. Model se sastoji od zone procjepa, rubne zone, zone za izmjenu mase i višestrukih središnjih zona. Izmjena topline između zona i stijenki modelirana je tako da se srednja vrijednost izmjenjene topline cjelokupne mase raspodjeli na zone proporcionalno njihovom volumenu, dok se izmjena topline između zona zanemaruje. Model isto tako koristi razdvojeni rješavač, pa rješenja diferencijalnih jednadžbi

svake pojedine zone treba naknadno uskladiti kako bi se postigao jednaki tlak u svim zonama.

Babajimopoulos i sur. [77, 78] napravili su nadogradnju Acevesovog kombiniranog 10 zonskog - CFD modela tako što su CFD proračun proširili na izmjenu radnog medija, pa model CFD proračunom izračunava taktove ispuha, usisa i dijela kompresije, a 10 zonski model izračunava izgaranje. Prelazak na 10 zonski model isto je tako promijenjen, pa se on dešava u trenutku kada najveća temperatura u cilindru pređe granicu od 950 K.

Svi prethodno opisani modeli, izuzev dvozonskog i trozonskog modela Fivelanda i Assanisa, nemaju izmjenu mase između zona. Za razliku od njih Komninos i sur. [79, 80] prvenstveno su uveli izmjenu mase. U [79] izgaranje se modelira pojednostavljenim empirijskim modelom dok je [80] uvedena kemijska kinetika. Kako bi se smanjilo vrijeme trajanja proračuna, promjena sastava i rezultirajuća oslobođena toplina računaju se odvojeno, a rezultati se u drugom koraku usklađuju izmjenom mase između zona te se na taj način postiže jednak tlak u svim zonama uz zadovoljavanje jednadžbe prvog glavnog stavka. Pored toga model visokotlačnog procesa je samostalan, bez proračuna raspodjele temperature i mase, pa se na početku kompresije početni uvjeti prepostavljaju i oni su jednakim u svim zonama.

Kongsereeparp i Checkel [81 i 82] u svoj 13 zonski model uključili su izmjenu topline između zona, ali su ispuštali zonu procjepa, te zanemarili izmjenu mase. U [81] početni uvjeti u trenutku zatvaranja usisnih ventila se zadaju, dok je u [82] uveden model izmjene radnog medija, te model određivanja temperature i sastava u trenutku prelaska s jednozonskog na višeozonski model.

Pored prezentiranih modela u literaturi se može naći još nekoliko njih, no oni svojim opisom odgovaraju nekom od prethodno opisanih modela [83, 84, 85, 86, 87].

1.3. Hipoteza

Analizom postojećih proračunskih modela, te načina inicijalizacije i tijeka izgaranja u HCCI motoru, moguće je izdvojiti značajke koje definiraju taj proces izgaranja i koje moraju biti održane u modelima njihovog izračunavanja. Istom analizom moguće je uočiti područje proračuna u kojem ima prostora za napredak. Pretpostavka je da se može postaviti matematički model proračuna izgaranja u motoru s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem (HCCI) koji će s jedne strane vjernije opisivati stanje u cilindru motora za vrijeme visokotlačnog procesa od dosadašnjih pojednostavljenih modela, a s druge strane biti brži i jednostavniji od složenih modela koji koriste CFD proračune.

1.4. Znanstveni doprinos

Razvit će se novi i drugačiji simulacijski proračun visokotlačnog procesa motora koji će imati više zona, te će zbog svoje karakteristike moći određivati početak izgaranja, duljinu trajanja izgaranja, te emisije štetnih tvari. Razvijeni simulacijski proračun bit će vezan na program za izračunavanje procesa u motoru s unutarnjim izgaranjem, te će iteracijskim proračunom kroz nekoliko uzastopnih ciklusa moći predvidjeti početne uvjete u trenutku zatvaranja usisnih ventila, posebno pri radu s visokim udjelom iznutra recirkuliranih produkata izgaranja. Takav model moći će se koristiti prilikom istraživanja motora s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem, za izvođenje raznih analiza:

- ispitivanje raznih strategija upravljanja

Glavni problem HCCI motora je upravljanje točkom paljenja. Postoji niz prijedloga strategija upravljanja točkom paljenja koje je na neki način potrebno evaluirati, a isto tako i dalje razvijati.

- analiza mehanizma izgaranja

Pri razvoju mehanizama izgaranja pojedinog goriva, mehanizam se ispituje i uspoređuje s rezultatima ispitivanja pri različitim uvjetima. Između ostalog mehanizam je potrebno ispitati i u uvjetima rada u motoru s unutarnjim izgaranjem.

- ispitivanje upotrebe raznih goriva

HCCI motori po svom načinu izgaranja mogu biti pogonjeni raznim gorivima. Različita goriva zahtijevaju i različite uvjete u cilindru, a i ostvaruju različite karakteristike motora pri radu. Upotrebom različitih mehanizama izgaranja moći će se vršiti proračuni za razna goriva.

1.5. Pregled rada

Rad je prikazan u sedam poglavlja u koja su uključeni uvod, i popis literature. U drugom poglavlju detaljno su opisani svi razvijeni simulacijski modeli. Osim toga prikazane su i osnove kemijske kinetike nužne za razumijevanje prikazanih modela. U trećem poglavlju prvo je provedena verifikacija pristupa i numeričke procedure pomoću četverozonskog modela, a zatim su modeli validirani usporedbom rezultata proračuna s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja. Pri tom je fokus stavljen na šestzonski model koji i je konačni rezultat ovog doktorata. U četvrtom poglavlju analizirani su utjecaji primjene propuhivanja pored klipa, povećanja broja zona, te primjene različitih korelacija za izmjenu topline na rezultate šestzonskog proračuna, a u petom poglavlju razvijeni model primjenjen je za provedbu analiza utjecaja veličine zone procjepa i temperatura stijenki prostora izgaranja na emisije CO i HC. Na kraju su u šestom poglavlju izvedeni sveukupni zaključci zajedno s preporukama za daljnji rad.

2. MODELIRANJE I PRORAČUN HCCI PROCESA

2.1. Uvod u modeliranje

Od samih početaka istraživanja HCCI izgaranja zamijećeno je da se ono potpuno drugačije ponaša u odnosu na izgaranja u konvencionalnim motorima. Pri tome se pod konvencionalnim izgaranjem smatra izgaranje u Ottovom motoru koje je karakterizirano širenjem plamena od mesta zapaljenja stranim izvorom energije prema neizgorijelom dijelu smjese goriva i zraka, te izgaranje u Dieselovom motoru koje je karakterizirano tzv. difuzijskim plamenom. Kod HCCI izgaranja zamijećeno je da izgaranje započinje na mnogo mesta istovremeno, a da sam proces izgaranja ne ovisi toliko o strujanjima u cilindru motora, već više o brzini kemijskih reakcija karakterističnih za samo izgaranje goriva. Ova činjenica proizlazi iz same prirode HCCI izgaranja, a vrijedi za potpuno homogene smjese goriva i zraka, dok kod smjesa kod kojih se određenom slojevitošću pokušava upravljati točkom paljenja to ne mora biti točno.

Kemijski procesi koji se odvijaju u cilindru motora za vrijeme HCCI izgaranja istovjetni su kemijskim procesima koji se inače odvijaju u fronti plamena. No, kod izgaranja s frontom plamena, neizgorjela smjesa nalazi se u stanju u kojem su kemijski procesi izrazito spori ili ih uopće nema. Ta hladna smjesa dovodi se u stanje zapaljenja difuzijom radikala i topline u nju, a ta difuzija izrazito je ovisna o brzini miješanja, tj. o strujanjima u cilindru. Iz tog razloga kod konvencionalnih izgaranja turbulencija je vrlo važan faktor pri njihovom modeliranju. Kako se kod HCCI izgaranja cijela smjesa odjednom dovodi u stanje samozapaljenja, a tada je brzina kemijskih reakcija mnogo veća od brzine miješanja smjese uslijed strujanja u cilindru, tako to strujanje niti ne utječe na ukupno izgaranje u cilindru. Proučavanjem brzine kemijskih reakcija bavi se grana fizikalne kemije koja se naziva kemijska kinetika, pa se stoga vrlo često kaže da HCCI izgaranjem upravlja kemijska kinetika.

Zaključak da strujanja u cilindru ne utječu na sam proces izgaranja u HCCI motoru s jedne strane uvelike olakšava modeliranje tog procesa, ali s druge strane unosi nove komplikacije. Treba napomenuti da iako strujanja u cilindru ne utječu na sam proces izgaranja, ona utječu na homogenost smjese, temperaturnu i sastavnu, te na taj način ipak neizravno utječu i na samo izgaranje.

Kako je HCCI izgaranje vođeno brzinom kemijskih reakcija, koje se pak mogu izračunavati proračunima kemijske kinetike, za modeliranje HCCI izgaranja mogu se upotrijebiti ti proračuni. Isto tako, s obzirom da strujanje u cilindru ima smanjeni utjecaj na izgaranje, ono se ne mora nužno obuhvatiti modeliranjem, pa se proračuni strujanja radnog medija u cilindru,

za vrijeme izgaranja, mogu zanemariti, ili pak odvojiti od kemijskog dijela proračuna. Na taj način proračun se pojednostavljuje i postaje čisto termodinamički, tj. termokinetički, s obzirom da se u obzir uzima i utjecaj kemije. Kod takvog termokinetičkog proračuna prostor cilindra može se predstaviti s jednim volumenom (zonom) ili s njih više. U svakom od tih volumena (zona) temperatura, tlak, sastav itd. su jednoliki, dok te vrijednosti između zona mogu biti različite. Zavisno od načina prikaza prostora cilindra ovi termokinetički proračuni mogu se prema tome podijeliti na jednozonske i višezonske proračune. Prije nego što se detaljnije prikažu ovi proračuni potrebno je nešto više reći o kemijskoj kinetici.

2.2. Kemijska kinetika

Kemijska kinetika bavi se proučavanjem brzine kemijskih reakcija, njihovim mjerjenjem, te analizom eksperimentalnih rezultata kako bi se dobila sustavna zbirka informacija koja obuhvaća kvantitativne kinetičke podatke o bilo kojoj kemijskoj reakciji. Time je omogućena međusobna usporedba kemijskih reakcija te njihova kinetička klasifikacija. Iako se u ovom radu nije vršila kinetička analiza eksperimentalnih rezultata kemijskih reakcija, već se koristio dio te znanosti koji se bavi predviđanjem smjera i brzine kemijskih procesa, tj. njihovim proračunima, da bi se oni mogli razumjeti potrebno je definirati neke osnovne pojmove i postulate.

Ako pretpostavimo da se neka kemijska reakcija odvija po jednadžbi:

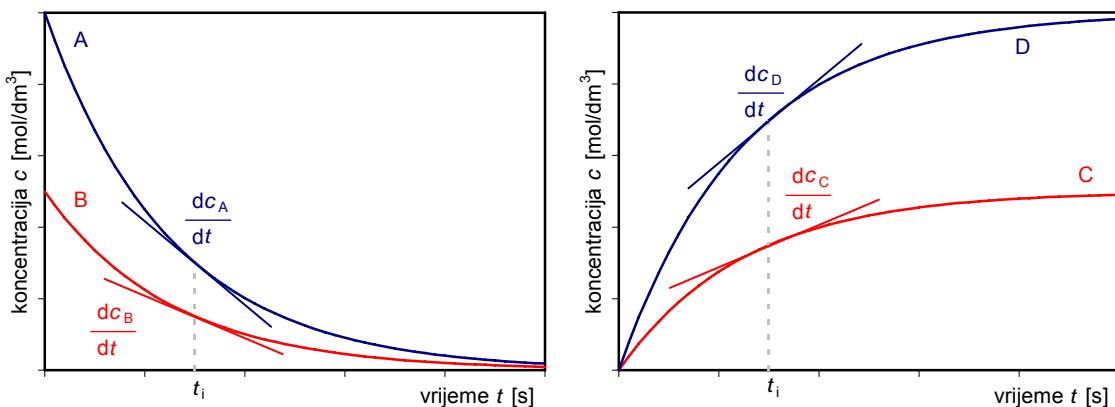
$$a \cdot A + b \cdot B \Rightarrow c \cdot C + d \cdot D \quad (1)$$

gdje su: a, b, c, d koeficijenti ravnoteže ili tzv. stehiometrijski koeficijenti, a A, B, C, D oznake kemijskih spojeva, tada ovakva jednadžba daje informaciju koliko će produkata (C i D) nastati iz reaktanata (A i B) nakon što se uspostavi kemijska ravnoteža. Kemijska ravnoteža postiže se na kraju reakcije, pri čemu reakcija može biti vrlo spora (npr. pretvaranje dijamanta u grafit) ili vrlo brza (npr. neutralizacija kiseline lužinom). Ako se želi saznati kakav je sastav produkata, ili pak reaktanata u nekom trenutku za vrijeme reakcije, mora se poznavati brzina reakcije. Brzina reakcije ω_R definirana je kao promjena koncentracije produkata, ili pak reaktanata u vremenu. Prema tome jedinica za brzinu kemijske reakcije u SI sustavu bila bi $[kmol/(m^3s)]$, no uobičajenije se koristi $[mol/(dm^3s)]$. Brzinu kemijske reakcije (1) može se tako zapisati kao:

$$\omega_R = -\frac{1}{a} \frac{dc_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dc_B}{dt} = \frac{1}{c} \frac{dc_C}{dt} = \frac{1}{d} \frac{dc_D}{dt}. \quad (2)$$

Ako se promjena koncentracije pojedinog kemijskog spoja prikaže dijagramom, tada brzina kemijske reakcije u trenutku t predstavlja nagib tangente na tu krivulju u trenutku t (slika 2.1.). S obzirom da brzina

reakcije koja ide u smjeru od reaktanata prema produktima ima pozitivnu veličinu, a nagib tangente na krivulji koncentracije reaktanata (A ili B) ima negativnu vrijednost, ispred derivacije koncentracije produkata stoji negativan predznak, dok u slučaju derivacije koncentracije produkata nema tog negativnog predznaka jer je sama derivacija pozitivna. Iako se brzina kemijske reakcije može izraziti brzinom promjene koncentracije reaktanata ili produkata, uobičajeno se ona izražava preko promjene koncentracije reaktanata.



Slika 2.1. Promjena koncentracije reaktanata lijevo i produkata desno, te pripadajuće brzine promjene koncentracija u trenutku t_i

Ako se pogleda tok krivulja promjene koncentracije u vremenu vidi se da, kako reakcija odmiče, brzina kemijske reakcije se smanjuje (nagib tangente na krivulju opada). Prema tome, kako se mijenja koncentracija reaktanata tako se mijenja i brzina reakcije što dovodi do zaključka da brzina kemijske reakcije ovisi o koncentraciji reaktanata. Pokazalo se da je brzina kemijske reakcije proporcionalna umnošku koncentracije reaktanata podignutih na određenu potenciju $\omega_R \propto c_{\text{reaktanti}}^n$. Prema tome brzina kemijske reakcije (1) može se prokazati kao:

$$\omega_R = k \cdot c_A^n \cdot c_B^m \quad (3)$$

gdje su: k , [promjenjiva]¹ - konstanta brzine reakcije; c_A i c_B , $\left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right]$ - koncentracije spojeva A i B; n i m , [-] - eksponenti na koncentracijama A i B, tj. red reakcije po spoju A odnosno B.

Ukupni red reakcije jednak je sumi pojedinačnih redova, tj. jednak je $(n+m)$. Zadatak kemijsko kinetičke analize eksperimentalnih rezultata je pronalaženje koeficijenata k , n i m za svaku moguću reakciju. Ukoliko se

¹ S obzirom da različite reakcije imaju različite eksponente na koncentracijama, a da je jedinica brzine kemijske reakcije ω_R uvijek ista [$\text{kmol}/(\text{m}^3\text{s})$], jedinica mjere konstante brzine reakcije k ovisiti će o eksponentima na koncentracijama, te je stoga promjenjiva,

reakcija (1) odvija u jednom koraku, tj. iz reaktanata se izravno stvaraju produkti (bez stvaranja nekih međuspojeva), tada se poznavanjem koeficijenata k , n i m može izračunati brzina kemijske reakcije, a iz nje se integracijom može odrediti funkcionalna ovisnost koncentracije pojedinih spojeva o vremenu. Na taj način moguće je odrediti stanje reaktanata i produkata u svakom trenutku.

Promatranjem kemijskih reakcija pri različitim temperaturama može se zaključiti da brzina kemijskih reakcija dosta ovisi o temperaturi. U jednadžbi (3) jedini faktor koji bi mogao ovisiti o temperaturi je konstanta brzine reakcije. Promatranjem reakcije pri različitim temperaturama može se za svaku temperaturu odrediti njena konstanta brzine reakcije, te na taj način pokazati da ona zaista ovisi o temperaturi. Krajem 19. stoljeća Svante August Arrhenius¹ pokazao je da se kod velike većine kemijskih reakcija konstanta brzine reakcije može prikazati sa:

$$k = A \cdot e^{\frac{-E_a}{\mathfrak{R}T}} \quad (4)$$

gdje su: E_a , $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right]$, - energija aktivacije; \mathfrak{R} , $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol} \cdot \text{K}} \right]$ - opća plinska konstanta; T , [K] – temperatura; A , [promjenjiva] – faktor frekvencije.

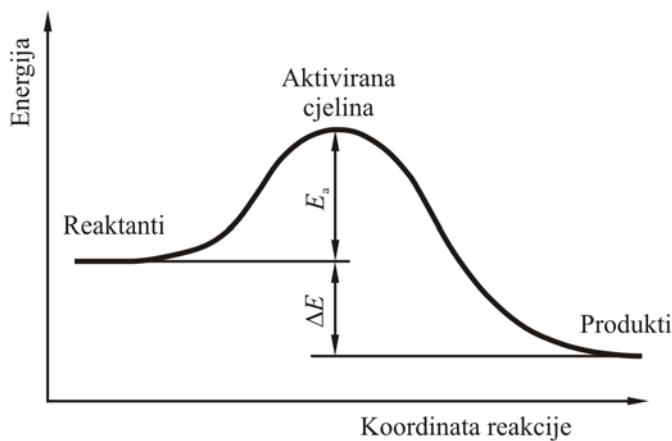
Faktor frekvencije A kod mnogih je reakcija konstantan, no kod nekih reakcija pokazalo se da on ovisi o temperaturi, pa se u općem slučaju Arrheniusova jednadžba može zapisati u obliku:

$$k = B \cdot T^\beta \cdot e^{\frac{-E_a}{\mathfrak{R}T}} \quad (5)$$

gdje su: B i β nove konstante za određivanje faktora frekvencije.

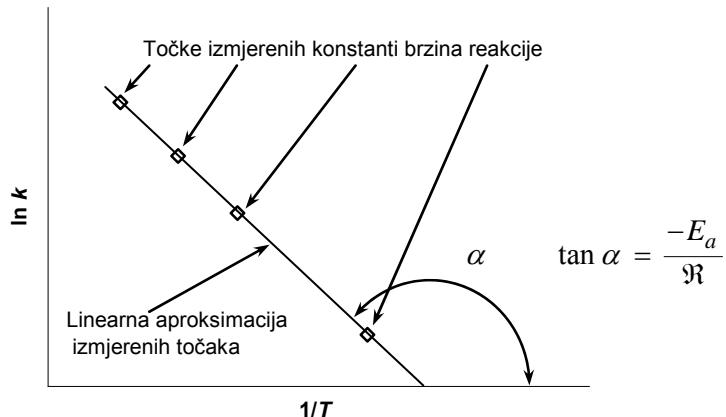
Energija aktivacije E_a iz jednadžbi (4) i (5) može se objasniti kao visina energijske prepreke preko koje reaktanti moraju prijeći da bi se pretvorili u proekte. Na slici 2.2. prikazan je energetski profil kemijske reakciju u kojem se područje oko lokalnog maksimuma naziva aktivirana cijelina, tj. prijelazno stanje. U kinetičkoj teoriji sudara smatra se da do reakcije dolazi samo kod sudara između onih molekula koje sadrže dovoljno energije da bi reagirale, tj. svaki sudar molekula reaktanata ne mora nužno dovesti do reakcije. Taj minimum energije odgovara energiji aktivacije, a izraz $e^{\frac{-E_a}{\mathfrak{R}T}}$ u tom slučaju predstavlja udio sudara molekula reaktanata koji sadrži dovoljno energije da se pretvori u proekte. Reakcija prikazana na slici 2.2. predstavlja egzotermnu reakciju jer je energetski nivo krajnjih produkata niži od energijskog nivoa reaktanata, pri čemu se reakcijom oslobođila

¹ Svante August Arrhenius (1859-1927) bio je švedski znanstvenik, izvorno fizičar, vrlo često spominjan kao kemičar i kao jedan od osnivača fizikalne kemije kao znanosti.



Slika 2.2. Energetski profil kemijske reakcije

energija u iznosu (ΔE). Energija aktivacije može se računati primjenom teorija kemijske kinetike, no pouzdanija metoda je određivanje iz eksperimentalnih rezultata crtanjem dijagrama izmjerениh vrijednosti $\ln k$ u ovisnosti o faktoru $1/T$. U takvom dijagramu nagib ravne linije koja najbolje aproksimira prikazane točke odgovara vrijednosti $\frac{-E_a}{R}$ (slika 2.3.).


 Slika 2.3. Primjer određivanja energije aktivacije E_a .

Ako sada reakciju prikazanu jednadžbom (1) prikažemo u općem obliku tako da i s lijeve i s desne strane imamo sve kemijske spojeve koji sudjeluju u reakciji, onda tu reakciju možemo prikazati jednadžbom:

$$\sum_{i=1}^{N_{sp}} v_i \chi_i \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_{sp}} v_i'' \chi_i \quad (6)$$

gdje su: v_i' - stehiometrijski koeficijent i -tog reaktanta; v_i'' - stehiometrijski koeficijent i -tog produkata; χ_i - oznaka i -tog kemijskog spoja u reakciji; N_{sp} - broj svih kemijskih spojeva u kemijskoj reakciji.

Ako se sada usporede jednadžbe (1) i (6) lako se može doći do zaključka da su stehiometrijski koeficijenti reaktanata v_i' koji odgovaraju koeficijentima

kemijskih spojeva C i D iz jednadžbe (1) jednaki nuli, isto kao i stehiometrijski koeficijenti produkata v_i'' koji odgovaraju koeficijentima kemijskih spojeva A i B u jednadžbi (1). Kod ovakvog načina zapisa, uz primjenu ranije prikazanih jednadžbi, brzina stvaranja pojedinog kemijskog spoja ω_i može se izračunati pomoću:

$$\dot{\omega}_i = \left(v_i'' - v_i' \right) \cdot k \cdot \prod_{j=1}^{N_{sp}} c_j^{n_j} \quad (7)$$

gdje su: c_j , $\left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right]$ - koncentracija j-tog kemijskog spoja; n_j – red reakcije po j -tom kemijskom spoju (koeficijenti $n_j=0$ za one kemijske spojeve za koje je $v_i'=0$)

Konstanta brzine reakcije k u jednadžbi (7) izračunava se jednadžbom (5).

Ako se pretvorba reaktanata u produkte odvija u jednom koraku kako je to prikazano u jednadžbama (1) i (6) onda se ta reakcija može nazvati elementarnom reakcijom. Međutim, reakcije plinova vrlo se rijetko odvijaju u jednom koraku, jednom elementarnom reakcijom, već se one odvijaju kroz veći broj elementarnih reakcija. Najjednostavniji oblik složene kemijske reakcije je tzv. povratna reakcija kod koje se istovremeno odvija pretvaranje reaktanata u produkte, ali i povratno pretvaranje produkata u reaktante. Taj bi se sustav mogao zapisati s dvije jednadžbe koje imaju oblik prikazan jednadžbom (7), pri čemu bi svaka prikazivala jedan smjer reakcije, ali se isto tako može prikazati i jednom jednadžbom za povratne reakcije:

$$\sum_{i=1}^{N_{sp}} v_i' \chi_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{N_{sp}} v_i'' \chi_i \quad (8)$$

Kod povratnih reakcija postoje dvije konstante brzine reakcije, pri čemu jedna karakterizira brzinu reakcije u smjeru prema naprijed (k_f), dok druga karakterizira brzinu reakcije u smjeru prema nazad (k_r). Obje konstante brzine reakcije mogu se izračunati jednadžbom (5) uz primjenu odgovarajućih konstanti za smjer prema naprijed i prema nazad. No, poznавanjem jedne od konstanti druga se može izračunati pomoću konstante ravnoteže za zadanu kemijsku reakciju. Prema [88] omjer konstanti brzina reakcije jednak je konstanti ravnoteže po koncentraciji (K_c):

$$K_c = \frac{k_f}{k_r}, \quad (9)$$

a konstanta ravnoteže po koncentraciji može se izračunati iz:

$$K_c = K_p \cdot \left(\frac{p_{\text{atm}}}{\mathfrak{R}T} \right)^{\sum_{j=1}^{N_{\text{sp}}} (\nu_j'' - \nu_j)} ; \quad (10)$$

gdje su: K_p , - konstanta ravnoteže po parcijalnom tlaku; p_{atm} , [Pa/atm] brojčana vrijednost tlaka jedne atmosfere (101325 Pa).

Konstanta ravnoteže po parcijalnom tlaku može se izračunati iz:

$$K_p = e^{-\frac{\Delta G_m^0}{\mathfrak{R}T}} , \quad (11)$$

gdje je ΔG_m^0 , $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right]$ - promjena molarne Gibbsove slobodne energije pri potpunoj promjeni sastava od reaktanata u produkte, a pri standardnom tlaku od 1 atm (101325 Pa) koja se može izračunati iz:

$$\Delta G_m^0 = \sum_{j=1}^{N_{\text{sp}}} [(\nu_j'' - \nu_j^0)(H_{m,j}^0 - S_{m,j}^0 \cdot T)] , \quad (12)$$

gdje su: $H_{m,j}^0$, $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}} \right]$ - standardna molarna entalpija j -tog kemijskog spoja; $S_{m,j}^0$, $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol} \cdot \text{K}} \right]$ - standardna molarna entropija j -tog kemijskog spoja.

Kod nekih povratnih reakcija izračunavanje konstante brzine reakcije prema nazad pomoću konstante ravnoteže nije prikladno pa je u tom slučaju potrebno definirati energiju aktivacije E_a , te faktore B i β i za povratni smjer reakcije, te se u tom slučaju konstanta brzine reakcije prema nazad (k_r) računa pomoću jednadžbe (5).

Jednadžbe (1), (6) i (8) prikazuju jednu elementarnu reakciju ili pretvorbu koja se odvija u jednom koraku. Većina kemijskih procesa plinova odvija se kroz niz elementarnih reakcija, pri čemu se te elementarne reakcije mogu odvijati jedna iza druge, ili pak istovremeno, stvarajući pritom veći broj međuspojeva, te veći broj konačnih produkata. Međuspojevi se u nekim elementarnim reakcijama stvaraju, dok u drugim reakcijama oni nestaju. Eksperimentalna analiza međuspojeva vrlo je važna pri definiranju mehanizma reakcije kojim se pokušava opisati neki složeni kemijski proces.

Pri definiranju mehanizma reakcije analiziraju se svi dostupni kinetički podaci o promjenama reaktanata, produkata i međuspojeva u razmatranom procesu, te se na osnovu tih podataka postavlja niz elementarnih reakcija kroz koje se odvija sam proces, a za svaku od tih reakcija definiraju se kinetičke konstante pomoću kojih se može odrediti brzina reakcije. Predloženi mehanizam mora udovoljiti svim eksperimentalnim podacima, no

to ne znači da je taj mehanizam upravo ono što se odvija u stvarnosti. Zbog poteškoća u eksperimentalnom određivanju svih međuspojeva, kojih može biti i do nekoliko stotina, može se desiti da nekoliko *različitih* mehanizama udovoljava svim eksperimentalnim rezultatima. Činjenica da neki mehanizam zadovoljava dostupne eksperimentalne rezultate znači da je taj mehanizam moguć.

Za svaku od elementarnih reakcija vrijede jednadžbe i značajke opisane ranije. Imajući to u vidu, mehanizam reakcije u općem obliku može se prikazati jednadžbom:

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} v_{i,k} \chi_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} v_i^{\nu_k} \chi_i, k = 1, \dots, N_{\text{reak}} \quad (13)$$

gdje su: $v_{i,k}$ - stehiometrijski koeficijent i -tog reaktanata u k -toj reakciji; $v_i^{\nu_k}$ - stehiometrijski koeficijent i -tog produkata u k -toj reakciji; N_{reak} – broj kemijskih reakcija u mehanizmu.

Jednadžba (13) sastoji se od N_{reak} jednadžbi elementarnih reakcija, pri čemu je, s obzirom da svaka reakcija sadrži samo nekoliko spojeva iz mehanizma, veći broj stehiometrijskih koeficijenata $v_{i,k}$ i $v_i^{\nu_k}$ svake reakcije jednak nuli.

Za svaku od kemijskih reakcija može se definirati brzina te reakcije, pri čemu je kod većine elementarnih reakcija red reakcije određenog kemijskog spoja jednak njegovom stehiometrijskom koeficijentu. Prema tome brzina k -te kemijske reakcije u svakom trenutku može se izračunati iz:

$$\omega_{R,k} = k_{f,k} \cdot \prod_{i=1}^{N_{\text{sp}}} c_i^{v_{i,k}} - k_{r,k} \cdot \prod_{i=1}^{N_{\text{sp}}} c_i^{v_i^{\nu_k}} \quad (14)$$

Konstante brzine svake reakcije prema naprijed ($k_{f,k}$) i prema nazad ($k_{r,k}$) računaju se pomoću jednadžbe (5), kada su energija aktivacije E_a i faktori B i β zadani za oba smjera reakcije. Kada su ti faktori zadani samo smjer reakcije prema naprijed tada se koeficijent brzine reakcije prema nazad ($k_{r,k}$) računa pomoću konstante ravnoteže (jednadžbe (9)-(12)). U jednadžbi (14) eksponenti na koncentracijama jednaki su stehiometrijskim koeficijentima, što kod velike većine reakcija i jest slučaj, no kod onih reakcija kod kojih redovi reakcije ne odgovaraju stehiometriskim koeficijentima, ti redovi moraju biti zadani.

Kod nekih reakcija postoji tzv. *treće tijelo* (engl. third body) koje je potrebno da bi reakcija mogla napredovati. Treće tijelo mogu biti molekule stabilnog kemijskog spoja, inertnih spojeva ili pak stijenke komore u kojoj se odvija kemijski proces. Treće tijelo ne sudjeluje u samoj kemijskoj reakciji, ali ju pospješuje tako što osigurava potrebnu energiju aktivacije (kod dekompozicijskih reakcija) ili pak apsorbira višak energije (kod

povratnih reakcija). Reakcije s trećim tijelom (engl. third body reactions) označavaju se tako što se uz reaktivne kemijske spojeve u jednadžbi reakcije na obje strane dodaje pribrojnik M:



Kod reakcija s trećim tijelom na brzinu reakcije utječe i koncentracija tih tzv. trećih tijela pa se jednadžba (14) nadopunjuje faktorom kojim će se obuhvatiti i taj utjecaj:

$$\omega_{R,k} = \left(\sum_i^{N_{sp}} (\alpha_{ik} \cdot c_i) \right) \left[k_{f,k} \cdot \prod_{i=1}^{N_{sp}} c_i^{v_i \cdot k} - k_{r,k} \cdot \prod_{i=1}^{N_{sp}} c_i^{v_i \cdot k} \right] \quad (16)$$

U jednadžbi (16) koeficijent α_{ik} predstavlja utjecaj i -tog kemijskog spoja u k -toj reakciji na koncentraciju trećeg tijela u toj reakciji. Koeficijenti α_{ik} nazivaju se učinkovitosti trećeg tijela. Ukoliko svi kemijski spojevi jednoliko doprinose kao treća tijela u reakciji k tada su svi $\alpha_{ik} = 1$, za taj k . U tom slučaju je prvi faktor u jednadžbi (16) jednak ukupnoj koncentraciji mješavine.

Prema jednadžbi (5) vidi se da konstanta brzine reakcije ovisi samo o temperaturi. Kod nekih reakcija, međutim, pri određenim uvjetima, zamijećeno je da ta konstanta ovisi i o tlaku. Tipičan primjer reakcija kod kojih se to može zamijetiti su tzv. jednomolekularne reakcije kod kojih jedna molekula ulazi u aktiviranu cjelinu i reagira. Takve molekule u aktivno stanje mogu ući sudarom s nekim trećim tijelom, a da pri tom s njim ne reagiraju. Kod jednomolekularnih reakcija zamijećeno je da su one kod visokog tlaka prvoga reda, no kod niskoga tlaka čini se da se ponašaju kao da su drugoga reda. To se objašnjava činjenicom da kod dovoljno visokog tlaka konstanta brzine reakcije ovisi isključivo o temperaturi, pa je reakcija **prvoga reda**, dok kod nižih tlakova, konstanta brzine reakcije postaje ovisna o tlaku, a reakcija se mijenja iz reakcije strogo prvoga reda u reakciju **drugoga reda**. O jednomolekularnim reakcijama razvijena je i posebna teorija kojom se objašnjavaju pojave koje se kod njih dešavaju, no za potrebe ovog rada potrebno je samo analizirati način na koji se kod takvih reakcija izračunava njihova brzina.

Iznad gornje granice tlaka, jednomolekularna reakcija ponaša se kao svaka druga reakcija prvoga reda s konstantom brzine reakcije ovisnom samo o temperaturi, dok se ispod donje granice tlaka ona ponaša kao reakcija s trećim tijelom s drugim vrijednostima energije aktivacije E_a , te faktora B i β . U području između graničnih vrijednosti tlaka ponašanje reakcije je složeno i opisuje se s više različitih jednadžbi. S obzirom da se u različitim područjima tlaka reakcija različito ponaša, za nju je potrebno definirati dva

niza podataka (E_a , B i β) od kojih se jedan odnosi na gornje područje tlaka i označava se s indeksom ∞ , dok se drugi niz odnosi na donje područje tlaka i označava s indeksom 0. Pomoću jednadžbe (5) i ova dva niza podataka mogu se izračunati pripadajuće konstante brzine reakcije k_∞ i k_0 . U određenom stanju mješavine, konstanta brzine reakcije izračunava se pomoću izraza:

$$k = k_\infty \left(\frac{p_r}{1 + p_r} \right) \cdot F \quad (17)$$

U jednadžbi (17) koeficijent F koristi se za modifikaciju izvornog Lindemannovog pristupa rješavanju ovih problema, pa je u slučaju da se koristi taj pristup koeficijent F jednak jedinici.

Reducirani tlak (p_r) računa se jednadžbom:

$$p_r = \frac{k_0 \cdot c_M}{k_\infty}, \quad (18)$$

gdje je c_M koncentracija trećih tijela koja se izračunava pomoću prvog faktora u jednadžbi (16), pri čemu se isto tako mogu koristiti povećane učinkovitosti trećih tijela (α_{ik}).

Nešto složeniji pristup integracije konstanti brzina reakcije u području između graničnih vrijednosti tlaka prikazan je u [89]. Kod tog pristupa jednadžba (17) množi se sa faktorom F koji je različit od 1 i jednak je:

$$\log F = \frac{\log F_{\text{cent}}}{1 + \left[\frac{\log p_r + C}{N - 0,14(\log p_r + C)} \right]} \quad (18)$$

gdje su:

$$N = 0,75 - 1,27 \cdot \log F_{\text{cent}} \quad (19)$$

$$C = -0,4 - 0,67 \cdot \log F_{\text{cent}} \quad (20)$$

$$F_{\text{cent}} = (1-a) \cdot e^{-\frac{T}{b}} + a \cdot e^{-\frac{T}{c}} + e^{-\frac{d}{T}} \quad (21)$$

Da bi se primijenio ovaj pristup, pored ranije navedenih podataka, potrebno je, iz eksperimentalnih rezultata, definirati još dodatna četiri parametra a , b , c i d , koji se koriste u jednadžbi (21). U jednadžbi (21) T predstavlja trenutnu temperaturu promatrane mješavine.

Poznavanjem brzina svih kemijskih reakcija mehanizma, brzina stvaranja pojedinog kemijskog spoja $\dot{\omega}_i$ može se izračunati iz:

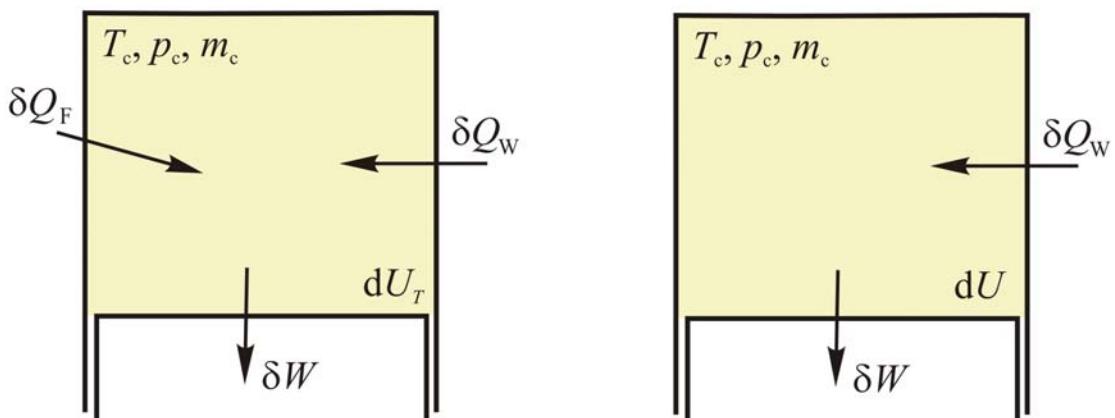
$$\dot{\phi}_i = \sum_{k=1}^{N_{\text{reak}}^i} \left(v_i^{\prime\prime k} - v_i^{\prime k} \right) \cdot \omega_{R,k} \quad (22)$$

Ovako izračunate brzine stvaranja kemijskih spojeva upotrebljavaju se u opisanim jednozonskim i višezonskim proračunima pri izračunavanju promjene sastava i stanja u cilindru za vrijeme visokotlačnog procesa.

2.3. Jednozonski proračunski model

2.3.1. Opće jednadžbe jednozonskog modela

Jednozonski proračunski modeli predstavljaju temelj i polaznu točku kod termodinamičkih bezdimenzionalnih proračuna. Kod njih se prepostavlja da je kompletna masa u cilindru potpuno homogena što znači da su veličine stanja na svim mjestima u cilindru jednake, te da je sastav mješavine plinova u cijelom cilindru isto tako jednak. Osnovna shema takvog modela prikazana je na slici 2.4. pri čemu je usporedno prikazana razlika između konvencionalnog modeliranja izgaranja jednozonskim modelima, te modeliranja primjenom kemijske kinetike.



Slika 2.4. Model jednozonskog proračuna: (lijevo) konvencionalnog, (desno) s primjenom kemijske kinetike.

Kod oba modela na energijsku promjenu mase u cilindru djeluju rad (δW) koji se dobiva putem promjene volumena, osigurane pomakom klipa, te toplina koja se izmjenjuje između mješavine plinova u cilindru i rubnih stijenki prostora izgaranja (δQ_w). Razlika između ova dva modela odnosi se na način prikaza energije koja se mješavini plinova dovodi izgaranjem goriva. Kod konvencionalnih proračuna izgaranje se modelira nekim od poznatih modela (Vibe, Hires, Hiroyasu itd.), koji izračunava energiju koja će se u nekom trenutku oslobađati (δQ_F), te se ona dodaje mješavini plinova u cilindru na isti način kao i toplina izmijenjena sa stijenkama, a kod promjene unutarnje energije mješavine razmatra se samo onaj dio promjene koji dolazi kao posljedica promjene temperature. Kod modela koji koristi kemijsku kinetiku može se zamjetiti da nema elementa kojim se

toplina oslobođena uslijed izgaranja dovodi mješavini u cilindru. To je zbog toga što kod ovog modela promjena unutarnje energije u sebi sadrži dio promjene koja nastaje kao posljedica promjene temperature, ali i onaj dio promjene koji se javlja kao posljedica promjene sastava. Na taj će način energija koja se oslobađa izgaranjem goriva biti sadržana u promjeni unutarnje energije mješavine. Pored ovih pretpostavki kod jednozonskog modela se pretpostavlja da se mješavina plinova u cilindru ponaša kao idealni plin, a da se sastoji od određenog broja kemijskih spojeva definiranih mehanizmom reakcije. Ako se sada za model prikazan na slici 2.4. (desno) postavi jednadžba prvog glavnog stavka onda vrijedi:

$$dU + p_c dV_c = \delta Q_w \quad (23)$$

gdje su: U , [J] – ukupna unutarnja energija mješavine; p_c , [Pa] – tlak u cilindru, Q_w , [J] – toplina izmijenjena sa stijenkama prostora izgaranja.

S obzirom da za mješavinu idealnog plina vrijedi izraz:

$$U = \sum_{i=1}^{N_{sp}} (m_i \cdot u_i) = m_c \sum_{i=1}^{N_{sp}} (x_i \cdot u_i), \quad (24)$$

gdje su: m_i , [kg] – masa i -tog kemijskog spoja u cilindru; u_i , [J/kg] – specifična unutarnja energija i -tog kemijskog spoja u cilindru; m_c , [kg] – ukupna masa mješavine u cilindru; x_i , [-] – maseni udio i -tog kemijskog spoja u mješavini.

Promjena unutarnje energije može se zapisati kao:

$$dU = m_c \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}} (dx_i \cdot u_i) + \sum_{i=1}^{N_{sp}} (x_i \cdot du_i) \right). \quad (25)$$

U desnoj sumi faktori du_i predstavljaju promjenu unutarnje energije uslijed promjene temperature pa se mogu zapisati kao:

$$du_i = c_{v,i} \cdot dT, \quad (26)$$

gdje su: $c_{v,i}$, $\left[\frac{\text{J}}{\text{kg K}} \right]$ – specifični toplinski kapacitet pri konstantnom

volumenu i -tog kemijskog spoja; T , [K] – temperatura mješavine.

S druge strane odnos masenih udjela pojedinih kemijskih spojeva u mješavini i njihovih koncentracija, a u skladu s time i njihovog diferencijala jednak je:

$$x_i = M_i \cdot v \cdot c_i \Rightarrow dx_i = M_i \cdot v \cdot dc_i \quad (27)$$

gdje su: v , $\left[\frac{m^3}{kg} \right]$ - specifični volumen mješavine, M_i , $\left[\frac{kg}{kmol} \right]$ - molarna masa i -tog kemijskog spoja.

Uvrštenjem jednadžbi (27) i (26) u (25), te primjenom formule za izračunavanje specifičnog toplinskog kapaciteta mješavine plinova $\bar{c}_v = \sum_{i=1}^{N_{sp}} (c_{v,i} \cdot x_i)$, uz diferenciranje po vremenu dobije se:

$$\frac{dU}{dt} = m_c \left[v \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \left(M_i \cdot u_i \frac{dc_i}{dt} \right) + \bar{c}_v \frac{dT_c}{dt} \right] \quad (28)$$

Diferenciranjem jednadžbe (23) po vremenu, te uvrštenjem jednadžbe (28) u tako diferencirani izraz, uz činjenicu da brzina promjene koncentracije nekog kemijskog spoja $\left(\frac{dc_i}{dt} \right)$ odgovara veličini brzine stvaranja tog kemijskog spoja ($\dot{\omega}_i$) prikazane jednadžbom (22) dobije se:

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_v} \cdot \left[\frac{1}{m_c} \cdot \frac{\delta Q_w}{dt} - \frac{p_c}{m_c} \frac{dV_c}{dt} - v \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_i \cdot \dot{\omega}_i \cdot M_i) \right] \quad (29)$$

gdje faktor $\frac{\delta Q_w}{dt}$ predstavlja toplinski tok između stijenki prostora izgaranja i mješavine plinova u cilindru.

Diferencijalna jednadžba (29) funkcija je od \bar{c}_v , m_c , $\frac{\delta Q_w}{dt}$, p_c , $\frac{dV_c}{dt}$, v , u_i , $\dot{\omega}_i$ i M_i , pri čemu su neki od tih faktora konstantni, dok su drugi funkcije nekih drugih veličina:

- \bar{c}_v ovisi o masenim udjelima mješavine te o temperaturi $\bar{c}_v(x_i, T_c)$;
- m_c konstantna (barem za vrijeme diferenciranja jednadžbe (29));
- $\frac{\delta Q_w}{dt}$ ovisi o većem broju faktora;
- p_c ovisi o temperaturi, sastavu, masi i volumenu, a s obzirom da je masa konstantna, a volumen prema zakonu gibanja klipnog mehanizma ovisi o vremenu, dolazi se do zaključka da je $p_c(x_i, T_c, t)$;
- $\frac{dV_c}{dt}$ s obzirom da je volumen cilindra funkcija vremena t tako je i brzina promjene volumena isto tako funkcija vremena t ;
- v ovisi o volumenu i masi u cilindru pa je prema tome $v(t)$;

- u_i s obzirom da vrijedi pretpostavka idealnih plinova $u_i(T_c)$;
 $\dot{\omega}_i$ ovisi o temperaturi i koncentraciji pojedinih spojeva, a s obzirom na vezu koncentracije i masenih udjela može se doći do zaključka da je $\dot{\omega}_i(x_i, T_c, t)$;
 M_i konstante.

Svi ranije navedeni faktori, izuzev $\frac{\delta Q_w}{dt}$, su ili konstantni, ili ovise o jednoj od ovih veličina: x_i , T_c , t , ili o njihovoj kombinaciji. O modeliranju izmjene topline između radnog medija i stijenki bit će više riječi kasnije, no za sada se može pretpostaviti da je vrijednost toplinskog toka za vrijeme rješavanja diferencijalne jednadžbe konstantna, a u tom slučaju može se zaključiti da je brzina promjene temperature prikazana izrazom (29) funkcija od (x_i, T_c, t) . S obzirom da iz jednadžbe (27) slijedi:

$$\frac{dx_i}{dt} = M_i \cdot v \cdot \dot{\omega}_i = f(x_i, T_c, t), \quad i = 1, \dots, N_{sp} \quad (30)$$

povezivanjem jednadžbe (29) i jednadžbi (30) dobije se sustav od $N_{sp}+1$ diferencijalnih jednadžbi prvoga reda kod kojih je nezavisna varijabla vrijeme. Ovaj sustav jednadžbi vrlo je krut (engl. stiff), a o načinu njegova rješavanja bit će govora malo kasnije.

2.3.2. Termodinamičke značajke kemijskih spojeva

U do sada prikazanim jednadžbama vrlo se često koriste termodinamičke značajke individualnih kemijskih spojeva kao što su: unutarnja energija, specifični toplinski kapacitet, Gibbsova slobodna energija itd. S obzirom da pri izračunavanju izgaranja dovedena energija proizlazi iz promjene ukupne unutrašnje energije, a i kod izračunavanja konstanti ravnoteže traži se Gibbsova slobodna energija i entropija, važno je da značajke svih kemijskih spojeva budu dobro definirane.

Entalpija formacije (ΔH_f^0) (J/kmol) nekog kemijskog spoja predstavlja povećanje entalpije koje je povezano uz reakciju stvaranja jednog kilomolata kemijskog spoja iz njegovih sastavnih elemenata, pri standardnom termodinamičkom stanju. Uobičajeno se koristi standardno stanje definirano tlakom od 1 atm (101325 Pa). i temperaturom od 25°C (298.15K). Kemijski elementi kao što su (H_2 , N_2 , O_2 , itd.) pri standardnom stanju atmosfere imaju entalpiju formacije jednaku nuli. Pomoću entalpije formacije može se za svaku reakciju odrediti koliko će se promjeniti entalpija zbog promjene sastava ako su i reaktanti i produkti u standardnom stanju. Osim toga upotrebotom entalpije formacije može se za kemijske spojeve koji se koriste kao gorivo odrediti kolika je njihova donja ogrjevna vrijednost (H_d) [90].

S obzirom da je pretpostavljeno da se masa u cilindru ponaša kao mješavina idealnih plinova, unutarašnja energija, entalpija te specifični toplinski kapaciteti ovise samo o temperaturi [91]. Zbog toga se standardna bezdimenzijska veličina molarnog specifičnog toplinskog kapaciteta pri konstantnom tlaku $\left(\frac{C_{\text{mp}}^0}{\mathfrak{R}}\right)$ može se zapisati kao polinom N -tog reda:

$$\frac{C_{\text{mp}}^0}{\mathfrak{R}} = \sum_{n=0}^N a_n \cdot T^n \quad (31)$$

Kako za entalpiju idealnog plina vrijedi da je:

$$H_m^0(T) - H_m^0(T_0) = \int_{T_0}^T C_{\text{mp}}^0 dT, \quad (32)$$

gdje su: H_m^0 , $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol}}\right]$ - standardna molarna entalpija; C_{mp}^0 , $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol K}}\right]$ - standardni molarni toplinski kapacitet pri konstantnom tlaku; uz primjenu jednadžbe (31) može se izvesti da je standardna bezdimenzijska molarna entalpija $\left(\frac{H_m^0(T)}{\mathfrak{R} \cdot T}\right)$ jednaka:

$$\frac{H_m^0(T)}{\mathfrak{R} \cdot T} = \sum_{n=0}^N \frac{a_n \cdot T^n}{n+1} + \frac{\frac{H_m^0(T_0)}{\mathfrak{R}} - \sum_{n=0}^N \frac{a_n \cdot T_0^n}{n+1}}{T} \quad (33)$$

Brojnik drugog probrojnika predstavlja konstantnu vrijednost pa vrijedi:

$$\frac{H_m^0}{\mathfrak{R} \cdot T} = \sum_{n=0}^N \frac{a_n \cdot T^n}{n+1} + \frac{a_{N+1}}{T} \quad (34)$$

Primjenom izraza za promjenu entropije idealnog plina pri konstantnom tlaku:

$$S_m^0(T) - S_m^0(T_0) = \int_{T_0}^T \frac{C_{\text{mp}}^0}{T} dT, \quad (35)$$

gdje je: $S_m^0(T)$, $\left[\frac{\text{J}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}\right]$ - standardna molarna entropija pri temperaturi T ;

može se isto tako izvesti izraz za standardnu bezdimenzijsku molarnu entropiju $\left(\frac{S_m^0(T)}{\mathfrak{R}}\right)$:

$$\frac{S_m^0(T)}{\mathfrak{R}} = a_0 \cdot \ln T + \sum_{n=1}^N \frac{a_n \cdot T^n}{n} + a_{N+2} \quad (36)$$

Ako molarni toplinski kapacitet opisan jednadžbom (31), svakog kemijskog spoja, prikažemo polinomom četvrtog reda ($N=4$), tada jednadžbe (31), (34) i (36) imaju oblik:

$$\frac{C_{mp,i}^0(T)}{\mathfrak{R}} = a_{0,i} + a_{1,i} \cdot T + a_{2,i} \cdot T^2 + a_{3,i} \cdot T^3 + a_{4,i} \cdot T^4 \quad (37)$$

$$\frac{H_{m,i}^0(T)}{\mathfrak{R} \cdot T} = a_{0,i} + \frac{a_{1,i}}{2} T + \frac{a_{2,i}}{3} T^2 + \frac{a_{3,i}}{4} T^3 + \frac{a_{4,i}}{5} T^4 + \frac{a_{5,i}}{T} \quad (38)$$

$$\frac{S_{m,i}^0(T)}{\mathfrak{R}} = a_{0,i} \cdot \ln T + a_{1,i} \cdot T + \frac{a_{2,i}}{2} \cdot T^2 + \frac{a_{3,i}}{3} \cdot T^3 + \frac{a_{4,i}}{4} \cdot T^4 + a_{6,i} \quad (39)$$

pri čemu se indeks i odnosi na razmatrani kemijski spoj.

Koeficijenti prikazanih polinoma za svaki kemijski spoj u reakcijskom mehanizmu određeni su tako da su tablične vrijednosti promjena prikazanih termodinamičkih značajki aproksimirane metodom najmanjih kvadrata. S obzirom da se pri niskim temperaturama promjene prikazanih termodinamičkih značajki dosta razlikuju od istih promjena pri visokim temperaturama, sedam potrebnih koeficijenata definirano je za dva temperaturna intervala, niski i visoki. Niski temperaturni interval proteže se do 1000 K, a visoki od 1000 K do 5000 K. Koeficijenti a_{N+1} i a_{N+2} višeg temperaturnog intervala određeni su tako da vrijednosti značajki na granici intervala međusobno budu jednake. Kod nižeg temperaturnog intervala isti ti koeficijenti određeni su tako da je standardna molarna entalpija pri 298.15 K jednaka entalpiji formacije pri istoj toj temperaturi.

Poznavanjem molarne entalpije, molarnog toplinskog kapaciteta, te molarne entropije svih kemijskih spojeva u mješavini, pri standardnom tlaku, pomoću poznatih izraza za idealne plinove i njihove mješavine mogu se izračunati i ostale termodinamičke značajke, pri istom tom tlaku [90], [91]. Kako se radi o idealnim plinovima vrijednosti molarnog toplinskog kapaciteta, unutarnje energije i entalpije pri svim ostalim tlakovima jednake su vrijednostima pri standardnom tlaku. S druge strane to ne vrijedi za entropiju i Gibbsovu slobodnu energiju pa se te veličine pri nekom drugom tlaku izračunavaju iz:

$$S_{m,i} = S_{m,i}^0 - \mathfrak{R} \ln y_i - \mathfrak{R} \cdot \ln \left(\frac{p}{p_{atm}} \right) \quad (40)$$

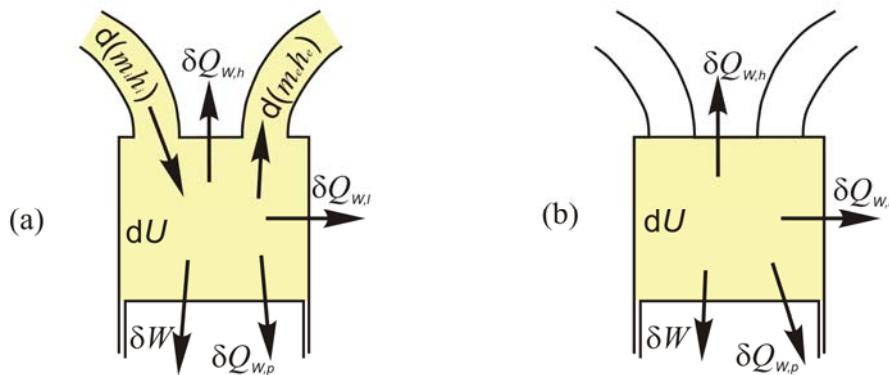
$$G_{m,i} = H_{m,i} - T \cdot \left(S_{m,i}^0 - \mathfrak{R} \ln y_i - \mathfrak{R} \cdot \ln \left(\frac{p}{p_{atm}} \right) \right) \quad (41)$$

gdje su: y_i , [-] – molni udio kemijskog spoja i u mješavini, p , [Pa] – tlak mješavine, p_{atm} , [Pa] – iznos standardnog tlaka od jedne atm.

2.3.3. Početni uvjeti

Proračunski model prikazan na slici 2.4. predstavlja model zatvorenog sustava kod kojeg je masa mješavine plinova konstantna. Tijekom rada četverotaktnog motora jedan radni ciklus sastoji se od izmjene radnog medija i od tzv. visokotlačnog procesa.

Za vrijeme izmjene radnog medija cilindar je povezan s usisnom cijevi pomoću otvorenog usisnog ventila, ili s ispušnom cijevi pomoću otvorenog ispušnog ventila, ili s obje cijevi u slučaju preklapanja ventila. Tada je masa u cilindru povezana s okolišom pa je i sustav otvoren (slika 2.5. a). Za vrijeme izmjene radnog medija temperatura i tlak u cilindru mnogo su niži u odnosu na temperaturu i tlak koji se ostvaruju za vrijeme izgaranja. Zbog toga za to vrijeme gotovo da nema kemijskih reakcija promjene sastava mješavine plinova. Kada su oba ventila zatvorena, zatvoren je i sustav, a taj dio ciklusa naziva se visokotlačni proces. Diferencijalne jednadžbe (29) i (30) vrijede za zatvoreni sustav, pa se odnose na visokotlačni proces, koji obično započinje u trenutku zatvaranja usisnih ventila, nakon što je tijekom takta usisa svježa smjesa ubaćena u cilindar. Kako diferencijalne jednadžbe (29) i (30) pored rubnih uvjeta zahtijevaju i početne uvjete, potrebno je poznavati stanje plina u cilindru u trenutku zatvaranja usisnih ventila. To stanje može se prepostaviti, može se dobiti eksperimentalnim ispitivanjem,



Slika 2.5. Jednozonski model: a) izmjene radnog medija, b) visokotlačnog procesa

a može se i izračunati. Ako se početno stanje visokotlačnog procesa računa, tada model postaje neovisan o početnim uvjetima i ostaje ovisan samo o rubnim uvjetima. Da bi se početni uvjeti izračunali potrebno je računati promjene stanja u usisnim i ispušnim cijevima, za vrijeme izmjene radnog medija, te promjene stanja u cilindru koji je u to vrijeme otvoren prema tim cijevima. S obzirom da na tržištu postoje programi koji računaju promjene stanja u cijelom motoru za cijelo vrijeme trajanja ciklusa, za izračunavanje početnih uvjeta visokotlačnog HCCI procesa koristit će se jedan od njih, AVL Boost.

AVL Boost je program koji pomoću jednodimenzijskih proračuna u cijevima, te 0D-proračuna u raznim prostorima (uključujući i cilindar) izračunava promjene stanja koje se odvijaju u cijelom motoru. Program ima veliki broj modela pomoću kojih može računati promjene u raznim elementima motora. U tablici 2.1. prikazani su proračunski elementi koji korisniku programa stoje na raspolaganju, uz opis za što se sve ti elementi mogu koristiti. Iz prikazane tablice se može vidjeti da se primjenom raznih kombinacija tih elemenata može stvoriti proračunski model gotovo svakog motora.

Proračuni svih elemenata koncipirani su tako da na osnovu rubnih uvjeta i uvjeta na početku vremenskog koraka izračunaju stanje na kraju koraka. U prvom proračunskom koraku stanje na početku proizvoljno se zadaje, no kako se u stacionarnom stanju kod četverotaktnog motora procesi ponavljaju s periodom od 720° zakreta koljenastog vratila (1 ciklus), iteracijskim provođenjem proračuna kroz nekoliko ciklusa postiže se konvergencija rješenja u svim elementima, a tada se posljednji proračunavani ciklus uzima kao rješenje zadanog problema.

Proračun promjene stanja u cilindru motora kod programa AVL Boost podijeljen je na dva dijela: izmjena radnog medija i visokotlačni proces. Pri tome se izgaranje, kao dio visokotlačnog procesa, može računati pomoću raznih modela izgaranja. Pored toga postoji mogućnost da se cijeli proračun visokotlačnog procesa zamjeni novim korisnikovim proračunom. Upravo je ta mogućnost iskorištena kod modela HCCI izgaranja koji je tema ove disertacije i koji je modeliran kao korisnikov visokotlačni proračun u programu AVL Boost (engl. User Defined High Pressure Cycle). Na taj će se način početni uvjeti visokotlačnog procesa, u trenutku zatvaranja usisnih ventila, automatski izračunavati.

Tablica 2.1. Proračunski elementi za simulaciju elemenata motora u programu AVL Boost v. 3.1.1.

Naziv elementa	Primjena
Cilindar	Proračun stanja u jednom cilindru motora
Plenum	Proračun u bilo kakvom prostoru s konstantnim volumenom na koji može biti spojena jedna ili više cijevi
Promjenjivi plenum	Proračun u prostoru s promjenjivim volumenom na koji može biti spojena jedna ili više cijevi (npr. kompresor u kućištu 2T motora)
Cijev s rupama u cijevi	Proračun strujanja u cijevima koje na sebi imaju rupe a nalaze se u prigušivačima zvuka ispušnog sustava.
Filtar zraka	Proračun stanja na ulazu, izlazu, te protok kroz filter zraka
Katalizator	Proračun stanja na ulazu i izlazu, te protok kroz katalizator u ispušnom sustavu
Hladnjak	Proračun stanja na izlazu iz hladnjaka zraka koji se u usisnom sustavu postavlja nakon nabijanja
Filtar čestica	Proračun stanja na ulazu i izlazu, te protok kroz filter čestica Dieselovih motora
Turbopunjač	Proračun stanja na ulazu, izlazu, te protok mase kroz turbinu i kompresor turbopunjača pogonjenog ispušnim plinovima
Volumetrički kompresor	Proračun stanja na ulazu, izlazu, te protok mase kroz bilo koji tip mehanički pogonjenog volumetričkog kompresora
Turbokompresor	Proračun stanja na ulazu, izlazu, te protok mase kroz bilo koji tip mehanički pogonjenog turbokompresora
Obilazni ventil	Proračun ventila za regulaciju tlaka nabijenog zraka propuštanjem dijela ispušnih plinova pored turbine turbopunjača
Otpor	Proračun otpora strujanja u bilo kojem dijelu motora
Kružni ventil	Proračun strujanja kroz otvor razvodnog mehanizma s rotirajućom pločom koji se koristi kod 2T motora
Jednosmjerni ventil	Proračun strujanja kroz bilo koji jednosmjerni ventil
Brizgaljka	Proračun dodavanja goriva brizgaljke ili sapnice
Spoj	Proračun strujanja na mjestu spoja dviju cijevi
Cijev	Proračun strujanja u cijevima
Cijev s rupama	Proračun strujanja u cijevima s rupama koje se koriste u ispušnom sustavu motora

2.3.4. Integracija s programom AVL Boost

Prilikom integracije proračuna koji koristi kemijsku kinetiku s programom AVL Boost treba obratiti pažnju na različiti način prikaza sastava mješavine plinova, te napraviti model preračunavanja prikaza sastava smjese iz programa AVL Boost u proračun s kemijskom kinetikom i obrnuto.

Na slici 2.6. vizualno je prikazan način definiranja sastava smjese u oba proračuna, pri čemu su grupe plinova u različitim proračunima smještene jedna ispod druge i obojane istom bojom.

	Gorivo	Zrak	Produkti izgaranja					
AVL Boost			Izgorjelo gorivo					
Kemijska Kinetika	$C_xH_yO_z$	O_2	N_2	N_2	CO_2	H_2O	CO	...

Slika 2.6. Prikaz sastava smjese u programu Boost i u proračunu s kemijskom kinetikom.

Program AVL Boost mješavinu plinova prikazuje kao smjesu zraka, goriva i produkata izgaranja, pa je smjesa definirana njihovim masenim udjelima $\left(\begin{smallmatrix} x_G^b & x_Z^b & x_{PI}^b \end{smallmatrix} \right)$ ¹. Da bi se moglo odrediti termodinamičke značajke mješavine

plinova potrebno je te značajke poznavati za sva tri sastavna dijela. Kako bi se one mogle odrediti za produkate izgaranja potrebno je znati pri kojim uvjetima su ti produkti nastali. Stoga se još navodi i podatak o masenom udjelu izgorjelog goriva (x_{IG}^b) pomoću kojeg se određuju značajke produkta izgaranja.

Kao što je već rečeno proračuni s kemijskom kinetikom mješavinu plinova prikazuju kao smjesu svih kemijskih spojeva navedenih u reakcijskom mehanizmu, zadalu njihovim masenim udjelima (x_i^k)². Obično jedan od tih kemijskih spojeva predstavlja gorivo, pa se njegov maseni udio izjednačava s masenim udjelom goriva u Boostovom prikazu.

Zrak (na slici 2.6. obojan plavo) sastoji se od dušika i kisika. Udjeli ostalih elemenata u zraku se zanemaruju. Prema tome, maseni udio zraka u Boostovom prikazu sastoji se od masenog udjela kisika i dušika. Pri tome treba zamijetiti da se, tijekom izgaranja, dio dušika koji je "pripadao" utrošenom kisiku prikazuje kao sastavni dio produkata izgaranja (na slici 2.6. obojano zeleno). Dio dušika koji je sastavni dio zraka mora s masenim udjelom kisika činiti omjer u kojem se oni u zraku i nalaze (u zraku je 23.16% kisika). Preostali dio ukupnog dušika u cilindru, koji je višak u tom

¹ Indeks b iznad masenih udjela označava da se radi o masenom udjelu odgovarajućeg elementa u Boostovom načinu prikaza sastava smjese.

² Indeks k iznad masenog udjela označava da se radi o masenom udjelu kemijskog spoja u proračunu s kemijskom kinetikom.

omjeru, predstavlja se kao dio produkata izgaranja. Svi ostali kemijski spojevi u reakcijskom mehanizmu predstavljeni su kao produkti izgaranja. Preračunavanje masenih udjela iz Boostovog prikaza u kemijski prikaz provodi se jednom u ciklusu i to u trenutku prelaska iz proračuna izmjene radnog medija, koji se provodi Boostovim proračunom, na proračun visokotlačnog procesa koji se provodi HCCI-modelom. Kako bi se na početku visokotlačnog procesa što točnije izračunali maseni udjeli kemijskih spojeva, koji spadaju u produkte izgaranja, potrebno je poznavati te

masene udjele na kraju visokotlačnog procesa prethodnog ciklusa $(x_i^{KVP})^k$. U prvom izračunavanom ciklusu vrijednosti na kraju visokotlačnog procesa prethodnog ciklusa nisu dostupne, pa se pretpostavlja da sastav produkata izgaranja odgovara sastavu potpuno izgorjele smjese, koja se pak može izračunati primjenom jednadžbi ravnoteže za promatrano gorivo. S druge strane, iz kemijskog prikaza u Boostov prikaz maseni udjeli se preračunavaju u svakom koraku visokotlačnog procesa, jer Boostove programske varijable moraju imati te podatke u svakom računskom koraku. U prilogu 1. ovoga rada detaljnije je prikazan način preračunavanja masenih udjela iz kemijskog prikaza u Boostov način prikaza i obrnuto.

Kao što je spomenuto ranije, a prikazano je i jednadžbama u prilogu 1., pri izračunavanju masenih udjela kemijskih spojeva na početku visokotlačnog procesa koriste se vrijednosti masenih udjela tih spojeva na kraju prethodnog ciklusa. No, fizikalno bi te veličine trebale predstavljati sastav zaostalih produkata izgaranja nakon izmjene radnog medija, na početku kompresije. U velikoj većini slučajeva taj sastav se ne razlikuje bitno, no može se desiti situacija pri kojoj će doći do značajnije promjene sastava produkata izgaranja od trenutka otvaranja ispušnog ventila do trenutka zatvaranja usisnog ventila. Osim toga, s obzirom da je sustav diferencijalnih jednadžbi prikazan izrazima (29) i (30) vrlo krut i osjetljiv na početne uvjete, pokretanjem rješavanja ovih jednadžbi s nekonistentnim početnim uvjetima može dovesti do nestabilnosti pri rješavanju samog sustava. Stoga se sastav produkata izgaranja s kraja visokotlačnog procesa prethodnog ciklusa mijenja i prilagođava stanju tlaka i temperature koja vlada u cilindru u trenutku zatvaranja usisnih ventila.

U trenutku otvaranja ispušnih ventila (IVO) u cilindru vlada određeno stanje tlaka (p_1) i temperature (T_1). U istom tom trenutku sastav mješavine plinova definiran je masenim udjelima kemijskih spojeva na kraju visokotlačnog procesa $(x_i^{KVP})^k$. Od tog trenutka do trenutka zatvaranja usisnih ventila (UVZ) i početka sljedećeg visokotlačnog procesa, proračun promjene stanja provodi se modelom AVL Boosta pa je za to vrijeme sastav plinova u cilindru definiran masenim udjelima zraka, produkata izgaranja i goriva. U trenutku UVZ u cilindru vlada neko novo stanje tlaka (p_2), (T_2), a za samu

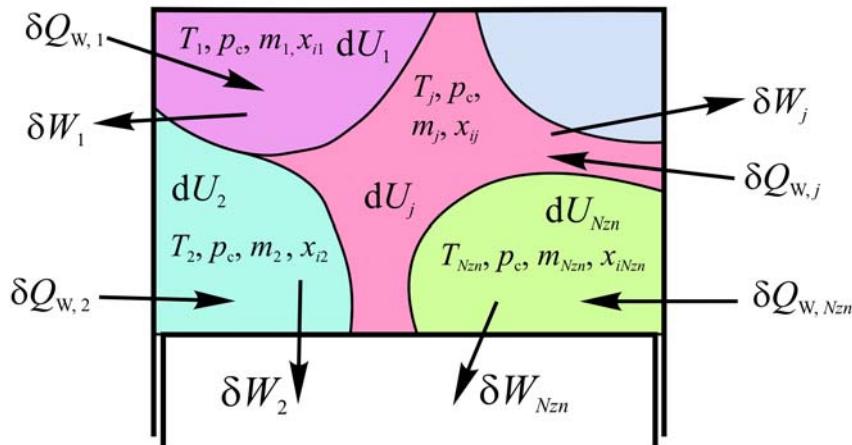
izmjenu radnog medija bilo je potrebno vrijeme Δt . Ako se pretpostavi politropska promjena stanja s (p_1, T_1) na (p_2, T_2) u vremenu Δt , onda se može izračunati zakon promjene tlaka i temperature sa stanja 1 na stanje 2. Rješavanjem sustava diferencijalnih jednadžbi prikazanih u izrazu (30), koje se odnose samo na sastav mješavine plinova, s početnim stanjem koji odgovara trenutku IVO, a pri čemu se tlak i temperatura mijenjaju po zakonu definiranom politropskom promjenom od 1 do 2, može se izračunati sastav mješavine plinova pri tlaku (p_2) i temperaturi (T_2) . Jednadžbe promjene tlaka i temperature za potrebe promjene sastava prikazane su u prilogu 2.

2.4. Višezonski proračunski modeli

2.4.1. Opće jednadžbe višezonskog HCCI modela

Jednozonski modeli prepostavljaju jednaku temperaturu i sastav u cijelom cilindru što naravno ne odgovara stvarnom stanju. Kod različitih motora temperatura i sastav plinova kroz cilindar bit će nejednoliki na različite načine i zbog različitih efekata. Npr. kod Ottovih motora preskakanjem iskre na svjećici počinje izgaranje koje napreduje od svjećice prema ostalim dijelovima u cilindru. Prema tome u nekom trenutku izgaranja dio mase u cilindru već je prošao kroz reakciju izgaranja i sastoji se od produkata izgaranja s nekom temperaturom, dio mase još nije niti ušao u reakciju pa se sastoji od mješavine goriva i zraka, a dio mase se baš u tom trenutku nalazi u reakciji. Vrlo često se višezonski modeli ovakvih motora dijele na izgorjelu zonu produkata izgaranja, te na neizgorjelu zonu mješavine goriva i zraka. Kod tih modela razmatranjem strujanja u cilindru izračunava se brzina kojom napreduje plamen te se na osnovu toga izračunava stanje u svakoj zoni. Brzina kemijskih procesa u zoni reakcije puno je brža od brzine širenja plamena, pa se više pažnje posvećuje upravo modeliranju širenja plamena. Kod HCCI motora izgaranje nastupa u onim dijelovima cilindra u kojima zbog postignutog tlaka i temperature započinju reakcije izgaranja. To se obično dešava na mnogo mjesta istovremeno, a kad te reakcije započnu, brzinom izgaranja dominira brzina kemijskih reakcija. Nejednolikost temperature i sastava smjese ima veliki utjecaj na ukupnu brzinu i oblik izgaranja, zbog toga što u dijelovima s višom temperaturom izgaranje započinje ranije, dok u dijelovima s nižom ono započinje nešto kasnije. Plamen se ne širi od mjesta gdje je izgaranje započelo ranije, već se i u ostalim dijelovima vrlo brzo postižu uvjeti samozapaljenja. Kod takvog izgaranja brzine strujanja plinova za vrijeme izgaranja neće bitno utjecati na sam tok izgaranja, putem prenošenja plamena s jednog dijela na drugi, već će dominantnu ulogu na prosječnu brzinu izgaranja imati brzina kemijskih procesa, te temperaturna nejednolikost u prostoru cilindra. Prema tome da bi se ta nejednolikost proračunski uhvatila, prostor cilindra

podijeliti će se na nekoliko volumena (zona) u kojima se zbog određenih razloga očekuju razlike u temperaturi. U općem razmatranju te zone postavljene su proizvoljno pri čemu je njihov broj jednak N_{zn} (slika 2.7.).



Slika 2.7. Proizvoljna podjela prostora cilindra na N_{zn} zona.

Ako se u obzir uzme ranije opisano razmatranje o utjecaju strujanja u cilindru na sam tok izgaranja, može se pretpostaviti da strujanja između zona nema, a da se interakcija između zona odvija putem rada zbog promjene volumena te putem izmjene topline. Pri tome se granice između zona mogu zamisliti kao beskonačno tanke elastične pregrade koje fizički odvajaju masu u svakoj zoni, no dozvoljavaju joj da mijenja svoj volumen i prilagođava ga tako da u svakom trenutku u svim zonama vlada isti tlak.

Ako sada za j -tu zonu postavimo jednadžbu (29), koja se može definirati na bilo kojoj masi u nekom prostoru, tada vrijedi:

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_{v,j}} \cdot \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{\delta Q_j}{dt} - \frac{p_c}{m_j} \frac{dV_j}{dt} - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_{i,j} \cdot \dot{\omega}_{i,j} \cdot M_i) \right] \quad (42)$$

gdje se fizikalne veličine s indeksom j odnose na vrijednost te fizikalne veličine u j -toj zoni, a fizikalne veličine s indeksom (i, j) odnose na vrijednost te veličine za i -ti kemijski spoj u j -toj zoni. Toplinski tok $\frac{\delta Q_j}{dt}$ predstavlja zbroj svih tokova usmjerenih prema j -toj zoni, a koji se javlja kao posljedica izmjene topline s nekom stijenkom ili s nekom drugom zonom. Promjena volumena $\frac{dV_j}{dt}$ ne može se jednostavno odrediti već se javlja kao posljedica uvjeta jednakosti tlaka između svih zona. Jednadžba (42) može se postaviti za svaku zonu sa slike 2.7. pa ih prema tome ima N_{zn} . Da bi se mogao riješiti ovaj sustav jednadžbi potrebno je izračunati brzinu promjene volumena svake zone. S obzirom da se radi o mješavini idealnih

plinova za koje vrijedi jednadžba stanja plina, promjena volumena može sa zapisati kao:

$$\frac{dV_j}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\frac{m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c} \right] \quad (43)$$

gdje je: $R_j \left[\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \right]$ - individualna plinska konstanta mješavine u j -toj zoni.

Uz pretpostavku konstantne mase u zoni j jednadžba (43) može se transformirati u:

$$\frac{dV_j}{dt} = m_j \frac{\left(T_j \frac{dR_j}{dt} + R_j \frac{dT_j}{dt} \right) p_c - R_j \cdot T_j \frac{dp_c}{dt}}{p_c^2} \quad (44)$$

Uvrštenjem jednadžbe (44) u (42) uz primjenu općih termodinamičkih i matematičkih transformacija dobije se jednadžba:

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_{p,j}} \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{dQ_j}{dt} - T_j \frac{dR_j}{dt} + \frac{R_j \cdot T_j}{p_c} \frac{dp_c}{dt} - v_j \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} (u_{ij} \cdot \dot{\omega}_{ij} \cdot M_i) \right], \quad j=1, \dots, N_{\text{zn}} \quad (45)$$

gdje je $\bar{c}_{p,j} \left[\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \right]$ - specifični toplinski kapacitet pri konstantnom tlaku mješavine plinova u j -toj zoni.

U jednadžbama (45) kao nova nepoznanica javlja se brzina promjene tlaka $\frac{dp_c}{dt}$ pa je stoga potrebno dodati još jednu jednadžbu. S obzirom da se volumen cilindra sastoji volumena svih zona, brzina promjene ukupnog volumena cilindra može se zapisati kao:

$$\frac{dV_c}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{zn}}} \frac{m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c} \right) \quad (46)$$

Raspisivanjem jednadžbe (46) dobije se izraz:

$$V_c \cdot \frac{dp_c}{dt} - \sum_{j=1}^{N_{\text{zn}}} m_j \cdot R_j \cdot \frac{dT_j}{dt} = \sum_{j=1}^{N_{\text{zn}}} m_j \cdot T_j \frac{dR_j}{dt} - p_c \cdot \frac{dV_c}{dt} \quad (47)$$

Uz poznato stanje tlaka u cilindru (p_c) i temperature u svakoj zoni (T_j), te masenih udjela mješavine u svakoj zoni x_{ij} , jednadžbe (45) i (46) čine sustav od $(N_{\text{zn}}+1)$ linearnih jednadžbi u kojima su nepoznate veličine $\frac{dT_j}{dt}$ i

$\frac{dp_c}{dt}$. S obzirom da je u prikazanim jednadžbama potrebno poznavati masene udjele x_{ij} , da bi se sustav diferencijalnih jednadžbi upotpunio potrebno je definirati brzinu promjene masenog udjela svakog kemijskog spoja u svakoj zoni, za što se može koristiti jednadžba (30):

$$\frac{dx_{ij}}{dt} = M_i \cdot v_j \cdot \dot{\omega}_{ij}, \quad i = 1, \dots, N_{sp}, j = 1, \dots, N_{zn} \quad (48)$$

U jednadžbama (47) i (48) javlja se veličina brzine promjene individualne plinske konstante mješavine u zoni j $\left(\frac{dR_j}{dt} \right)$. Ova veličina ovisi isključivo o promjeni sastava mješavine u toj zoni i može se izračunati pomoću:

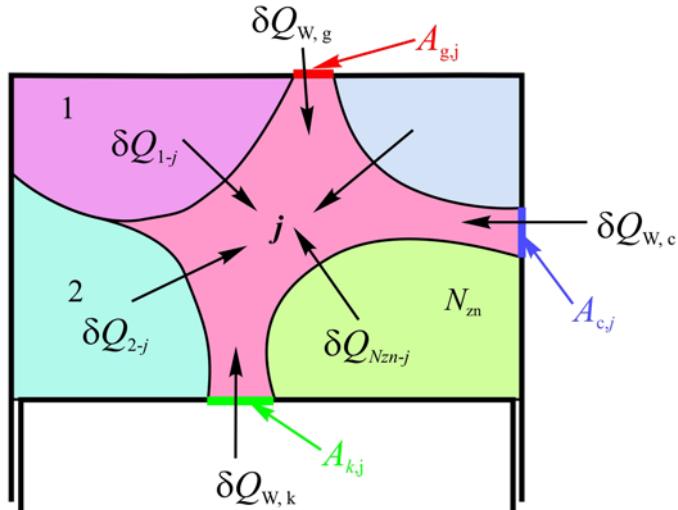
$$\frac{dR_j}{dt} = \mathfrak{R} \cdot v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{ij}, \quad j = 1, \dots, N_{zn} \quad (49)$$

Analizom varijabli prikazanih u jednadžbama (45), (47), (48) i (49) koja je analogna onoj prikazanoj na str. 33 za jednozonski proračun, uz prepostavku konstantne mase u svakoj zoni, može se doći do zaključka da se nepoznate varijable $\left(\frac{dT_j}{dt}, \frac{dp_c}{dt}, \frac{dx_{ij}}{dt} \right)$ mogu izraziti kao funkcije od T_j , x_{ij}

i t. S obzirom da je brzina promjene tlaka $\frac{dp_c}{dt}$ samo pomoćna varijabla pri određivanju brzina promjene temperatura, i nije potrebna za kasnije izračunavanje tlaka, onda jednadžbe (45), (47) i (48) čine sustav od $N_{zn}*(N_{sp}+1)$ diferencijalnih jednadžbi prvoga reda kod kojih je nezavisna varijabla vrijeme. Isto kao i kod jednozonskog proračuna ovaj sustav jednadžbi je vrlo krut, a iz rješenja jednadžbi, koja se sastoje od temperature i sastava svih zona, može se izračunati tlak p_c i sve ostale značajke u cilindru. Termodinamičke značajke mješavine plinova i kemijskih spojeva izračunavaju se postupkom prikazanim u točki 2.3.2. Prikaz kompletног izvoda ovih diferencijalnih jednadžbi dan je u prilogu 3.

2.4.2. Izmjena topline

Svaka zona višezonskog modela prikazanog na slici 2.7. može izmjenjivati toplinu sa stijenkama s kojima je u dodiru, ali i sa svim zonama s kojima graniči (slika 2.8.).



Slika 2.8. Toplinski tok između zone j i njene okoline u proizvoljnom višezonskom modelu.

Prema modelu priказанom na slici 2.8. toplinski tok zone j sastoji se od toplinskog toka između stijenki klipa, cilindra i glave motora, te radnog medija, te toplinskog toka između zone $1, 2, \dots, N_{zn}$ i zone j :

$$\frac{\delta Q_j}{dt} = \frac{\delta Q_{w,c}}{dt} + \frac{\delta Q_{w,k}}{dt} + \frac{\delta Q_{w,g}}{dt} + \frac{\delta Q_{1,j}}{dt} + \frac{\delta Q_{2,j}}{dt} + \dots + \frac{\delta Q_{N_{zn},j}}{dt} \quad (50)$$

Izmjena topline između stijenki i radnog medija modelira se kao konvektivni prijenos topline, pa opća jednadžba svakog od tih članova glasi:

$$\frac{\delta Q_{w,x}}{dt} = A_{x,j} \cdot \alpha_w \cdot (T_{w,x} - T_j) \quad (51)$$

gdje je: α_w , $\left[\frac{W}{m^2 \cdot K} \right]$ - koeficijent prijelaza topline; $A_{x,j}$, $[m^2]$ – površina dodira stijenke i fluida; $T_{w,x}$, $[K]$ – temperatura stijenke x .

Za motore s unutarnjim izgaranjem tijekom godina razvijen je veći broj korelacija za izračunavanje trenutnog prostorno osrednjeg koeficijenta α_w , među kojima su poznatije Annandova [92], Woschnijeva [53] i Hohenbergova [93], pri čemu se najčešće upotrebljava Woschnijeva, zajedno s njenim modifikacijama [53] i [94]. Woschnijeve korelacije [53] i [94] redom imaju oblik:

$$\alpha_w = 130 \cdot D_c^{-0,2} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,53} \left\{ C_1 \cdot \bar{v}_{kl} + C_2 \frac{V_H \cdot T_c^{UVZ}}{p_c^{UVZ} \cdot V_c^{UVZ}} (p_c - p_{c,gon}) \right\}^{0,8} \quad (52)$$

$$\alpha_w = 130 \cdot D_c^{-0,2} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,53} \left\{ C_1 \cdot \bar{v}_{kl} \cdot \left[1 + 2 \left(\frac{V_c^{GMT}}{V_c} \right) \bar{p}_i^{-0,2} \right] \right\}^{0,8} \quad (53)$$

gdje su: D_c , [m] – promjer cilindra; \bar{v}_{kl} , $\left[\frac{m}{s}\right]$ – srednja brzina klipa; p_c^{UVZ} , [Pa], T_c^{UVZ} , [K], V_c^{UVZ} , [m³] – tlak, temperatura i volumen u trenutku zatvaranja usisnih ventila; $p_{c,gon}$, [Pa] tlak u cilindru koji bi se u tom trenutku postigao da je motor gonjen (bez izgaranja); $C_1 = 2,28 + 0,308 \frac{v_o}{\bar{v}_{kl}}$; v_o , $\left[\frac{m}{s}\right]$ – obodna brzina smjese u cilindru¹; $C_2 = 0,00324$.

Kod Woschnijevih korelacija karakteristična duljina iz Reynoldsovog i Nusseltovog broja je promjer cilindra, a karakteristična brzina strujanja sastoji se od dijela proporcionalnog srednjoj brzini klipa (prvi pribrojnik u vitičastoj zagradi), te od dijela kojim se u obzir uzima povećani toplinski tok koji nastaje uslijed pojave plamena (drugi faktor u vitičastoj zagradi). Kod Dieselovog i Ottovog motora taj drugi faktor vrlo je bitan za predviđanje izmjene topline za vrijeme izgaranja, no isto tako prema [95] čini se da je taj faktor zbog drugačijeg načina izgaranja HCCI motora za njega neprimjeren.

Hohenbergova korelacija za karakterističnu duljinu koristi treći korijen iz trenutnog volumena, a i faktor kojim se povećava karakteristična brzina pri izgaranju je značajno smanjen. Sama jednadžba za koeficijent prijelaza topline ima oblik:

$$\alpha_w = 130 \cdot V_c^{-0,06} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,4} \cdot (\bar{v}_{kl} + 1,4)^{0,8} \quad (54)$$

U odnosu na prvu Woschnijevu korealciju [53] ovako izračunat koeficijent prijelaza topline predviđa veću izmjenu topline za vrijeme kompresije, a manju za vrijeme izgaranja, što bi trebalo više odgovarati HCCI motoru, no i koeficijenti ove korelacije određeni su na temelju ispitivanja Dieselovog motora.

Na temelju ispitivanja toplinskog toka HCCI motora originalna Woschnijeva korelacija je modificirana, te su određene nove proračunske konstante koje više odgovaraju HCCI motoru. Tako je dobivena nova, Changova korelacija [95] za koeficijent prijelaza topline koja ima oblik:

$$\alpha_w = C \cdot H_{uk}^{-0,2} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,73} \left\{ C_1 \cdot \bar{v}_{kl} + \frac{C_2}{6} \frac{V_H \cdot T_c^{UVZ}}{p_c^{UVZ} \cdot V_c^{UVZ}} (p_c - p_{c,gon}) \right\}^{0,8} \quad (55)$$

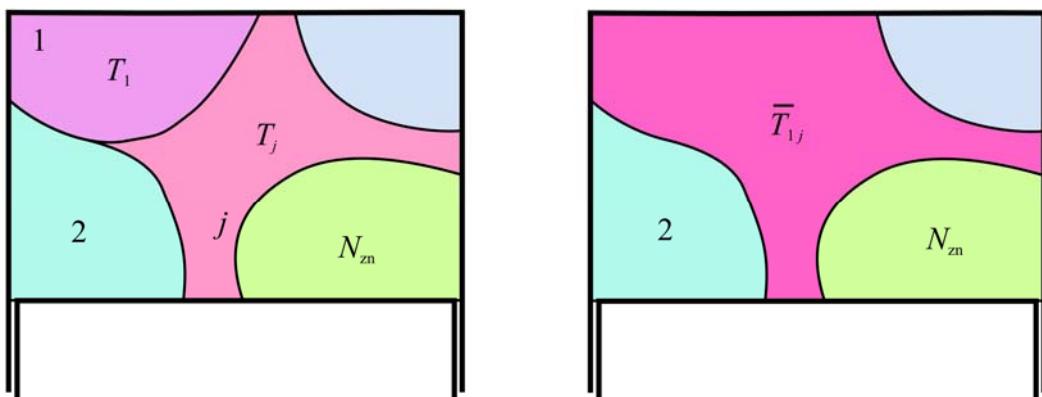
gdje je H_{uk} , [m] – trenutna visina prostora izgaranja.

¹ Jedan od mogućih oblika strujanja u cilindru motora je tzv. vrtložno strujanje, kod kojeg plinovi kruže oko uzdužne osi cilindra. Obodna brzina smjese u cilindru predstavlja brzinu strujanja plinova uz rub cilindra, tj. uz samu stijenkiju cilindra, kao posljedicu tog vrtložnog strujanja.

Kod Changove korelacije za karakterističnu duljinu uzeta je trenutna visina prostora izgaranja, pri čemu ona ne može biti veća od polumjera cilindra, smanjen je utjecaj povećanja karakteristične brzine strujanja uslijed pojave izgaranja, te je promijenjen eksponent nad temperaturom.

Pri ispitivanju višezonskog modela izgaranja i usporedbi njegovih rezultata s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja korištene su sve tri prikazane korelacije, te su analizirane razlike u rezultatima.

Izmjena topline između zona izračunava se modelom koji se temelji na potencijalu izmjene topline uslijed miješanja. Ako se razmotri na koji način plin koji se nalazi u jednom području cilindra izmjenjuje energiju s plinom koji se nalazi s njim u dodiru, onda se može zaključiti da se ta energija izmjenjuje uslijed prodiranja molekula plina iz prvog područja u drugo i obrnuto, tj. uslijed izmjene mase. S obzirom da je za vrijeme rješavanja diferencijalnih jednadžbi izmjena mase zanemarena, ta izmjena energije zamjenjuje se izmjenom topline koja svoj temelj bazira upravo na miješanju tva dva područja. U skladu s time ako se promatra izmjena topline između zone 1 i zone j (slika 2.9. lijevo) tada, uz pretpostavku potpunog miješanja tih dviju zona, nakon miješanja novonastala zona imati će neku temperaturu \bar{T}_{1j} (slika 2.9. desno).



Slika 2.9. Grafički prikaz modela izmjene topline između zona. Lijevo: potpuno razdvojene zone s pripadajućim temperaturama. Desno: podjela zona nakon potpunog miješanja zona 1 i j .

Energija koju zoni j treba dovesti da bi se ona pri konstantnom volumenu zagrijala s temperature T_j na temperaturu \bar{T}_{1j} može se izračunati iz:

$$\Delta Q_{1j} = \left[u_j(\bar{T}_{1j}) - u_j(T_j) \right] \cdot m_j \quad (56)$$

Ova energija (toplina) naziva se potencijal izmjene topline između zona 1 i j . To je energija koju bi te dvije mase izmijenile ukoliko bi se ostavilo dovoljno vremena da se one pri konstantnom volumenu potpuno izmiješaju. Ako se

prepostavi da je to vrijeme jednako Δt , tada se toplinski tok između zone 1 i zone j , potreban u jednadžbi (50), može izračunati iz:

$$\frac{\delta Q_{1,j}}{dt} = \frac{\Delta Q_{1,j}}{\Delta t} \quad (57)$$

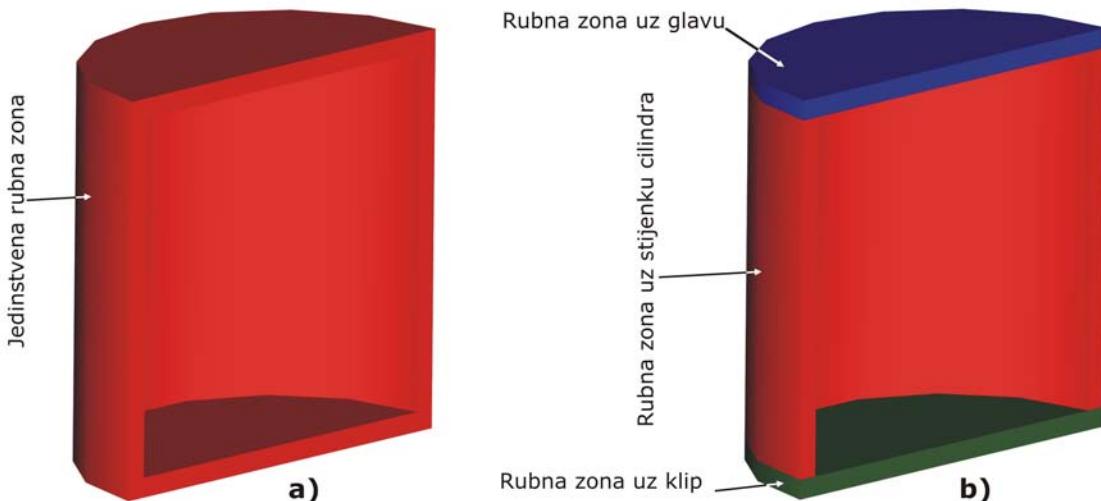
gdje je Δt , [s] – vremenska konstanta izmjene topline između zona.

Što je vremenska konstanta Δt manja to je manje vremena potrebno da zone potpuno izmjene potencijal izmjene topline, što se može ostvariti samo uz veći toplinski tok. Isto tako veća vremenska konstanta znači da je za potpunu izmjenu topline potrebno više vremena, tj. manji toplinski tok. Vremenska konstanta ovisi dakle o obliku i intenzitetu strujanja u cilindru te o položaju zona. U skladu s time proračun vremenske konstante Δt mogao bi se modelirati u ovisnosti o spomenutim veličinama, no u ovom istraživanju vremenska konstanta izmjene topline između zona Δt je kalibracijski faktor koji se određuje na temelju rezultata eksperimentalnih ispitivanja.

2.4.3. Model sa četiri zone bez izmjene mase

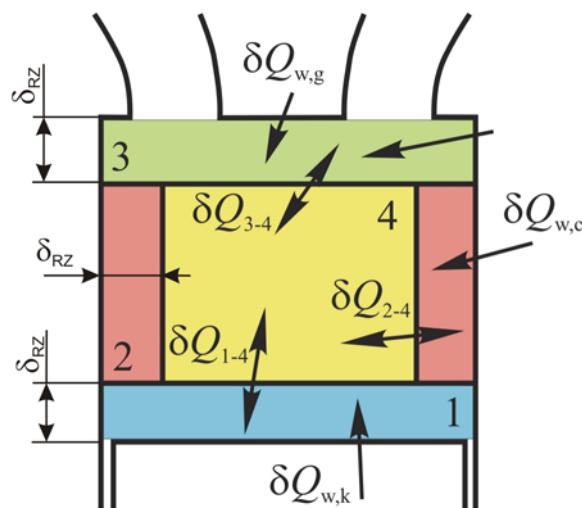
U točkama 2.4.1. i 2.4.2. razmatran je opći višezonski HCCI model. No da bi se takav opći model mogao riješiti potrebno ga je detaljnije odrediti definicijom broja i volumena zona, te njihovom međusobnom interakcijom. Za prvi model odabran je najjednostavniji oblik s najmanjim brojem zona i njihovom minimalnom interakcijom.

Kao najjednostavnije rješenje nameće se model s dvije zone kod kojeg bi jedna zona bila rubna zona i imala bi oblik šupljeg cilindra sa zatvorenim krajevima i određenom debljinom stijenke, a druga zona bi imala oblik cilindra koji ispunjava šupljinu unutar rubne zone (slika 2.10. a). Kod takvog rješenja teško bi bilo odrediti koja stijenka dominira izmjenom topline, tj. vrijednost srednje temperature svih stijenki. U stvarnom motoru temperatura stijenke glave motora obično je nešto viša od temperature stijenke cilindra, a stijenka klipa još je nešto toplija od stijenke glave. Osim toga stijenka cilindra ima izrazitu promjenu temperature s položajem, u odnosu na gornju mrtvu točku (GMT). Tako dio stijenke cilindra koji je vrlo blizu glave motora ima mnogo višu temperaturu od dijela stijenke koji je bliži klipu kada se on nalazi u donjoj mrvotvoj točki (DMT). Promjena temperature s mjestom promatranja može se zamijetiti i na stijenci glave i klipa, no s obzirom da je njihova cijela površina stalno u dodiru s plinovima u cilindru, njihova srednja temperatura je za vrijeme ciklusa konstantna. S druge strane, kod stijenke cilindra, u različitim položajima klipa biti će otkriven različit dio stijenke, pa će prema tome i njena srednja temperatura u različitim položajima klipa biti različita. Zbog svega toga kao najjednostavniji, ipak se nameće model s tri rubne zone (za svaku stijenku po jednu) i jednom središnjom zonom (slika 2.10. b).



Slika 2.10. Različite varijante jednostavne podjele cilindra na zone

Rubne zone smještene su uz odgovarajuće stijenke, pa na taj način nastaju zona uz klip, zona uz cilindar i zona uz glavu motora, a preostali prostor u sredini može se nazvati središnjom zonom. Rubne zone za vrijeme rješavanja diferencijalnih jednadžbi izmjenjuju toplinu sa stijenkama s kojima su u dodiru, npr. zona uz klip izmjenjuje toplinu sa stijenkama klipa (slika 2.11.), a pored toga svaka rubna zona izmjenjuje toplinu i sa središnjom zonom. Izmjena mase u ovom jednostavnom modelu zanemaruje se, pa je stoga za vrijeme visokotlačnog procesa masa u svakoj zoni konstantna. Masa svake zone određuje se u trenutku zatvaranja usisnih ventila na temelju volumena zona, koje ovise o zadanom udjelu volumena u rubnim zonama i položaju klipa u tom trenutku, te termodinamičkog stanja plina u cilindru. Prema tome, masa svake zone definirana je početnim uvjetima visokotlačnog procesa.



Slika 2.11. Višezonski model sa četiri zone bez izmjene mase.

Početni uvjeti računaju se na sličan način kao i kod jednozonskog modela (točke 2.3.3. i 2.3.4.). Kod jednozonskog modela primjenom programa AVL Boost i određenih jednadžbi definirani su tlak, temperatura i maseni udjeli svih kemijskih spojeva u cilindru u trenutku zatvaranja usisnih ventila, tj. na početku visokotlačnog procesa. Na isti način te su veličine izračunate i u slučaju četverozonskog proračuna s time da su još naknadno izračunati maseni udjeli pojedinih zone, tj. masa plina u svakoj zoni. Pretpostavljeno je da je temperatura u svim zonama u trenutku zatvaranja usisnih ventila jednaka pa su stoga te temperature jednake temperaturi izračunatoj za jednu zonu. Za podjelu mase u rubne zone korisnik proračuna zadaje udio volumena rubnih zona x_{Vzn} koji predstavlja udio volumena rubnih zona zajedno sa kompresijskim volumenom u odnosu na volumen cilindra u DMT.

Ako se prepostavi da u DMT rubne zone imaju oblik prikazan slikom 2.10.b, pri čemu je debljina svih rubnih zona jednaka δ_{RZ} , onda se uz zadani udio volumena rubnih zona x_{Vzn} može zapisati jednadžba:

$$\frac{D_c^2 \cdot \pi}{4} \cdot 2 \cdot \delta_{RZ} + \frac{\left[D_c^2 - (D_c - 2 \cdot \delta_{RZ})^2 \right] \cdot \pi (H - 2 \cdot \delta_{RZ})}{4} + V_K = x_{Vzn} \cdot (V_K + V_H) \quad (58)$$

gdje su: V_K , [m^3] – kompresijski volumen; V_H , [m^3] – radni volumen; D_c , [m] – promjer cilindra; H , [m] . hod klipa.

Raspisivanjem jednadžbe (58) dobije se polinom trećeg stupnja po debljini zone δ_{RZ} koji se može numerički riješiti Laguerreovom metodom, te na taj način izračunati debljinu rubnih zona. Poznavanjem debljine rubnog sloja, volumen zona dobije se množenjem rubne površine (npr. površine klipa) i debljine rubnih zona. Pri tome se u realnom motoru površina stijenke cilindra iznad klipa mijenja tijekom ciklusa, pa se za površinu stijenke cilindra uzima njena srednja vrijednost.

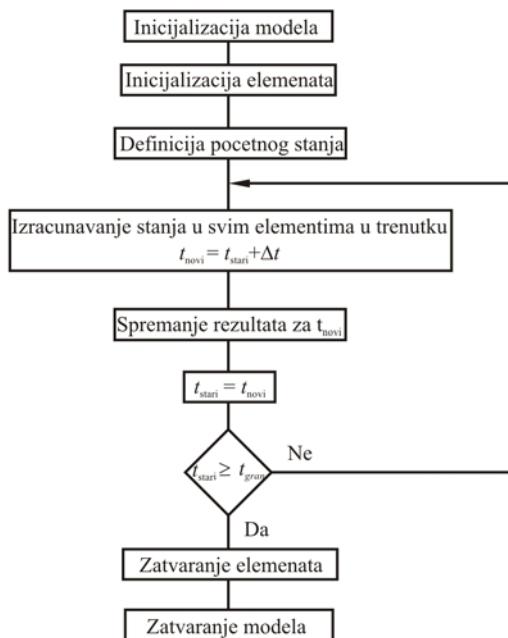
Kao što je ranije spomenuto, masa u zonama za vrijeme visokotlačnog procesa drži se konstantnom, dok se temperatura, tlak i maseni udjeli kemijskih spojeva u svakoj zoni mijenjaju u skladu s prikazanim proračunom (točka 2.4.1.). S druge strane ukupni volumen cilindra za vrijeme visokotlačnog procesa mijenja se u skladu s karakteristikom klipnog mehanizma, a volumen zona ovisiti će o izračunatom termodinamičkom stanju i o masi u svakoj zoni. S obzirom na to, oblik rubnih zona za vrijeme trajanja visokotlačnog procesa će se mijenjati, tj. mijenjati će se njihova debljina, uz prepostavku da masa u zoni popunjava cijeli prostor uz pripadajuću stijenku. Pri tome će najveću promjenu doživjeti zone uz stijenku klipa i glave. Pomakom klipa prema GMT ukupni volumen cilindra značajno se smanjuje, dok se s druge strane izračunati volumni udjeli zona mijenjaju mnogo manje. Zbog smanjenja ukupnog volumena cilindra, i relativno male promjene izračunatog volumnog udjela, volumeni rubnih

zona uz klip i glavu će se smanjivati, a s obzirom da su površine klipa i glave konstantne, njihova debljina će se smanjivati. Debljina zone uz stijenu cilindra isto će se tako smanjivati, no ta promjena biti će manja zbog toga što se pomakom klipa prema GMT smanjuje i površina stijenke, pa se na taj način kompenzira dio promjene volumena. Ova pojava je negativna posljedica činjenice da model nema izmjenu mase, koju će se pokušati popraviti sljedećim modelom. Kompletni izrazi za izračunavanje masenih udjela zona četverozonskog modela nalaze se u prilogu 4.

2.5. Postupak rješavanja

U točkama 2.3.3. i 2.3.4. je prikazano da je, s ciljem izračunavanja početnih uvjeta jednozonskog proračuna, model povezan s programom za izračunavanje promjena stanja u cijelom motoru. Pri tome je u spomenutim točkama naglasak stavljen na preračunavanje prikaza masenih udjela iz jednog proračuna u drugi.

Opisani četverozonski proračun HCCI motora isto je tako, s ciljem izračunavanja početnih uvjeta, povezan s programom AVL Boost, a s njim će biti povezani i budući višezonski proračuni. Stoga je postupak rješavanja svih ovih proračunskih modela usko povezan s postupkom rješavanja unutar programa Boost, pa da bi se mogao opisati način na koji razvijeni modeli rješavaju prikazane jednadžbe mora se pokazati i osnovna struktura proračuna unutar programa Boost (slika 2.12.).



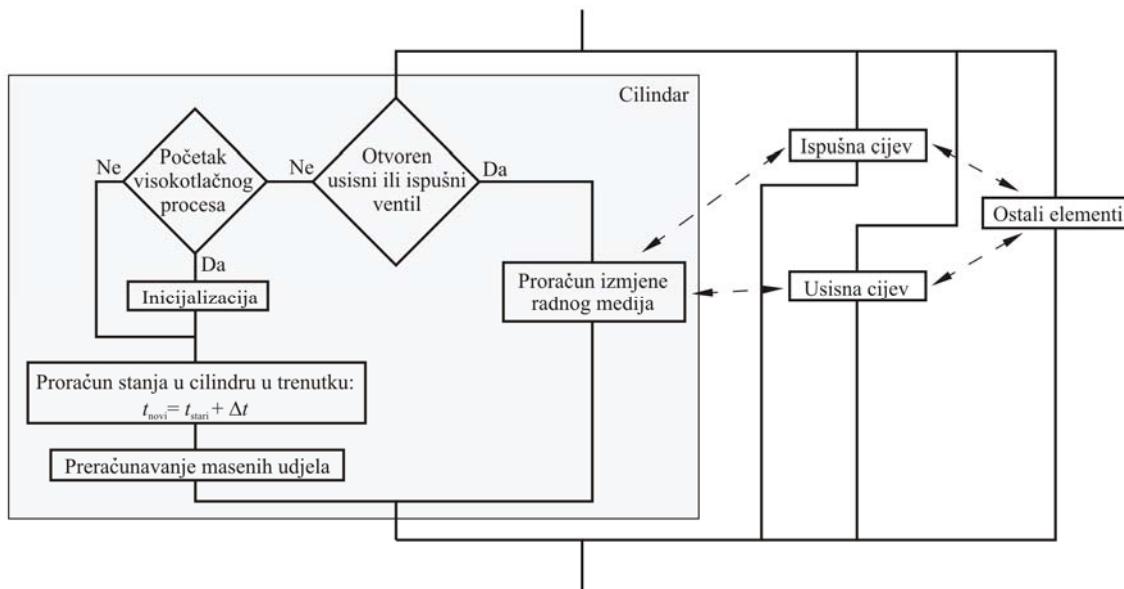
Slika 2.12. Osnovna struktura proračuna u programu AVL Boost

U programu Boost proračun se pokreće u trenutku otvaranja usisnih ventila. Korisnik programa za taj trenutak mora u svim elementima motora zadati stanje plinova. Pokretanjem proračuna na temelju ulaznih podataka modela

inicijaliziraju se sve potrebne varijable u koje će se tijekom proračuna upisivati izračunate vrijednosti. Na temelju zadanih veličina početnog stanja izračunavaju se sve ostale veličine, koje nisu zadane. Nakon toga se pomoću veličina početnog stanja u svim elementima modela motora izračunavaju sve te veličine za trenutak pomaknut za Δt . Pri tome se neki elementi mogu izračunavati potpuno odvojeno, dok se neki elementi, kod kojih postoji međusobna interakcija, izračunavaju istovremeno. Kada se izračunaju sve veličine u trenutku t_{novi} koji je za Δt pomaknut u odnosu na t_{stari} , izračunati rezultati spremaju se u posebne varijable, a sve veličine koje se odnose na t_{novi} nakon spremanja postavljaju se kao početne veličine (t_{stari}) za sljedeći korak. Ukoliko je tako postavljen t_{stari} veći ili jednak graničnoj veličini proračunskog vremena tada se proračun prekida i sve otvorene varijable se zatvaraju uz prethodno zapisivanje rezultata u posebne datoteke, a ako nije onda se cijeli proračun ponavlja i izračunavaju se sve veličine modela u sljedećem trenutku koji je za novi Δt pomaknut unaprijed. Ovaj vremenski korak Δt s kojim Boost ponavlja proračun nazvati ćemo Boostov korak i on je u pravilu konstantan za cijelo vrijeme trajanja proračuna. U proračunu motora on se obično izražava kao zakret koljenastog vratila $\Delta\alpha$, a s obzirom da se motor pri svom radu vrti nekom brzinom vrtnje ω , vrijeme Δt i kut zakreta $\Delta\alpha$ međusobno su izravno povezani:

$$\Delta\alpha = \omega \cdot \Delta t \quad (59)$$

Na slici 2.12. Proračun stanja u svim elementima prikazan je jednom kućicom pri čemu bi se ta kućica mogla dalje raščlaniti na niz manjih elemenata, što je djelomično i učinjeno na slici 2.13.



Slika 2.13. Osnovna struktura proračuna vremenskog koraka Δt

S obzirom da se proračun izgaranja HCCI motora provodi za vrijeme visokotlačnog procesa u cilindru, fokus je stavljen na taj dio. Za vrijeme visokotlačnog procesa cilindar je potpuno odvojen od usisnih i ispušnih cijevi pa se proračun jednog koraka u cilindru može provesti potpuno neovisno o ostalim elementima. S druge strane ukoliko je bilo koji od ventila otvoren, tada se radi o procesu izmjene radnog medija, pri čemu je za provođenje tog proračuna potrebna interakcija s usisnom ili ispušnom cijevi (ili obje). Razvijeni proračun izgaranja HCCI motora ugrađuje se u dio strukture proračuna prikazane na slici 2.13. lijevo, kada su oba ventila zatvorena.

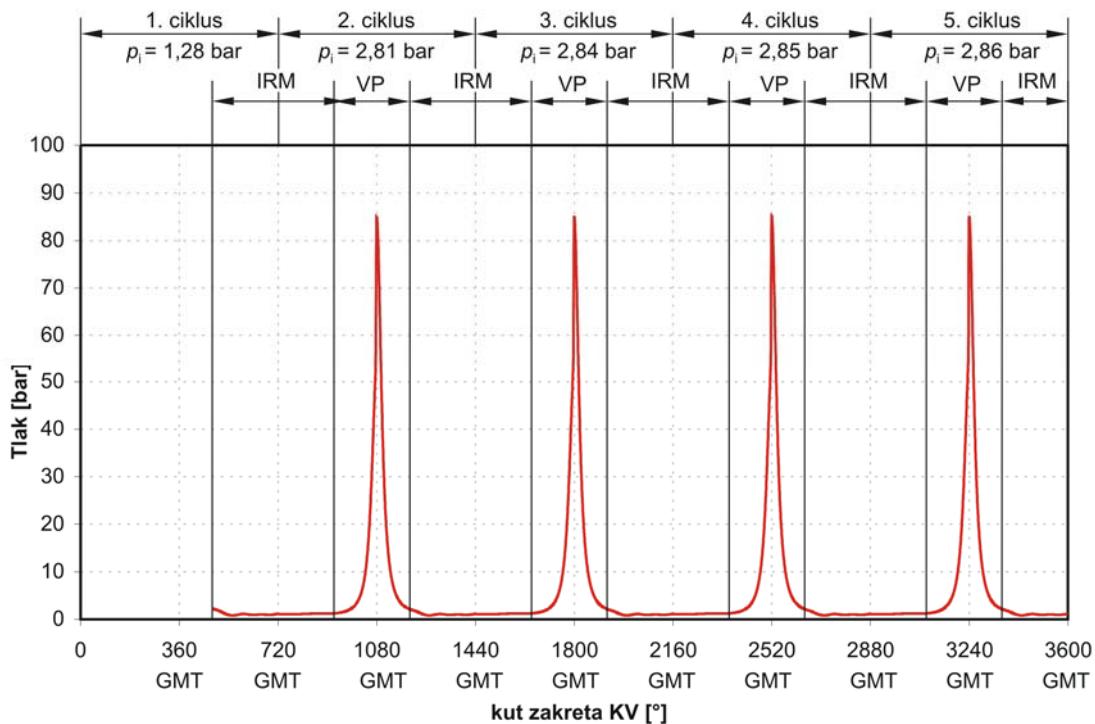
Pri tome se prije samog proračuna ispituje da li se radi o početku (prvom koraku) visokotlačnog procesa, u slučaju čega se moraju inicijalizirati veličine potrebne za proračun HCCI izgaranja. U točki 2.3.4. prikazano je kako se sastav mješavine plinova definiran u programu Boost preračunava na definiciju sastava potrebnu za prikazani proračun. To preračunavanje provodi se jednom na početku svakog visokotlačnog procesa i na slici 2.13. označeno je inicijalizacijom. Inicijalizacijom veličina definirat će se sastav mješavine, masa i temperatura u svakoj zoni, dok su ostale veličine (tlak, ukupna masa i volumen, itd.) na početku Boostovog koraka (t_{stari}) poznate iz prethodnog koraka. Numeričkim rješavanjem sustava jednadžbi (45), (47) i (48), prilagođenih opisanom četverozonskom modelu, izračunavaju se temperature i maseni udjeli svih kemijskih spojeva u svim zonama na kraju koraka (t_{novi}). Pri definiranju tog sustava jednadžbi toplinski tok svake zone izračunava se jednadžbom (50) pri čemu se primjenjuju oni elementi koji su u skladu s modelom prikazanim na slici 2.11. Koeficijent prijelaza topline α_w , koji se pri tome koristi, izračunava se jednom od jednadžbi (52), (53), (54) ili (55). Referentno stanje u tim jednadžbama je stanje plina u trenutku t_{stari} , a za vrijeme rješavanja sustava jednadžbi od trenutka t_{stari} do trenutka t_{novi} koeficijent α_w drži se konstantnim.

Sustav postavljenih diferencijalnih jednadžbi vrlo je krut pa se rješava rutinom VODE (variable coefficient ordinary differential equation solver) [96] koja pokriva širi krug potencijalnih diferencijalnih jednadžbi. Ovom rutinom mogu se rješavati kruti i nekruti problemi, s izrazito glatkim ili pak naglim promjenama nagiba. Za prikazani kruti problem koristi se implicitna metoda promjenjivog reda, s fiksnim vodećim koeficijentom. Metoda koristi promjenjivi vremenski korak pa se stoga može nositi s izrazito promjenjivom karakteristikom vremenskih konstanti. Ukoliko bi se koristila neka od metoda s konstantnim korakom, tada bi se za stabilno rješenje ovog problema za vrijeme proračuna izgaranja trebao izabrati vrlo mali korak, zbog kojeg bi u ostalom dijelu visokotlačnog procesa efikasnost računanja bila vrlo mala. Osim promjenjivog koraka, metoda tijekom iteracije više puta koristi Jakobijevu matricu koja se izračunava kvocijentom razlika, čime se njena efikasnost još više povećava. Sama rutina laka je za korištenje i izborom određenih parametara definira se tip problema koji se

rješava. Rutina se poziva sa stanjem u nekom trenutku t_0 i izračunava vrijednosti funkcije u trenutku t_1 , zadanom od strane korisnika. Broj unutarnjih koraka koji će rutina koristiti ovisi o ponašanju funkcije u zadanom vremenskom intervalu. Ukoliko se želi izračunati vrijednost funkcije u trenutku $t_2 > t_1$ tada na raspolaganju postoje dvije mogućnosti. Prva mogućnost je ponovni poziv rutine uz napomenu da se radi o nastavku rješavanja prethodnog problema, i u tom slučaju zadani problem, a ni njegove konstante, ne smiju biti nimalo promijenjeni. Druga mogućnost je ponovni poziv rutine, kao novog problema, s početnim stanjem koje odgovara izračunatim vrijednostima za trenutak t_1 i zahtjevom za izračunavanjem vrijednosti funkcije u t_2 . Kod ovakvog načina korištenja rutine, s obzirom da je svaki poziv potpuno novo rješavanje, konstante problema smiju se od poziva do poziva mijenjati. Upravo iz tog razloga ova druga mogućnost korištena je kod rješavanja jednadžbi prikazanog četverozonskog modela. Rutina se, kao novi problem, poziva s početnim stanjem u Boostovom vremenskom trenutku t_{stari} i traži se rješenje jednadžbi na kraju Boostovog vremenskog koraka (t_{novi}). Pri tome je korak kojim VODE rješava te jednadžbe promjenjiv i značajno manji od konstantnog Boostovog koraka Δt .

Kada rutina VODE izračuna temperature i masene udjele u svim zonama u trenutku t_{novi} , pomoći jednadžbe stanja plina i ostalih općih jednadžbi idealnih plinova izračuna se tlak u cilindru u istom tom trenutku. Osim toga izračunavaju se još i neke dodatne veličine koje se kasnije mogu prikazati u rezultatima kao što su: srednja temperatura cilindra, brzina oslobođanja topline, kumulativni udio oslobođene topline itd. Po završetku računanja stanja u cilindru u trenutku t_{novi} izračunati maseni udjeli kemijskih spojeva preračunavaju se u udjele kojima Boost prikazuje sastav mješavine, te se svi ti rezultati upisuju u variable glavnog programa. Istovremeno izračunato stanje u cilindru pohranjuje se kako bi u sljedećem koraku, koji nije prvi korak visokotlačnog procesa, početno stanje bilo poznato i ne bi trebalo vršiti ponovnu inicijalizaciju.

Na slici 2.12. prikazano je da se proračun zaustavlja kada vrijeme proračuna t_{stari} postane veće od neke granične vrijednosti t_{gran} . Granična vrijednost koja će osigurati konvergenciju rješenja ovisi o složenosti modela motora i za neke jednostavnije modele može iznositi 5 – 10 ciklusa, a kod složenih modela motora ona može biti i veća od 20 ciklusa. Na slici 2.14. prikazan je izračunati tok tlaka jednog jednostavnog modela motora jednozonskim proračunom kroz pet uzastopnih ciklusa. U prvom ciklusu proračun započinje tek na 480° jer je to trenutak otvaranja ispušnog ventila. Proračun u cilindru započinje izmjenom radnog medija koja se izračunava Boostovim jednadžbama. Na 720°KV započinje drugi ciklus, pri čemu se kod 924°KV zatvara usisni ventil i počinje proračun visokotlačnog procesa koji



Slika 2.14. Tok proračuna jednostavnog modela HCCI motora jednozonskim proračunskim modelom. (Oznake: IRM – izmjena radnog medija, VP – visokotlačni proces)

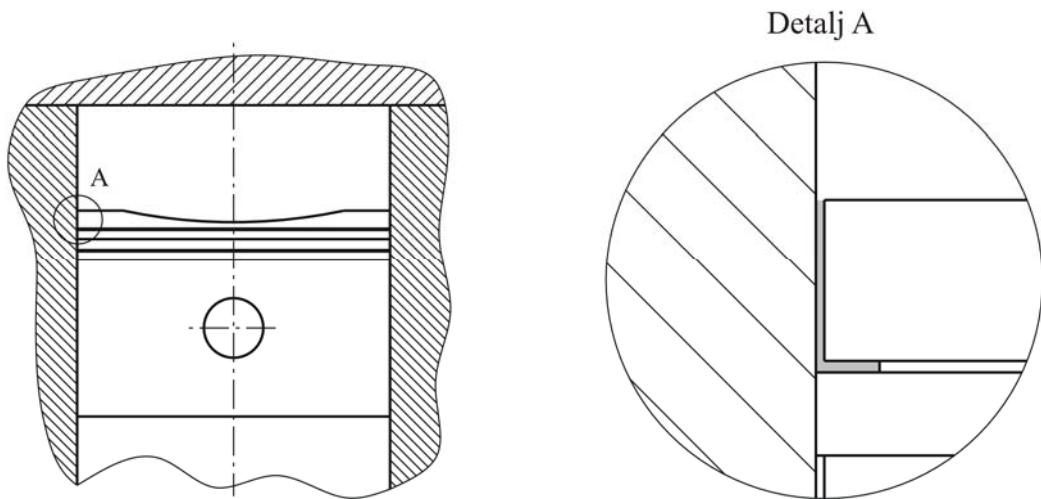
se provodi jednim od razvijenih modela (jednozonski, višezonski). Kod 1644°KV otvara se ispušni ventil i ponovno započinje izmjena radnog medija, ali sada 2. ciklusa. Proračun tako napreduje sve do kraja koji je u ovom slučaju nakon 5 proračunatih ciklusa. S obzirom da se radi o jednostavnom modelu motora, bez velikog broja usisnih i ispušnih cijevi, već u 2. ciklusu postiže se tok tlaka koji je vrlo sličan svim ostalima. No mala razlika ipak postoji što se vidi iz izračunatog srednjeg indiciranog tlaka (p_i) koji polagano iz ciklusa u ciklus raste. No, nakon 4 do 5 ciklusa moglo bi se reći da je postignuta konvergencija rješenja, a kao rješenje se uzima posljednji izračunavani ciklus.

2.6. Model sa šest zona i izmjenom mase

2.6.1. Opći pristup

Pri opisivanju četverozonskog modela spomenuto je da volumeni zona za vrijeme visokotlačnog procesa ne prate geometriju prostora, već se oblikuju u skladu s izračunatim tlakovima, temperaturama i masama koje se u njima nalaze. Ta činjenica može dovesti do vrlo malih razlika u rezultatima u odnosu na jednozonski model. To će se dobro vidjeti u rezultatima prikazanim u točki 3.2. Pored toga u nekoliko radova o HCCI motorima govori se o tome da je veliki izvor emisije CO i HC prostor između klipa i cilindra iznad prvog klipnog prstena, te prostor između klipnog prstena i

utora u klipu [58, 69, 72]. Na slici 2.15., u detalju A, taj je prostor obojen sivo i naziva se prostorom procjepa između klipa i cilindra.



Slika 2.15. Prikaz prostora procjepa između klipa i cilindra.

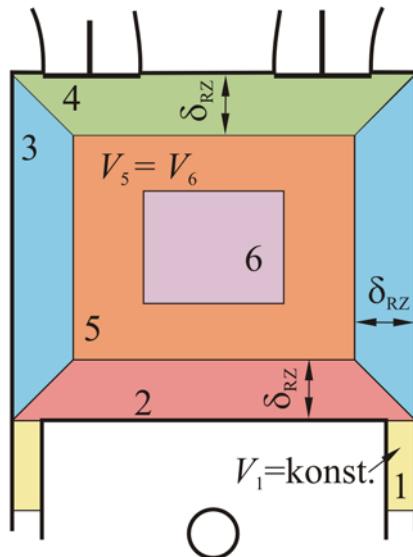
Iako taj prostor ima izrazito mali volumen, kada se klip nalazi u GMT uslijed porasta tlaka u njega uđe nezanemariva masa plinova. S obzirom da je površina stijenki klipa i cilindra koje se nalaze u dodiru s plinovima iz prostora procjepa relativno velika, temperatura plinova vrlo je bliska temperaturi tih stijenki. Zbog toga plinovi u tom prostoru u pravilu ne izgaraju. Za vrijeme ekspanzije tlak u cilindru pada pa plinovi iz prostora procjepa polagano izlaze u glavni prostor izgaranja i ukoliko je temperatura dovoljno velika u određenoj mjeri izgaraju. No u nekom trenutku temperatura plinova u glavnom prostoru izgaranja padne ispod temperature potrebne za inicijalizaciju reakcija i reakcije izgaranja se zaustavljaju. Prema tome dio emisije CO i HC svoj izvor pronalaze u prostoru procjepa, pa bi model koji pokušava simulirati te emisije u svakom slučaju trebao obuhvatiti i taj prostor.

Zbog svega navedenog definirane su značajke koje novi višezonski model mora sadržati:

- jedna zona mora opisivati prostor procjepa
- volumeni zona moraju pratiti zadatu geometriju
- središnja zona mora se podijeliti barem na dvije manje zone
- potrebno je definirati različite temperature u zonama na početku visokotlačnog procesa

U skladu s prikazanim zahtjevima izведен je šestzonski model čija je geometrija prikazana na slici 2.16. Zona 1 predstavlja zonu procjepa između klipa i cilindra, a njezin volumen je za cijelo vrijeme trajanja proračuna konstantan. Zone 2 i 4 predstavljaju rubne zone uz klip i glavu, a njihov volumen definiran je površinom stijenke klipa, odnosno glave, i

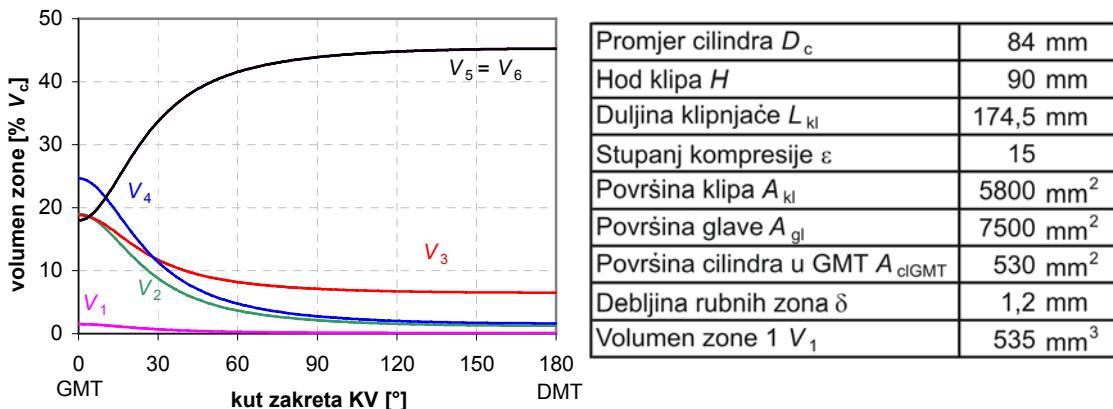
debljinom rubne zone δ_{RZ} . Debljina rubnih zona δ_{RZ} u ovom šestzonskom modelu jednaka je za sve rubne zone i konstantna za vrijeme trajanja visokotlačnog procesa. Zona 3 predstavlja rubnu zonu uz stijenku cilindra, a njezin volumen ovisi o već spomenutoj debljini rubne zone δ_{RZ} i trenutnoj površini stijenke cilindra, koja pak ovisi o obliku prostora izgaranja i položaju klipa h . Preostali volumen predstavlja središnji prostor koji je podijeljen na dva jednakna dijela pri čemu zona 5 ima oblik šupljeg cilindra i u kontaktu je sa svim rubnim zonama i zonom 6, a zona 6 ima oblik punog cilindra i u kontaktu je samo sa zonom 5. U prilogu 5. nalaze se kompletne jednadžbe kojima se volumen cilindra dijeli na šest prikazanih zona.



Slika 2.16. Prikaz položaja i oblika zona šestzonskog proračunskog modela.

Kod ovako definiranih zona njihovi volumeni različito će se mijenjati s pomakom klipa, tj. zakretom koljenastog vratila. Primjer promjene volumena svih zona za motor s proizvoljnim geometrijskim karakteristikama prikazan je na slici 2.17. Na istoj slici prikazana je i tablica s geometrijskim parametrima klipnog mehanizma za koje vrijedi ovakva promjena volumena zona. Promjena volumena prikazana ju u postocima od trenutnog volumena cilindra, što znači da je zbroj svih tih relativnih volumena u svakom trenutku jednak 100%. Kut zakreta odnosi se na položaj klipa u gornjoj mrtvoj točki što znači da se kod 0° KV klip nalazi u GMT, a kod 180° KV klip se nalazi u DMT. U donjoj mrtvoj točki ukupni volumen je dosta velik, pa se većina volumena nalazi u zonama 5 i 6 čiji zbroj čini $\sim 90\%$ volumena cilindra. U tom položaju klipa (DMT) površina stijenke cilindra je veća od površine glave i klipa pa je sljedeća po veličini zona uz stijenku cilindra, a mali volumen zone procjepa (V_1) u relativnom je odnosu gotovo zanemariv. Pomakom klipa prema GMT ukupni volumen cilindra se smanjuje, pri čemu volumen zone procjepa i volumeni rubnih zona uz klip i glavu ostaju konstantni. To znači da njihov utjecaj u ukupnom volumenu raste, što se na

slici može vidjeti kao porast udjela zona 1, 2, 4. Udio volumena zone 3 isto tako raste, iako se njena absolutna vrijednost smanjuje uslijed sve manje površine stijenke cilindra. S obzirom da se ukupni volumen cilindra značajno mijenja, veliku promjenu u relativnom odnosu doživljavaju središnje zone 5 i 6 koje u GMT više ne dominiraju. Na slici 2.17. može se isto tako vidjeti da, iako je volumen zone procjepa u DMT gotovo zanemariv, kada klip dođe u GMT to nikako više nije slučaj.



Slika 2.17. Promjena volumena zona u ovisnosti o kutu zakreta koljenastog vratila

Da bi proračunski model mogao pratiti zadane promjene volumena zona, a da pri tom u svakom trenutku tlak u svim zonama bude jednak, neophodno je da tijekom proračuna zone međusobno izmjenjuju masu. Prilikom izvođenja jednadžbe (29), odnosno (42) za višezonski model, prepostavljeno je da je masa u cilindru, tj. zoni, konstantna, zbog čega su određene komponente spomenutih izraza nestale.

Uvođenjem izmjene mase u diferencijalne jednadžbe, u svakoj jednadžbi zone pojavio bi se faktor brzine promjene mase zone $\frac{dm_j}{dt}$ koji bi se morao modelirati na poseban način. Fizikalno bi masa iz jednog prostora u drugi strujala uslijed različitih tlakova u tim prostorima ili zbog inercije plinova kao posljedice karakterističnog strujanja u cilindru. Niti jedna od tih pojava ne može se modelirati ovim proračunom. Za potrebe modeliranja karakterističnih strujanja, s termodinamičkog proračuna, moralo bi se preći na proračun mehanike fluida (CFD), a za što je već u uvodu rečeno da, uz upotrebu detaljne kemijske kinetike, nije moguće. S druge pak strane moglo bi se termodinamičkim proračunom, uz prepostavku različitog tlaka u zonama, modelirati izmjena mase kao posljedica razlike u tlakovima. No to bi unijelo nove prepostavke i ograničenja, te još dodatno produžilo već dugačko vrijeme računanja.

Zbog toga se izmjena mase računa izvan diferencijalnih jednadžbi u tzv. bezvremenskom prostoru, pri čemu je glavni cilj izmjene mase

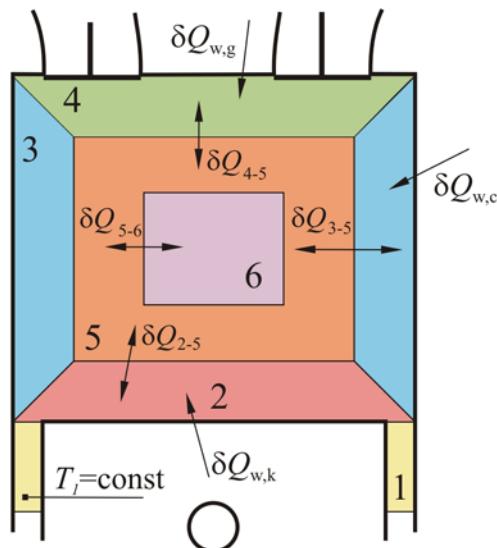
izjednačavanje izračunatih volumena zona sa zadanim. Model izmjene mase detaljnije će biti opisan u sljedećoj točki (2.6.2.).

S obzirom da je temperatura u prostoru procjepa, iz razloga objašnjenih ranije, bliska temperaturi stijenke s kojom je u dodiru, zona 1 modelira se kao izotermna zona pri čemu je temperatura plinova u toj zoni za cijelo vrijeme trajanja visokotlačnog procesa jednaka temperaturi klipa.

Dakle, što se tiče osnovnih jednadžbi, vrijede jednadžbe (45), (47) i (48) prikazane u točki 2.4.1., pri čemu je broj zona povećan na 6, što znači da se rješava sustav od $6*(N_{sp}+1)$ diferencijalnih jednadžbi. Isto tako s obzirom na činjenicu da je zona 1 izotermna, jednadžba (45) za nju glasi:

$$\frac{dT_1}{dt} = 0 \quad (60)$$

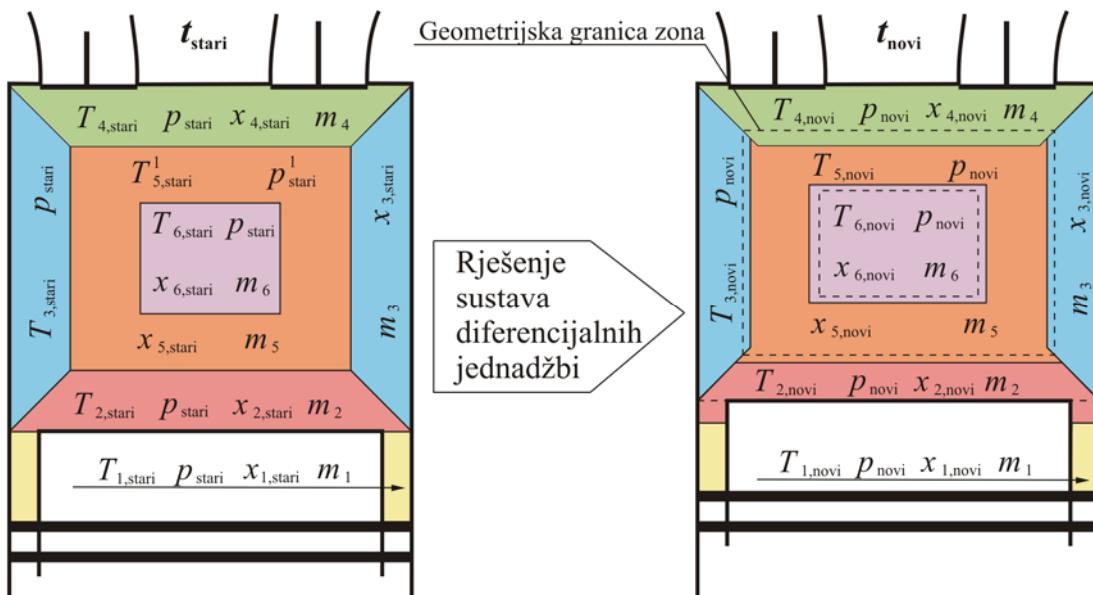
U jednadžbama (45) potrebno je definirati toplinski tok koji se zoni dovodi, a koji se modelira na način opisan u točki 2.4.2., s time da je pritom potrebno odrediti na koji način pojedina zona i s kim izmjenjuje toplinu. Na slici 2.18. prikazana je izmjena topline između zona i stijenki, te između zona međusobno, koja se primjenjuje u šestzonskom modelu. Izmjena topline između zona modelira se za parove (2 i 5), (3 i 5), (4 i 5), te (5 i 6), dok se izmjena topline sa stijenkama modelira između rubnih zona i pripadajućih stijenki. Iako je izmjena topline u zoni procjepa intenzivna, tu izmjenu topline nije potrebno modelirati, s obzirom da je odabran izotermni model zone. Na slici se vidi da su zone (3 i 4) i (2 i 3) isto tako u dodiru, no površina međusobnog dodira je vrlo mala pa se ta izmjena topline zanemaruje.



Slika 2.18. Modeliranje izmjene topline u šestzonskom modelu.

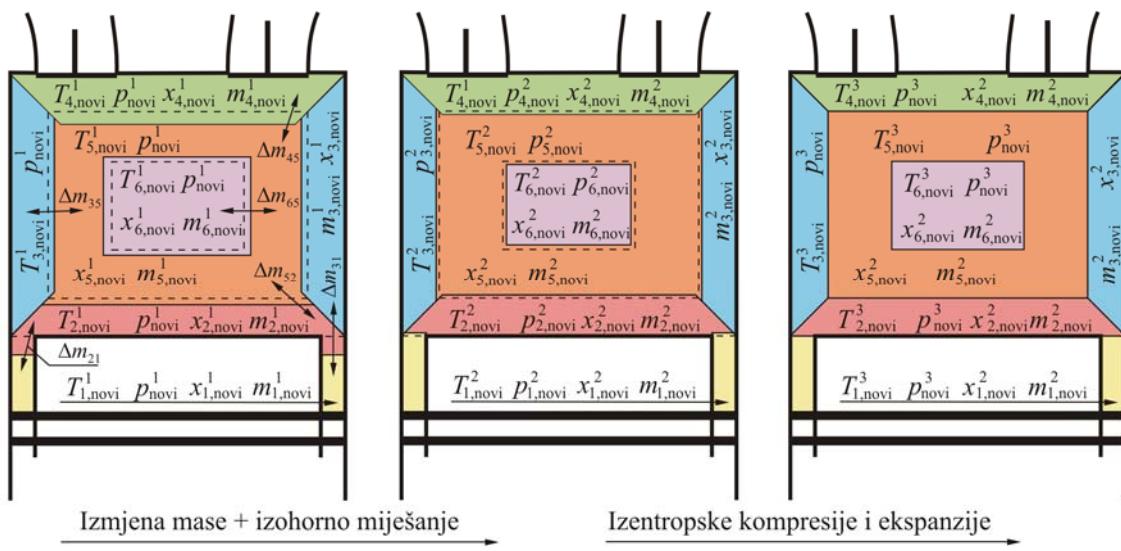
2.6.2. Model izmjene mase

S obzirom da se izmjena mase neće izračunavati za vrijeme rješavanja sustava diferencijalnih jednadžbi, a rješavanjem tog sustava prelazi se iz trenutka t_{stari} u trenutak t_{novi} , izmjena mase rješavati će se u bezvremenskom području, tj. proračun izmjene mase neće sadržati vrijeme kao varijablu. Ako se prepostavi da se proračun nalazi u nekom dijelu visokotlačnog procesa (za sada zanemarimo kako se do tuda došlo), prije rješavanja sustava diferencijalnih jednadžbi opisanih izrazima (45), (47) i (48), a prilagođenih šestzonskom modelu u skladu s opisom u točki 2.6.1., u cilindru je u trenutku t_{stari} , što predstavlja trenutak početka Boostovog koraka, poznato stanje u svim zonama ($T_{i,\text{stari}}$, p_{stari} , $X_{i,\text{stari}}$, $m_{i,\text{stari}}$). Pri tome je tlak u svim zonama jednak pa stoga nema indeks i . Kako je prikazano na slici 2.19. rješavanjem sustava diferencijalnih jednadžbi izračunavaju se temperature i maseni udjela zona, te ukupni tlak u cilindru na kraju promatranog vremenskog koraka ($T_{i,\text{novi}}$, $X_{i,\text{novi}}$, p_{novi}). S obzirom da je prepostavljeno da za vrijeme rješavanja diferencijalnih jednadžbi nema izmjene mase, mase u zonama prije i poslije su jednake, pa na slici 2.19. u indeksu nemaju oznake stari i novi. S tako izračunatim stanjem svaka masa pojedine zone ispunjava određeni volumen koji je na slici 2.19. prikazan odgovarajućom bojom, a granica zona prikazana je punim tankim linijama. S druge strane u trenutku t_{novi} klip se nalazi u određenom položaju za koji postoje definirani geometrijski volumeni zona. Granice geometrijskih volumena zona na slici 2.19. prikazane su isprekidanim linijama. Prema tome početno stanje proračuna izmjene mase prikazano je slikom 2.19. desno.



Slika 2.19. Skica promjena veličina stanja u zonama, pri rješavanju sustava diferencijalnih jednadžbi, a prije izmjene mase.

Model proračuna izmjene mase prikazan je na slici 2.20., pri čemu je početno stanje definirano slikom 2.19. desno. Izmjena mase odvija se kroz dva koraka, a veličine stanja u svakom od koraka definirane su gornjim indeksom. Tako sve veličine početnog stanja imaju dodan gornji indeks 1, sve veličine na kraju prvog koraka imaju dodan gornji indeks 2, a sve veličine na kraju 2 koraka imaju dodan gornji indeks 3. U prvom koraku prepostavlja se da se granice između zona pomiču pri čemu dolazi do miješanja određene količine mase jedne zone s određenom količinom mase druge zone, uz konstantan volumen. Pri tome je dozvoljeno da samo neke zone međusobno izmjenjuju masu, a dozvoljena interakcija prikazana je na 2.19. lijevo. Prema tome dozvoljeno je da se izmjenjuje masa između zona 1 i 2, 1 i 3, 2 i 5, 3 i 5, 4 i 5, te 5 i 6. Nakon izmjene mase i izohornog miješanja svakoj zoni promijenit će se temperatura, sastav, masa, tlak i volumen. Pri tome je volumen svake zone određen na osnovu volumena zone prije miješanja i volumena mase koja se zoni dodavala ili oduzimala. Zbog toga nakon prvog koraka proračuna izmjene mase tlak u zonama više nije međusobno jednak, što je na slici 2.20. prikazano tako da tlak na središnjoj skici u donjem indeksu ima i oznaku zone. Ako se prepostavi da su zone u cilindru odvojene beskonačno tankim i potpuno fleksibilnim pregradama, tada bi se nakon ovakve izmjene mase volumeni zona promijenili i stabilizirali u stanju u kojem sve zone imaju isti tlak. Pri tome bi neke zone povećale svoj volumen (ekspanzija), dok bi ga neminovno neke smanjile (kompresija). Prema tome u drugom koraku izračunavaju se istovremene kompresije i ekspanzije zona koje na kraju dovode do jednakog tlaka. Te promjene volumena modeliraju se kao izentropske promjene stanja zatvorenih sustava. Na kraju drugog koraka u svakoj zoni izračunata je nova temperatura, masa i sastav, te novi tlak u cilindru. Pri tome je volumen svake zone promijenjen u odnosu na početno stanje.



Slika 2.20. Shematski prikaz proračuna izmjene mase u trenutku t_{novi} .

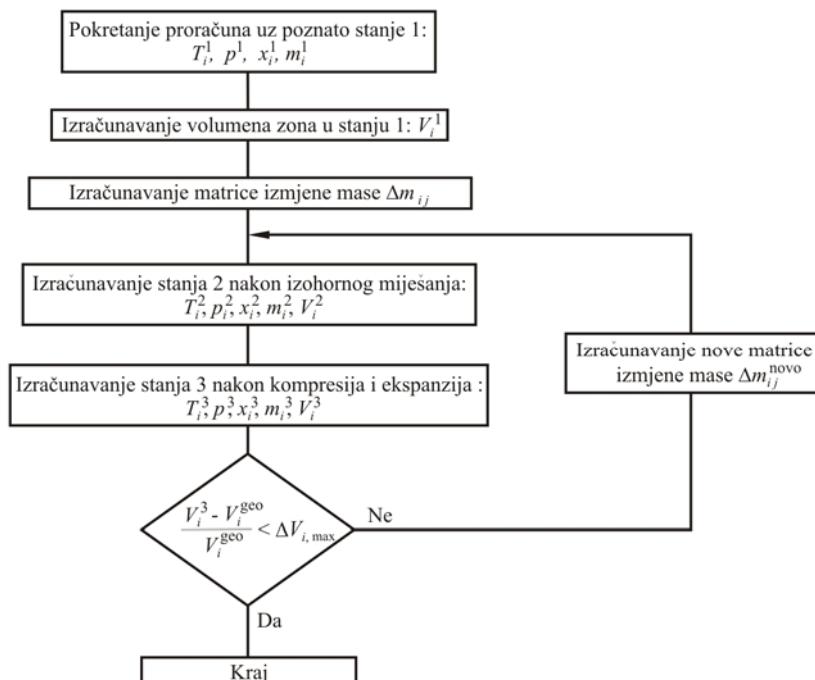
Potrebno je napomenuti da se zona 1, koja predstavlja zonu procjepa, u oba koraka smatra izotermnom, pa se prema tome temperatura zone 1 nakon miješanja ne računa, a u drugom koraku kod zone 1 prepostavljena je izotermna promjena volumena.

Ako se u prvom koraku dobro odaberu mase koje se izmjenjuju (Δm_{ij}) tada volumeni zona na kraju drugog koraka odgovaraju geometrijskim volumenima zona za taj vremenski trenutak. Treba zamijetiti da volumeni zona na kraju prvog koraka izmjene mase ne odgovaraju geometrijskim volumenima, a to se na slici 2.20. vidi tako što su granice geometrijskih volumena prikazane isprekidanim linijama.

Masa koja se izmjenjuje (Δm_{ij}) ne može se analitički izračunati, već se do te mase dolazi iteracijskim numeričkim postupkom prikazanim u sljedećoj točki (2.6.2.1.).

2.6.2.1. Postupak izračunavanja izmjene mase

Prije nego se definiraju jednadžbe kojima će se izračunati masa koju zone trebaju međusobno izmjeniti da bi prema gore opisanom modelu sveli volumene zona na geometrijski zadane, prikazat će se osnovna struktura, tj. tok proračuna (slika 2.21.). Proračun se pokreće uz poznato stanje plinova u zonama prije izmjene mase, koje je definirano njihovom temperaturom, tlakom, masom i masenim udjelima kemijskih spojeva. Na osnovu tog stanja mogu se izračunati volumeni svih zona prije izmjene mase, te se na temelju odstupanja tih volumena od geometrijski zadanih volumena zona



Slika 2.21. Dijagram toka proračuna izmjene mase

izračunavaju komponente matrice (Δm_{ij}) . U matrici izmjene mase, komponenta Δm_{ij} predstavlja masu koja se iz zone i prebacuje u zonu j . Kada se definiraju sve komponente matrice izmjene mase, izračunava se stanje nakon izohornog miješanja tih masa s masama zona u koje one ulaze. Nakon izračunavanja stanja 2 izračunava se promjena veličina zbog istovremenih kompresija i ekspanzija, te se na taj način dobije konačno stanje nakon izmjene mase definirane matricom Δm_{ij} . Ako vrijednosti volumena zona nakon izmjene mase odstupaju od vrijednosti geometrijski zadanih volumena za više od najveće dozvoljene vrijednosti, tada se na temelju tih odstupanja i stare matrice izmjene mase definira nova matrica izmjene mase i proračun miješanja i ekspanzije se ponavlja. Takva zatvorena petlja vrti se sve dok se izračunati volumeni dovoljno ne približe zadanim, kada se proračun zaustavlja, a posljednja matrica izmjene mase uzima se kao rješenje tog proračuna.

2.6.2.2. Inicijalizacija i izračunavanje početne matrice izmjene mase
 Ulazne veličine u proračun su dakle T_j^1 , p^1 , x_{ij}^1 , m_j , V_j^{geo} . Poznavanjem masenih udjela kemijskih spojeva individualna plinska konstanta svake zone može se izračunati iz:

$$R_j^1 = \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} (x_{ij}^1 \cdot R_i) \quad (61)$$

gdje je R_i , $\left[\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \right]$ - individualna plinska konstanta i -tog kemijskog spoja.

Volumen zone j za zadane uvjete izračunava se iz jednadžbe stanja plina:

$$V_j^1 = \frac{m_j^1 \cdot R_j^1 \cdot T_j^1}{p^1} \quad (62)$$

Popunjavanje matrice izmjene mase započinje izračunavanjem masa koje se izmjenjuju između zona 1 i 2, te zona 1 i 3. Te mase ovisiti će o trenutnom volumenu zone 1, pa ako je $V_1^{\text{geo}} > V_1^1$ to znači da masa iz zona 2 i 3 mora ući u zonu 1, što znači da su:

$$\Delta m_{12} = \Delta m_{13} = 0, \quad (63)$$

Veličine masa koje ulaze u zonu 1 odgovaraju razlici geometrijskog i izračunatog volumena uz stanje odgovarajuće zone, pri čemu se prepostavlja da polovina razlike volumena otpada na masu iz zone 2, a druga polovina na masu iz zone 1:

$$\Delta m_{21} = \frac{p^1 \cdot (V_1^{\text{geo}} - V_1^1)}{2 \cdot R_2^1 \cdot T_2^1}, \quad \Delta m_{31} = \frac{p^1 \cdot (V_1^{\text{geo}} - V_1^1)}{2 \cdot R_3^1 \cdot T_3^1} \quad (64)$$

Ako je pak $V_1^{\text{geo}} < V_1^1$ to znači da masa iz zone 1 mora izaći, a prema modelu prikazanom na slici 2.20. ona će ući u zonu 2 i 3. Pretpostavlja se da je masa koja ulazi u zonu 2 jednaka masi koja ulazi u zonu 3, a s obzirom da masa koja izlazi iz zone 1 odgovara razlici geometrijskog i izračunatog volumena, one se mogu izračunati iz:

$$\Delta m_{12} = \Delta m_{13} = \frac{p^1 \cdot (V_1^1 - V_1^{\text{geo}})}{2 \cdot R_1^1 \cdot T_1^1}, \quad (65)$$

dok su pri tome $\Delta m_{21} = \Delta m_{31} = 0$.

Početne vrijednosti u matrici izmjene mase za zone 2 i 5 određene su na temelju volumena zone 2 i na temelju mase koja ulazi ili izlazi iz te zone u zonu 1. Prema tome ako je $V_2^{\text{geo}} > V_2^1$ pretpostavlja se da će masa iz zone 5 ulaziti u zonu 2. U skladu s time $\Delta m_{25} = 0$, dok se vrijednost mase koja iz zone 5 ulazi u zonu 2 može izračunati iz:

$$\Delta m_{52} = \frac{p^1 \cdot (V_2^{\text{geo}} - V_2^1) - \Delta m_{12} \cdot R_1^1 \cdot T_1^1 + \Delta m_{21} \cdot R_2^1 \cdot T_2^1}{R_5^1 \cdot T_5^1} \quad (66)$$

Iz jednadžbe (66) vidi se da je pri izračunavanju mase koja iz zone 5 ulazi u zonu 2 osim razlike volumena u obzir uzeta i masa koja eventualno ulazi u zonu 2 iz zone 1 i obrnuto. Prema tome ako masa iz zone 1 ulazi u zonu 2 može se desiti da je rezultat jednadžbe (66) negativan, što se s obzirom na način definiranja matrice izmjene mase ne smije desiti. U tom slučaju je $\Delta m_{52} = 0$, a masa koja iz zone 2 ulazi u zonu 5 izračunava se iz:

$$\Delta m_{25} = \frac{p^1 \cdot (V_2^1 - V_2^{\text{geo}}) + \Delta m_{12} \cdot R_1^1 \cdot T_1^1}{R_2^1 \cdot T_2^1} \quad (67)$$

Ako je pak $V_2^{\text{geo}} < V_2^1$ pretpostavlja se da masa iz zone 2 izlazi u zonu 5. U skladu s time je $\Delta m_{52} = 0$, a Δm_{25} računa se pomoću:

$$\Delta m_{25} = \frac{p^1 \cdot (V_2^1 - V_2^{\text{geo}}) - \Delta m_{21} \cdot R_2^1 \cdot T_2^1 + \Delta m_{12} \cdot R_1^1 \cdot T_1^1}{R_2^1 \cdot T_2^1} \quad (68)$$

U slučaju da se masa iz zone 2 prebacuje u zonu 1, može se desiti da se jednadžbom (68) izračuna negativna vrijednost za Δm_{25} . U tom slučaju je $\Delta m_{25} = 0$, a masa iz zone 5 ulazi u zonu 2 i jednaka je:

$$\Delta m_{52} = \frac{p^1 \cdot (V_2^{\text{geo}} - V_2^1) + \Delta m_{21} \cdot R_2^1 \cdot T_2^1}{R_5^1 \cdot T_5^1} \quad (69)$$

Izračunavanje komponenata matrice izmjene mase između zona 3 i 5 potpuno je analogno onom između zona 2 i 5, pri čemu se svi indeksi koji se odnose na zonu 2 mogu zamijeniti indeksima za zonu 3.

Zona 4 izmjenjuje masu samo sa zonom 5 pa će početna vrijednost te izmjene ovisiti isključivo o volumenu zone 4. Prema tome ako je $V_4^{\text{geo}} > V_4^1$, tada je geometrijski volumen veći od trenutnog pa masa mora ući u zonu 4, što znači da je $\Delta m_{45} = 0$, a masa koja iz zone 5 ulazi u zonu 4 računa se pomoću:

$$\Delta m_{54} = \frac{p^1 \cdot (V_4^{\text{geo}} - V_4^1)}{R_5^1 \cdot T_5^1} \quad (70)$$

Ako je pak $V_4^{\text{geo}} < V_4^1$ tada je $\Delta m_{54} = 0$, a masa iz zone 4 ulazi u zonu 5 i njena početna vrijednost je jednaka:

$$\Delta m_{45} = \frac{p^1 \cdot (V_4^1 - V_4^{\text{geo}})}{R_4^1 \cdot T_4^1} \quad (71)$$

Središnja zona 6 isto tako izmjenjuje masu samo sa zonom 5 pa su jednadžbe za izračunavanje početnih vrijednosti te izmjene analogne izrazima za izmjenu mase između zone 4 i 5. Pri tome ta masa ovisi o odnosima trenutnog i geometrijskog volumena zone 6.

2.6.2.3. Miješanje i promjena volumena

Matrica izmjene mase potpuno određuje veličine i smjer prebacivanja mase. Većina elemenata matrice jednaka je nuli, a s obzirom na način na koji je definirana niti jedna njena vrijednost ne može biti manja od nule. Prvi korak u proračunu izmjene mase je izohorno mijehanje u svim zonama, uz iznimku zone 1 kod koje imamo mijehanje uz konstantnu temperaturu. Poznavanjem matrice izmjene mase, masa u zoni j nakon mijehanja m_j^2 može se izračunati pomoću:

$$m_j^2 = m_j^1 + \sum_{i=1}^{N_{\text{zn}}} \Delta m_{ij} - \sum_{i=1}^{N_{\text{zn}}} \Delta m_{ji} \quad (72)$$

S obzirom da se miješanje odvija pri konstantnom volumenu, pri prebacivanju mase iz zone i u zonu j prebacuje se i određeni volumen ΔV_{ij} , koji se može izračunati na temelju stanja plina u zoni iz koje se masa prebacuje:

$$\Delta V_{ij} = \frac{\Delta m_{ij} \cdot T_i^1 \cdot R_i^1}{p^1} \quad (73)$$

Poznavanjem matrice izmjene volumena, volumen u zoni j nakon miješanja V_j^2 izračunava se jednadžbom analognom jednadžbi (72):

$$V_j^2 = V_j^1 + \sum_{i=1}^{N_{zn}} \Delta V_{ij} - \sum_{i=1}^{N_{zn}} \Delta V_{ji} \quad (74)$$

Nakon mase i volumena potrebno je definirati sastav plinova u svakoj zoni nakon miješanja. Bilancem mase svakog kemijskog spoja i u svakoj zoni j dobije se njihov maseni udio nakon miješanja x_{ij}^2 :

$$x_{ij}^2 = \frac{\sum_{k=1}^{N_{zn}} (\Delta m_{kj} \cdot x_{ik}^1) + x_{ij}^1 \left(m_j^1 - \sum_{k=1}^{N_{zn}} \Delta m_{jk} \right)}{m_j^2} \quad (75)$$

Temperatura u zoni j nakon miješanja računa se postupkom koji je detaljnije opisan u prilogu 6, dok su u nastavku prikazane samo osnovne jednadžbe. Da bi se mogao izračunati srednji specifični toplinski kapacitet za razmatrani temperaturni interval $c_{v,j}^2|_{300}^{T_j^2}$, potreban za izračunavanje temperature zone nakon miješanja T_j^2 , tu temperaturu potrebno je u prvom koraku prepostaviti $(T_{j,p}^2)$. Postupkom prikazanim u poglavlju 2.3.2. za zonu j može se izračunati specifična unutarnja energija plinova pri temperaturi od 300 K $(u_j^2(300))$ i energija $(u_j^2(T_{j,p}^2))$ pri prepostavljenoj temperaturi $T_{j,p}^2$, pri čemu sastav plinova odgovara stanju nakon miješanja. 2. Primjenom ovih veličina srednji specifični toplinski kapacitet zone j , pri konstantnom volumenu, za interval od 300 K do prepostavljene temperature zone jednak je:

$$c_{v,j}^2|_{300}^{T_{j,p}^2} = \frac{u_j^2(T_{j,p}^2) - u_j^2(300)}{T_{j,p}^2 - 300}. \quad (76)$$

Temperatura zone j nakon miješanja sada se može izračunati pomoću:

$$T_j^2 = \frac{\sum_{k=1}^{N_{zn}} (\Delta m_{kj} \cdot u_k^1(T_k^1)) + \left(m_j^1 - \sum_{k=1}^{N_{zn}} \Delta m_{jk} \right) \cdot u_j^1(T_j^1) - m_j^2 \cdot u_j^2(300)}{m_j^2 \cdot c_{v,j}^2 \Big|_{300}^{T_{j,p}^2}} + 300 \quad (77)$$

Ako je absolutna vrijednost razlike između izračunate i prepostavljene temperature veća od 10^{-4} tada se izračunavanje temperature ponavlja, pri čemu se uzima da je prepostavljena temperatura mješavine jednaka temperaturi izračunatoj jednadžbom (77).

Uz poznatu temperaturu, masu, volumen i sastav u zoni j , tlak u istoj zoni može se izračunati primjenom jednadžbe stanja plina:

$$p_j^2 = \frac{m_j^2 \cdot R_j^2 \cdot T_j^2}{V_j^2} \quad (78)$$

pri čemu se individualna plinska konstanta mješavine R_j^2 može izračunati jednadžbom analognom s jednadžbom (61) uz primjenu masenih udjela kemijskih spojeva u zoni j nakon miješanja.

U drugom koraku proračuna izmjene mase, zone adijabatski mijenjaju svoj volumen, izuzev zone 1 koja svoj volumen mijenja uz konstantnu temperaturu. Na kraju te promjene sve zone ponovno imaju isti tlak p^3 pa se u skladu s time mogu postaviti jednadžbe:

$$p_1^2 \cdot V_1^2 = p^3 \cdot V_1^3 \quad (79)$$

$$p_j^2 \cdot (V_1^2)^{\kappa_j} = p^3 \cdot (V_j^3)^{\kappa_j}, \quad j = 2, \dots, N_{zn} \quad (80)$$

U šest jednadžbi prikazanih u (79) i (80) imamo 7 nepoznanica (6 volumena i tlak na kraju promjene), što znači da moramo dodati još jednu. Zbroj volumena zona u stanju 3 jednak je trenutnom volumenu cilindra V_c :

$$V_c = \sum_{i=1}^{N_{zn}} V_i^3 \quad (81)$$

Uvrštenjem jednadžbi (79) i (81) u jednadžbe pod (80) dobiva se reducirani sustav od pet nelinearnih jednadžbi s pet nepoznanica:

$$\frac{p_j^2 \cdot (V_j^2)^{\kappa_j}}{V_c - \sum_{i=2}^{N_{zn}} V_i^3} = \frac{p_1^2 \cdot V_1^2}{V_c} (V_j^3)^{\kappa_j}, \quad j = 2, \dots, N_{zn} \quad (82)$$

Nepoznanice u ovom sustavu su volumeni zona $2, \dots, N_{zn}$ u stanju 3.

S obzirom da je ovaj sustav nelinearan rješava se numerički, upotrebom malo izmijenjenog Powellevog hibridnog algoritma, pri čemu se Jakobijeva matrica računa aproksimacijom pomoću konačnih diferencija. Algoritam se u obliku zasebne rutine NEQNF nalazi u numeričkoj biblioteci IMSL, koja sadrži veliki broj programiranih numeričkih postupaka i pri izračunavanju ovog sustava jednadžbi koristi se kao gotov proizvod.

2.6.2.4. Provjera rješenja i priprema novog koraka

Nakon proračuna miješanja i promjene volumena, na temelju prepostavljene izmjene mase izračunati su volumeni zona na kraju cijelog postupka. Ukoliko su tako izračunati volumeni unutar tolerancijskog područja definiranog geometrijski zadanim volumenima i najvećim dozvoljenim odstupanjem:

$$\text{MAX} \left(\left| \frac{V_j^3 - V_j^{\text{geo}}}{V_j^{\text{geo}}} \right| \right) < \Delta V_{\max}, \quad (83)$$

tada se uzima da je prepostavljena izmjena mase upravo rješenje proračuna. Ako jednadžba (83) nije zadovljena tada se, na temelju prepostavljene matrice izmjene mase i postignutog rezultata izračunava nova matrica izmjene mase s kojom se postupak opisan u točki 2.6.2.3. ponavlja.

Nova matrica izmjene mase popunjava se promatranjem pojedinih komponenata izmjene mase i njihovog učinka na promjenu volumena. Zona 1 izmjenjuje masu sa zonama 2 i 3 pri čemu ta izmjena ovisi o veličini zone 1. Ako se promatra izmjenu mase između zone 1 i 2, te ako je zona 1 u prethodnom ciklusu imala veći volumen od geometrijskog, tada je prepostavljeno da volumen iz zone 1 odlazi u zonu 2. To znači da je $\Delta m_{12} > 0$. U tom slučaju se komponenta nove matrice izmjene mase s istom adresom izračunava pomoću:

$$\Delta m_{12}^{\text{novi}} = \Delta m_{12} - C_1 \frac{V_1^{\text{geo}} - V_1^3}{V_1^{\text{geo}}} \cdot \Delta m_{12} \quad (84)$$

gdje je C_1 , - proporcionalna konstanta zone 1.

Ovako izračunat $\Delta m_{12}^{\text{novi}}$ može biti i manji od nule što bi značilo da masa više ne ide iz zone 1 u zonu 2 već da ide obrnutim smjerom. S obzirom na način zadavanja matrice izmjene mase, u tom slučaju je potrebno napraviti sljedeće jednakosti:

$$\begin{aligned} \Delta m_{21}^{\text{novi}} &= -\Delta m_{12}^{\text{novi}} \\ \Delta m_{12}^{\text{novi}} &= 0 \end{aligned} \quad (85)$$

Ako je pak u prethodnom bilo ciklusu $\Delta m_{21} > 0$, što znači da se masa prebacivala iz zone 2 u zonu 1, tada se ista ta komponenta nove matrice izmjene mase računa s:

$$\Delta m_{21}^{\text{novi}} = \Delta m_{21} + C_1 \frac{V_1^{\text{geo}} - V_1^3}{V_1^{\text{geo}}} \cdot \Delta m_{21} \quad (86)$$

Isto kao i kod jednadžbe (84), $\Delta m_{21}^{\text{novi}}$ izračunat jednadžbom (86) može biti manji od nule, a u tom slučaju se radi zamjena mjesta u matrici koja je istovjetna kao ona prikazana jednadžbama (85).

U vrlo malom broju slučajeva u prethodnom koraku nije bilo izmjene mase između zona 1 i 2, no u tom slučaju su i $\Delta m_{12} = 0$ i $\Delta m_{21} = 0$. To znači da je volumen zone 1 prije prethodnog ciklusa bio jednak geometrijskom, no to ne znači da je i nakon izmjene mase ostalih zona situacija i dalje takva. Stoga se u tom slučaju računa pomoćna veličina Δm_p :

$$\Delta m_p = \frac{V_1^{\text{geo}} - V_1^3}{V_1^{\text{geo}}} \cdot m_1^3 \quad (87)$$

Ako je $\Delta m_p > 0$, tada se polovina njene vrijednosti smješta na mjesto (2 1) u novoj matrici izmjene mase $(\Delta m_{21}^{\text{novi}})$, a ako je pak $\Delta m_p < 0$ polovina absolutne vrijednosti smješta se na mjesto (1 2) iste te matrice $(\Delta m_{12}^{\text{novi}})$.

Komponente nove matrice izmjene mase koje se odnose na zone 1 i 3 $(\Delta m_{13}^{\text{novi}}, \Delta m_{31}^{\text{novi}})$, računaju se istim postupkom kao i za zone 1 i 2, pri čemu je i kod ovih komponenti referentni volumen, volumen zone 1. To znači da su izrazi potpuno isti uz promjenu indeksa 2 u indeks 3.

Pri promatranju izmjene mase između zona 2 i 5 referentni volumen za izračunavanje promjene prethodne vrijednosti je volumen zone 2. Ako je u prethodnom ciklusu $\Delta m_{25} > 0$ to znači da je masa prelazila iz zone 2 u 5.

Ako je volumen zone 2 i dalje veći od geometrijskog volumena to znači da vrijednost Δm_{25} treba povećati, dok je u obrnutom slučaju treba smanjiti.

Pored tog treba promatrati kako se mijenja izmjena mase između zona 1 i 2 jer i ona ima utjecaj na volumen zone 2. Kada se sve to uzme u obzir nova komponenta matrice izmjene mase za zone 2 i 5 može se izračunati iz:

$$\Delta m_{25}^{\text{novi}} = \Delta m_{25} - C_2 \cdot \frac{V_2^{\text{geo}} - V_2^3}{V_2^{\text{geo}}} \cdot \Delta m_{25} + (\Delta m_{12}^{\text{novi}} - \Delta m_{12}) - (\Delta m_{21}^{\text{novi}} - \Delta m_{21}) \quad (88)$$

gdje je C_2 - proporcionalna konstanta zone 2.

Isto kao i kod prethodnih komponenti i ova komponenta može biti manja od nule. U tom slučaju se, zbog već ranije opisanog načina definiranja matrice izmjene mase, absolutna vrijednost ovako izračunate komponente stavlja na mjesto (5, 2), dok se ova komponenta izjednačava s nulom.

Postoji mogućnost da je u prethodnom ciklusu $\Delta m_{52} > 0$ što znači da je masa prelazila iz zone 5 u 2. U tom slučaju nova vrijednost te komponente iznosi:

$$\Delta m_{52}^{\text{novi}} = \Delta m_{52} + C_2 \cdot \frac{V_2^{\text{geo}} - V_2^3}{V_2^{\text{geo}}} \cdot \Delta m_{52} - (\Delta m_{12}^{\text{novi}} - \Delta m_{12}) + (\Delta m_{21}^{\text{novi}} - \Delta m_{21}) \quad (89)$$

Ako bi kojim slučajem ovako izračunata komponenta $\Delta m_{52}^{\text{novi}}$ bila manja od nule, tada bi njena absolutna vrijednost bila smještena u komponentu $\Delta m_{25}^{\text{novi}}$, a ona bi bila izjednačena s nulom.

Isto kao i kod proračuna zone 1, postoji mogućnost da su obje komponente izmjene mase između zona 2 i 5 u prethodnom ciklusu bile jednake nuli $\Delta m_{25} = \Delta m_{52} = 0$. U tom slučaju prvo se izračunava pomoćna veličina Δm_p :

$$\Delta m_p = \frac{V_2^{\text{geo}} - V_2^3}{V_2^{\text{geo}}} \cdot m_2^3 - (\Delta m_{12}^{\text{novi}} - \Delta m_{12}) + (\Delta m_{21}^{\text{novi}} - \Delta m_{21}) \quad (90)$$

Ako je ta pomoćna veličina $\Delta m_p > 0$ tada se postavlja da je komponenta $\Delta m_{52} = \Delta m_p$, a u suprotnom slučaju je $\Delta m_{25} = |\Delta m_p|$.

Komponente matrice izmjene mase koje se odnose na interakciju između zona 3 i 5 mijenjaju se na isti način kao i komponente za zone 2 i 5, s time da se u jednadžbama indeksi 2 zamjenjuju indeksima 3.

Isto tako kod izračunavanja komponenata nove matrice izmjene mase za zone 4 i 5 ($(\Delta m_{45}^{\text{novi}}, \Delta m_{54}^{\text{novi}})$, te zone 5 i 6 ($\Delta m_{56}^{\text{novi}}, \Delta m_{65}^{\text{novi}}$) primjenjuje se proračun prikazan za zone 1 i 2 i 1 i 3 (jednadžbe (84) – (87)). Pri tome je kod izmjene mase između zona 4 i 5 referentni volumen, volumen zone 4, a kod izmjene mase između zona 5 i 6 to je volumen zone 6. U prvom slučaju u jednadžbama gdje se ona koristi primjenjuje se proporcionalna konstanta zone 4 (C_4), dok je u drugom slučaju to konstanta zone 6 (C_6). Jedino odstupanje od proračuna za zone 1 i 2 i 1 i 3 nalazi se u slučaju da se računa pomoćna veličina Δm_p . Kod proračuna izmjene mase između zona 1 i 2, te 1 i 3 polovina pomoćne veličine Δm_p ili njene absolutne vrijednosti pridodaje se odgovarajućoj komponenti nove matrice izmjene mase, dok se kod proračuna izmjene mase između zona 4 i 5 i zona 5 i 6 odgovarajućim komponentama pridodaje cijela vrijednost pomoćne veličine Δm_p .

U jednadžbama (84), (86), (88) i (89) spominju se proporcionalne konstante pojedinih zona. Te konstante imaju funkciju ubrzati postupak

konvergencije rješenja, tj. ubrzati približavanje vrijednosti komponenti matrice izmjene mase konačnim vrijednostima. S druge pak strane prevelike vrijednosti ovih konstanti mogu dovesti do nestabilnosti postupka i umjesto konvergencije, do divergencije rješenja. Zbog toga se ove konstante računaju na temelju početnih vrijednosti volumena zona u prvom ciklusu i geometrijski zadanih volumena zona:

$$C_j = \frac{V_j^{\text{geo}}}{2 \cdot |V_j^1 - V_j^{\text{geo}}|} \leq 400 \quad (91)$$

Ovako izračunata vrijednost u određenim kombinacijama može biti jako velika, što s aspekta stabilnosti rješenja nije dobro, pa je granična vrijednost proporcionalne konstante postavljena na 400.

2.6.3. Priprema početnih uvjeta

Šestzonski proračun visokotlačnog procesa pokreće se u trenutku zatvaranja usisnih ventila, a s obzirom da se izmjena radnog medija izračunava jednozonskim proračunom, na početku visokotlačnog procesa poznati su tlak u cilindru p_c , temperatura u cilindru T_c , masa u cilindru m_c , sastav smjese u cilindru x_i , te volumen cilindra V_c . Da bi se opisani proračun pokrenuo potrebno je svakoj zoni pridodati njenu temperaturu T_j , masu m_j , maseni sastav x_{ij} i volumen V_j , te odrediti ukupni tlak u cilindru. Volumeni zona geometrijski su određeni debljinom rubnih zona δ_{RZ} , te se za svaki kut zakreta koljenastog vratila, pa tako i za trenutak zatvaranja usisnih ventila, mogu izračunati. Kod četverozonskog modela pretpostavljeno je da je sastav plinova u svim zonama, u trenutku zatvaranja usisnih ventila, jednak prosječnom sastavu cilindra, a isto tako pretpostavljeno je da je, u istom tom trenutku, temperatura u svim zonama jednaka i da odgovara temperaturi cilindra. Uz ove dvije pretpostavke masa u svakoj zoni lako se može izračunati primjenom jednadžbe stanja plina na svaku zonu. No, korištenjem pretpostavke o jednakosti temperatura, na početku kompresije, nema raspodjele temperature po cilindru.

Za šestzonski model pripremljen je proračun početnih uvjeta kod kojeg je zadržana pretpostavka o jednakosti sastava u svim zonama, ali je pretpostavka o jednakosti temperatura izmijenjena. Ako se prepostavi da HCCI motor usisava pripremljenu smjesu goriva i zraka, onda će ta smjesa nakon izmjene radnog medija biti dosta dobro izmiješana, pa pretpostavka da sve zone imaju isti sastav može ostati. S druge strane temperatura uz stijenkiju klipa cilindra ili glave motora poprima vrijednost koja je tim bliže temperaturi stijenke, što se bliže stijenci nalazimo. Ta pojava javlja se kako za vrijeme visokotlačnog procesa, tako i za vrijeme izmjene radnog medija. Iz tog razloga je pretpostavka o jednakosti temperatura zamijenjena modelom koji izračunava temperature rubnih zona.

2.6.3.1. Opće jednadžbe raspodjele mase na zone

Za vrijeme trajanja proračuna u svakom Boostovom koraku prikazani proračunski model izračunat će stanje u svakoj zoni ($T_j, p_j, x_{ij}, m_j, V_j$). Pored tih veličina potrebno je izračunati i srednje vrijednosti temperature, i sastava cijelog cilindra. Te srednje vrijednosti izračunavaju se primjenom proračuna miješanja svih šest zona pri konstantnom volumenu. U skladu s time na početku proračuna, u trenutku zatvaranja usisnih ventila, uz poznate srednje vrijednosti temperature i sastava u cilindru, te vrijednosti tlaka i volumena cilindra izračunat će se temperature i mase u svim zonama čijim miješanjem pri konstantnom volumenu će se dobiti upravo srednja vrijednost temperature i tlak jedne zone. Pri tom treba imati na umu da sve zone imaju jednak tlak, no nakon miješanja pri konstantnom volumenu tlak mješavine svih zona ne mora odgovarati tlaku kada su zone odvojene. Ta razlika vrlo je mala, ali ipak postoji. U skladu s opisanim modelom mogu se postaviti jednadžbe pomoću kojih će se računati tražene veličine.

Ako promatramo zone u razdvojenom stanju, onda se za svaku zonu može postaviti jednadžba stanja plina pri čemu je, s obzirom da je sastav u svim zonama jednak, individualna plinska konstanta svih zona isto tako jednak:

$$p_z \cdot V_j = m_j \cdot R_c \cdot T_j, \quad (91)$$

gdje je sa p_z označen tlak u cilindru kada je masa zone razdvojena.

Miješanjem pri konstantnom volumenu unutarnja energija ostaje konstantna pa vrijedi:

$$m_c \cdot u_c(T_c, x_i) = \sum_{j=1}^{N_{zn}} m_j \cdot u_j(T_j, x_{ij}), \quad (92)$$

pri čemu vrijednosti u zagradama predstavljaju funkcionalnu ovisnost specifične unutarnje energije smjese u cilindru i zona pojedinačno.

Bilanca mase kaže da je zbroj masa u svim zonama jednak masi u cilindru:

$$m_c = \sum_{j=1}^{N_{zn}} m_j, \quad (93)$$

a nakon miješanja smjesa u cilindru isto tako zadovoljava jednadžbu stanja plina:

$$p_c \cdot V_c = m_c \cdot R_c \cdot T_c. \quad (94)$$

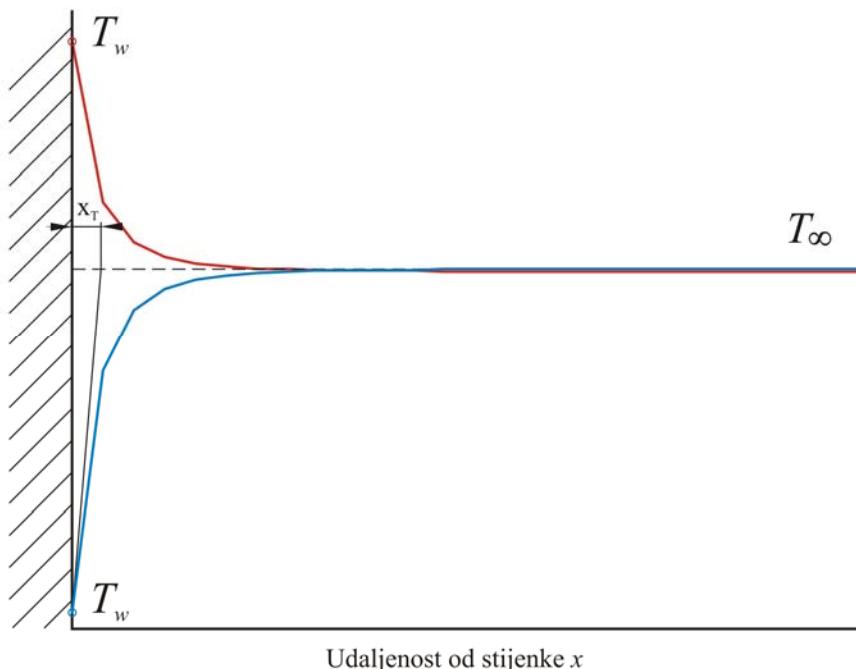
Prikazane jednadžbe čine sustav od 9 jednadžbi u kojima su nepoznate veličine: T_j, m_j, p_z (13 nepoznanica). Ovakav sustav nije moguće riješiti, ali ako pomoću nekih drugih modela izračunamo temperature rubnih zona (T_2, T_3, T_4) i uz pretpostavku da je temperatura zone procjepa (T_1) jednaka temperaturi stijenke klipa, broj nepoznanica smanjuje se na 9 čime sustav

jednadžbi (91) – (94) postaje rješiv. Temperatura zone procjepa mora se postaviti da je jednaka temperaturi stijenke klipa, s obzirom da je ionako za vrijeme proračuna ta zona izotermna i prati temperaturu stijenke klipa. Temperature rubnih zona izračunati će se primjenom proračuna koji se temelji na pretpostavljenom profilu temperature uz stijenke i prikazan je točkom 2.6.3.2.

Sustav jednadžbi (91) – (94) nije moguće eksplicitno riješiti, pa se primjenjuje iteracijski postupak prikazan točkom 2.6.3.3.

2.6.3.2. Izračunavanje temperaturnih profila u rubnim zonama

Za vrijeme rada motora radni medij u cilindru struji na određeni način, a kao posljedica tog strujanja javlja se konvektivni prijelaz topline na samim stijenkama. Kao posljedica tog prijelaza topline, uz stijenke cilindra stvara se određeni profil temperature koji je različit za različite uvjete strujanja i različite rubne uvjete na stijenkama. No, općenito promatrajući može se pretpostaviti da temperatura plinova u cilindru, uz samu stijenu, ima profil sličan jednom od onih prikazanih na slici 2.22. Prikazana su dva oblika profila temperature s obzirom na rubne uvjete. Crveno obojani profil prikazuje slučaj kada je srednja temperatura plinova u cilindru niža od temperature stijenke, dok plavo obojani profil prikazuje obrnuti slučaj kada je srednja temperatura plinova u cilindru viša od temperature stijenke. Na prikazani profil mogu se nametnuti određeni uvjeti, čime je njegov oblik potom potpuno definiran.



Slika 2.22. Mogući profili temperature uz stijenku cilindra.

Prema [97] koeficijent konvektivnog prijelaza topline proporcionalan je koeficijentu toplinske provodnosti (λ) i temperaturnom gradijentu na stijenci, a obrnuto proporcionalan razlici između temperature stijenke T_w i temperature u unutrašnjosti cilindra T_∞ . To za slučaj profila prikazanih na slici 2.22. znači:

$$\alpha_w = \frac{-\lambda \cdot \left(\frac{dT}{dx} \right)_{x=0}}{(T_w - T_\infty)}. \quad (95)$$

S obzirom da se koeficijent prijelaza topline izračunava jednom od korelacija (52), (53), (54) ili (55), jednadžba (95) predstavlja rubni uvjet za određivanje nagiba profila temperature na mjestu dodira sa stijenkom. Pored ovog rubnog uvjeta poznato je da temperatura plina uz samu stijenku mora odgovarati temperaturi stijenke tj. $T(x=0) = T_w$, a isto tako srednja vrijednost profila temperature mora biti jednak srednjoj vrijednosti temperature plinova u cilindru $\bar{T} = T_c$.

Usporedbom oblika krivulja profila temperature, s krivuljama poznatih matematičkih funkcija dolazi se do zaključka da funkcija s izrazom:

$$y = a \cdot (x + b)^{-c} + d \quad (96)$$

daje oblik vrlo sličan obliku prikazanom na slici 2.22. Osim toga kod prikazane funkcije promjenom koeficijenata a , b , c i d funkcija može zadovoljiti sve nametnute uvjete. Pri tome treba zamijetiti da funkcija (96) ima četiri nepoznanice, a da su definirana tri rubna uvjeta. Prema tome da bi se mogli odrediti svi koeficijenti potrebno je definirati još jedan rubni uvjet.

Krivulja profila temperature na određenoj udaljenosti od stijenke više ne mijenja svoju temperaturu, te je ona jednaka T_∞ . Prema tome dodatni rubni uvjet bi mogao biti taj da na nekoj udaljenosti od stijenke nagib krivulje temperature bude jednak nuli. No kod funkcije prikazane jednadžbom (96) povećanjem vrijednosti varijable x nagib krivulje će se smanjivati, ali nikada neće biti jednak nuli. Zbog toga je postavljen takav rubni uvjet kod kojeg nagib krivulje na određenoj udaljenosti od stijenke mora biti približno jednak nuli, tj. mora biti manji od neke zanemarivo male vrijednosti. Udaljenost na kojoj se pretpostavlja da je nagib krivulje približno jednak nuli odgovara udaljenosti 10 puta većoj od veličine x_T na slici 2.22., a koja predstavlja udaljenost na kojoj tangenta na profil temperature povučena iz stijenke presijeca liniju najveće temperature profila.

Primjenom opisanih rubnih uvjeta na izraz (96) dobiju se sljedeće jednadžbe:

$$\left(\frac{dT}{dx} \right)_{x=0} = -a \cdot c \cdot b^{-(c+1)} \quad (97)$$

$$T_w = a \cdot b^{-c} + d \quad (98)$$

$$T_c = \frac{\frac{H_{uk}}{2} \int_0^{\frac{D_c}{2}} (a \cdot (x+b)^{-c} + d) dx}{\frac{H_{uk}}{2}} \text{ ili } T_c = \frac{\int_0^{\frac{D_c}{2}} 2 \cdot \pi \cdot (a \cdot (x+b)^{-c} + d) \cdot \left(\frac{D_c}{2} - x \right) dx}{\frac{D^2 \pi}{4}} \quad (99)$$

$$\left| -a \cdot c \cdot (10 \cdot x_T + b)^{-(c+1)} \right| < \dot{y}_{\max} \quad (100)$$

Za jednadžbu (99) postoje dva izraza, pri čemu se koristi jedan zavisno o vrsti stijenke. Kod stijenke klipa i glave motora koristi se lijevi izraz, a integracija srednje temperature vrši se do polovine ukupne trenutne visine cilindra, dok se kod stijenke cilindra koristi desni izraz, a integracija se vrši do polovine promjera cilindra.

Jednadžbama (97) – (100) mogu se izračunati koeficijenti a , b , c , d jednadžbe (96) svake stijenke, a primjenom tako izračunatog profila temperature lako se može izračunati srednja vrijednost temperature u prostoru uz stijenku koji ima točno određenu debljinu δ_{RZ} .

2.6.3.3. Postupak izračunavanja raspodjele mase

Primjenom jednadžbi (91) – (94) uz zadano srednje stanje u cilindru (T_c , p_c , x_i , m_c), te zadane volumene zona V_j , temperaturu zone procjepa T_1 i temperature rubnih zona (T_2 , T_3 , T_4) mogu se izračunati mase svih zona, temperature središnjih zona (T_5 , T_6), te tlak razdvojenih masa p_z . No, iz prikazanih jednadžbi ne mogu se ove veličine eksplicitno izraziti, a ne mogu se niti riješiti nekom od poznatih numeričkih metoda. Stoga je primijenjen poseban postupak prilagođen upravo rješavanju tih jednadžbi.

U prvom koraku pretpostavlja se da je tlak razdvojenih masa jednak srednjem tlaku u cilindru $p_z = p_c$. Uz tako pretpostavljeni tlak mogu se primjenom jednadžbe (91) na zone 1, 2, 3 i 4 izračunati mase u tim zonama (m_1 , m_2 , m_3 , m_4). Uvrštenjem jednadžbi (91) za zone 5 i 6 u bilancu mase (93) dobiva se ovisnost temperature T_5 o temperaturi T_6 :

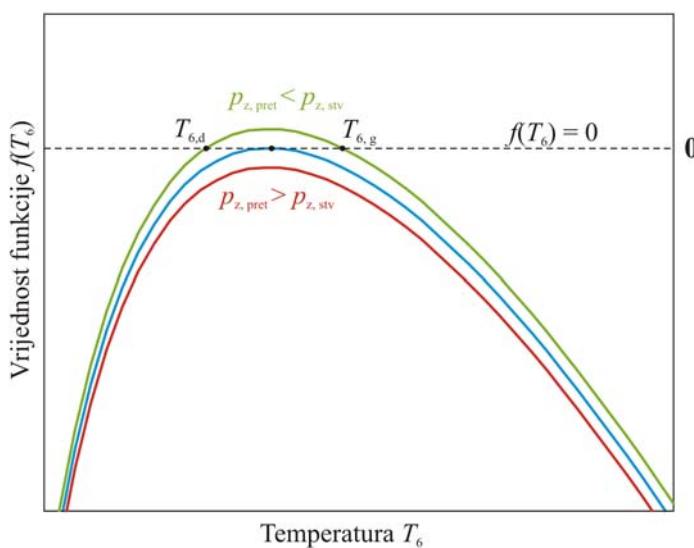
$$T_5 = \frac{\frac{p_z \cdot V_5}{R}}{m_c - \sum_{j=1}^4 m_j - \frac{p_z \cdot V_6}{R \cdot T_6}}, \quad (101)$$

a s tako izračunatom temperaturom T_5 bilanca unutarnje energije iz (92) postaje funkcija samo temperature T_6 :

$$m_c \cdot u_c(T_c, x_i) - \sum_{j=1}^4 m_j \cdot u_j(T_j, x_{ij}) - \frac{p_z \cdot V_5}{R \cdot T_5(T_6)} \cdot u_5(T_5(T_6), x_{i5}) - \frac{p_z \cdot V_6}{R \cdot T_6} \cdot u_6(T_6, x_{i6}) = 0. \quad (102)$$

Rješavanjem jednadžbe (102) može se izračunati temperatura T_6 , a zatim i sve ostale nepoznate veličine. No, poteškoća kod rješavanja jednadžbe (102) je ta da ona u nekim slučajevima ima dva rješenja, a u nekima nema niti jedno. Promatranjem funkcije $f(T_6)$ prikazane lijevom stranom jednadžbe (102) u ovisnosti o temperaturi T_6 pri raznim rubnim uvjetima, zaključeno je da graf te funkcije može imati jedan od tri oblika prikazana na slici 2.23.

Na početku proračuna pretpostavljena je vrijednost tlaka razdvojenih masa p_z . Ako je pretpostavljeni tlak p_z veći od stvarnog tlaka p_z tada krivulja funkcije prikazana jednadžbom $y = f(T_6)$ ima oblik prikazan crvenom linijom, a rješenje jednadžbe $f(T_6) = 0$ ne postoji. Ako je pak pretpostavljeni tlak p_z manji od stvarnog tlaka p_z tada krivulja funkcije ima oblik prikazan zelenom linijom i postoje dva rješenja za zadani problem $f(T_6) = 0$. Plava linija, na slici 2.23. prikazuje treći slučaj, kada je pretpostavljeni p_z upravo jednak stvarnom p_z , a funkcionalna krivulja tangira nultu liniju. Tada postoji upravo jedno rješenje jednadžbe $f(T_6) = 0$. S obzirom da se ovaj problem rješava numeričkim metodama, cilj postupka je smanjiti interval između $T_{6,d}$ i $T_{6,g}$ na vrlo malu veličinu, koja neće značajno utjecati na konačni rezultat. Prema tome rješavanjem jednadžbe (102) mogu se dobiti dva rješenja, ili pak niti jedno.



Slika 2.23. Krivulje funkcije jednakosti unutarnjih energija u ovisnosti o T_6 , za tri slučaja pretpostavljenog tlaka razdvojenih masa p_z .

U slučaju da se dobiju dva rješenja, odabirom rješenja $T_{6,d}$ temperatura T_5 , koja će se izračunati nakon toga, biti veća od temperature T_6 . Ako se pak odabere temperatura $T_{6,g}$, tada će temperatura T_5 biti niža od temperature T_6 . Prema tome, odabrano rješenje ovisiti će o rubnim uvjetima u trenutku zatvaranja usisnih ventila. Ako je srednja temperatura cilindra veća od srednje temperature stijenki cilindra, tada je logično da sredina cilindra bude toplija tj. $T_6 > T_5$. U obrnutom slučaju, ako je srednja temperatura cilindra manja od srednje temperature stijenki cilindra, odabire se rješenje koje će dati $T_5 > T_6$.

Ako pak rješenje jednadžbe (102) ne postoji (crvena krivulja na slici 2.23.), da bi se proračun mogao nastaviti potrebno je odabrati neku temperaturu T_6 . S obzirom da kod točnog rješenja krivulja funkcije tangira nultu liniju točno u rješenju (plava linija na slici 2.23.), a za tu točku vrijedi da je nagib krivulje jednak nuli, T_6 se može izračunati kao rješenje jednadžbe:

$$\frac{df(T_6)}{dT_6} = 0 \quad (103)$$

S obzirom na prikazani oblik funkcije $f(T_6)$ (slika 2.23.) derivacija funkcije ima kontinuirano opadajući karakter i samo jedno rješenje jednadžbe (103).

Kako god se izračunala vrijednost temperature T_6 , nakon toga jednadžbom (101) izračunati će se temperatura T_5 , a mase u zoni 5 i 6 izračunavaju se primjenom jednadžbe stanja plina (91) na te zone.

Uz poznato stanje plinova u svim zonama primjenom proračuna miješanja pri konstantnom volumenu mogu se izračunati temperatura i tlak nakon miješanja (T_{mj} , p_{mj}). Ta temperatura i taj tlak moraju odgovarati srednjem tlaku i temperaturi u cilindru (T_c , p_c), a to će biti slučaj samo ako je dobro prepostavljen tlak razdvojenih masa p_z na početku proračuna. Ako izračunati tlak mješavine odstupa od srednjeg tlaka u cilindru za više od najveće dozvoljene vrijednosti, tada se proračun ponavlja s novom prepostavkom tlaka razdvojenih masa p_z koja se izračuna pomoću:

$$p_{z,novi} = p_{z,stari} - (p_{mj} - p_c). \quad (104)$$

Ponavljanjem proračuna kroz nekoliko ciklusa dolazi se do rješenja kod kojeg je prepostavljeni tlak gotovo jednak onom izračunatom.

3. VERIFIKACIJA I VALIDACIJA PRORAČUNSKIH MODELA

Verifikacija i validacija proračunskih modela, tj. ispitivanje njihovih mogućnosti, ograničenja, te načina korištenja sa svrhom postizanja željenih rezultata, provedena je kroz niz različitih faza s nekoliko modela motora i mehanizama izgaranja. Na početku je napravljena tzv. verifikacija četverozonskog modela, zatim je taj isti četverozonski model uspoređen s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja, potom je promijenjen mehanizam izgaranja, a promijenjen je i motor s čijim se eksperimentalnim rezultatima vršila usporedba. Analizirani su rezultati šestzonskog modela, pri čemu je prvo provjeren utjecaj debljine rubnih zona δ_{RZ} , vremenske konstante izmjene topline Δt i temperature usisa na rezultate, a na kraju su s odabranim faktorima napravljeni proračuni za cijeli niz radnih točaka i uspoređeni s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja.

3.1. Verifikacija četverozonskog modela

Pod verifikacijom četverozonskog modela smatra se provjera matematičke točnosti računanja modela prikazanog pod točkom 2.4.3. Na taj način ispituje se da li su pretpostavke modela na dobar način pretvorene u matematičke izraze, a zatim i u programski kod. Kod četverozonskog modela osnovna pretpostavka je da nema izmjene mase između zona, te da se granice između zona mogu proizvoljno mijenjati kako bi se zadovoljio uvjet jednakog tlaka u svim zonama. Interakcija između zona odvija se putem izmjene topline između zona, te putem rada koji se javlja uslijed promjene volumena. Ako bi se pretpostavilo da je izmjena topline između zona jednaka nuli, te da je izmjena topline između stijenki i rubnih zona isto tako jednaka nuli, tada bi sve zone bile adijabatske. U tom slučaju, s obzirom da je stanje na početku visokotlačnog procesa u svim zonama jednako, nema razloga da bi se ta jednakost poremetila, tj. sve zone trebale bi za cijelo vrijeme trajanja proračuna imati jednake temperature i masene udjele pojedinih kemijskih spojeva. To znači da će se u svim zonama odvijati isti kemijski i termodinamički procesi, što u konačnici znači da se model ponaša kao jednozonski. Prema tome rezultati ovakvog proračuna (bez izmjena topline) trebali bi biti jednakim rezultatima jednozonskog proračuna, a provjerom te jednakosti može se napraviti spomenuta verifikacija modela.

S obzirom da se radi o provjeri matematičke točnosti nije nužno da model motora bude neki stvarni motor, niti je potrebno poznavati rezultate eksperimentalnih ispitivanja. Stoga su ovi proračuni napravljeni na proizvoljnem modelu motora čije su osnovne karakteristike prikazane u

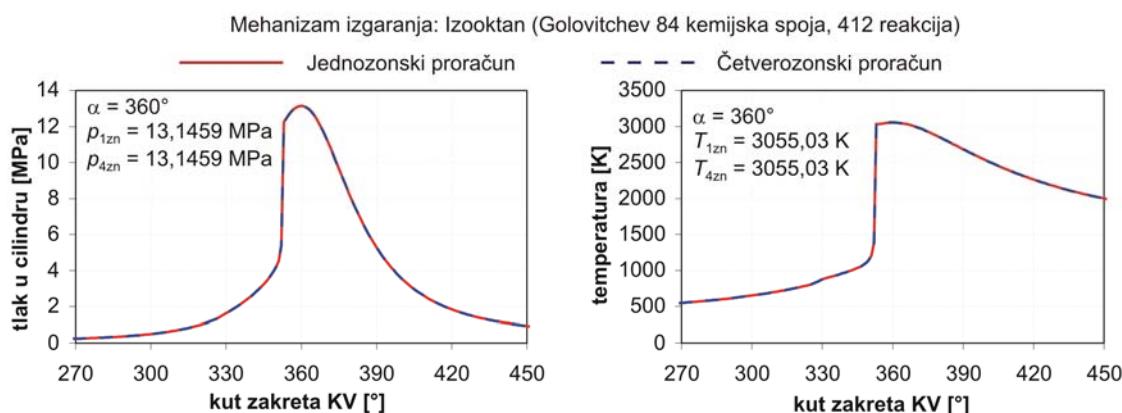
tablici 3.1. Kao mehanizam izgaranja korišten je mehanizam izooktana od Golovitcheva [98, 99] s 84 kemijska spoja i 412 kemijskih reakcija.

Tablica 3.1. Značajke proizvoljnog modela motora i radne točke korištenog pri verifikaciji četverozonskog modela.

Geometrijski parametri		Podaci o radnoj točki	
Promjer cilidnra	84 mm	Brzina vrtnje n	4000 min ⁻¹
Hod klipa	90 mm	Gorivo	Izooktan
Duljina klipnjače	174,5 mm	Ogrjevna vrijednost H_d	44800 kJ/kg
Stupanj kompresije	15	Steh. količina zraka Z_0	15,09 kg/kg

Rezultati promjene tlaka i temperature izračunati jednozonskim i četverozonskim proračunom prikazani su na slici 3.1. Može se vidjeti da se krivulje međusobno preklapaju duž cijelog proračuna, no da bi se još bolje pokazalo da su ovi rezultati zaista jednaki, na slici su prikazane vrijednosti tlaka i temperature izračunate s oba proračuna za kut zakreta $\alpha = 360^\circ$, koje su potpuno jednake. Isto tako analiza rezultata masenih udjela pojedinih kemijskih spojeva pokazala je da su maseni udjeli istog kemijskog spoja u određenom trenutku jednaki u svim zonama, te da odgovaraju masenom udjelu tog kemijskog spoja u tom trenutku, izračunatom jednozonskim proračunom.

Ovime je pokazano da je prijelaz s jednozonskog proračuna na višezonski napravljen korektno, tj. da izvod temeljnih jednadžbi višezonskog proračuna (45) - (48) iz jednadžbi jednozonskog proračuna (29) i (30) u potpunosti zadovoljava postavljene pretpostavke. Osim toga ovime je pokazano da je postupak rješavanja jednadžbi (45) - (48) opisan u poglavlju 2.5. isto tako dobar, te je točno pretvoren u proračunski kod.



Slika 3.1. Tok tlaka i temperature izračunat jednozonskim i četverozonskim proračunom u kojem je izostavljena izmjena topline između zona i izmjena topline između stijenki i rubnih zona.

3.2. Validacija četverozonskog modela

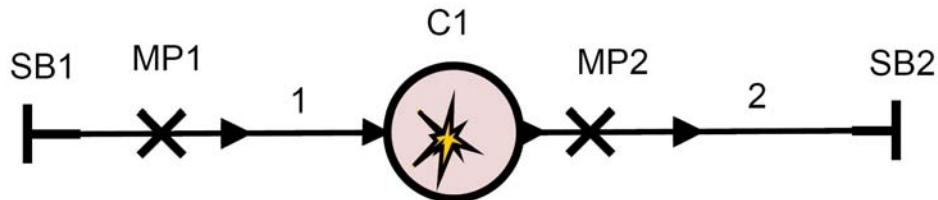
Kako bi se mogao ocijeniti napredak u razvoju simulacijskog proračuna HCCI motora primjenom prikazanog četverozonskog modela potrebno je s jedne strane rezultate četverozonskog proračuna usporediti s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja, a s druge strane usporediti s rezultatima jednozonskog proračuna. S obzirom da zbog izrazito visokih troškova opreme za eksperimentalna ispitivanja motora nismo bili u mogućnosti provesti vlastita ispitivanja, morali smo se poslužiti rezultatima ispitivanja objavljenim u literaturi. U prvoj fazi upotrijebljeni su rezultati objavljeni u [70], a koji su dobiveni ispitivanjem motora Cummins C, originalno Dieselovog, a prerađenog na rad s HCCI izgaranjem. Opći geometrijski parametri ispitivanog motora prikazani su u tablici 3.2. lijevo, dok su istoj tablici desno prikazani podaci o radnoj točki u kojoj je vršeno ispitivanje. U ispitivanoj radnoj točki motor je izrazito nabijen, što se očituje tlakom usisa od 2,41 bar, a kao što je i karakteristično za HCCI motore faktor pretička zraka je veći od 1 ($\lambda = 2,89$), što ukazuje da se radi o djelomičnom opterećenju. U ovom slučaju motor radi bez zaostalih produkata izgaranja, tj. s vrlo malim iznosom faktora $\gamma = 0,02^1$. Iako je motor izvorno Dieselov, kao gorivo je korišten izooktan.

Tablica 3.2. Značajke eksperimentalnog Cummins C motora, prerađenog na rad u HCCI modu, te promatrane radne točke [70].

Geometrijski parametri		Podaci o radnoj točki	
Promjer cilindra	114 mm	Brzina vrtnje n	1010 min ⁻¹
Hod klipa	135 mm	Temperatura usisa T_{us}	381 K
Duljina klipnjače	216 mm	Tlak na usisu p_{us}	2,41 bar
Stupanj kompresije	10,5	Faktor pretička zraka λ	2,89 kg/kg
Usis otvara (UVO)	10°KV prije GMT	Fak. zaostalih plinova γ	0,02 kg/kg
Usis zatvara (UVZ)	34°KV nakon DMT	Gorivo	Izooktan
Ispuh otvara (IVO)	45°KV prije DMT	Ogrjevna vrijednost H_d	44800 kJ/kg
Ispuh zatvara (IVZ)	10°KV nakon GMT	Steh. količina zraka Z_0	15,09 kg/kg
Oblik prostora izg.	udubina u klipu		

U skladu s prikazanim parametrima u programu AVL Boost napravljen je model ovog motora, no s obzirom na nepoznavanje geometrije usisnog i ispušnog sustava motora napravljen je model samo sa cilindrom (C1), kratkim usisnim (1) i ispušnim (2) cijevima i rubnim uvjetima (SB1 i SB2) koji postavljeni su odmah na krajevima tih cijevi (Slika 3.2.). S obzirom da se neće razmatrati promjena tlaka u cilindru za vrijeme izmjene radnog

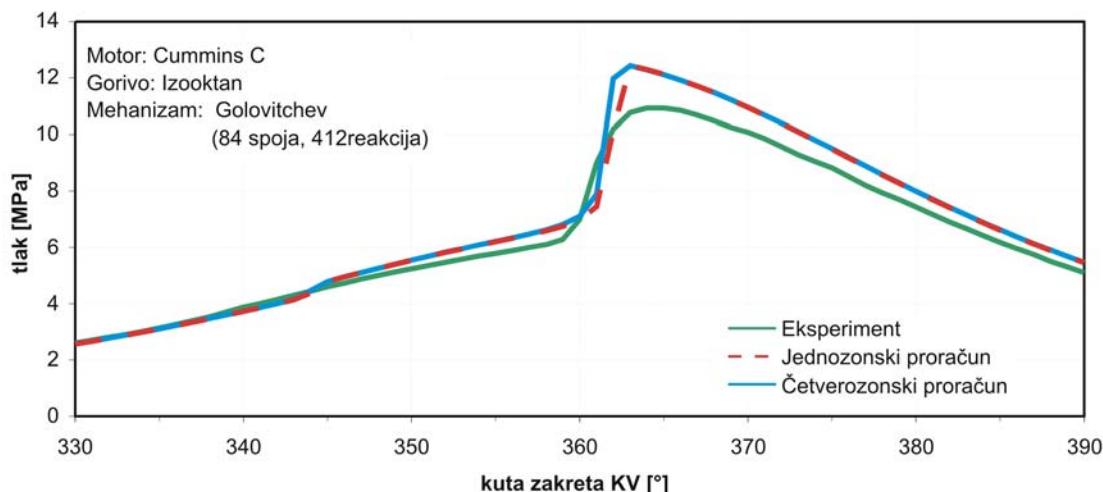
¹ Faktor zaostalih produkata izgaranja γ predstavlja omjer mase zaostalih produkata izgaranja prethodnog ciklusa i svježeg punjenja cilindra.



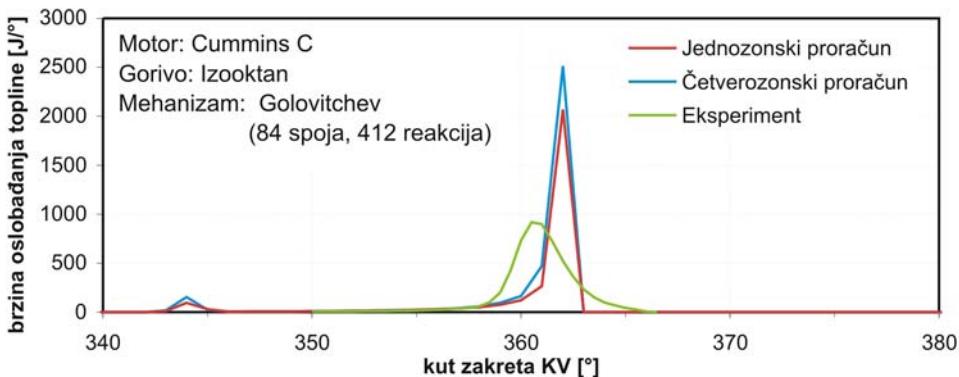
Slika 3.2. Skica modela motora Cummins C u programu AVL Boost.

medija, nepoznavanje usisnog i ispušnog sustava razmatranog motora neće bitno utjecati na promatrane rezultate. Prilagodbom rubnih uvjeta (SB1 i SB2), koji se sastoje od tlaka, temperature i sastava plina može se postići stanje na početku visokotlačnog procesa koje odgovara rezultatima eksperimentalnog ispitivanja. Eksperimentalni rezultati ne sadrže podatke o temperaturi u cilindru, pa je temperatura u rubnom uvjetu odabrana tako da se postigne povoljan trenutak početka izgaranja. Kod HCCI motora početak izgaranja izrazito je ovisan o temperaturi u cilindru, koja ovisi o temperaturi u usisnom rubnom uvjetu (SB1). Kako se početak izgaranja dobro može vidjeti iz rezultata brzine oslobođanja topline, temperaturni rubni uvjet odabran je tako da se postigne dobro fazno podudaranje eksperimentalne i izračunate krivulje brzine oslobođanja topline. Pri ispitivanju je kao gorivo korišten izooktan, pa je stoga za mehanizam reakcija odabran ranije spomenuti mehanizam oksidacije izooktana od Golovitcheva (84 kemijska spoja i 412 reakcija).

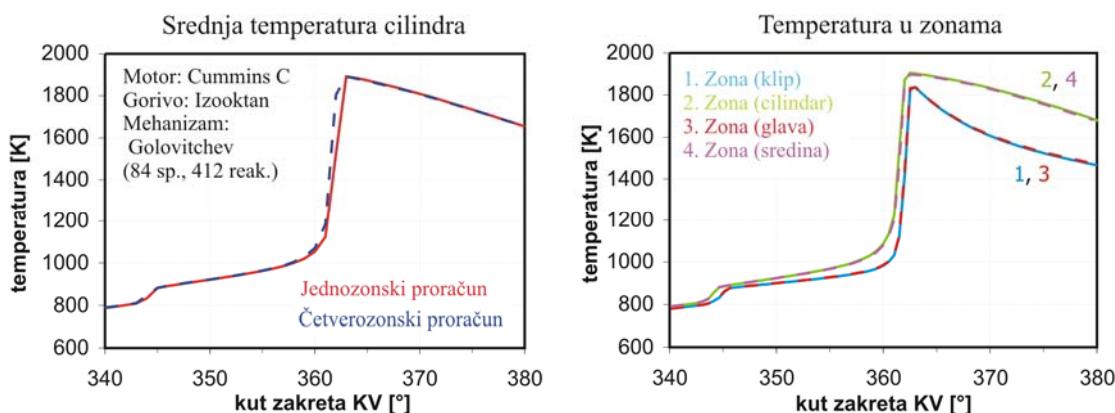
Usporedni rezultati promjene tlaka dobiveni eksperimentalnim ispitivanjem, jednozonskim i četverozonskim proračunom prikazani su na slici 3.3. Rezultati pokazuju da postoji vrlo mala razlika između tlaka izračunatog jednozonskim i četverozonskim proračunom, te da je u skladu s time odstupanje od eksperimentalnih rezultata još uvijek dosta veliko. Rezultati



Slika 3.3. Usporedni rezultati promjene tlaka HCCI motora dobiveni eksperimentalnim ispitivanjem, jednozonskim i četverozonskim proračunom.



Slika 3.4. Usporedni rezultati promjene brzine oslobađanja HCCI motora dobiveni eksperimentalnim ispitivanjem, jednozonskim i četverozonskim proračunom.



Slika 3.5. Rezultati izračunatih promjene temperature; lijevo: srednje za jednozonski i četverozonski model; desno: temperature po zonama četverozonskog proračuna.

oba proračuna pokazuju mali porast tlaka oko 345° KV koji se kod eksperimentalnih ispitivanja ne može zamijetiti. U usporedbi s jednozonskim, rezultati četverozonskog proračuna pokazuju malo zaobljeniji prijelaz prema naglom porastu tlaka i isto tako malo zaobljeniji prijelaz na kraju izgaranja. Da bi se još bolje razumjeli ovi rezultati na, slici 3.4. prikazane su krivulje promjene brzine oslobađanja topline za sva tri slučaja kao na slici 3.3., a na slici 3.5. prikazane su izračunate promjene temperature, srednje i po zonama.

Prije daljnje analize potrebno je napomenuti da je raspodjela mase po zonama kod četverozonskog proračuna prikazana u tablici 3.3. Kao što se može zamijetiti većina mase smještena je u središnju zonu, što odgovara

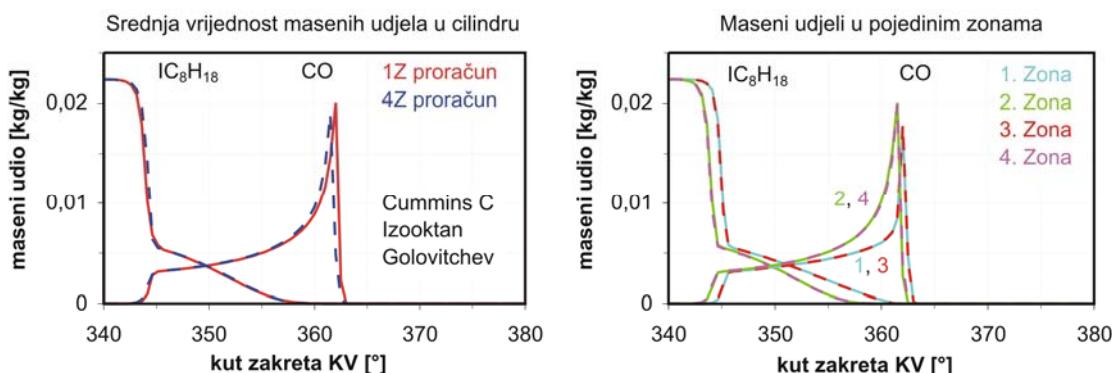
Tablica 3.3. Raspodjela mase po zonama kod četverozonskog proračuna.

Broj zone	1 (uz klip)	2 (uz cilindar)	3 (uz glavu)	4 (središnja)
Maseni udio zone	5,3%	8,1%	3,3 %	83,3%

trenutku u kojem je raspodjela provedena, ali s obzirom da nema izmjene mase ona takva ostaje za vrijeme cijelog proračuna. Iz tog razloga srednjom vrijednosti temperature dominira vrijednost temperature središnje zone, pa model daje rezultate koji su vrlo bliski rezultatima jednozonskog proračuna. Kao što se može vidjeti na slici 3.3., 3.4. a i 3.5. naglji porast tlaka i srednje temperature, a što se dešava uslijed oslobađanja topline, događa se malo ranije kod četverozonskog proračuna. Srednja temperatura prije izgaranja gotovo je jednaka kod jednozonskog i kod četverozonskog proračuna. S obzirom da se kod četverozonskog proračuna ostvaruje određena razlika u temperaturama zona (slika 3.5. desno), a da je srednja temperatura prije izgaranja gotovo ista kao kod jednozonskog proračuna, i bez obzira na činjenicu da je masa središnje zone 83,3% od ukupne mase, kao posljedica te razlike u temperaturama, temperatura središnje zone prije izgaranja nešto je veća od srednje temperature dobivene jednozonskim proračunom. Upravo zbog toga središnja zona reagira nešto ranije pa izgaranje kod četverozonskog proračuna, uz iste rubne uvjete, počinje malo ranije. Ono što se još može vidjeti na slici 3.5. je da temperatura zone uz stijenku cilindra isto tako prati temperaturu središnje zone, za razliku od rubnih zona uz klip i glavu, a to se javlja kao posljedica relativno velike mase u toj zoni u odnosu na površinu stijenke s kojom je ta zona u dodiru, kada se klip nalazi u području oko GMT. Naime podjela mase u zonama napravljena je kada je klip bio u području oko DMT, a tada je površina stijenke cilindra dosta velika. Povećana izmjena topline sa stijenkama odvija se oko GMT, kada temperatura plinova u cilindru uslijed kompresije poprilično naraste, a u tim je trenucima kod rubnih zona uz klip i glavu omjer masa zona i površina stijenki ostao isti, dok je kod zone uz stijenku cilindra taj omjer poprilično promijenjen u korist mase plinova.

Na slici 3.3. može se zamijetiti da je porast tlaka kod četverozonskog proračuna nešto strmiji od jednozonskog, a na slici 3.4. da je brzina dovođenja topline u jednom trenu veća. S druge strane ideja podjele mase u cilindru na zone upravo je smanjenje naglog porasta tlaka i velike brzine oslobađanja topline koja se javlja kod jednozonskog proračuna, pa se postavlja pitanje zašto je to tako. Već je primijećeno da je masa u središnjoj zoni velika i da je zbog toga utjecaj razdiobe mase uvelike umanjen, no svejedno je pitanje zašto brzina dovođenja topline i porast tlaka nisu manji. Ako promotrimo malo rezultate jednozonskog proračuna možemo zamijetiti da se gotovo cijelo izgaranje odvija nakon GMT. Poznato je da će u takvom slučaju pomakom početka izgaranja prema naprijed brzina porasta tlaka biti veća zajedno s većom brzinom oslobađanja topline. Kako je kod četverozonskog proračuna početak izgaranja malo pomaknut unaprijed, očito je utjecaj povećanja brzine porasta tlaka uslijed pomaka točke paljenja veći od utjecaja opisanog dijeljenja mase cilindra na četiri zone.

No, iako rezultati ovog četverozonskog modela ne predstavljaju željeni napredak u smislu poboljšanja kvalitete rezultata simulacijskih proračuna, ovi rezultati vrlo su korisni s aspekta prikaza mogućnosti koje ovakav proračun nudi, te s aspekta definiranja značajki novog proračunskog modela, a s kojima se potom mogu očekivati i pozitivni pomaci u rezultatima. Pod mogućnostima ovog višezonskog proračuna misli se na mogućnost izračunavanja različitih temperatura i različitih sastava mješavine plinova (slika 3.6.) u pojedinim zonama. Na slici 3.6 lijevo prikazano je na koji način kod opisanog mehanizma dolazi do izgaranja. Iako se upotrijebljeni mehanizam sastoji od 84 kemijska spoja, na slici se promatra promjena samo dva, izooktana (IC_8H_{18}) i ugljikovog monoksida (CO). Oko 345°KV dolazi do smanjenja mase izooktana, i pritom do blagog porasta mase ugljikovog monoksida. To su početne reakcije u kojima se iz izooktana većinom stvaraju razni međuspojevi (HC). Stoga je u to vrijeme pad udjela izooktana izraženiji, kao i porast udjela HC, dok je porast CO mnogo manji. Na krivulji brzine dovođenja topline (slika 3.4.) u tom trenu vidi se mali brežuljak koji se na krivulji tlaka manifestira kao blago povećani porast. Nakon toga brzina dovođenja topline ponovno pada gotovo na nulu, ali se promjene u sastavu i dalje nastavljaju, pri čemu udio izooktana blago pada, a udjeli CO i HC rastu. Nešto prije 360°KV udio izooktana pada na nulu, a tada negdje i udio HC dostiže svoj maksimum. Nakon toga dolazi do pada udjela HC i istovremenog naglijeg rasta udjela CO, a ubrzo zatim do naglog pada udjela i HC i CO. Nagli pad udjela i HC i CO karakteriziran je i velikom količinom oslobođene topline koja se manifestira naglim porastom tlaka.



Slika 3.6. Promjena udjela izooktana (IC_8H_{18}), ugljikovog monoksida (CO) i ostalih ugljikovodika (HC) izračunata jednozonskim i četverozonskim proračunom. Lijevo: srednje vrijednosti za cijeli cilindar; Desno: samo IC_8H_{18} i CO po zonama.

Na slikama 3.5. i 3.6. desno prikazane su temperature i neki maseni udjeli po zonama, gdje se vidi da proračunski model u zonama s različitim temperaturama izračunava i različite masene udjele. Tako se npr. vidi da u zonama s višom temperaturom za vrijeme kompresije (2 i 4), kemijske reakcije započinju ranije od onih zona s nižom temperaturom (1 i 3). Ova

mogućnost pokazuje potencijal višezonskog proračuna uz odgovarajuće preinake. Na osnovi ovih rezultata i analiza, definirane su značajke novog višezonskog modela prikazane u točki 2.6.1. na osnovi kojih je nastao novi šestzonski proračun. No, prije analize rezultata šestzonskog proračuna napravljena je promjena mehanizma izgaranja.

3.3. Novi mehanizam izgaranja izooktana

Već je spomenuto ranije da se na krivulji brzine oslobođanja topline, razmatranog modela, može vidjeti mali brežuljak nekih 15°KV prije samog izgaranja. Taj mali brežuljak može se protumačiti kao neka vrst predizgaranja, koje se u krivulji toka tlaka manifestira malim skokom, no ako se pogledaju eksperimentalni rezultati vidi se da tog skoka u tlaku nema. Ovo dovođenje topline javlja se kao posljedica naglijeg pada koncentracije izooktana i istovremenog porasta koncentracije ostalih ugljikovodika (HC) i ugljikovog monoksida (CO). To znači da je prikazano predizgaranje posljedica karakteristika upotrijebljenog reakcijskog mehanizma (Golovitchev). Osim toga upotrijebljeni reakcijski mehanizam pokazivao je dosta nestabilnosti u numeričkom rješavanju jednadžbi. Pri određenim rubnim uvjetima mehanizam je dovodio do naglih promjena masenih udjela, a s time i unutarnje energije, zbog kojih je rutina kojom se rješava sustav postavljenih diferencijalnih jednadžbi neprestano smanjivala proračunski korak sve dok zbog nemogućnosti dalnjeg prikaza manje vrijednosti vremena nije došlo do numeričke pogreške i pucanja proračuna.

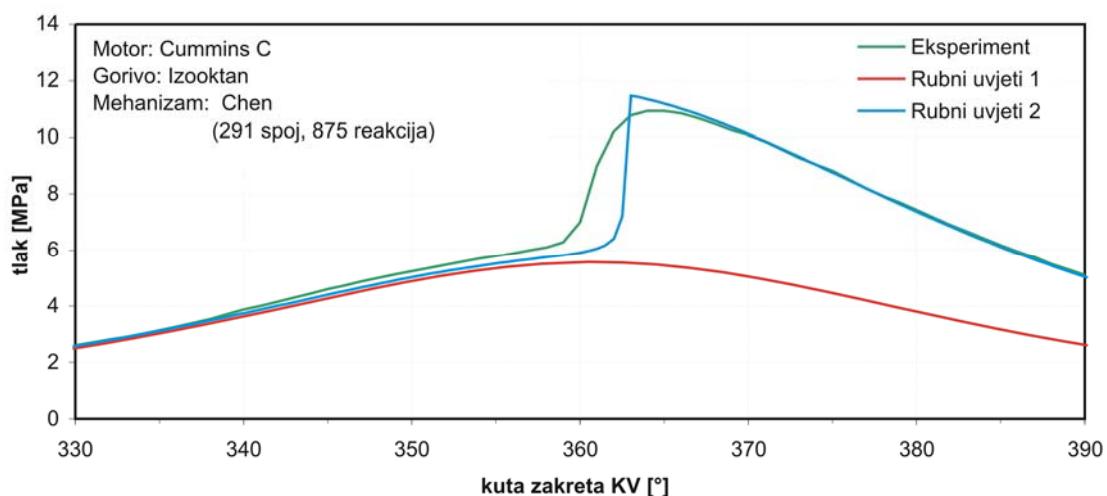
Zbog toga je relativno mali reakcijski mehanizam zamijenjen nešto opširnijim mehanizmom od Chena koji ima 291 kemijski spoj i 875 reakcija [40]. Mehanizam je nastao na temelju detaljnog mehanizma izgaranja izooktana od Currana [39], koji se sastoji od 857 kemijskih spojeva i 3606 reakcija, izbacivanjem određenog broja kemijskih spojeva i reakcija za koje je analizom reakcija zaključeno da pri uobičajenim uvjetima HCCI izgaranja ne doprinose značajno rezultatima, tj. čiji je utjecaj na rezultate zanemariv. U [40] je pokazano da se ovim mehanizmom može dobro predviđati brzina dovođenja topline, a samim time i tlak i temperatura, ali i da se njim može dobro predviđati emisija ugljikovog monoksida (CO) i neizgorjelih ugljikovodika (HC).

Novi mehanizam prvo je primijenjen na modelu motora Cummins C kojim je validiran četverozonski proračun, a čiji podaci su navedeni u tablici 3.2. U prvoj fazi proračun je proveden s istim rubnim uvjetima s kojim su napravljeni i prethodni proračuni (Golovitchev mehanizam), a u rezultatima su ti rubni uvjeti označeni brojkom 1. Kao što će se moći vidjeti, s tim rubnim uvjetima ne dolazi do izgaranja, pa su napravljeni proračuni s malo izmijenjenim rubnim uvjetima s kojima se osiguralo izgaranje. Pri tome je najveća promjena napravljena na temperaturi usisa, koja je ionako i kod prethodnih rubnih uvjeta odabrana tako da se postigne pravi trenutak

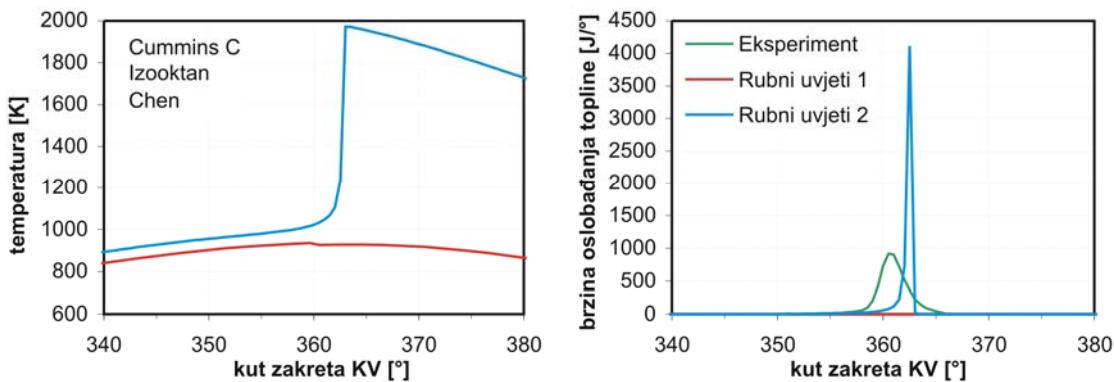
početka izgaranja. S obzirom na promjenu temperature usisnog rubnog uvjeta vrlo malo je korigiran i tlak u istom rubnom uvjetu, kako bi se ponovno tlak u cilindru na početku kompresije izjednačio s eksperimentalnim. Promijenjeni rubni uvjeti označeni su brojkom 2. Potrebno je napomenuti da su, s obzirom da je cilj ovih proračuna usporedba i ocjena mehanizama izgaranja, a ne ocjena višezonskog proračuna, u ovom dijelu provedeni samo jednozonski proračuni.

Rezultati promjene tlaka, temperature, brzine oslobađanja topline, te promjene masenih udjela izooktana, ugljikovog monoksida (CO), te ostalih ugljikovodika (HC) prikazani su na slikama 3.7., 3.8. i 3.9. Već na slici 3.7 lako se može uočiti da uz rubne uvjete 1 ne dolazi do izgaranja, pa se promjena tlaka ponaša kao kod gonjenog motora. S druge strane uz rubne uvjete 2 izgaranje nastupa dosta naglo, što i odgovara značajkama jednozonskog proračuna, pa krivulja tlaka za vrijeme izgaranja odstupa od eksperimentalne. No, prebacivanje tlaka je manje nego što je to bio slučaj kod prethodnog mehanizma, pa je i tlak za vrijeme ekspanzije bliži eksperimentalnom.

Usporedbom krivulja temperatura dobro se može uočiti zašto je kod primjene drugog mehanizma potrebno promijeniti i rubne uvjete. Ako se temperature prikazane na slici 3.8. lijevo usporede s temperaturama prikazanim na slici 3.5. lijevo vidi se da je i u jednom i u drugom slučaju oko 340°KV temperatura oko 800 K. Kod Golovitchevog mehanizma ubrzo nakon doga dolazi do pojave pred-izgaranja kojim se temperatura podiže za cca 100 K, a time je na kraju kompresije postignuta temperatura potrebna za glavno izgaranje. S druge strane kod Chenovog mehanizma pred-izgaranja nema, tj. nema vidljive naglike promjene tlaka ili temperature prije izgaranja. Zbog toga je uz rubne uvjete 1 temperatura na kraju kompresije preniska da bi došlo do izgaranja. Povećanjem temperature



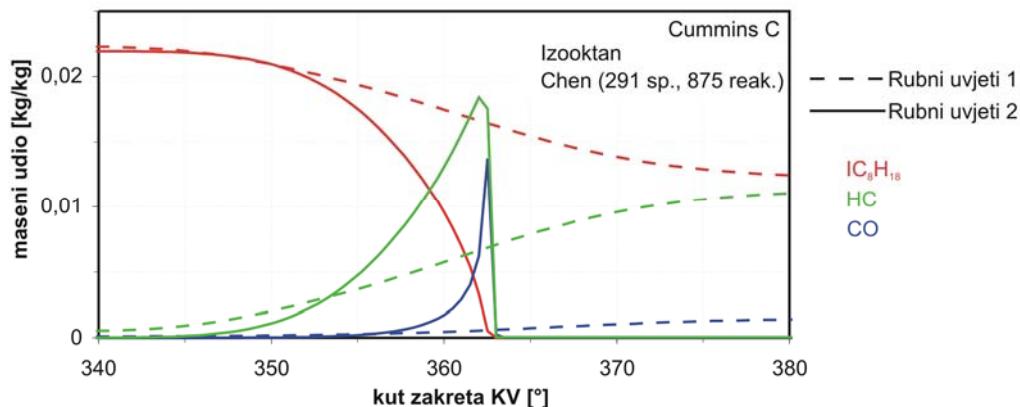
Slika 3.7. Rezultati promjene tlaka izračunati jednozonskim proračunom modela motora Cummins C i primjenom Chenovog mehanizma oksidacije izooktana.



Slika 3.8. Rezultati promjene temperature (lijevo) i brzine oslobađanja topline (desno) izračunati jednozonskim proračunom modela motora Cummins C i primjenom Chenovog mehanizma oksidacije izooktana.

rubnog uvjeta povećava se i temperatura na kraju kompresije, pa se primjenom rubnih uvjeta 2 postiže temperatura potrebna da se postigne izgaranje. Činjenica da primjenom rubnih uvjeta 1 izgaranje izostaje može se vidjeti i na slici 3.8. desno, gdje je brzina oslobađanja topline uz te rubne uvjete jednaka 0. S druge strane, promijenjenim rubnim uvjetima i novim mehanizmom postiže se intenzivnije oslobađanje topline, pri čemu je najveća vrijednost tako izračunate brzine oslobađanja topline dva puta veća od one ranije izračunate (vidi slike 3.4. i 3.8. desno). Dakle kod Chenovog mehanizma nemamo reakcije kojima se prvo dovodi mala količina topline (predizgaranje), a zatim reakcije glavnog oslobađanja topline, već se oslobađanje topline odvija u jednoj cjelini, ali intenzivnije.

Velika razlika u načinu funkciranja mehanizama može se vidjeti usporedbom krivulja promjena masenih udjela pojedinih kemijskih spojeva. Prikaz svih 291 spojeva ne bi bio jednostavan pa, kao što je to učinjeno i kod prethodnog mehanizma, su oni grupirani u tri osnovne kategorije: izooktan (IC_8H_{18}), ugljikovodici (HC) i ugljikov monoksid (CO) (Slika 3.9.). Ako se pogledaju rezultati s rubnim uvjetima 1 kod kojih nije došlo do izgaranja, vidi se da su se, bez obzira što nije došlo do izgaranja, određene promjene desile. Tako je udio izooktana malo smanjen, dok su udjeli ugljikovodika (HC) i ugljikovog monoksida (CO) malo povećani. Pri tome je udio HC značajnije povećan u odnosu na CO. Kako kod ovih reakcija nema značajnijeg oslobađanja topline, vrlo često se u literaturi one nazivaju nisko-temperaturne reakcije. Rezultati za rubne uvjete 2 pokazuju da se zamjetnije promjene masenih udjela počinju dešavati oko 345° KV gdje prvo dolazi do smanjenja udjela IC_8H_{18} i istovremenog povećanja udjela HC. Dakle u prvoj fazi gorivo se raspada na niz među-spojeva koji spadaju u kategoriju HC. No te reakcije ne dovode do oslobađanja topline. Brzina raspadanja goriva cijelo vrijeme se ubrzava što rezultira konveksnim oblikom krivulje, a isto tako ubrzava se i stvaranje HC. Oko 355° KV počinje



Slika 3.9. Promjene masenih udjela izooktana, ugljikovodika i ugljikovog monoksida izračunate jednozonskim proračunom modela motora Cummins C i primjenom Chenovog mehanizma oksidacije izooktana.

se stvarati CO uz daljnje povećanje udjela HC i pad udjela IC_8H_{18} . Sa zamijetnijim porastom udjela CO počinje se oslobađati i toplina što se vidi na slici 3.8. Najveći udio HC postiže se malo prije postizanja najvećeg udjela CO, a početak pada udjela HC povezan je s približavanjem udjela IC_8H_{18} nuli. Tu je oslobađanje topline već dosta intenzivno, a najintenzivnije je neposredno nakon toga kada istovremeno dolazi do naglog pada udjela HC i CO, te njihovog izgaranja u CO_2 i H_2O . Usپoredimo li ovo izgaranje s izgaranjem dobivenim primjenom Golovitchevog mehanizma (slika 3.6.) vidi se da su ona poprilično različita. Iako je kod oba mehanizma intenzivno oslobađanje povezano s naglim padom udjela CO i HC, kod Chenovog mehanizma nema naglog pada udjela IC_8H_{18} i povećanja udjela HC i CO u ranoj fazi izgaranja karakteriziranog s kratkotrajnim oslobađanjem topline. S obzirom da takva karakteristika nije zamijećena niti kod rezultata eksperimentalnih ispitivanja u dalnjim proračunima korišten je Chenov mehanizam oksidacije izooktana, bez obzira na činjenicu da je on veći i proračunski zahtjevniji.

3.4. Validacija šestzonskog modela

3.4.1. Novi rezultati eksperimentalnih ispitivanja i novi model

Validacija četverozonskog proračuna provedena je pomoću rezultata iz literature [70] koji su se sastojali od jedne radne točke, te vrlo šturo zadanih rubnih uvjeta. Kako bi se pri validaciji šestzonskog modela moglo obuhvatiti šire područje rada HCCI motora, u literaturi su potraženi upravo takvi rezultati. U [100] su prikazani rezultati ispitivanja motora prerađenog na rad HCCI načinom, pri čemu je količina goriva mijenjana od nule, pa sve do početka detonantnog izgaranja. U tom radu analizirani su učinci količine goriva na emisije štetnih produkata izgaranja, te na ostale kako vanjske tako i unutrašnje značajke motora.

Eksperimentalni motor dobiven je preradom Dieselovog Cummins B motora. Izvorni motor imao je šest cilindara, izravno ubrizgavanje goriva i klipove s udubinom karakteristične za DI motore. Motor je prerađen tako da radi samo s jednim cilindrom pri čemu su napravljene određene konstrukcijske preinake kako bi se zadržala njegova uravnoteženost. Izvorni klip s udubinom zamijenjen je klipom s gotovo ravnim čelom kako bi se dobila veća udaljenost klipa od glave motora, kada se klip nalazi u GMT, a samim time i ujednačena visina prostora izgaranja. Kod promijenjenog klipa volumen prostora procjepa između klipa i cilindra iznosi oko 1,4% od kompresijskog volumena.

Eksperimentalni motor opremljen je novim usisnim sustavom kojim je omogućeno postizanje potpuno homogene smjese goriva i zraka uz vrlo preciznu kontrolu sastava smjese, a isto tako ispušni sustav je promijenjen tako da se iz njega mogu uzimati uzorci za analizu ispušnih plinova.

Motor je ispitivan u trinaest radnih točaka s različitim količinama goriva, pri čemu jedna radna točka predstavlja rad gonjenog motora, tj. količina goriva je jednaka nuli. U američkoj literaturi uobičajeni način definiranja sastava smjese razlikuje se od načina definiranja smjese u Europi. Kod nas se udomaćio pojam faktora pretička zraka λ , koji predstavlja omjer stvarne količine zraka za izgaranje i stehiometrijske. Kod tako definiranog faktora λ vrijednost iznad jedan znači da u smjesi ima više zraka nego što je to potrebno (siromašna smjesa), dok vrijednost manja od jedan znači da zraka nema dovoljno (bogata smjesa). U američkoj literaturi sastav smjese obično se definira faktorom sastava smjese ϕ , koji predstavlja omjer obrnut od faktora λ . Prema tome, veza između faktora ϕ i λ je sljedeća:

$$\phi = \frac{1}{\lambda}. \quad (105)$$

S obzirom da je eksperimentalni motor ispitivan u Americi, tako je sastav smjese mijenjan od smjese s vrlo malim udjelom goriva $\phi = 0,04$ ($\lambda = 25$) kod kojega je izgaranje jedva primjetno i nije dostačno za pokrivanje mehaničkih gubitaka, pa sve do smjese s kojom pri HCCI izgaranju počinje detonantno izgaranje: $\phi=0,26$ ($\lambda = 3,8$), uz korak od $\phi = 0,02$. Tako su u prikazu sastava smjese s faktorom ϕ dobivene ekvidistantne radne točke, no u prikazu smjese s faktorom λ to nije slučaj. Upravo iz tog razloga u dalnjem prikazu rezultata zadržana je definicija sastava smjese pomoću faktora ϕ , iako on kod nas nije uobičajen.

Pri ispitivanju korišten je izootkan kao gorivo. Upravo zbog toga su rezultati tih ispitivanja pogodni za validaciju proračunskog modela primjenom prethodno analiziranog mehanizma izgaranja. Osim toga, motor je pri ispitivanju lagano nabijen, pa je tlak na usisnoj strani 1,2 bar, a osnovne

značajke opisanog eksperimentalnog motora i ispitanih radnih točaka prikazane su u tablici 3.4.

Tablica 3.4. Osnovne značajke eksperimentalnog motora [100]

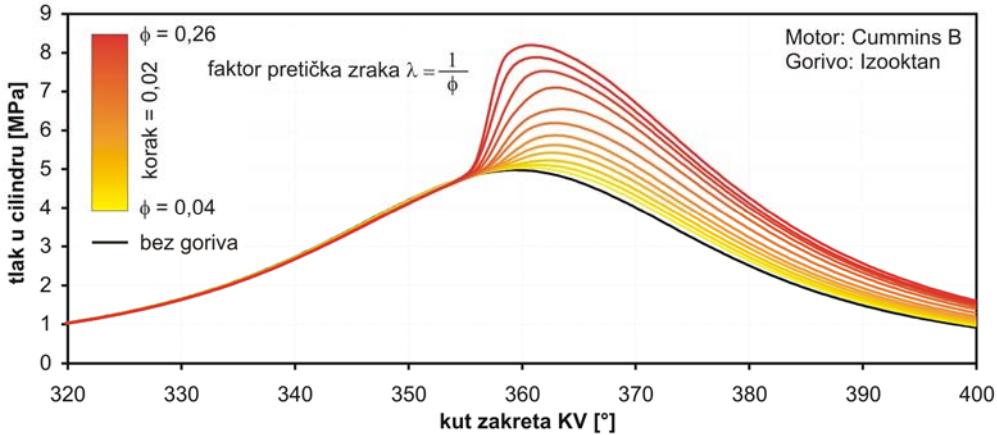
Promjer	102 mm	Usisni ventil otvara	3° pr. GMT
Hod	120 mm	Usisni ventil zatvara	25° nk. DMT
Duljina klipnjače	192 mm	Ispušni ventil otvara	60° pr.DMT
Kompresijski omjer	17,63	Ispušni ventil zatvara	8° nk.GMT
Radni volumen cilindra	0,98 dm ³	Brzina vrtnje motora	1200 min ⁻¹
Faktor sastava smjese ϕ	0,00 – 0,26	Gorivo	Izooctan

Pored toga što su ovi rezultati mnogo opsežniji, u pogledu broja radnih točaka i činjenice da su vršena ispitivanja emisija, za razliku od prethodnih rezultata kod kojih su eksperimentalne krivulje dobivene digitalizacijom dijagrama prikazanih u radu, svi rezultati ovih ispitivanja dobiveni su izravno od autora rada, pa stoga nema pogrešaka očitanja. Osim toga što su dobiveni rezultati dosta opsežni s velikom gustoćom zapisa, dobiveni su i opsežniji podaci o rubnim uvjetima pomoću kojih je potom lakše definirati proračunski model. Tako je npr. u materijal ispod površine stijenke glave, na dubini od 2,5 mm, postavljen termopar kojim je za vrijeme ispitivanja rada motora mjerena temperatura na tom mjestu. S obzirom da se s druge strane te stijenke nalazi rashladna tekućina, kojoj je poznata temperatura, a i debljina te stijenke je poznata, linearnom ekstrapolacijom izračunate su vrijednosti temperature unutrašnje površine stijenke glave, koje su vrlo korisne pri zadavanju proračunskog modela. Tako izračunate temperature stijenke, pri različitim sastavima smjese, prikazane su u tablici 3.5.

Tablica 3.5. Temperature površine stijenke glave.

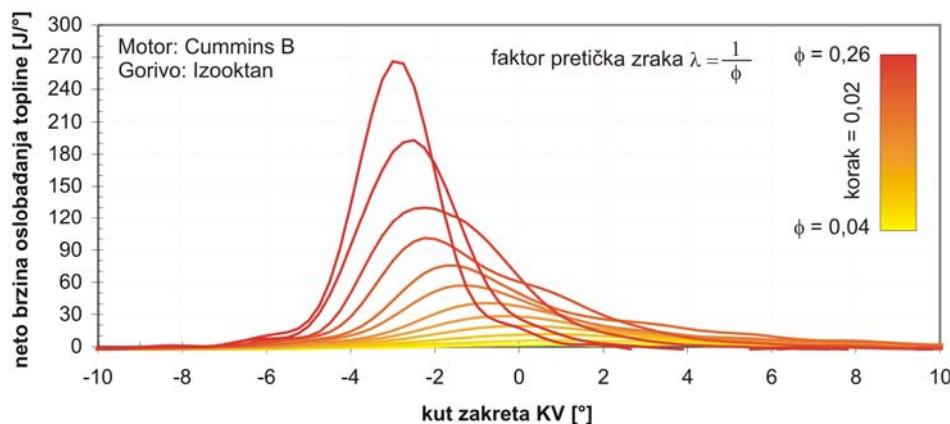
Faktor ϕ	0,08	0,10	0,12	0,14	0,16	0,18	0,20	0,22	0,24	0,26
Temperatura	122	122	123	124	126	128	130	132	134	137

Rezultati ispitivanja opisanog eksperimentalnog HCCI motora pri opisanim uvjetima prikazani su na slikama 3.10., 3.11. i 3.12. Promjena tlaka snimljena je za cijeli ciklus, ali je zbog boljeg pregleda na slici 3.10. prikazan samo dio koji je od posebnog interesa s aspekta validacije proračuna izgaranja. Debelom crnom linijom prikazana je promjena tlaka gonjenog motora, tj. motora kod kojeg uopće nije bilo goriva u smjesi. Kako se količina goriva poveća, krivulja tlaka u području oko GMT i nakon njega sve se više odmiče od krivulje gonjenog motora. Porastom količine goriva vršni tlak, a i brzina porasta tlaka, u promatranom području, kontinuirano rastu, a najveći tlak kod najvećeg opterećenja nešto je veći od 80 bar.



Slika 3.10. Tok tlaka eksperimentalnog motora izmjerен pri različitim udjelima goriva u smjesi sa zrakom.

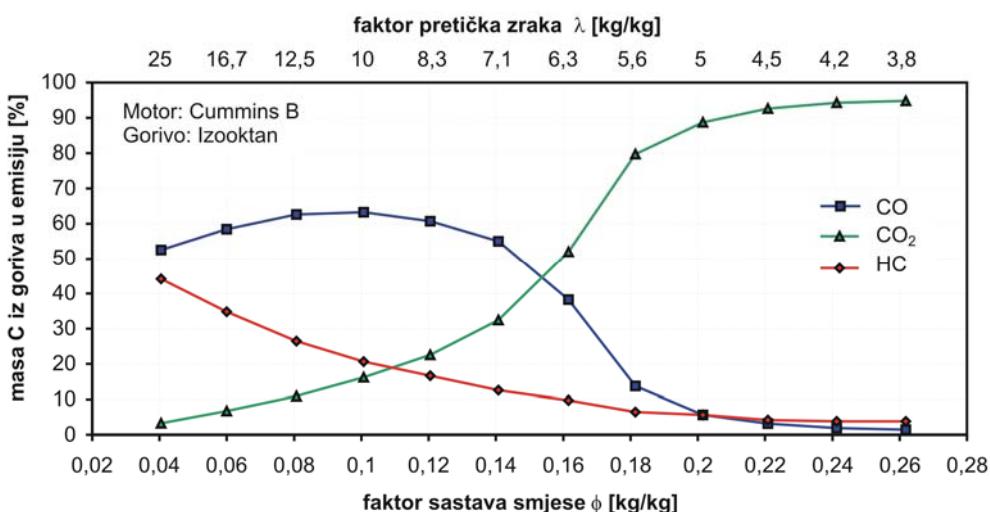
Na slici 3.11. prikazane su krivulje neto brzine oslobađanja topline. Brzina oslobađanja topline izračunava se iz krivulje promjene tlaka postupkom opisanim u [90]. Za točno izračunavanje brzine oslobađanja topline potrebno je u svakom trenutku predvidjeti koliki dio mase ulazi u zone procjepa, te koliki je toplinski tok između plinova u cilindru i stijenki prostora izgaranja. Ako se zanemare ova dva utjecaja na promjenu temperature, onda se proračunom prema [90] dobije tzv. neto brzina oslobađanja topline koja u sebi sadrži gubitke izmjene topline i gubitke prestrujavanja u procjep. Iz eksperimentalnih rezultata tlaka u [100] su izračunate upravo neto brzine oslobađanja topline. Neto brzina oslobađanja topline prije samog početka izgaranja ima negativnu vrijednost, zbog topline koja se od radnog medija odvodi kroz stijenke. Na slici 3.11. te negativne vrijednosti se zbog odabranog mjerila ne vide, ali će se vidjeti u kasnijim rezultatima usporedbe s rezultatima proračuna. Na slici 3.11. dobro se vidi kako je oslobađanje topline uz mali udio goriva izrazito malo, te kako postepeno raste s povećanjem količine goriva. Isto tako može se



Slika 3.11. Promjena neto brzine oslobađanja topline izračunata iz rezultata toka tlaka prikazanih na slici 3.10.

zamijetiti da se točka najveće brzine oslobađanja topline s povećanjem količine goriva pomiče prema naprijed, tj. prema manjim vrijednostima kuta zakreta KV.

Pored ovih rezultata, za vrijeme eksperimentalnih ispitivanja mjerene su emisije produkata izgaranja i to: ugljikovog monoksida (CO), ugljikovog dioksida (CO_2), te neizgorjelih ugljikovodika (HC). Emisije se obično mjeru u udjelima, postocima ili ppm mase, no u ovom slučaju, kako bi rezultati na neki način postali neovisno o količini goriva oni su prikazani u malo drugačijem obliku. Iz masenih udjela pojedine emisije i masenog udjela goriva prije izgaranja izračunato je koliki je postotak ugljika (C) iz goriva pretvoren u neki od oblika emisije. Prema tome, zbog toga što se ugljik iz goriva može pretvoriti u CO_2 , CO ili neki od ugljikovodika HC, zbroj ovako prikazanih emisija u svakoj radnoj točki mora biti jednak 100%. Na slici 3.12. prikazane su ovako izračunate emisije za cijelo promatrano područje rada HCCI motora. Prikazani su dijagrami promjene emisije u ovisnosti o faktoru sastava smjese ϕ , a kako bi lakše mogli dobili predodžbu o kakvim se radnim točkama radi, na gornjoj skali prikazan je sastav smjese faktorom pretička zraka λ . Kod radnih točaka s $\phi \geq 0,2$ ($\lambda \leq 5$) izgaranje je vrlo učinkovito, pa su i emisije CO i HC relativno male, a emisija CO_2 je prilično velika. U tim točkama učinkovitost izgaranja η_c^1 kreće se u rasponu od 92 – 95%. Smanjenjem količine goriva faktor ϕ se smanjuje, a emisija



Slika 3.12. Izmjerena emisija ugljikovog dioksida (CO_2), ugljikovog monoksida (CO) i neizgorjelih ugljikovodika (HC) pri različitim količinama goriva prikazana kao udio mase ugljika (C) iz goriva pretvoren u određenu emisiju.

¹ Učinkovitost izgaranja predstavlja udio energije oslobođene za vrijeme izgaranja u odnosu na energiju koju je smjesa posjedovala prije izgaranja uzimajući u obzir donju ogrijevnu vrijednost goriva i ostalih elemenata u smjesi i kreće se u rasponu od 0 – 100%.

HC kontinuirano raste, dok emisija CO u području $0,1 \leq \phi \leq 0,2$ prvo naglo raste, a potom daljnjim smanjivanjem udjela goriva opada. Emisija CO_2 se smanjenjem količine goriva u rasponu od $0,04 \leq \phi \leq 0,2$ dosta naglo snižava i pada na vrlo niske vrijednosti. To znači da će u tom području izgaranje biti slabo što će se manifestirati i lošom učinkovitosti izgaranja. Učinkovitost izgaranja za područje $0,04 \leq \phi \leq 0,2$ snižava se s 92% na samo 31%.

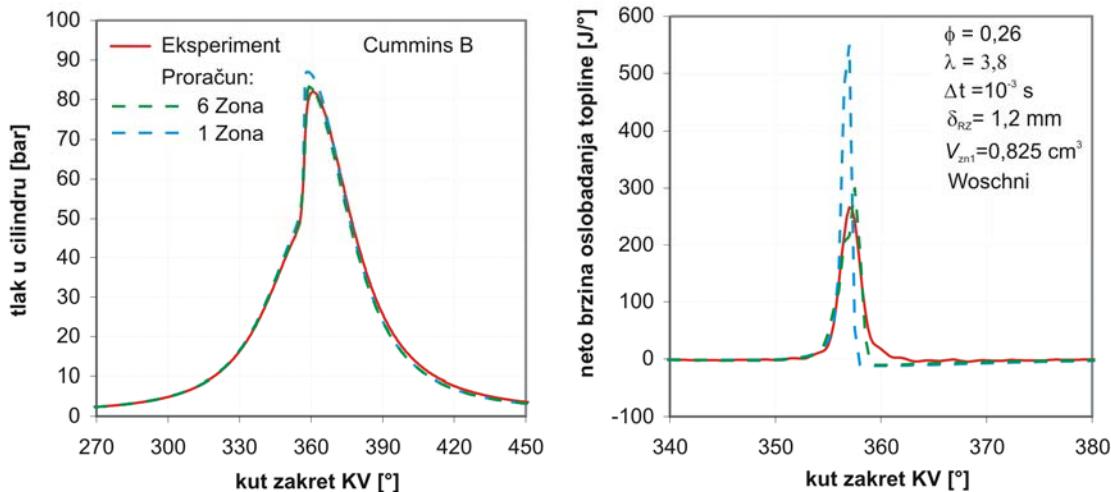
Treba napomenuti da je prazan hod motora kod radne točke s faktorom $\phi \approx 0,14$ ($\lambda \approx 7$), a sve radne točke s manjom količinom goriva imaju negativan rad, tj. motor u njima ne bi mogao samostalno raditi.

3.4.2. Proračunski model motora Cummins B

Na osnovu motora prikazanog u prethodnoj točki napravljen je njegov proračunski model. Model se, u skladu s eksperimentalnim postavom, sastoji od jednog cilindra, usisnih i ispušnih cijevi neposredno spojenih na cilindar, usisnih i ispušnih spremnika, te cijevi spojenih na taj spremnik. Na kraju tih cijevi nalaze se rubni uvjeti kojima je moguće mijenjati radne točke proračuna. S obzirom da je kod eksperimentalnog motora homogena smjesa goriva i zraka pripremljena prije usisnog spremnika, gorivo se u model dodavalo putem usisnog rubnog uvjeta. Duljine usisnih cijevi definirane su tako da izračunata dinamika tlaka u cilindru za vrijeme usisa i ispuha ogovara onoj dobivenoj ispitivanjem.

Kod modela motora, temperature stijenki klipa, cilindra i glave motora mogu se zadati odvojeno, a kao što će se vidjeti kasnije, temperatura stijenke može imati značajniji utjecaj na izračunatu emisiju. U tablici 3.5. prikazane su temperature unutrašnje površine stijenke glave motora izračunate na temelju mjerena temperature stijenke. Te vrijednosti unesene su kao temperature glave proračunskog modela motora, a isto tako i kao temperature stijenke cilindra. S druge strane poznato je da je zbog slabijeg odvođenja topline stijenka klipa nešto toplija. Zbog toga je zadana temperatura stijenke klipa nešto veća, pri čemu faktor povećanja ovisi o opterećenju. Kod radne točke s najviše goriva $\phi=0,26$ temperatura klipa je veća od temperature ostalih stijenki za 50°C , a kod gonjenog motora $\phi=0$ temperatura stijenke klipa je veća za 20°C . Razlike između temperature stijenke klipa i ostalih stijenki u ostalim radnim točkama dobivene su linearnom interpolacijom između ovih dviju krajnjih točaka.

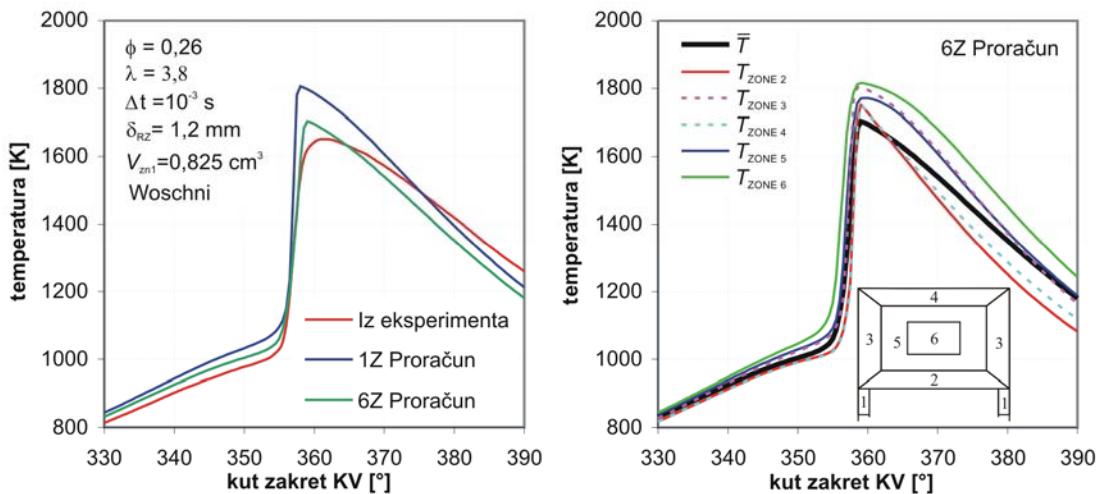
S tako pripremljenim modelom napravljeni su prvi šestzonski proračuni, pri čemu su proračunski faktori vremenske konstante izmjene topline Δt i debljine rubnih zona δ_{RZ} proizvoljno odabrani. U početnim proračunima za izmjenu topline sa stijenkama korišten je uobičajeni Woschnijev model, a volumen zone procjepa (V_{zn1}) postavljen je na vrijednost koja je jednaka 1,4% kompresijskog volumena. Neki rezultati inicijalnog proračuna radne točke s najvećim opterećenjem $\phi=0,26$ prikazani su na slikama 3.13. i 3.14.



Slika 3.13. Usporedni rezultati jednozonskog i šestzonskog proračuna tlaka (lijevo) i neto brzine oslobađanja topline (desno) HCCI motora s $\phi=0,26$, te njihova usporedba s eksperimentalnim.

Na slici 3.13. lijevo uspoređeni su tlakovi izračunati jednozonskim i šestzonskim proračunom, dok su na desnoj slici uspoređene krivulje brzine oslobađanja topline. Kao što se može vidjeti odstupanje toka tlaka od eksperimentalnog, kod šestzonskog proračuna mnogo je manje nego što je to kod jednozonskog proračuna, posebno u području gdje je tlak najveći. To je posljedica reduciranih brzina dovođenja topline koja se može vidjeti na desnoj slici, a kod koje je šestzonskim proračunom najveća izračunata vrijednost oko 300 J/° , za razliku od jednozonskog proračuna kod kojeg je to približno 550 J/° . Na krivulji brzine oslobađanja topline mogu se zamijetiti oštре promjene smjera koje su posljedica različitog početka izgaranja u različitim zonama i činjenice da je broj zona još uvijek relativno mali da se te razlike ne bi primijetile.

Na slici 3.14. lijevo prikazane su izračunate srednje vrijednosti temperature. Krivulja temperature s označom „iz eksperimenta“ izračunata je na temelju izmjerene promjene tlaka, te podataka o usisanoj masi i sastavu smjese. Može se zamijetiti da izgaranje kod šestzonskog proračuna počinje kod niže prosječne temperature u odnosu na jednozonski proračun. Zbog činjenice da različite zone imaju različite temperature, središnja zona ima višu temperaturu od srednje, što se može vidjeti na slici 3.14. desno. Zbog toga, iako je srednja temperatura niža od temperature zapaljenja goriva, temperatura u središnjoj zoni je dovoljna da izgaranje počne. Temperatura iz eksperimentalnih rezultata kod početka izgaranja još je niža od temperature šestzonskog proračuna, no u realnom motoru može se očekivati da je distribucija temperature duž cilindra još neravnomjernija. Odstupanje najveće temperature šestzonskog proračuna u odnosu na temperaturu iz eksperimenta dosta je manje od odstupanja najveće



Slika 3.14. Usporedni rezultati temperature izračunate iz jednozonskog, šestzonskog i eksperimentalnog tlaka prikazanih na slici 3.13 (lijevo) i promjene temperature u svakoj zoni šestzonskog proračuna (desno).

temperature jednozonskog proračuna. Najveće odstupanje šestzonskog proračuna od eksperimentalnih rezultata može se naći u završnoj fazi izgaranja. Kod eksperimentalnih rezultata vidi se polagan završetak izgaranja, kojeg karakterizira blago zaobljena krivulja, s relativno velikim polumjerom, brzine oslobođanja topline. Kao posljedica toga krivulje toka tlaka i temperature imaju glatke prijelaze kod svojih najvećih vrijednosti. Krivulja brzine oslobođanja topline izračunata šestzonskim proračunom dosta naglo pada na nulu, što znači da izgaranje dosta naglo završava. Zbog toga je i krivulja toka tlaka i temperature mnogo oštrijia kod svojih najvećih vrijednosti, a u početnoj fazi ekspanzije i tlak i temperatura strmije padaju. Taj efekt vidi se i kod jednozonskog proračuna, gdje je još mnogo izraženiji.

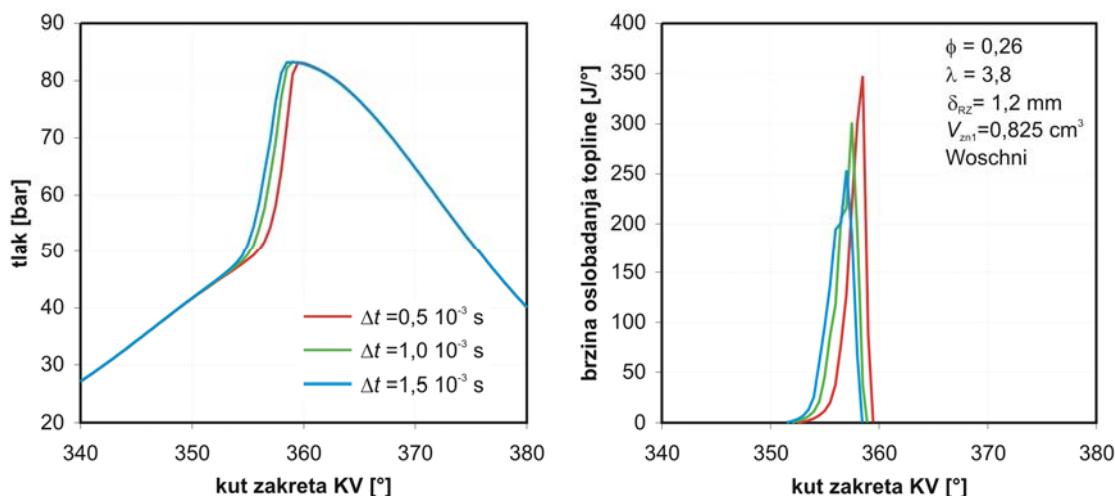
Na slici 3.14. desno prikazana je raspodjela temperature po zonama šestzonskog proračuna, a usporedno je prikazana i srednja izračunata temperatura. Temperatura zone 1 nije prikazana jer se ona ne mijenja i jednaka je temperaturi klipa. Odmah se može zamijetiti da za razliku od četverozonskog proračuna niti jedna zona ne dominira rezultatima. Srednja temperatura u različitim trenucima bliža je različitim zonama. Tako je za vrijeme kompresije srednja temperatura bliža temperaturama stijenke klipa i glave, dok se pri ekspanziji približava temperaturi središnje zone. Detaljnije analize razlika u temperaturama zona prikazat će se kasnije, a za sada je važno napomenuti da se razlike u temperaturama postižu, da se zbog njihovog postojanja dovođenje topline produžuje, te da temperatura niti jedne zone ne definira srednju temperaturu što znači da niti jedna zona ne dominira rezultatima.

3.4.3. Utjecaj vremenske konstante izmjene topline

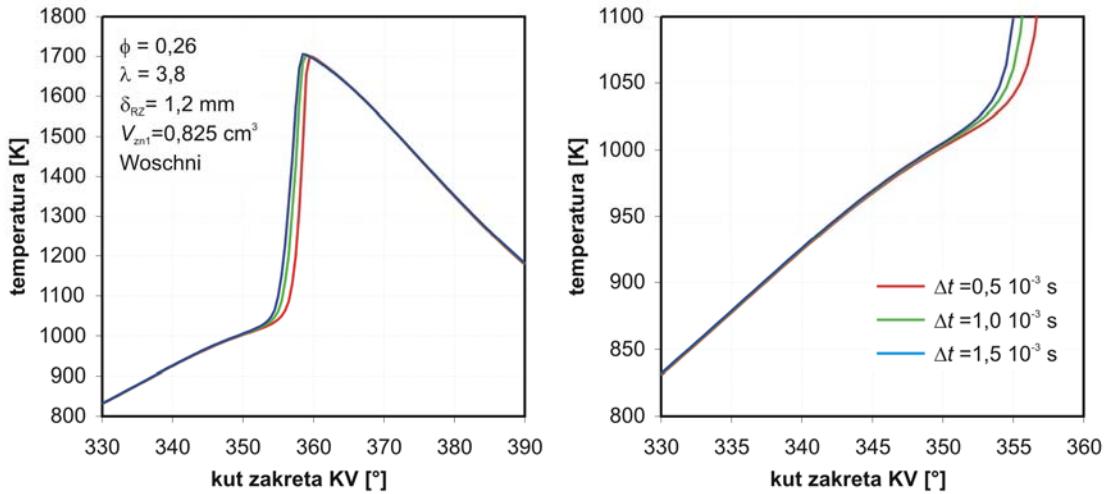
Jedan od kalibracijskih faktora proračunskog modela sa šest zona je vremenska konstanta izmjene topline između zona Δt . Ako je taj faktor veći, tada će se izračunavati manji toplinski tokovi između zona, dok će u slučaju manjeg faktora ti toplinski tokovi biti veći. Da bi se vidjelo kako ti faktori utječu na ostale rezultate šestzonskog proračuna napravljen je analiza njihovog utjecaja. Zbog toga su napravljeni proračuni s različitim vrijednostima tog faktora i međusobno su uspoređeni dobiveni rezultati. Prema tome su za radnu točku s najvećom količinom goriva $\phi=0,26$ napravljeni proračuni s još dvije različite vremenske konstante izmjene topline $\Delta t = 0,5 \cdot 10^{-3}$ s i $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-3}$ s. Neki rezultati ovih proračuna prikazani su na slikama 3.15. – 3.18.

Na slici 3.15. prikazana je promjena tlaka i promjena neto brzine oslobađanja topline, pri promjeni vremenske konstante. Smanjenjem vremenske konstante, izmjena topline između zona postaje intenzivnija pa su stoga zone međusobno ujednačenije. Kao posljedica toga oslobađanje topline uslijed izgaranja odvija se u manjem vremenskom intervalu, uz veću vršnu vrijednost, a osim toga izgaranje započinje nešto kasnije. Moglo bi se reći da se smanjenjem vremenske konstante izmjene topline rezultati višezonskog proračuna sve više približavaju rezultatima jednozonskog proračuna.

S obzirom da se primjenom veće vremenske konstante izmjene topline postiže ranije izgaranje, moglo bi se očekivati da je temperatura kod tog modela prije izgaranja veća. Isto tako moguće je da do ranijeg izgaranja dolazi zbog drugačije raspodjele temperature zona. Da bi se to provjerilo na slici 3.16. prikazani su rezultati srednje temperature u cilindru za sva tri



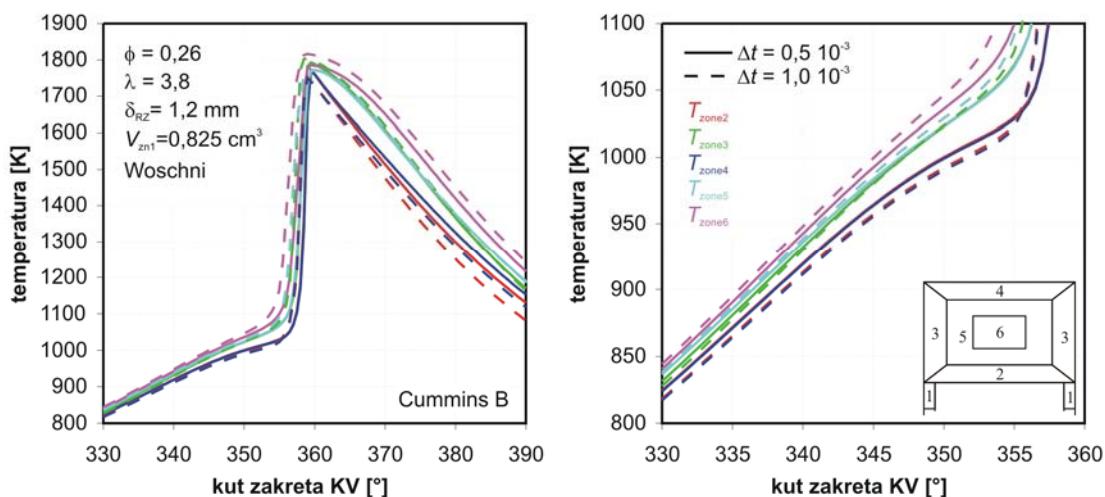
Slika 3.15. Promjena tlaka (lijevo) i neto brzine oslobađanja topline (desno) u zavisnosti o kutu zakreta KV, izračunat sa šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti vremenske konstante izmjene topline.



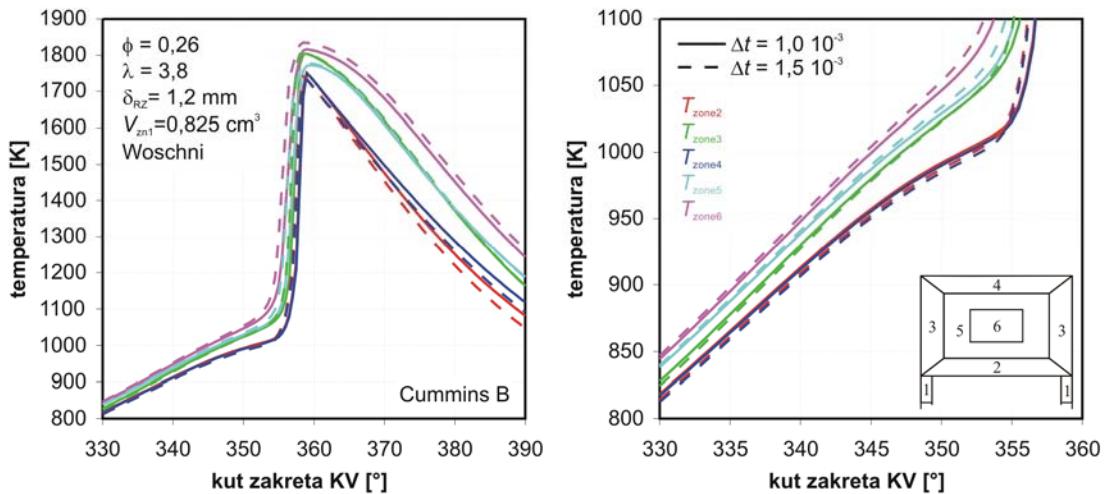
Slika 3.16. Promjena temperature u ovisnosti o kutu zakreta KV, izračunat za šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti vremenske konstante izmijene topline (lijevo: područje od $330 - 390^\circ\text{KV}$; desno: povećani prikaz kraja kompresije).

promatrana slučaja, a na slikama 3.17. i 3.18. prikazane su usporedne temperature po zonama. Na slici 3.17. uspoređene su temperature za $\Delta t = 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ i $1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$, a na slici 3.18. za $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ i $1,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.

Promjena srednje temperature potvrđuje činjenicu da izgaranje s većom vremenskom konstantom započinje ranije. Isto tako može se vidjeti da je srednja temperatura i prije i nakon izgaranja gotovo ista, isto kao što je i tlak prije i nakon izgaranja gotovo isti. Na desnoj slici 3.16. kraj kompresije je povećan kako bi se još bolje vidjelo da razlog ranijeg izgaranja ne leži u većoj srednjoj temperaturi. Prema tome uzrok ranijeg izgaranja mora biti



Slika 3.17. Promjena temperature zona u ovisnosti o kutu zakreta KV, izračunate šestzonskim proračunom uz vremensku konstantu izmijene topline $\Delta t = 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ i $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$, pri $\phi = 0,26$ i $\delta_{RZ} = 1,2 \text{ mm}$.



Slika 3.18. Promjena temperatura zona u ovisnosti o kutu zakreta KV, izračunate šestzonskim proračunom uz vremensku konstantu izmjene topline $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3}$ s i $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-3}$ s, pri $\phi = 0,26$ i $\delta_{RZ} = 1,2$ mm.

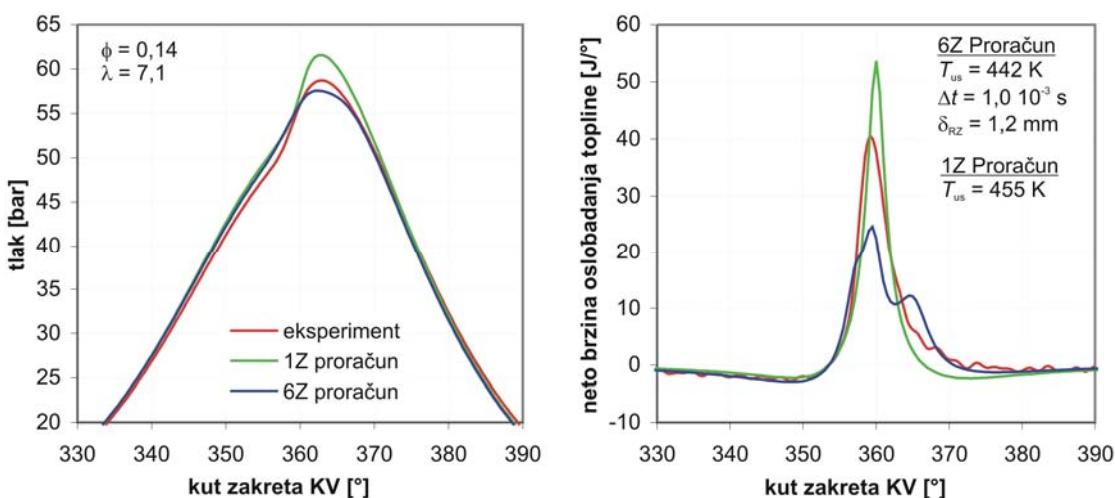
drugačija raspodjela temperatura po zonama što se dobro vidi na slikama 3.17. i 3.18. Povećanjem vremenske konstante razlika u temperaturama između zona se isto tako povećava. S obzirom da je srednja temperatura gotovo ista to znači da će uz veći Δt zone s temperaturom višom od srednje temperature imati i višu temperaturu zone, a one zone s temperaturom nižom od srednje imati će uz veći Δt nižu temperaturu zone. Upravo iz tog razloga uz veći Δt prije početka izgaranja središnja zona imati će i višu temperaturu, pa će stoga i prije početi izgarati. I druga središnja zona, zona 5, isto tako za vrijeme kompresije uz veći Δt ima višu temperaturu pa i u njoj izgaranje počinje ranije. No, zbog povećanja volumena tih zona, koje se javlja kao posljedica početka izgaranja, rad se s tih zona prenosi na ostale zone, pa i u zonama u kojima je temperatura za vrijeme kompresije, uz veći Δt , niža, izgaranje započinje ranije. Naime, početkom izgaranja središnjih zona naglo se povisuju temperature ostalih zona i ubrzo nakon toga i one izgaraju.

Nakon izgaranja, za vrijeme ekspanzije, razlika u temperaturama između zona veća je nego što je to za vrijeme kompresije. U skladu s time uz veći Δt , za vrijeme ekspanzije, temperature rubnih zona uz klip i glavu (2 i 4) su i dalje niže, a temperatura središnje zone (6) je i nadalje viša. No, zanimljivo je zamijetiti da su temperature zona 3 i 5 za vrijeme ekspanzije vrlo bliske za sve tri vrijednosti faktora Δt .

Osim ispitivanja pri visokom opterećenju, proračunski model potrebno je testirati i pri nižem opterećenju. Pri nižem opterećenju kod HCCI izgaranja zbog smanjene koncentracije goriva dolazi do izgaranja sa smanjenom učinkovitosti, tj. veliki dio energije goriva ostaje neiskorišten. U tom slučaju veliki dio mase goriva u cilindru ne izgara potpuno, pa su se u tim

slučajevima i jednozonski proračuni pokazali mnogo točniji nego što su to bili u radnim točkama s većim opterećenjem. Kako bi ispitali ponašanje šestzonskog proračuna pri nižem opterećenju napravljeni su proračuni s količinom goriva kod koje je faktor sastava smjese $\phi=0,14$, tj. faktor pretička zraka je $\lambda=7,1$. Prije prikaza utjecaja vremenske konstante izmjene topline Δt na rezultate radne točke s manjim opterećenjem, usporedno će se prikazati osnovni rezultati ove radne točke dobiveni jednozonskim i šestzonskim proračunom, te eksperimentalnim ispitivanjem (slika 3.19.).

Rezultati toka tlaka pokazuju da i u ovom slučaju šestzonski proračun daje rezultate koji su bliži eksperimentalnim u odnosu na rezultate jednozonskog proračuna. No, za razliku od radne točke s većim opterećenjem kod ove radne točke ta razlika je mnogo manje izražena. Najveća vrijednost tlaka šestzonskog proračuna niža je od najveće eksperimentalno dobivene vrijednosti, dok je ona izračunata jednozonskim proračunom i dalje viša. S obzirom da je kod oba proračuna tlak za vrijeme kompresije nešto viši od eksperimentalnog, očito je da je oslobađanje topline kod šestzonskog proračuna nešto manje intenziteta nego što je to u stvarnom motoru. To se dobro može vidjeti na desnom dijagramu slike 3.19. gdje je najveća brzina oslobađanja topline šestzonskog proračuna niža od one iz eksperimentalnih rezultata, koja je pak niža od one izračunate jednozonskim proračunom. Na prvi pogled teško je ocijeniti koja od krivulja brzine oslobađanja topline bolje opisuje eksperimentalne rezultate, no da bi ocijenili koji proračun vjernije opisuje izgaranje pogledat ćemo rezultate učinkovitosti izgaranja. Šestzonski proračun daju vrijednost od $\eta_c = 68,3\%$, a jednozonski $\eta_c = 73,4\%$. S obzirom de je pri eksperimentalnom ispitivanju dobiveno da je $\eta_c = 62,5\%$ zaključuje se da oba proračuna i u ovoj radnoj



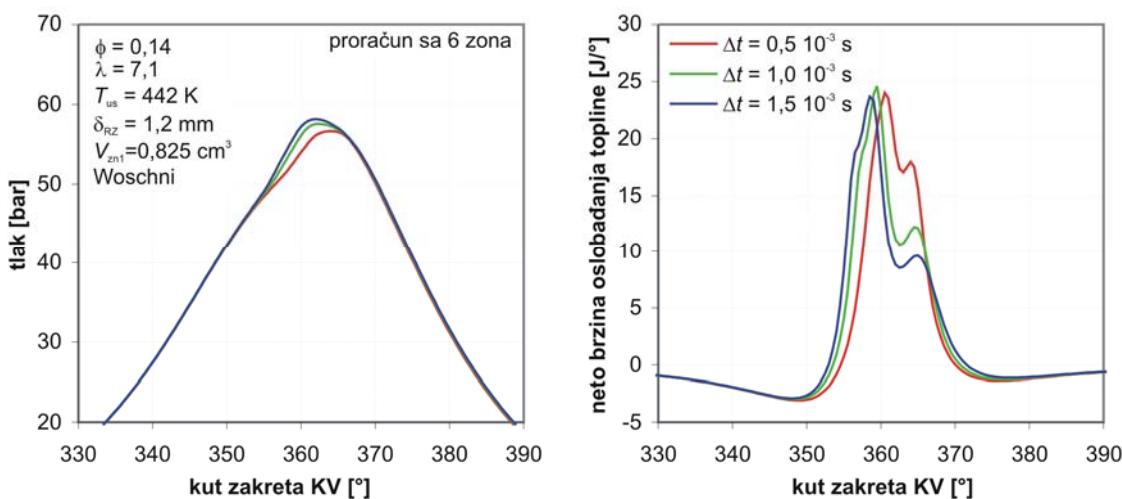
Slika 3.19. Promjena tlaka i neto brzine oslobađanja topline HCCI motora, u radnoj točki s $\phi=0,14$, dobiveni jednozonskim i šestzonskim proračunom, te eksperimentalnim ispitivanjem.

točki precjenjuju ukupnu količinu oslobođene topline, pri čemu je proračun s manjom vrijednosti (šestzonski) bliži eksperimentalnim rezultatima.

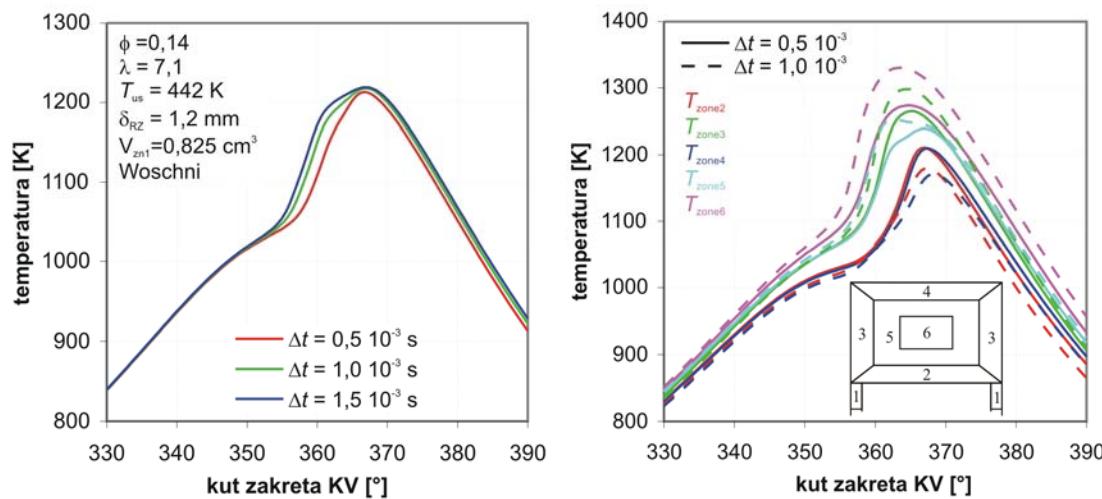
Treba zamijetiti da su temperature usisnog rubnog uvjeta dosta različite kod jednozonskog i šestzonskog proračuna, a što je važno kada se analizira sposobnost nekog proračuna da predviđa početak izgaranja. Naime prema nekim radovima [45, 58] jednozonski proračun može se koristiti za predviđanje početka izgaranja, no ovdje se vidi da zbog neujednačenosti temperature kod višezonskog proračuna izgaranje nastupa u isti trenutak uz nižu temperaturu usisa. Kako se kod realnog motora može očekivati postojanje neujednačenosti temperature u prostoru izgaranja, pitanje je koliko se jednozonskim proračunom, kod kojeg je temperatura u cijelom cilindru jednaka, može dobro predviđati početak izgaranja.

Da bi vidjeli da li se isti utjecaj vremenske konstante izmjene topline dobiva i kod smanjenog opterećenja ponovno su napravljeni proračuni s tri vrijednosti te konstante $\Delta t = 0,5 \cdot 10^{-3}$, $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3}$ i $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-3}$ s, ali sada pri opterećenju kod kojeg je $\phi=0,14$. Rezultati tlaka, i neto brzine oslobađanja topline prikazani su na slici 3.20., dok su na slici 3.21. prikazane promjene srednje temperature i temperature po zonama.

Isto kao i kod većeg opterećenja, povećanjem vremenske konstante Δt pomiciće se točka paljenja prema naprijed, tj. izgaranje započinje ranije. Pored toga i kod manjeg opterećenja uz veću vremensku konstantu krivulja brzine oslobađanja topline je šira, tj. dovođenje topline traje malo dulje. Za razliku od radne točke s velikim opterećenjem, kod ove radne točke nema promjene u vršnoj vrijednosti brzine oslobađanja topline. Sve tri krivulje imaju svoj maksimum oko 25 J° , dok je kod većeg opterećenja promjena najveće vrijednosti bila dosta izražena. Osim toga pregledom učinkovitosti



Slika 3.20. Rezultati promjene tlaka i neto brzine oslobađanja topline izračunati šestzonskim proračunom HCCI motora uz faktor sastava smjese $\phi=0,14$ i tri različite vrijednosti vremenske konstante izmjene topline Δt .



Slika 3.21. Rezultati promjene srednje temperature izračunati šestzonskim proračunom HCCI motora uz faktor sastava smjese $\phi=0,14$ i tri različite vrijednosti vremenske konstante izmjene topline Δt , te prikaz raspodjele temperature po zonama za dvije vrijednosti konstante Δt ($0,5 \cdot 10^{-3}$ i $1,0 \cdot 10^{-3}$).

Izgaranja vidi se da kod većeg opterećenja vremenska konstanta Δt ne utječe značajno na učinkovitost izgaranja. Vrijednost učinkovitosti izgaranja tamo se mijenja u rasponu od svega 0,2% pri čemu je uz veću vremensku konstantu Δt dobivena manja učinkovitost izgaranja. S druge strane kod manjeg opterećenja ($\phi=0,14$) učinkovitost izgaranja značajnije se povećava s povećanjem vremenske konstante i mijenja se u rasponu od $\approx 3\%$. To se dešava kao posljedica veće razlike u temperaturama zona, pri čemu središnja zona uz veći Δt ima i veću temperaturu, pa samim time veći dio plinova izgori do kraja. Iako je kao posljedica veće razlike u temperaturama zona, temperatura u rubnim zonama niža, a uz to je i količina neizgorjelih ugljikovodika veća, utjecaj potpunijeg izgaranja u središnjoj zoni veći je od utjecaja nepotpunijeg izgaranja u rubnim zonama.

Analiza emisija

S obzirom da je jedan od ciljeva šestzonskog modela i predviđanje emisije produkata izgaranja, važno je pogledati da li promjena vremenske konstante izmjene topline utječe na tu emisiju, te ako utječe na koji način i zašto. Stoga su iz napravljenih proračuna izvučeni rezultati emisija CO₂, CO i HC, te su prikazani u tablici 3.6. zajedno s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja pri promatranom opterećenju. Rezultati su prikazani na isti način kao i eksperimentalni, u postotku ugljika iz goriva koji je pretvoren u promatrano emisiju, a što je objašnjeno u točki 3.4.1. Pregledom rezultata za slučaj s velikim opterećenjem ($\phi=0,26$) vidi se da je emisija CO₂ u sva tri promatrana slučaja malo veća od izmjerene emisije. S druge strane izračunata emisija HC manja je u sva tri promatrana slučaja, što dogovara činjenici da je izračunata učinkovitost izgaranja još uvek malo veća od

eksperimentalne. Izračunata emisija CO skoro je jednaka eksperimentalnoj, u slučaju $\Delta t = 0,5 \cdot 10^{-3}$, dok je u ostalim slučajevima za nijansu manja.

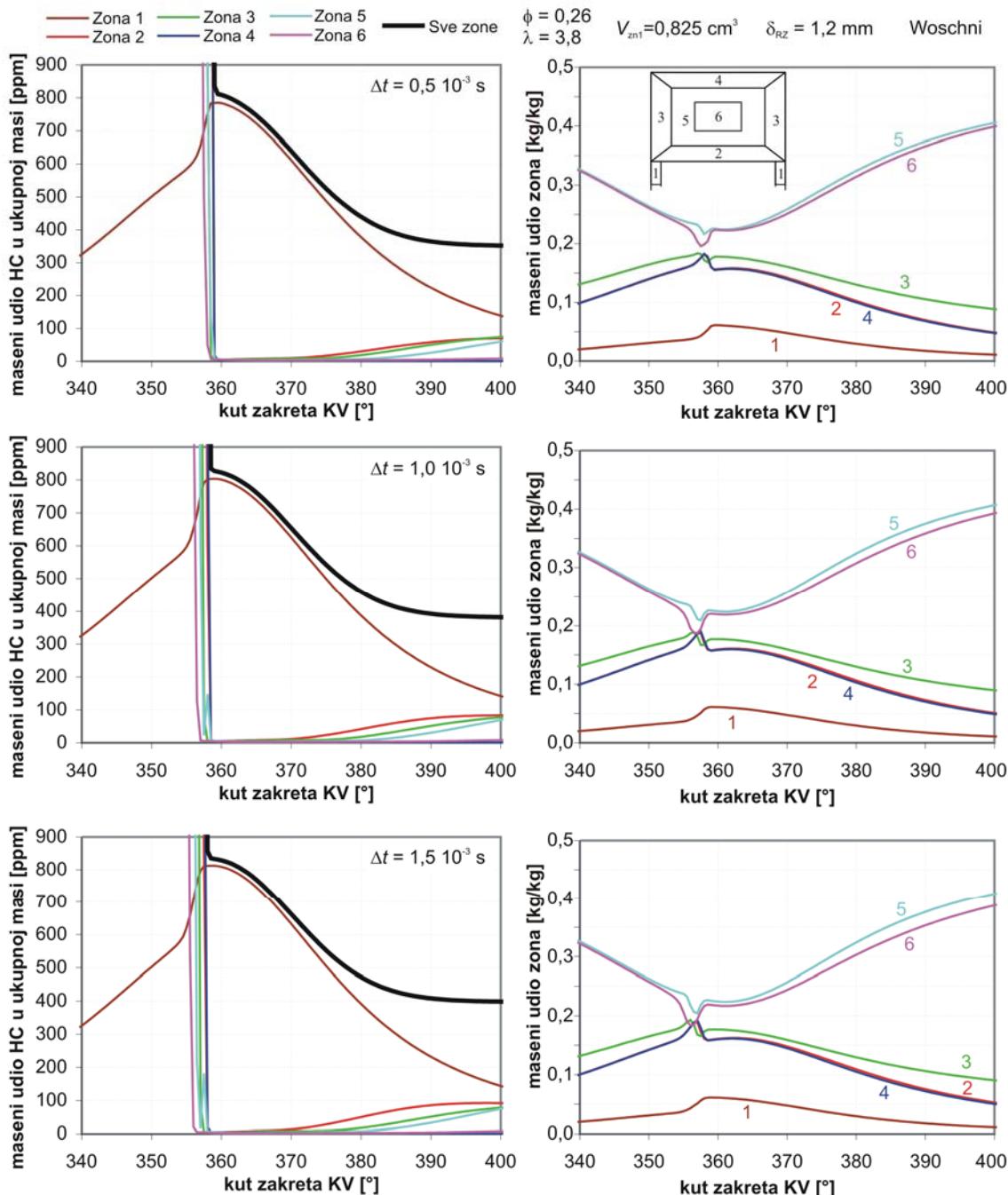
Tablica 3.6. Analiza promjene emisije pri promjeni vremenske konstante izmjene topline između zona Δt .

Radna točka	Vremenska konstanta Δt	CO₂	CO	HC
		%	%	%
$\phi = 0,26$ $(\lambda = 3,8)$	$0,5 \cdot 10^{-3}$ s	96,70	1,40	1,92
	$1,0 \cdot 10^{-3}$ s	96,54	1,36	2,09
	$1,5 \cdot 10^{-3}$ s	96,47	1,33	2,20
	Eksperiment	94,78	1,42	3,80
$\phi = 0,14$ $(\lambda = 7,1)$	$0,5 \cdot 10^{-3}$ s	32,92	60,17	6,91
	$1,0 \cdot 10^{-3}$ s	37,40	55,29	7,30
	$1,5 \cdot 10^{-3}$ s	40,89	50,90	8,21
	Eksperiment	32,47	54,98	12,56

Povećanjem vremenske konstante izmjene topline Δt pri opterećenju s $\phi=0,26$ emisija CO₂ malo se smanjuje, isto kao i emisija CO, dok se emisija HC povećava. Malo detaljnijom analizom može se vidjeti na koji način uz promjenu vremenske konstante izmjene topline dolazi do promjene izračunate emisije. Zbog toga su na slikama 3.22. i 3.23 prikazane promjene masenih udjela HC (3.22.) i CO (3.23.) po zonama izračunate za sve tri vremenske konstante, pri opterećenju s $\phi=0,26$. Pored masenih udjela HC i CO na desnoj strani svakog dijagrama prikazana je i promjena ukupnog masenog udjela mase u pojedinim zonama iz kojeg se može vidjeti kako masa u pojedinim trenucima prelazi iz zone u zonu, a pomoću kojih se lakše mogu tumačiti dijagrami na lijevoj strani.

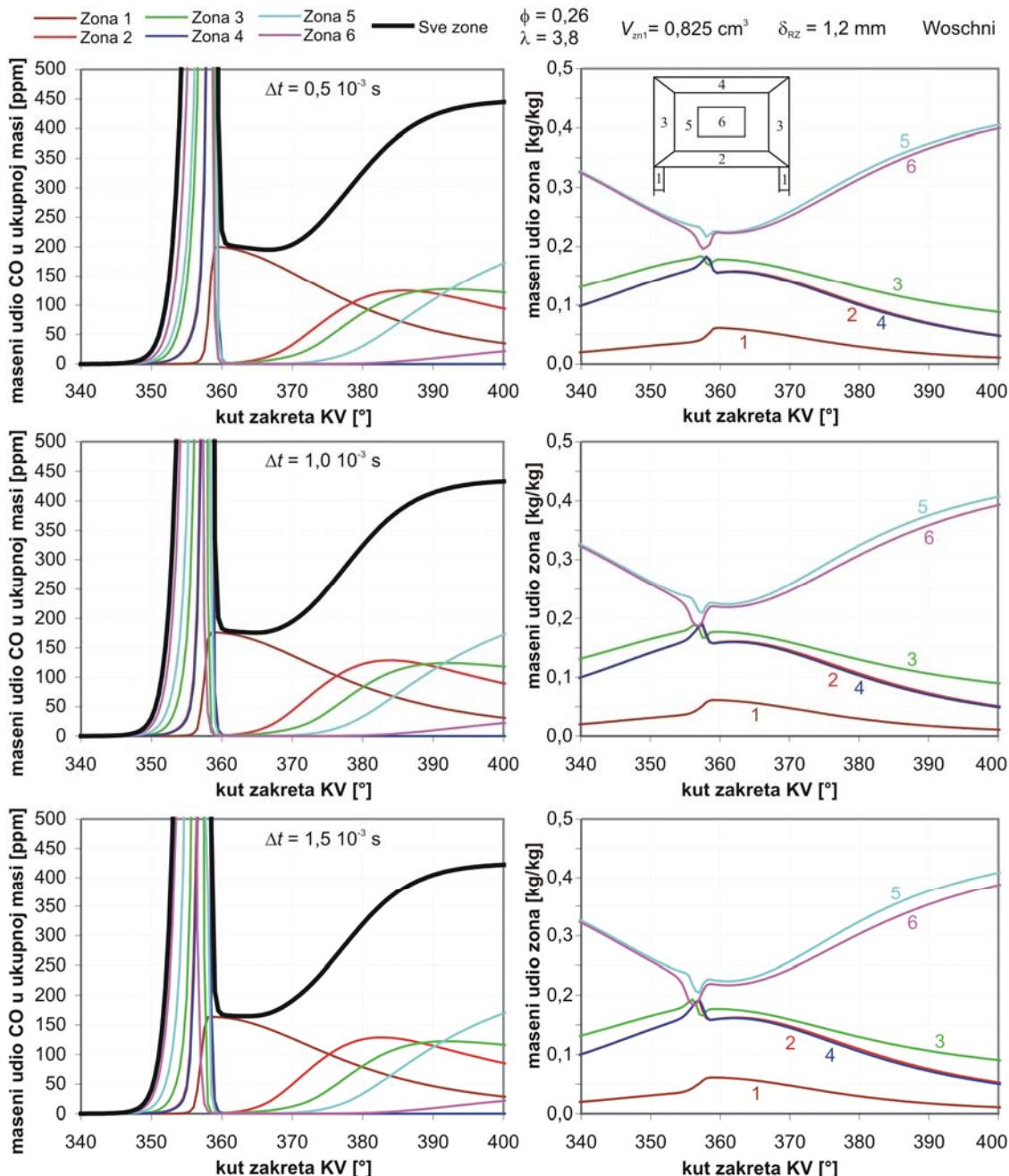
Uz veći Δt izgaranje započinje ranije, što se može vidjeti na slici 3.15. a i iz promjena udjela HC, a to znači da se tlak u cilindru povećava ranije. S obzirom da je uz veći Δt i temperaturna distribucija veća, raspon u kojem se odvija izgaranje u različitim zonama je isto tako veći. Zbog toga je masa neizgorjelih plinova koja ulazi u zonu procjepa pri većem Δt veća, a samim time je i ukupna količina neizgorjelih HC u području oko GMT veća. No, to je samo jedan od razloga zašto je izračunata emisija HC uz veći Δt veća. Tijekom ekspanzije tlak se u cilindru smanjuje pa masa iz zone procjepa izlazi u cilindar, pri čemu prvo ulazi u rubne zone uz klip i cilindar (zone 2 i 3) a zatim i u središnju zonu (zonu 5). U početnoj fazi ekspanzije temperatura u zoni uz klip i cilindar dovoljno je visoka da se HC koji izlazi iz zone procjepa aktivira i pretvara u CO ili CO₂. No, kako ekspanzija napreduje temperatura u cilindru pada, pri čemu najviše ona u rubnim zonama, pa se reakcije pretvorbe počinju usporavati, a zatim i potpuno

staju. To se prvenstveno dešava u zoni uz klip koja ima nižu temperaturu, a potom i u zoni uz cilindar. Kao posljedica kasnijeg prelaska mase iz zona 2 i 3 u zonu 5, a i zbog kasnije pada temperature u toj zoni, masa HC u zoni 5 počinje kasnije rasti. Kako je uz veći Δt temperatura u zoni 2 manja, ranije se počinje usporavati pretvorba HC koji izlazi iz zone procjepa, pa samim time i veća količina tih plinova na kraju ostaje u cilindru.



Slika 3.22. Rezultati mase HC u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti konstante Δt ($0,5 \cdot 10^{-3}$, $1,0 \cdot 10^{-3}$ i $1,5 \cdot 10^{-3}$).

Detaljnija analiza za CO (slika 3.23.) pokazuje da se povećanjem vremenske konstante Δt masa CO u zoni procjepa u području oko GMT smanjuje. Već je spomenuto, uz veći Δt izgaranje započinje ranije, pri čemu ga karakterizira veći raspon izgaranja u zonama. Ugljikov monoksid (CO) u cilindru se, kao jedna od međufaza, stvara tijekom izgaranja. Pri tom se u rubnim zonama zbog kasnijeg izgaranja u njima uz veći Δt CO pojavljuje kasnije. S druge strane uz veći Δt tlak u cilindru ranije raste zbog ranijeg izgaranja u središnjim zonama. Prema tome ranije će početi nagliji prijelaz



Slika 3.23. Rezultati mase CO u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti konstante Δt ($0.5 \cdot 10^{-3}$, $1.0 \cdot 10^{-3}$ i $1.5 \cdot 10^{-3}$).

mase iz rubnih zona u zonu procjepa, a s obzirom da se iz razloga navedenih ranije u rubnim zonama u tim trenucima nalazi manje CO tako će i masa CO u zoni procjepa oko GMT uz veći Δt biti manja.

U području oko GMT udio HC u zoni procjepa (zona 1) predstavlja veliki dio ukupnog HC. No kod CO u jednom trenutku njegova masa u zoni 1 predstavlja gotovo svu masu CO u cilindru (~98%). Tijekom ekspanzije CO iz zone procjepa izlazi u cilindar gdje izgara u CO_2 . Istovremeno se iz dijela HC koji izlazi iz zone procjepa i izgara, stvara CO kao međuspoj izgaranja. Zbog toga se u rubnim zonama 2 i 3 vrlo brzo nakon GMT može zamijetiti blagi porast udjela CO, a zatim oko 370°KV taj porast postaje naglijji. Naglijji porast CO, prvo u rubnim zonama, a zatim i u središnjoj zoni 5, povezan je s početkom usporenog pretvaranja CO u CO_2 , zbog toga što se pretvorba HC, koji iz zone procjepa izlazi, u CO ne mijenja, pa usporavanjem pretvorbe CO u CO_2 raste udio CO. To se naravno prvo dešava u zonama s najnižom temperaturom (zone 2 i 3), a tek potom u zoni 5, koja ima nešto višu temperaturu. Povećanjem Δt taj proces u zoni 2 započinje ranije pa i porast udjela CO u toj zoni počinje ranije. No, isto tako proces usporavanja pretvorbe HC u CO, uz veći Δt , počinje ranije, pa je zbog toga udio CO koji nastaje iz HC gotovo isti za sva tri Δt . Iz rezultata može se očitati da je prirast ukupnog CO tijekom ekspanzije u sva tri slučaja gotovo isti, pa se smanjeni udio CO može povezati s manjim udjelom CO u zoni procjepa u području oko GMT.

Rezultati radne točke s malim opterećenjem ($\phi=0,14$) pokazuju potpuno drugačiji karakter. Iz eksperimentalnih rezultata vidi se da je emisija CO_2 značajno manja, ali je zato povećana emisija CO i HC. To znači da je izgaranje u toj točki izrazito nepotpuno. Kod takvog izgaranja može se očekivati da izvor emisija CO i HC neće više biti samo zona procjepa, već da će se emisije u ovoj točki stvarati i u glavnom prostoru izgaranja.

S povećanjem vremenske konstante Δt izračunate emisije CO_2 i HC se povećavaju, dok se emisija CO smanjuje, pri čemu su ove promjene mnogo izraženije nego što su to bile pri $\phi=0,26$. Ovi rezultati pokazuju da promjena Δt mijenja fazu izgaranja koje se ostvaruju u pojedinim zonama. Iako je samo izgaranje vrlo kompleksno, grubo se mogu pretpostaviti dvije njegove faze: pretvaranje goriva i ugljikovodika u CO, te pretvaranje CO u CO_2 . Mada se ove dvije faze međusobno isprepliću neminovno pretvaranje HC u CO prethodi pretvaranju CO u CO_2 . Uz nižu temperaturu plina reakcije u mehanizmu završavaju ranije, pa upravo u tome leži razlog spomenute promjene emisija uz promjenu Δt . Već je pokazano da je uz veći Δt razlika u temperaturama između zona veća. Zbog toga je uz veći Δt temperatura u zonama uz klip i glavu niža, a temperatura u središnjoj zoni viša. Prema tome uz nižu temperaturu u zonama uz klip i glavu ranije se zaustavlja pretvorba HC u CO, pa veća količina HC ostaje u cilindru. Istovremeno zbog više temperature središnje zone kasnije se zaustavlja pretvorba CO u CO_2 ,

pa je veća količina CO₂ stvorena u zoni 6, a samim time i u cijelom cilindru. Oba ova učinka imaju za posljedicu smanjenje količine CO u cilindru, što se i vidi u tablici 3.6.

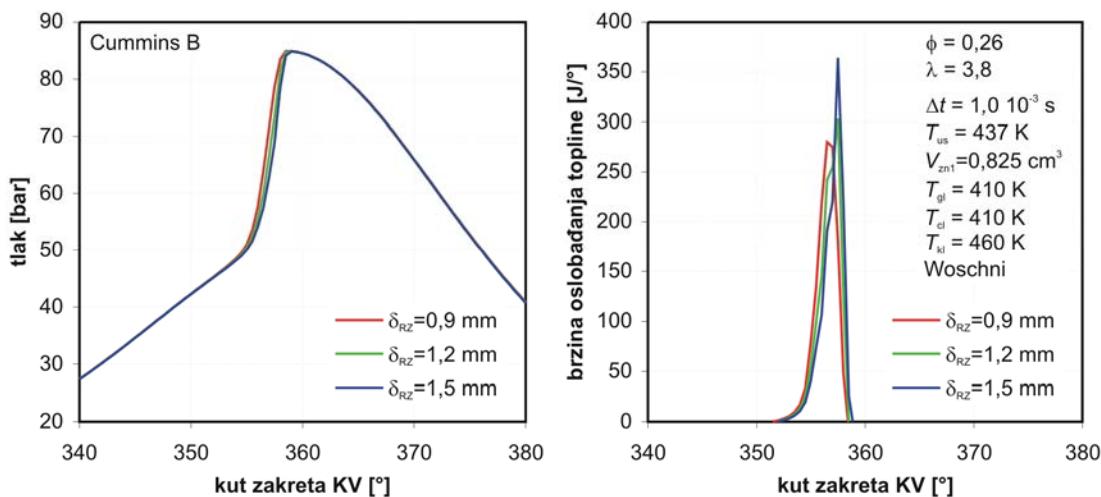
Zaključak

Vremenska konstanta izmjene topline imat će dakle utjecaja i na brzinu oslobađanja topline, a samim time i na tok tlaka i temperature, ali i na rezultate emisije. Pri tome je najvažniji utjecaj ove konstante na duljinu trajanja izgaranja i mogućnost prilagođavanja rezultata proračuna rezultatima eksperimentalnih ispitivanja. Utjecaj vremenske konstante izmjene topline na duljinu izračunatog izgaranja istovjetan je u svim područjima opterećenja i općenito se može reći da s povećanjem njene vrijednosti izračunata duljina izgaranja raste. Osim toga kao posljedica promjene u raspodjeli temperature unutar cilindra, koja se dobije s promjenom vrijednosti vremenske konstante izmjene topline, javljaju se i ranije opisane promjene u izračunatom početku izgaranja i izračunatim emisijama. Na ove rezultate, kao što će se vidjeti kasnije, utječu i neki drugi proračunski faktori, pa se njihovom promjenom ti rezultati nadalje mogu korigirati. Prema tome, ukoliko se želi raditi fino podešavanje proračunskog modela, tada je za izbor vremenske konstante izmjene topline najvažniji oblik krivulje neto brzine oslobađanja topline, no kao što će se vidjeti kasnije i bez tog finog podešavanja, uz red veličine te vremenske konstante od 1 ms, mogu se dobiti kvalitetni rezultati.

3.4.4. Utjecaj debljine rubnih zona

Pored vremenske konstante izmjene topline na rezultate proračune može utjecati i druga proračunska konstanta, debljina rubnih zona δ_{RZ} . Promjenom debljine rubnih zona mijenjat će se udio mase koji se u nekom trenutku nalazi u rubnim zonama, a samim time i rezultati proračuna. Da bi se bolje opisalo stanje tik uz stijenke, debljina rubne zone trebala bi biti vrlo tanka, no ukoliko je debljina rubne zone previše mala, a uz činjenicu da ne postoji drugi rubni sloj, može se desiti da zbog malog udjela mase utjecaj na ukupne rezultate bude malen. Kako bi se vidjelo na koji način promjena debljine rubne zone utječe na rezultate, napravljeni su proračuni s tri različite vrijednosti te debljine, a svi ostali parametri pri tom su držani konstantni. Proračuni su isto kao i u prethodnoj analizi napravljeni u radnoj točki s najvećim opterećenjem $\phi=0,26$ ($\lambda=3,8$), te u radnoj točki s malim opterećenjem $\phi=0,14$ ($\lambda=7,1$).

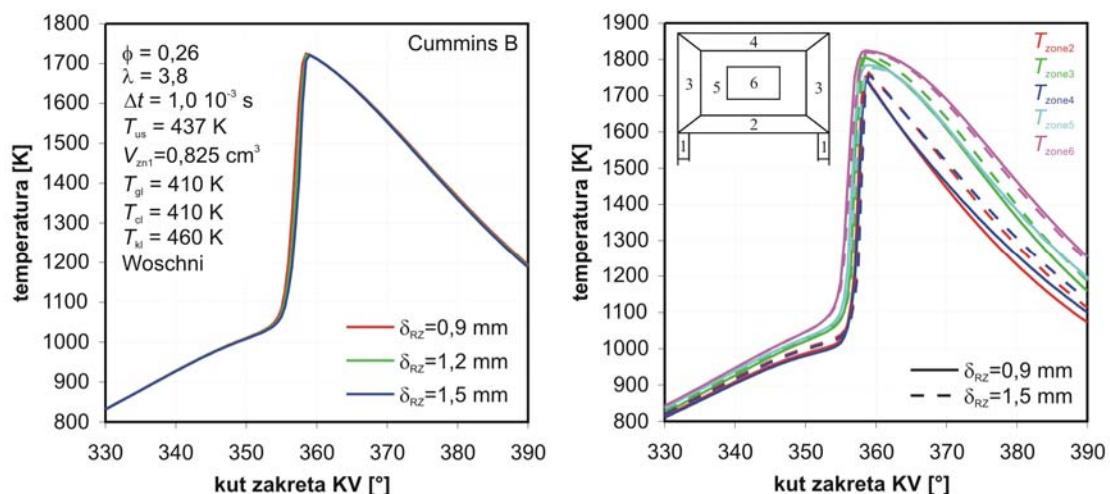
Rezultati promjene tlaka i neto brzine oslobađanja topline za radnu točku s visokim opterećenjem prikazani su na slici 3.24. Povećanjem debljine rubne zone točka paljenja pomiciće se malo unazad, a najveća brzina dovođenja topline malo raste. Ako se ovi rezultati usporede s analizom utjecaja duljine vremenske konstante Δt , vidi se da je utjecaj debljine zone na tlak i na



Slika 3.24. Promjena tlaka (lijevi) i neto brzine oslobođanja topline (desno) u zavisnosti o kutu zakreta KV, izračunat za šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone, uz opterećenje pri kojem je $\phi = 0,26$ ($\lambda = 3,8$).

oslobađanje topline mnogo manji nego što je to utjecaj konstante Δt . Da bi se vidjelo zbog čega dolazi do ovih promjena, na slici 3.25. prikazane su promjene srednjih temperatura za sva tri promatrana slučaja, te promjene temperature u zonama izračunate s dvije krajnje vrijednosti debljine rubnih zona 0,9 mm i 1,5 mm. Krivulje srednjih temperatura za vrijeme kompresije gotovo su jednake, pa se i ovdje dolazi do zaključka da do promjene početka izgaranja dolazi zbog različite raspodjele temperature između zona, te njihovog međusobnog utjecaja, a ne zbog promjene srednje temperature.

Temperature zona pri kraju kompresije (oko 340°KV) pokazuju da su temperature središnjih zona uz različite debljine δ_{RZ} gotovo iste, dok se

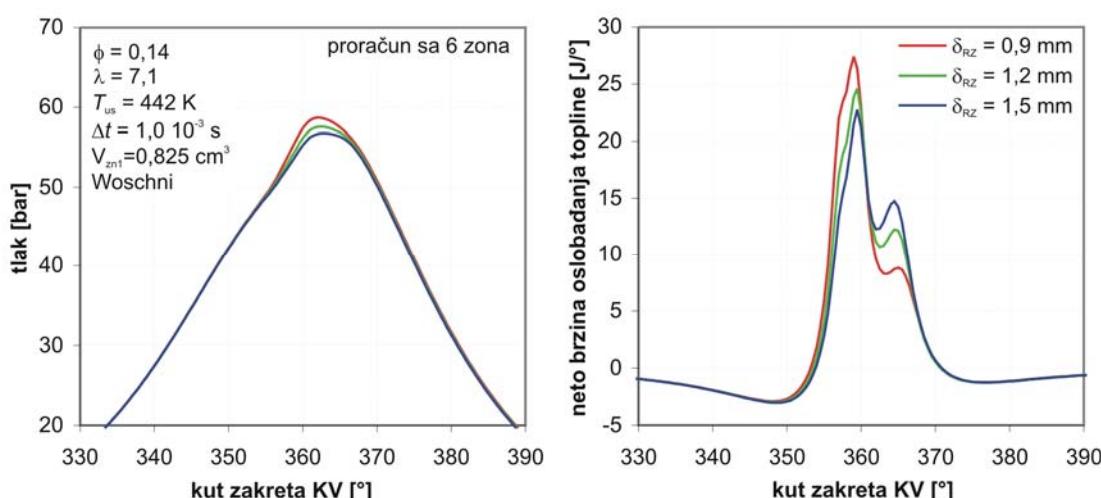


Slika 3.25. Promjene srednje temperature cilindra (desno) izračunata šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone, te usporedba izračunatih promjena temperatura u zonama za dvije krajnje debljine rubnih zona δ_{RZ} (0,9 i 1,5 mm), sve pri opterećenju kod kojeg je $\phi = 0,26$ ($\lambda = 3,8$).

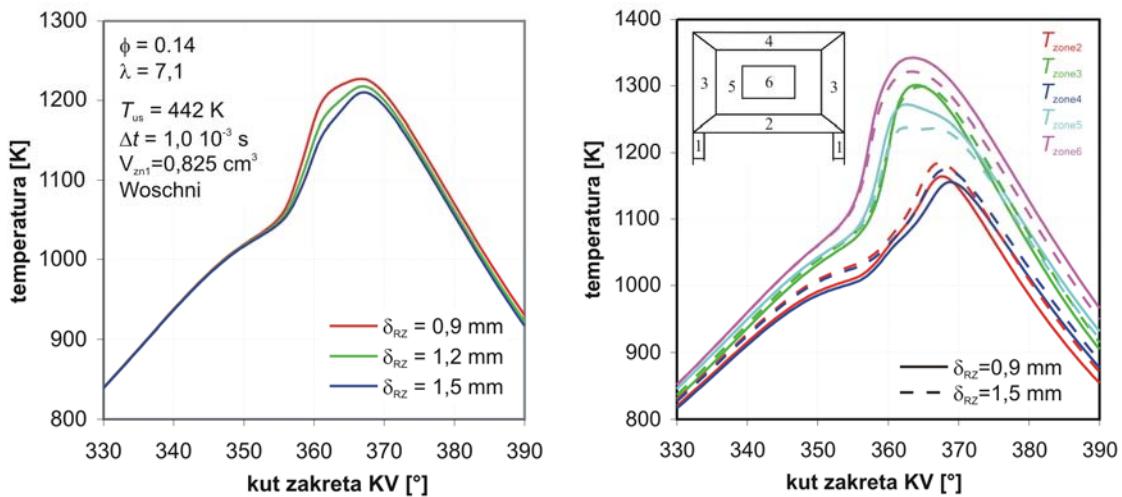
temperature rubnih zona mijenjaju, pri čemu se uz veću debljinu rubne zone veže i veća temperatura. Kako kompresija napreduje ta razlika se povećava, a počinju se pojavljivati i vrlo male razlike kod središnjih zona. No, s napredovanjem kompresije mijenja se i odnos masa između zona, pri čemu sve veći udio mase imaju rubne zone uz glavu i klip, a sve manji udio središnje zone. Povećanjem debljine rubne zone taj se odnos još dodatno mijenja u korist rubnih zona čime se utjecaj središnjih zona na ostale zone smanjuje. Stoga, iako sam početak izgaranja u središnjoj zoni (6) nastupa gotovo istovremeno za obje vrijednosti debljine δ_{RZ} , utjecaj tog izgaranja na ostale zone izraženiji je kod manje debljine rubnih zona, pa izgaranje u ostalim zonama za slučaj s manjim δ_{RZ} nastupa ranije. To se očituje izraženijim odmakom krivulje temperature zone 5 za slučaj s manjim δ_{RZ} , od trenutka kada je u zoni 6 nastupilo izgaranje ($\approx 355^{\circ}\text{KV}$). Isto tako, iako su temperature u rubnim zonama za vrijeme kompresije uz manji δ_{RZ} niže, nagli porast temperature (glavno izgaranje) nastupa prije ($\approx 356^{\circ}\text{KV}$) nego što je to slučaj uz veći δ_{RZ} . Posljedica ovoga vidi se i na krivuljama neto brzine oslobađanja topline (slika 3.24.) kod kojih je na samom početku izgaranja razlika između različitih vrijednosti debljine δ_{RZ} vrlo mala, a zatim kako izgaranje napreduje razlika se sve više povećava.

Povećanje najveće vrijednosti brzine oslobađanja topline pri povećanju vrijednost δ_{RZ} može se povezati s činjenicom da je kod većeg δ_{RZ} veći udio mase u rubnim zonama. Te rubne zone izgaraju kasnije, a s obzirom da se cijelo izgaranje odvija prije GMT to znači da će veći udio mase izgarati bliže GMT, a zbog toga će i oslobađanje topline biti intenzivnije.

Rezultati proračuna radne točke s malim opterećenjem ($\phi = 0.14$) prikazani su na slikama 3.26. i 3.27. I kod manjeg opterećenja izgaranje uz manju



Slika 3.26. Promjena tlaka (lijevo) i neto brzine oslobađanja topline (desno) u zavisnosti o kutu zakreta KV, izračunat sa šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone uz opterećenje pri kojem je $\phi = 0,14$ ($\lambda = 7,1$).



Slika 3.27. Promjena srednje temperature cilindra (desno) izračunata šestzonskim proračunom za tri različite debljine rubne zone, te usporedba izračunatih promjena temperatura u zonama za dvije krajne debljine rubnih zona δ_{RZ} (0,9 i 1,5 mm), sve pri opterećenju kod kojeg je $\phi=0,14$ ($\lambda=7,1$).

debljinu rubnih zona započinje ranije, tj. sam početak izgaranja je gotovo isti, ali veća brzina oslobađanja topline ostvaruje se ranije. Uzrok ove pojave isti je kao i kod slučaja s većim opterećenjem, što se potvrđuje na slici 3.27. desno, gdje je prikazana raspodjela temperature po zonama za dvije vrijednosti debljine δ_{RZ} . Za razliku od slučaja s većim opterećenjem, u ovom slučaju uz veću debljinu rubne zone postiže se manja vrijednost najveće brzine oslobađanja topline. Isto tako može se zamijetiti da kod smanjenog opterećenja krivulja brzine oslobađanja topline ima dva lokalna maksimuma, što se javlja kao posljedica produljenog izgaranja. Kod takovog izgaranja naglje oslobađanje topline u zonama 2 i 4 započinje dosta kasnije, kada je oslobađanje topline iz zona 3, 5 i 6 već u padu, pa se stoga javlja i drugi vrh. Izgaranje u tim zonama sada se javlja nakon GMT pa je intenzitet tog oslobađanja topline manji od onog koji se dobiva iz zona 3, 5 i 6. S obzirom da je uz manji δ_{RZ} masa u zonama 5 i 6 veća, izračunava se veća vrijednost oslobađanja topline iz tih zona, a manja vrijednost kasnijeg oslobađanja topline iz zona 2 i 4. Pored toga za razliku od izgaranja pri većem opterećenju ovdje se može zamijetiti da je promjenom debljine rubne zone promijenjena i ukupna količina oslobođene topline što se manifestira promjenom temperature ekspanzije. Rezultati učinkovitosti izgaranja pokazuju da je izgaranje najpotpunije u slučaju s najmanjim δ_{RZ} , što se slaže s rezultatima srednje temperature za vrijeme ekspanzije koja je upravo za taj slučaj najveća.

Analiza emisija

Isto kao i kod promjene vremenske konstante, tako i kod promjene debljine rubne zone treba pogledati što se dešava s emisijama. Iz tog razloga su

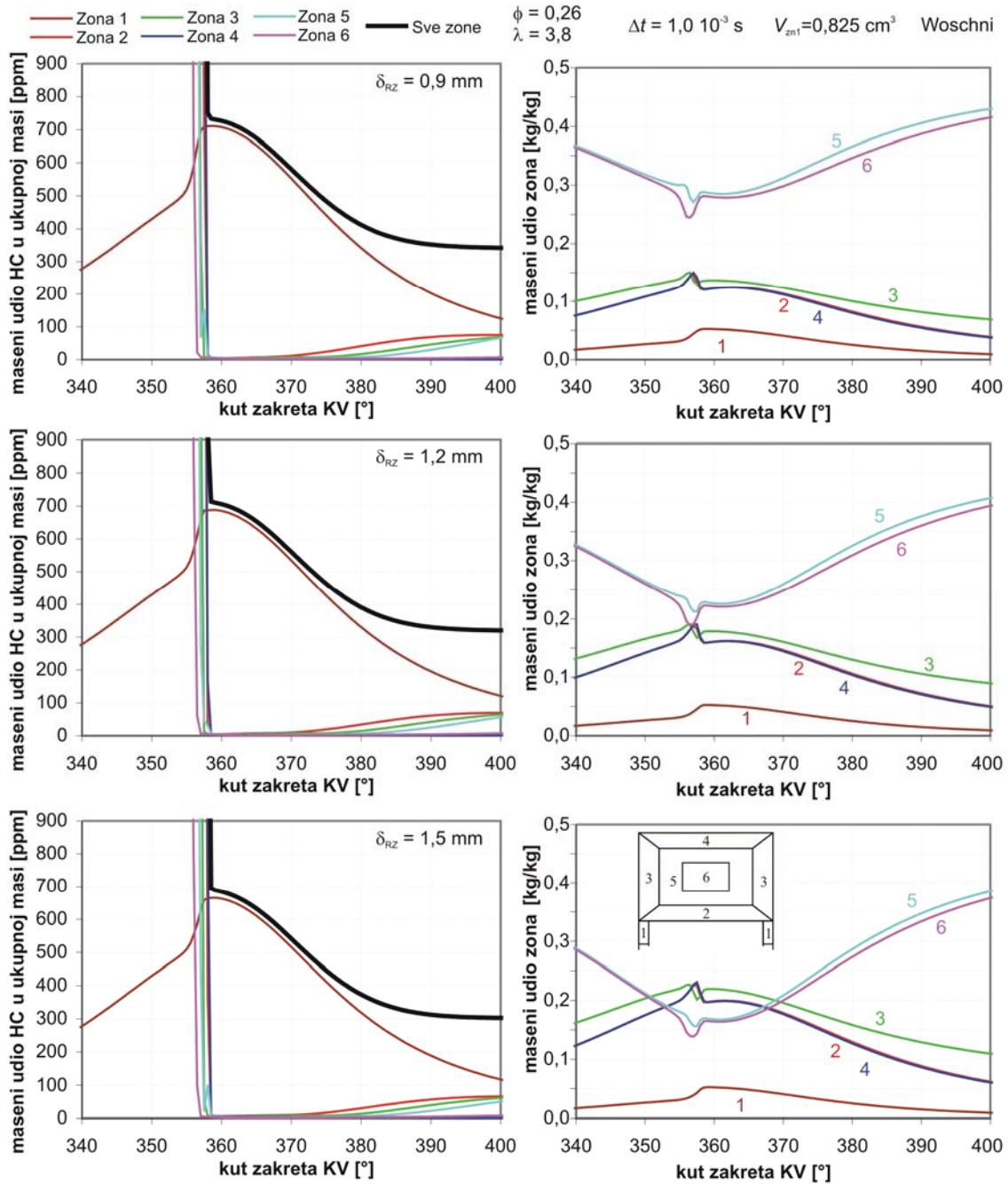
izračunate emisije CO₂, CO i HC svih razmatranih slučajeva prikazane u tablici 3.7., te su uspoređene s eksperimentalnim. Pri većem opterećenju povećanjem debljine rubne zone izračunata emisija CO₂ se povećava, dok se emisija CO i HC smanjuje. Pri tome su sve izračunate emisije CO₂ malo veće od eksperimentalnih, dok su one za CO i HC manje od eksperimentalnih. To nas navodi na zaključak da će se u promatranom području debljina rubnih zona, uz opterećenje kod kojeg se postiže gotovo potpuno izgaranje, najbolje podudaranje emisija s eksperimentom postići uz najmanju debljinu rubnih zona. S druge strane kod manjeg opterećenja, kod kojeg je izgaranje nepotpuno, promjena emisija ima drugačiji karakter. Povećanjem debljine rubne zone δ_{RZ} emisija CO₂ se smanjuje, dok se emisija CO i HC povećava. Pri tome je emisija CO₂ veća od eksperimentalne, emisija HC je manja, dok emisija CO u srednjem slučaju ($\delta_{RZ} = 1.2$ mm) upravo odgovara eksperimentalnoj. S obzirom na različiti karakter ponašanja emisija pri promjeni debljine rubnih zona, te pri promjeni vremenske konstante Δt , kod manjeg opterećenja, može se očekivati da će se s njihovom drugačijom kombinacijom postići još bolje podudaranje rezultata proračuna s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja.

Tablica 3.7. Analiza promjene emisije pri promjeni debljine rubne zone δ_{RZ} .

Radna točka	Debljina rubne zone δ_{RZ}	CO₂	CO	HC
		%	%	%
$\phi=0,26$ ($\lambda=3,8$).	0,9 mm	96,92	1,21	1,87
	1,2 mm	97,08	1,17	1,74
	1,5 mm	97,22	1,13	1,65
	Eksperiment	94,78	1,42	3,80
$\phi=0,14$ ($\lambda=7,1$).	0,9 mm	40,96	51,97	7,08
	1,2 mm	37,40	55,29	7,30
	1,5 mm	35,01	57,32	7,68
	Eksperiment	32,47	54,98	12,56

Na slikama 3.28. i 3.29. detaljnije je prikazana promjena masenih udjela HC i CO u različitim zonama, zajedno s promjenama masenih udjela ukupne mase u zonama, za sve tri debljine rubnih zona, izračunate pri većem opterećenju kod kojeg je $\phi = 0,26$.

Rezultati na slici 3.28. pokazuju da se s promjenom debljine rubnih zona u blizini GMT raspodjela masa u zonama bitno mijenja. U prvom slučaju uz najmanji δ_{RZ} masa u središnjim zonama veća je od mase u rubnim zonama za cijelo vrijeme trajanja ciklusa. U srednjem slučaju masa u središnjim zonama i dalje je kroz cijelo vrijeme trajanja proračuna veća od mase u



Slika 3.28. Rezultati mase HC u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti debljine rubne zone δ_{RZ} (0,9, 1,2, 1,5 mm) uz opterećenje kod kojeg je $\phi = 0,26$ ($\lambda=3,8$).

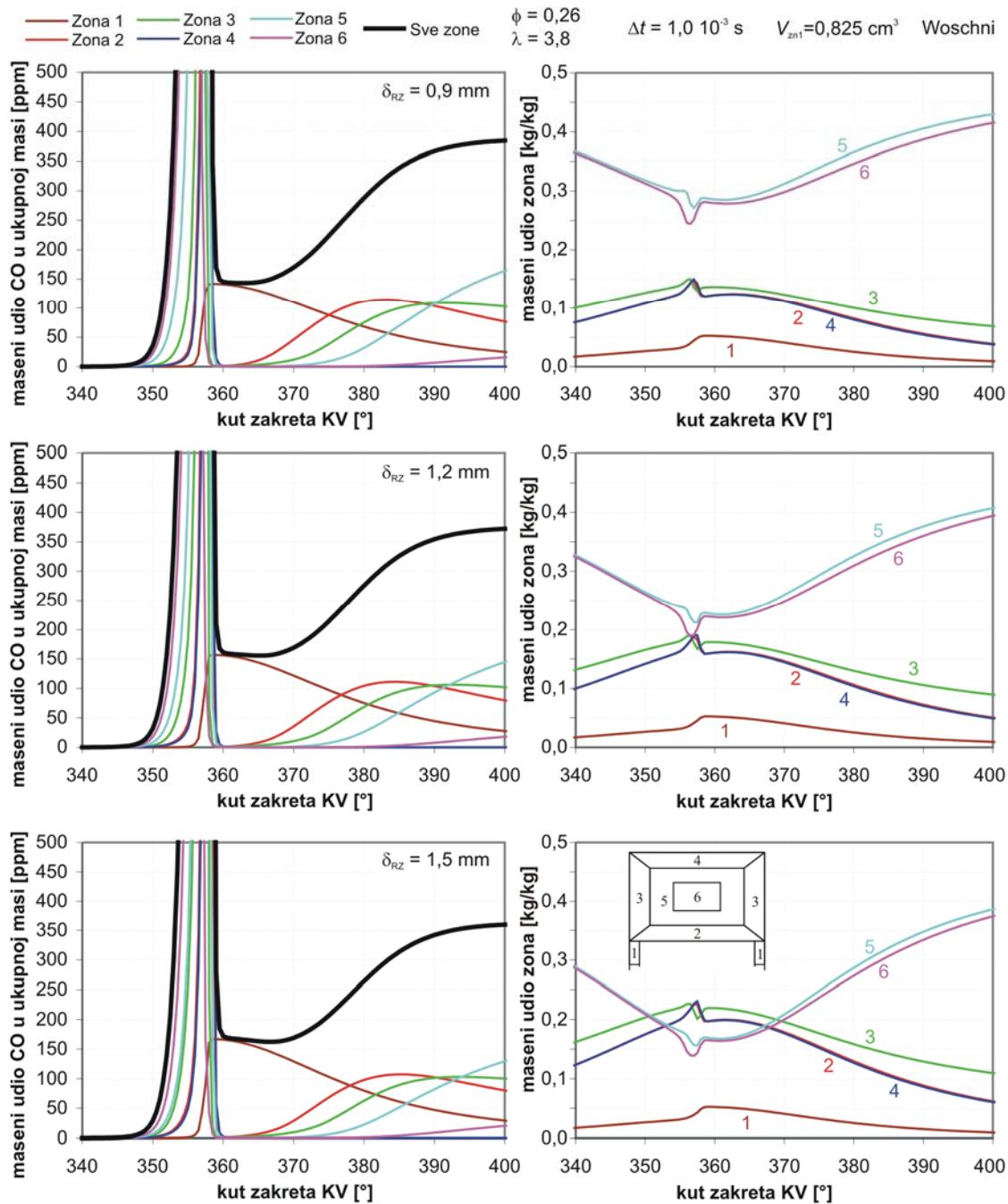
rubnim zonama, no ta razlika je manja, a osim toga u onim trenucima izgaranja kada zbog različitih trenutaka paljenja pojedinih zona dolazi do premještanja dijela mase prvo iz središnjih zona u rubne, a zatim natrag iz rubnih u središnje, u jednom trenutku masa u središnjim zonama gotovo je jednaka masi u rubnim zonama. Daljnjim povećanjem rubnih zona taj odnos se još više mijenja u korist rubnih zona, pa je stoga uz najveći δ_{RZ} , u

području oko GMT (350° – 370°), masa u rubnim zonama veća od mase u središnjim zonama.

Kao posljedica te razlike u masama javlja se razlika u temperaturama zona, posebno rubnih, koja je objašnjena ranije. Zbog različitih temperatura rubnih zona, uz različite debljine δ_{RZ} , različiti su i maseni udjeli neizgorjelih ugljikovodika HC i ugljikovog monoksida CO. Zbog toga se, za vrijeme izgaranja, kada tlak naglo raste i kada dio mase iz cilindra prelazi u zonu procjepa, pri većim vrijednostima debljine rubne zone δ_{RZ} u zonu procjepa ugura manja količina neizgorjelih ugljikovodika HC. S obzirom da je u području oko GMT masa HC u cilindru većim dijelom sadržana u zoni procjepa, uz veću količinu HC u toj zoni veća je i ukupna masa HC. Tijekom ekspanzije HC iz zone procjepa izlazi prvo u rubne zone uz klip i cilindar, a zatim u ostale zone. Uz veći δ_{RZ} temperatura u tim zonama je za vrijeme ekspanzije veća, pa se usporavanje pretvorbe HC počinje dešavati kasnije. Prema tome, pored toga što je količina HC u rubnoj zoni prije ekspanzije bila manja, još će se k tome i dulje odvijati pretvorba HC. Zbog toga je ukupna količina HC u cilindru u periodu kada se reakcije pretvaranja HC zaustavljuju, što se na spomenutim dijagramima manifestira kao zaustavljanje promjene ukupnog masenog udjela HC svih zona (debela crna linija), uz veću debljinu rubnih zona manja.

Pogledom na detaljne rezultate emisije CO (slika 3.29.) vidi se da je u području oko GMT masa CO u zoni procjepa (1) uz veći δ_{RZ} veća. S obzirom da je ranije zaključeno da se u zonama iz kojih se zona procjepa puni (2 i 3), u početku porasta tlaka uz veći δ_{RZ} nalazi manja koncentracija HC, to znači da se veći dio pretvorio u CO, pa je stoga i koncentracija CO uz veći δ_{RZ} u zoni procjepa veća. No bez obzira na to tijekom ekspanzije ta koncentracija se mijenja i na kraju, nakon završetka kemijskih pretvorbi uz veći δ_{RZ} u cilindru se nalazi manja koncentracija CO. Na slici 3.29. vidi se da je faza stagnacije ukupne količine CO nakon GMT uz veći δ_{RZ} dulja. Čak štoviše uz najveći δ_{RZ} u početnoj fazi ekspanzije ukupna količina CO se još malo snižava. S obzirom da tijekom ekspanzije iz zone procjepa s masom plinova izlaze i CO i HC, ako ukupna masa CO stagnira to znači da je pretvorba CO u CO_2 jednaka pretvorbi HC u CO, a ako se ona još i snižava znači da je u tim trenucima pretvaranje CO u CO_2 intenzivnije od njegovog stvaranja iz HC. Intenzivnija pretvorba CO u CO_2 , u slučajevima s većim δ_{RZ} posljedica je viših temperatura u rubnim zonama, posebno zona 2 i 3 u koje HC i CO iz zone procjepa prvo ulaze. Prema tome bez obzira što je ukupna koncentracija CO u cilindru oko GMT uz veći δ_{RZ} veća, već oko 370° ona se za sve vrijednosti izjednačava δ_{RZ} , a daljnjim napredovanjem ekspanzije intenzivnija pretvorba CO u rubnim zonama uz veći δ_{RZ} , dovodi do njene manje ukupne konačne vrijednosti. To se dobro vidi ako se pogledaju rezultati oko 400° kod kojih se ukupna koncentracija CO gotovo stabilizirala. Ukupni udio CO koji se nalazi u zonama 2 i 3 u tom trenutku gotovo da je

isti u sva tri slučaja, pri čemu je masa u zonama 2 i 3 uz veći δ_{RZ} veća. Prema tome uz veću masu ukupni CO je isti, što znači da je koncentracija u tim zonama manja.



Slika 3.29. Rezultati mase CO u pojedinim zonama (lijevo), te promjene ukupne mase u zonama (desno), izračunati šestzonskim proračunom za tri različite vrijednosti debljine rubne zone δ_{RZ} (0,9, 1,2, 1,5 mm), uz opterećenje kod kojeg je $\phi = 0,26$ ($\lambda = 3,8$).

Zaključak

Debljina rubne zone dakle gotovo da nema utjecaja na duljinu izgaranja i ima vrlo mali utjecaj na početak izgaranja. Sami oblik krivulje brzine oslobađanja topline, kao posljedica različitih temperatura u zonama, malo se mijenja posebno kod radnih točaka kod kojih se postiže izrazitija nepotpunost izgaranja. No, utjecaj debljine rubne zone na ukupnu brzinu oslobađanja topline mnogo je manji nego što je to bio utjecaj vrijednosti vremenske konstante izmjene topline. S druge strane, kao što je pokazano, debljina rubne zone značajno utječe na izračunate emisije i taj utjecaj je posebno važan. Promjenama debljine rubne zone mijenjaju se utjecaji stijenki na temperature u rubnim zonama, a kao posljedica toga i stupnjevi nepotpunitosti izgaranja u njima. Pri tome se različite značajke dobiju kod radnih točaka s gotovo potpunim izgaranjem i kod radnih točaka s nepotpunim izgaranjem. Kod potpunijeg izgaranja povećanjem debljine rubnih zona utjecaj stijenki na njih se smanjuje, pa se i emisija koja se u njima stvara sve manje može izračunati. Prema tome u tim radnim točkama smanjenjem debljine rubnih zona stanje u njima približava se realnom stanju. No, s obzirom na relativno mali broj zona, to smanjenje ne smije biti preveliko (debljina rubnih zona ne smije biti premala) jer će u protivnom preostale dvije zone izrazito dominirati u masi. Kod manjeg opterećenja s obzirom na premještanje izvora emisija mijenja se karakteristika proračuna, pa se s nešto većom debljinom rubne zone u ovako gruboj diskretizaciji, mogu postići bolji rezultati izračuna emisije. No isto kao i kod vremenske konstante, tako se i kod debljine rubnih zona uz red njezine veličine od 1 mm i bez posebnog podešavanja mogu dobiti dosta kvalitetni rezultati.

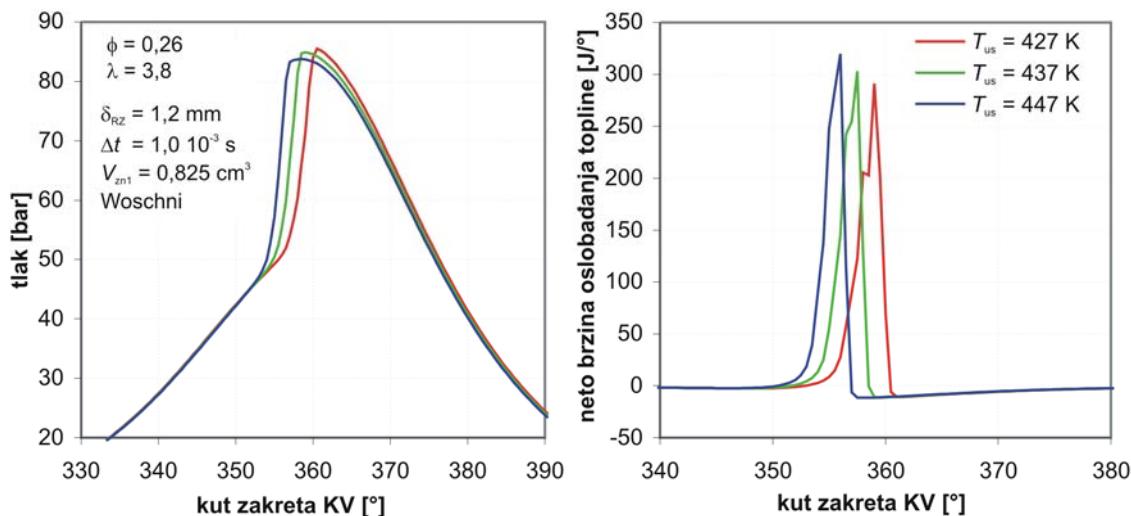
3.4.5. Utjecaj temperature usisa

Iz eksperimentalnih istraživanja poznato je da se povećanjem temperature usisa u HCCI motoru početak izgaranja pomiče prema unaprijed. Upravo na tome se zasnivaju neke od strategija upravljanja točkom paljenja kod kojih bi se na neki način vrlo brzo mijenjala ta temperatura i na taj način pomicala točku paljenja. Pored toga kod usporedbe rezultata simulacija s eksperimentalnim rezultatima bitno je podesiti rubne uvjete tako da oni odgovaraju onima pri izvođenju eksperimenta. Kod konkretnih simulacija HCCI motora, rubni uvjeti u cilindru su npr. temperature njegovih stijenki, promjeri ventila, itd., a temperatura usisa rubni je uvjet cijelog modela motora. Kod proračuna visokotlačnog procesa HCCI motora vrlo je važno s kojim početnim uvjetima se proračun pokreće, pri čemu će početni uvjeti visokotlačnog procesa ovisiti o proračunu elemenata usisa i ispuha, te o rubnim uvjetima modela motora. Prema tome, ako se želi analizirati učinkovitost proračuna samo visokotlačnog procesa, pored rubnih uvjeta cilindra, potrebno je da početni uvjeti isto tako budu dobro predviđeni. Tlak u cilindru na početku kompresije poznat je iz rezultata eksperimentalnih

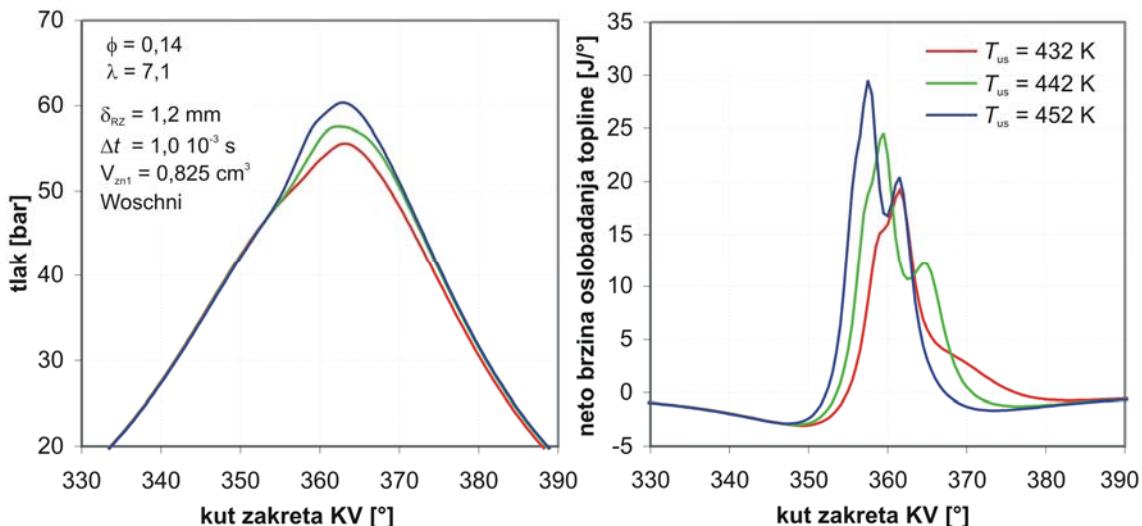
ispitivanja, pa se eventualne pogreške u proračunu za vrijeme izmjene radnog medija mogu korigirati malim promjenama usisnih rubnih uvjeta. No, kako temperatura u cilindru za vrijeme eksperimentalnih ispitivanja nije mjerena, a osim toga temperatura u cilindru bi dosta ovisila o položaju mjernog mesta, temperatura usisnog rubnog uvjeta malo je korigirana s obzirom na efekt koji će ona postići, tj. s obzirom na početak izgaranja koji je poznat iz rezultata brzine oslobođanja topline.

Zbog svega toga prije nego što se naprave proračuni kroz cijelo područje opterećenja prikazano eksperimentalnim rezultatima, analizirat će se utjecaj temperature rubnog uvjeta na usisu na rezultate tlaka i brzine oslobođanja topline. Za potrebe te analize napravljeni su proračuni s tri različite temperature usisnog rubnog uvjeta, razmaknute za 10 K, za oba prethodno razmatrana slučaja opterećenja ($\phi = 0,26$ i $\phi = 0,14$). Na slikama 3.30. i 3.31. prikazani su spomenuti rezultati ovih proračuna.

U oba slučaja opterećenja povećanje temperature usisa dovodi do povećanja početne temperature u cilindru u trenutku UVZ, pa samim time dovodi do ranijeg početka izgaranja. U slučaju s većim opterećenjem pomak izgaranja može se i kvantitativno odrediti s obzirom da je nagib krivulje brzine oslobođanja topline ostao isti. Prema tome može se vidjeti da je promjena temperature od 10 K dovela do pomaka izgaranja za $1,5^\circ$. Taj pomak izgaranja s jedne strane doveo je do pomaka krivulje tlaka, ali je pored toga doveo i do promjene najvećeg izračunatog tlaka u cilindru. Najveća vrijednost brzine oslobođanja topline kod kasnijeg izgaranja nešto je manja, što je posljedica malo kasnijeg izgaranja u rubnim zonama, koje se odvija oko GMT uz usporenu promjenu volumena. Isto tako vidi se da



Slika 3.30. Rezultati toka tlaka i neto brzine oslobođanja topline izračunati šestzonskim proračunom uz tri različite temperature usisa, pri opterećenju kod kojeg je $\phi = 0,26$ ($\lambda = 3,8$), uz konstante proračuna: $\delta_{RZ} = 1,2$ mm, $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3}$ s.



Slika 3.31. Rezultati toka tlaka i neto brzine oslobođanja topline izračunati šestzonskim proračunom uz tri različite temperature usisa, pri opterećenju kod kojeg je $\phi = 0,14$ ($\lambda = 7,1$), uz konstante proračuna: $\delta_{RZ} = 1,2 \text{ mm}$, $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.

zbog kasnijeg izgaranja krivulja oslobođanja topline ima mali lom zbog diskontinuiranog dovodenja topline u različitim zonama.

Kod manjeg opterećenja (slika 3.31.) promjena temperature usisa isto tako dovodi do promjene početka izgaranja, no osim početka izgaranja promijenjen je i nagib krivulje brzine oslobođanja topline. Zbog toga se ne može kvantitativno odrediti za koliko je izgaranje pomaknuto, no vidi se isto tako da je i ukupna količina oslobođene topline promijenjena. Rezultati učinkovitosti izgaranja pokazuju da se ona pri promjeni temperaturne usisa između krajnijih vrijednosti mijenja od $\eta_c = 56,1\%$ do $\eta_c = 75\%$, pri čemu se veća vrijednost postiže uz veći T_{us} . U ovim graničnim slučajevima opterećenja izgaranje je očito vrlo osjetljivo na početnu temperaturu, a isto tako osjetljivo je na sam početak izgaranja. Raniji početak izgaranja dovodi do izgaranja uz relativno veliku brzinu smanjenja volumena što opet dovodi do većih temperatura, a samim time i do potpunijeg izgaranja. To uzrokuje dosta veliku promjenu u krivulji toka tlaka koja osim što se ranije počinje odmicati od krivulje gonjenog motora, ima i dosta veću vršnu vrijednost. Dakle kod proračuna radnih točaka HCCI izgaranja sa smanjenim opterećenjem, kod kojeg je smanjena vrijednost učinkovitosti izgaranja, temperatura usisa imati će vrlo veliki utjecaj na rezultate.

3.4.6. Rezultati cijelog područja rada

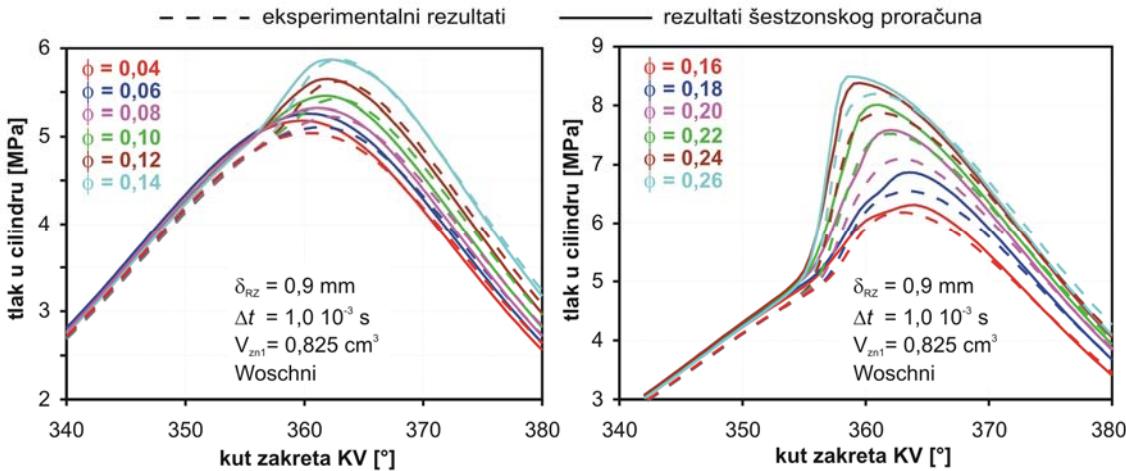
Iz provedenih analiza može se zaključiti da se promjenom proračunskih konstanti proračun svake radne točke može malo modificirati i na taj način približiti rezultatima eksperimentalnih ispitivanja. No, kako je konačni cilj svakog proračunskog modela da se uz što manje podešavanja dobiju rezultati koji vjerno opisuju događanja u motoru, na temelju prikazanih

rezultata dviju radnih točaka odabrana je jedna kombinacija proračunskih konstanti s kojima su napravljeni proračuni svih radnih točaka. Na taj se način želi vidjeti kako prikazani proračunski model predviđa izgaranje u ostalim radnim točkama, bez posebnog podešavanja proračunskih konstanti. U ovim proračunima odabrana je najmanja promatrana vrijednost debljine rubnih zona $\delta_{RZ} = 0,9 \text{ mm}$, te srednja vrijednost vremenske konstante izmjene topline $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$. Zbog problema određivanja temperature na početku visokotlačnog procesa, opisanog u prethodnoj točki, temperatura rubnog uvjeta podešena je za svaku radnu točku posebno, a s obzirom na eksperimentalno određeni početak oslobađanja topline. Rezultati ovih proračuna uspoređeni su s rezultatima jednozonskih proračuna, te s eksperimentalnim rezultatima, a prikazani su na slikama 3.32 – 3.37.

Na slici 3.32. prikazani su rezultati promjene tlaka u ovisnosti o kutu zakreta koljenastog vratila. Na dijagramu lijevo nalaze se radne točke s manjim opterećenjem ($\phi = 0,04, \dots, 0,14$), dok se na dijagramu desno nalaze radne točke s većim ($\phi = 0,16, \dots, 0,26$). Zbog boljeg pregleda, rezultati jednozonskih proračuna su u ovom i u prikazu na slijedećoj slici ispušteni. No ti rezultati pokazuju iste karakteristike kao i jednozonski proračuni prikazani na slikama 3.13 i 3.19.

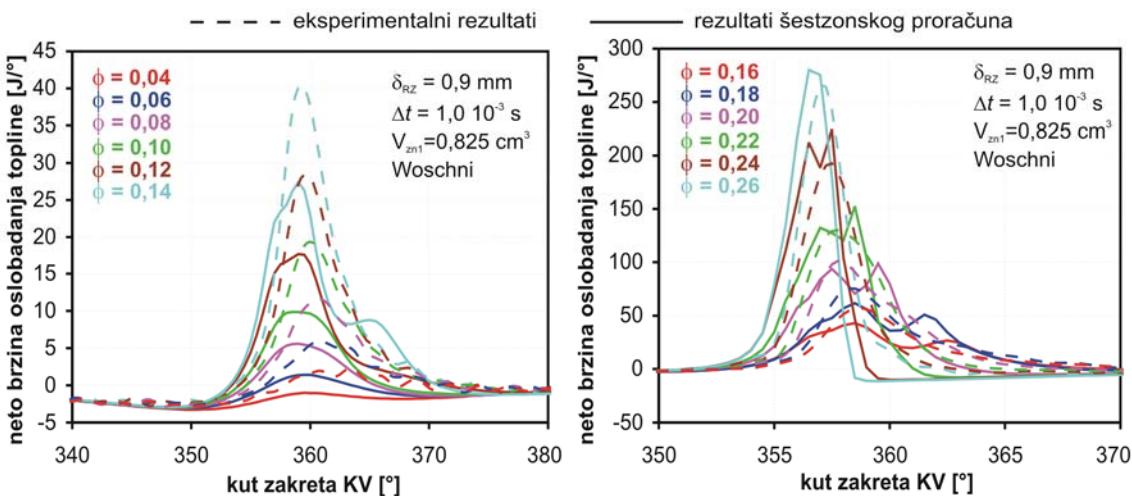
Tok tlaka za vrijeme kompresije, prije izgaranja, kod svih proračuna malo je veći od eksperimentalnog, pri čemu se odmak od eksperimentalne krivulje približavanjem GMT sve više povećava. Ista značajka uočena je i kod jednozonskog proračuna, s time da je tamo taj odmak još veći. Kako u tom periodu još ne dolazi do izgaranja, razlog za to može biti sama priroda višezonskih proračuna, kod koje temperaturna distribucija nije kontinuirana, već je dosta grubo diskretizirana. Osim toga nesigurnost rubnih uvjeta temperatura stijenki, točnost korelacija za izračunavanje izmjene topline, a i nesigurnost kod određivanja veličine zone procjepa i točnog kompresijskog omjera mogući su uzroci ovog odstupanja.

Za vrijeme izgaranja, izračunate krivulje toka tlaka imaju dosta dobar nagib, pri čemu se u radnim točkama s visokim opterećenjem još uvijek postiže prebacivanje vrijednosti najvećeg tlaka, no to prebacivanje je mnogo manje nego što je to kod jednozonskog proračuna. Smanjenjem opterećenja smanjuje se i to prebacivanje, pa je u radnim točkama s manjim opterećenjem vrijednost najvećeg izračunatog tlaka gotovo jednaka eksperimentalnoj vrijednosti. Malo prebacivanje najvećeg tlaka ponovno se javlja u točkama s najmanjim opterećenjem ($\phi = 0,04$ i $0,06$), no u tim točkama je izgaranje toliko slabo da je to prekoračenje posljedica većeg tlaka za vrijeme kompresije.



Slika 3.32. Rezultati tlaka šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0,26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9 \text{ mm}$ i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.

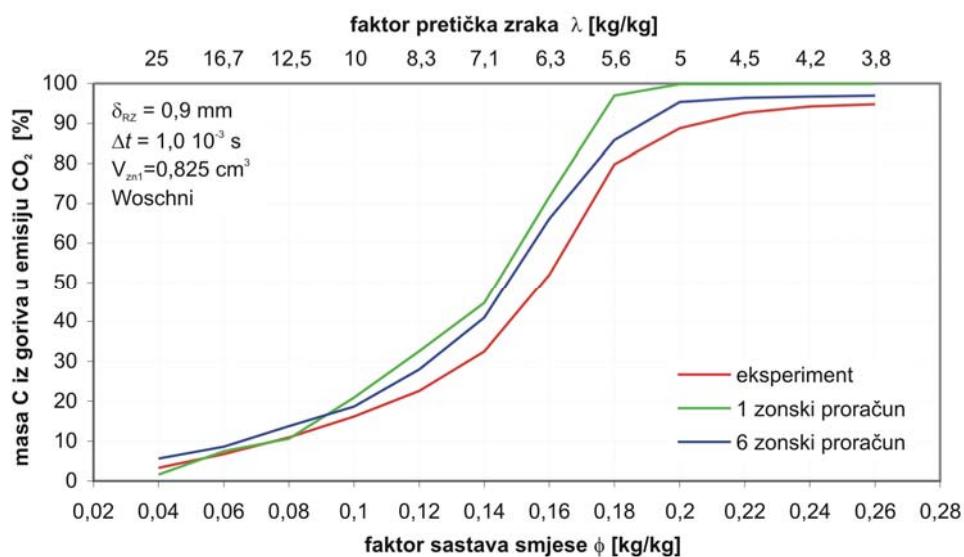
Na slici 3.33. prikazani su rezultati neto brzine oslobođanja topline. U radnim točkama s većim opterećenjem simulacijski model ($\phi=0,16, \dots, 0,26$) dobro predviđa brzinu oslobođanja topline. U nekim slučajevima krivulja ima oštре promjene smjera, no to je zbog toga što je podjela prostora na šest zona još uvijek dosta gruba, pa pri izgaranju svake zone dolazi do naglike promjene smjera krivulje oslobođanja topline. Kod jednozonorskog proračuna uz veće opterećenje, najveća vrijednost izračunate brzine oslobođanja topline mnogo je veća od eksperimentalne, pa u tom smislu šestzonski proračun predstavlja dobar napredak. Kod manjeg opterećenja najveća izračunata neto brzina oslobođanja topline manja je od eksperimentalne, no kao što ćemo vidjeti iz rezultata učinkovitosti izgaranja to ne znači da je



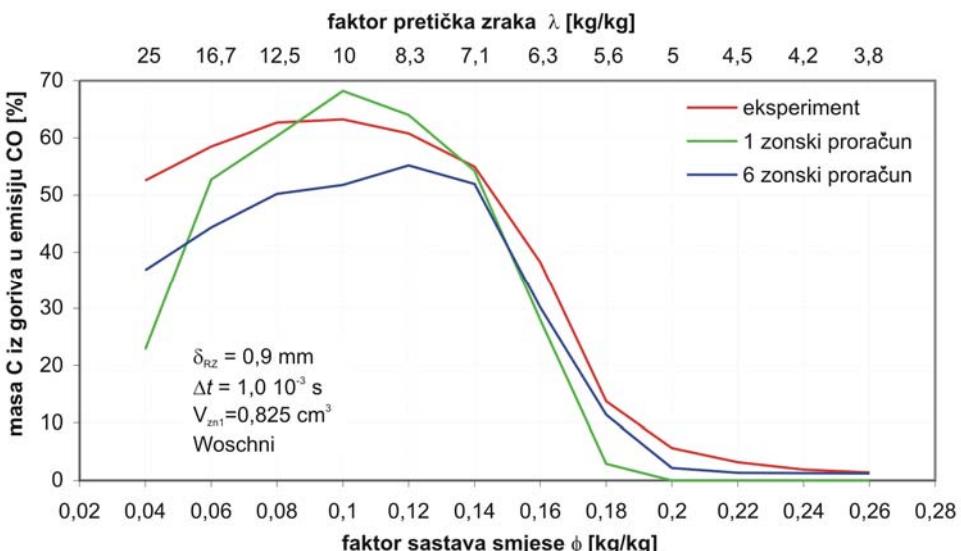
Slika 3.33. Rezultati nete brzine oslobođanja topline šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0,26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ}=0,9 \text{ mm}$ i $\Delta t=1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.

dovedena toplina značajno smanjena. Treba imati na umu da prikazane krivulje pokazuju neto brzinu oslobođanja topline, koja u sebi sadrži i izmjenu topline s okolišom. Prema tome ukoliko proračunski model precjenjuje izmjenu topline za vrijeme izgaranja, što je upotreborom Woschnijevog modela prema nekim izvorima moguće [95], tada ta precijenjena izmjena topline utječe na smanjenje neto brzine oslobođanja topline. Kod izgaranja s većom količinom goriva brzina oslobođanja topline je dosta velika pa je taj utjecaj manjeg značaja, no kod manjih vrijednosti brzine oslobođanja topline koje se ostvaruju uz manju količinu goriva utjecaj precjenjivanja izmjene topline može biti značajan.

Na slici 3.34. prikazani su rezultati emisije ugljikovog dioksida (CO_2) izračunate jednozonskim i šestzonskim proračunom, te su uspoređene s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja. Rezultati šestzonskog proračuna za područje opterećenja $\phi=0,10, \dots, 0,26$ smješteni su između rezultata jednozonskog proračuna i eksperimentalnih podataka. To znači da u tom području opterećenja šestzonski proračun, iako još uvijek odstupa od eksperimentalnih rezultata, bolje predviđa ovu emisiju od jednozonskog proračuna. Posebno je važno područje opterećenja od $\phi=0,2, \dots, 0,26$. To je područje u kojem izgaranje postiže visoki stupanj potpunosti, pa se zbog toga može očekivati da bi stvarni motor mogao raditi u tom području rada. U tim radnim točkama jednozonski proračun predviđa gotovo stopostotno izgaranje, pa prema tome nema mogućnost predviđanja zaostalih produkata. Šestzonski proračun u ovim području opterećenja izračunava nepotpuno izgaranje, što se na slici 3.34. manifestira pretvorbom C u CO_2 manjom od 100%. Stoga se može očekivati da će šestzonski proračun u tim radnim točkama biti u mogućnosti u određenoj mjeri predvidjeti i ostale emisije.



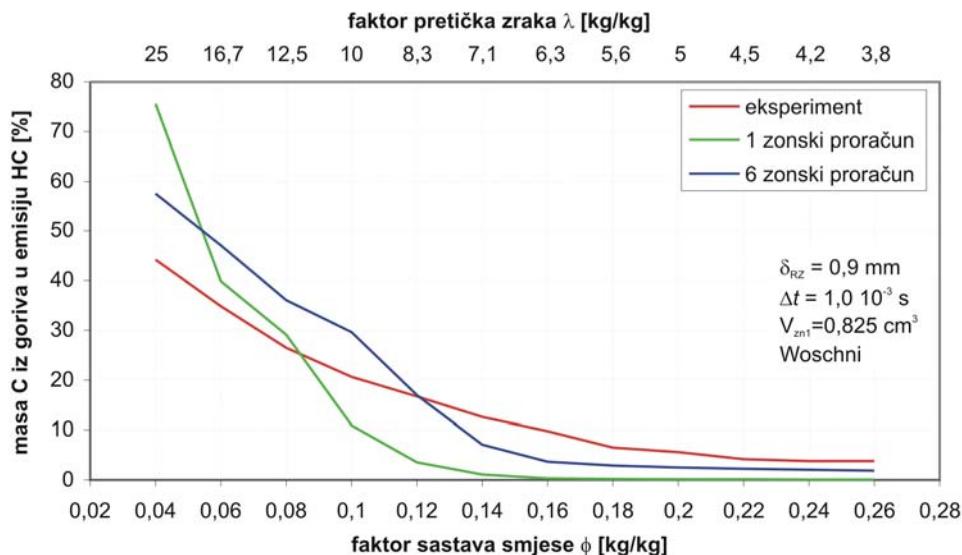
Slika 3.34. Rezultati emisije CO_2 jednozonskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0,26$, uz proračunske konstante: $\delta_{\text{RZ}} = 0,9 \text{ mm}$ i $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.



Slika 3.35. Rezultati emisije CO jednozonorskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0.26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ} = 0,9 \text{ mm}$ i $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.

To se za slučaj emisije CO može vidjeti na slici 3.35. gdje jednozoniski proračun u području s velikim opterećenjem ne predviđa nikakvu emisiju, dok šestzonski proračun predviđa određenu emisiju koja više ili manje odgovara eksperimentalnoj. Posebno dobro predviđanje postiže se u radnim točkama s najvećim opterećenjem ($\phi=0,24$ i 0.26). U radnim točkama s manjom količinom goriva ($\phi < 0,2$) i jednozoniski proračun počinje računati određenu emisiju, a to je posljedica činjenice da se uz tako smanjenu količinu goriva, nepotpuno izgaranje počinje dešavati u gotovo cijelom prostoru izgaranja. No i u tim uvjetima šestzonski proračun bolje predviđa emisiju CO sve do opterećenja $\phi=0,14$. U radnim točkama s $\phi < 0,14$ šestzonski proračun predviđa premalu emisiju CO, a obzirom da je u istom tom području emisija CO_2 vrlo blizu eksperimentalne može se zaključiti da je smanjena emisija CO rezultat smanjene pretvorbe HC u CO. To se može provjeriti na slici 3.36. koja prikazuje usporedne emisije HC. Kod emisije HC u točki $\phi=0,12$ dolazi do promjene karakteristike izračunate emisije. Uz $\phi > 0,12$ emisija izračunata šestzonskim proračunom malo je manja od eksperimentalne, no uz $\phi < 0,12$ ona postaje veća. To potvrđuje činjenicu da u tim radnim točkama s vrlo malom količinom goriva veći dio plinova ostaje u obliku HC i ne pretvori se u CO, u usporedbi s eksperimentalnim podacima. No kao i kod prethodnih rezultata uz veće količine goriva $\phi > 0,12$ šestzonski proračun bolje predviđa emisiju HC od jednozonorskog, pri čemu je važno primijetiti da je emisija izračunata jednozoniskim proračunom jednaka nuli već od $\phi=0,16$.

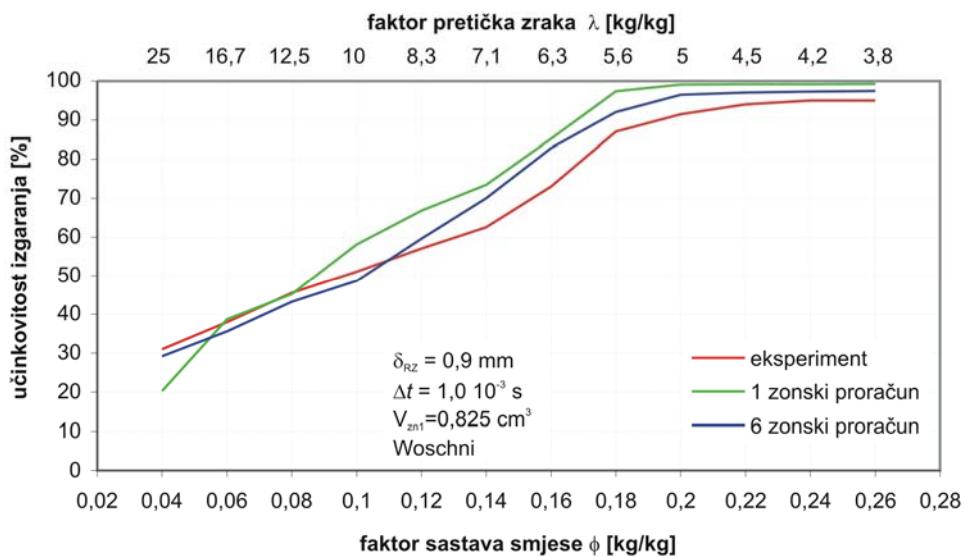
Na kraju mogu se pogledati još i rezultati učinkovitosti izgaranja (slika 3.37.) koji pokazuju da šestzonski proračun u cijelom području rada, izuzev dvije



Slika 3.36. Rezultati emisije HC jednozonskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi = 0,04, \dots, 0,26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ} = 0,9 \text{ mm}$ i $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.

radne točke ($\phi=0,06$ i $0,08$), bolje predviđa ovu učinkovitost od jednozonskog proračuna. Isto tako može se zamijetiti promjena karakteristike u području oko $\phi=0,12$, pri čemu je uz veće vrijednosti ϕ izračunata učinkovitost veća, dok je kod manjih vrijednosti ona nešto manja. Sve to navodi na zaključak da proračunske konstante (Δt i δ_{RZ}) koje odgovaraju radnim točkama s većim opterećenjem možda ne odgovaraju onima s manjim i obrnuto.

Bez obzira na to pregled rezultata za cijelo područje rada HCCI motora dobivenih s istim vrijednostima proračunskih konstanti pokazao je da se i



Slika 3.37. Rezultati učinkovosti izgaranja jednozonskog proračuna, šestzonskog proračuna i eksperimentalnih ispitivanja za radne točke s $\phi=0,04, \dots, 0,26$, uz proračunske konstante: $\delta_{RZ} = 0,9 \text{ mm}$ i $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$.

bez posebnog podešavanja tih konstanti za svaku radnu točku mogu postići vrlo dobra predviđanja promjene tlaka i brzine oslobađanja topline, kao i dosta poboljšana predviđanja emisija CO i HC. Trendovi promjena emisija s promjenom opterećenja isto su tako vrlo dobro uhvaćeni, pa su tako dobro predviđeni porasti emisija CO i HC pri smanjenju opterećenja. U usporedbi s jednozonskim proračunom brzine oslobađanja topline bolje su predviđene u svim radnim točkama pri čemu je kod radnih točaka s većim udjelom goriva izračunato izgaranje uslijed slojevitosti ublaženo, dok je kod radnih točaka s izrazito malim udjelom goriva upravo zbog te slojevitosti ono pojačano. Prema tome razvijeni model može se koristiti za simulaciju općih termodinamičkih značajki motora (tlak, temperatura, brzina oslobađanja topline, itd.), ali i za dublji pogled na zbivanja u cilindru koja dovode do takvih značajki, te njihovih posljedica u vidu emisija štetnih produkata izgaranja.

4. ANALIZA UTJECAJA PROPUHIVANJA, ZONA I IZMJENE TOPLINE

Usporedba rezultata proračuna s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja, prikazana u trećem poglavlju, pokazala je da se postiže dosta dobro predviđanje promjene tlaka u cilindru, no isto je tako pokazala da postoji određeno odstupanje koje u svim proračunima ima istu značajku. Promatrajući promjenu tlaka za vrijeme kompresije u svim razmatrаниm slučajevima vidi se da s napredovanjem kompresije izračunati tlak postaje veći od izmjerena, pri čemu se taj odmak s približavanjem prema GMT sve više povećava. Prema tome, izračunati tlak na početku izgaranja malo je veći od izmjerena, pa se dio prebacivanja najvećeg izračunatog tlaka tijekom izgaranja može objasniti upravo činjenicom da je vrijednost na početku izgaranja bila veća. S druge strane, za vrijeme ekspanzije nagib izračunate krivulje tlaka veći je od eksperimentalno određene, pa stoga nakon nekog vremena izračunati tlak postaje manji. Pri tome treba napomenuti da su ova odstupanja izraženija u dijelovima ciklusa u kojima je klip bliži GMT, dok je u dijelovima ciklusa kada je klip bliže DMT podudaranje gotovo potpuno.

Više je mogućih razloga za ovo odstupanje, kao npr. propuhivanje pored klipa, koje ovim proračunima nije obuhvaćeno, premali broj zona, nepreciznost kod eksperimentalnog određivanja stupnja kompresije, nepreciznost kod određivanja rubnih uvjeta, prepostavke kod korelacija za izračunavanja izmjene topline itd. Kako bi se ocijenila veličina nekih od ovih utjecaja, u nastavku su analizirani njihovi učinci na rezultate. Pritom je analiziran utjecaj propuhivanja pored klipa, broja zona, te korelacija za izmjenu topline, a da bi se smanjila eventualna odstupanja koja dolaze kao posljedica kemijskih procesa, razmatran je slučaj tzv. gonjenog motora kod kojeg se u cilindru nalazi čisti zrak. U takvom stanju motor se izvana pogoni jer sam po sebi ne proizvodi nikakav rad. U nastavku su još analizirani učinci primjene različitih korelacija za izmjenu topline u tri radne točke s različitim stupnjem opterećenja.

4.1. Gonjen motor

4.1.1. Propuhivanje pored klipa

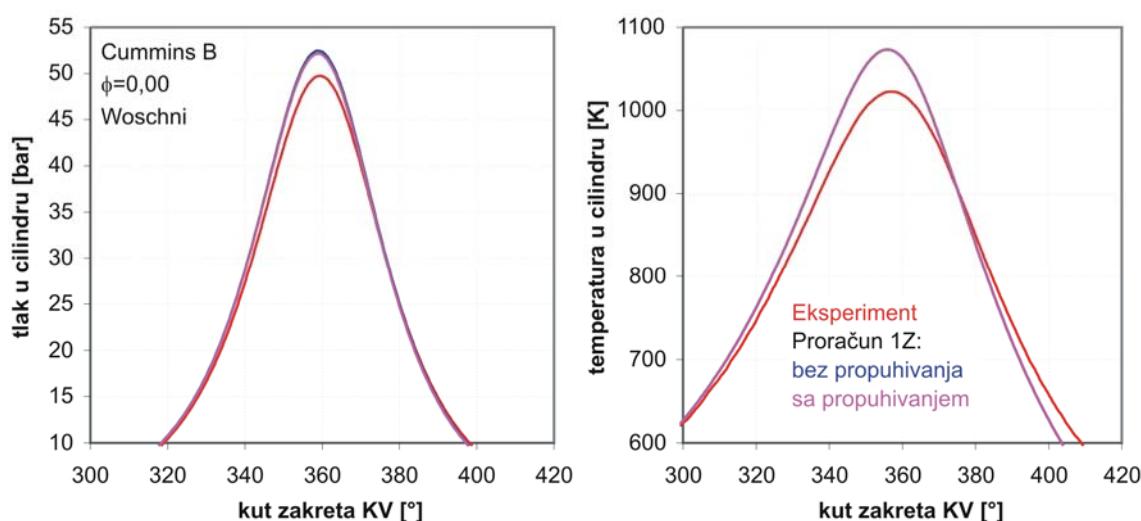
Za vrijeme rada motora, uslijed visokog tlaka iznad klipa i relativno niskog tlaka ispod klipa, mala količina plinova iz prostora iznad klipa prođe pored klipa i klipnih prstenova i uđe u prostor ispod klipa. Ta masa vrlo je mala i vrlo se često u proračunima zanemaruje, pa je tako u slučaju šestzonskog proračuna ona zanemarena, dok se kod jednozonskog proračuna ona može

relativno jednostavno izračunavati i može se analizirati njezin utjecaj na ukupni tlak u cilindru.

Da bi se analizirao koliki je taj utjecaj na razmatranom motoru, napravljeni su jednozonski proračuni gonjenog motora (motor bez goriva, $\phi=0.00$) s uključenim proračunom propuhivanja i bez njega. Pri tom su svi ostali rubni uvjeti ostali nepromijenjeni, a za izmjenu topline korištena je Woschnijeva korelacija. Eksperimentalno je određeno da količina plina koja je prošla pored klipa odgovara približno 1% mase zraka koja je za vrijeme izmjene radnog medija ušla u cilindar. U skladu s time efektivna širina procijepa potrebna za proračun strujanja pored klipa postavljena je na vrijednost s kojom se dobije upravo toliko propuhivanje.

Rezultati promjene tlaka i temperature, uspoređeni s rezultatima dobivenim iz eksperimentalnih ispitivanja prikazani su na slici 4.1. Izračunati tok tlaka u oba slučaja ponovno se u kasnijoj fazi kompresije odvaja od eksperimentalne krivulje, a razlika između ova dva proračuna zamjećuje se tek u području oko GMT ($355^\circ - 365^\circ$). Razlika između najvećeg izračunatog tlaka s propuhivanjem i bez njega vrlo je mala i iznosi oko 0.3 bara što predstavlja oko 0,6% od najvećeg izmjereno tlaka, tj. 10% od razlike između najvećeg izračunatog i najvećeg izmjereno tlaka. Tok temperature pokazuje da su razlike u izračunatim temperaturama neprimjetne, te da ovako malo propuhivanje pored klipa ne utječe na izračunatu srednju temperaturu u cilindru.

Prema tome moglo bi se zaključiti da je utjecaj propuhivanja pored klipa na promjenu tlaka zamjetan i da se njime može objasniti oko 10 % razlike između najvećeg izračunatog i izmjereno tlaka. No, s druge strane, to propuhivanje nema gotovo nikakvog utjecaja na temperaturu pa se niti jedan dio temperaturnih odstupanja ne može objasniti ovim utjecajem.



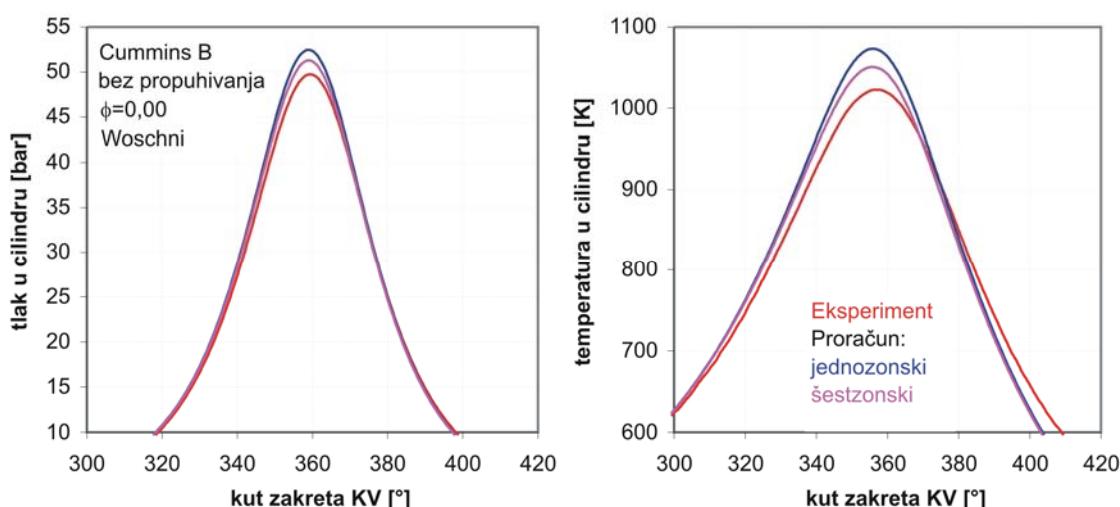
Slika 4.1. Rezultati promjene tlaka i temperature izračunati jednozonskim proračunom sa i bez uključenog propuhivanja pored klipa, te odgovarajući eksperimentalni rezultati; sve za slučaj gonjenog motora ($\phi=0,00$).

4.1.2. Podjela cilindra na više zona

U prethodnom poglavlju već je pokazano da je podjela prostora cilindra na više zona vrlo važna kod izračunavanja izgaranja HCCI motora. U ovoj točki promatraju se pojave u cilindru kod radne točke bez goriva, pa prema tome i bez izgaranja. Zanimljivo je vidjeti da li postoji utjecaj podjele prostora cilindra na rezultate takve radne točke, te ako postoji koliki je. Stoga je napravljen šestzonski proračun radne točke bez goriva, uz rubne uvjete koji odgovaraju jednozonskom proračunu iz prethodne točke. S obzirom da šestzonski proračun nema mogućnost izračunavanja propuhivanja pored klipa, a da bi se izolirao utjecaj podjele prostora cilindra na više zona, rezultati šestzonskog proračuna su uspoređeni s jednozonskim proračunom bez propuhivanja i prikazani na slici 4.2.

Promjena tlaka izračunata šestzonskim proračunom zamjetno počinje odmicati od jednozonskog već kod 340° KV, a do GMT ta razlika se sve više povećava. Nakon GMT tijekom ekspanzije ta razlika se smanjuje, a nakon 380° KV gotovo se više ne može niti zamijetiti. Razlika u najvećem izračunatom tlaku veća je nego što je to bila kod utjecaja propuhivanja, pa je šestzonskim proračunom izračunat najveći tlak koji je za $\sim 1,2$ bara manji od jednozonskog, što predstavlja 2,4% od najvećeg eksperimentalnog tlaka, tj. 43% od razlike između najvećeg tlaka izračunatog jednozonskim proračunom i eksperimentalno određenog.

Srednja temperatura izračunata šestzonskim proračunom isto se tako razlikuje od one izračunate jednozonskim proračunom, te je u području oko najvećih vrijednosti manja za ~ 24 K što predstavlja oko 46% od odstupanja najveće temperature iz jednozonskog proračuna od eksperimentalne. Srednje temperature izračunate s ova dva proračuna počinju se međusobno zamjetno razlikovati nešto prije nego što se zamjetno razlikuju tlakovi, a



Slika 4.2. Rezultati promjene tlaka i temperature izračunati jednozonskim i šestzonskim proračunom, te odgovarajući eksperimentalni rezultati; sve za slučaj gonjenog motora ($\phi=0,00$).

isto se tako mnogo kasnije ove dvije krivulje ponovno međusobno izjednače. Iz toga se može zaključiti da dijeljenje prostora na zone utječe prvenstveno na srednju temperaturu cilindra, koja kao posljedicu ima utjecaj na tlak.

Pored toga treba primijetiti da za vrijeme kompresije tlak izračunatih krivulja ima strmiji rast od eksperimentalnog, a u početnoj fazi ekspanzije te izračunate krivulje imaju i strmiji pad. Ta značajka još je izraženija kod rezultata temperature, pa je na kraju ekspanzije izračunata temperatura zamjetno manja od eksperimentalne. Povećanje broja zona ne mijenja značajno sliku temperature za vrijeme ekspanzije, pa se i sa šestzonskim proračunom dobije ista karakteristika. Pri tome treba imati na umu da je eksperimentalna temperatura izračunata iz krivulje promjene tlaka, uz poznavanje mase koja se u cilindru nalazi, pa se može smatrati da i eksperimentalna krivulja temperature ima određenu netočnost.

Na osnovu prikazanog može se zaključiti da dijeljenje cilindra na više zona ima vrlo značajan utjecaj na promjenu tlaka i temperature i bez prisutnosti izgaranja, posebnu o području oko GMT. Prelaskom na šest zona odstupanje najvećeg izračunatog tlaka smanjeno je za $\sim 43\%$, a približno toliko je smanjeno i odstupanje najveće izračunate srednje temperature. Prema tome dalnjim dijeljenjem prostora cilindra mogla bi se krivulja tlaka i temperature za vrijeme kompresije još više približiti eksperimentalnoj. S druge strane, povećanje broja zona nema značajni utjecaj na strmiji pad temperature za vrijeme ekspanzije, a kao posljedicu toga i strmiji pad tlaka, pa se objašnjenje za tu pojavu mora potražiti kod nekog drugog utjecajnog faktora.

4.1.3. Korelacije za koeficijent prijelaza topoline

Korelacijom za izračunavanje koeficijenta prijelaza topoline kod 0D proračuna, u koje spadaju i ovdje prikazani višezonski proračuni, izračunava se vrijednost koeficijenta konvektivnog prijelaza topoline u svakom položaju KV. Korelacije su dobivene teorijskom analizom, te prilagođavanjem određenih koeficijenata rezultatima eksperimentalnih ispitivanja izmjene topoline u motorima s unutarnjim izgaranjem.

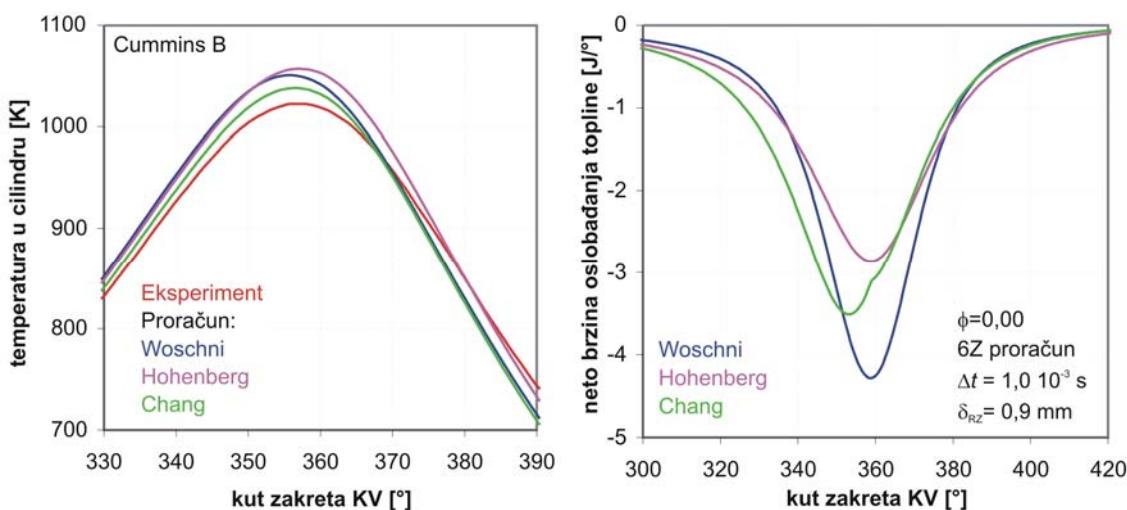
U trećem poglavlju (točka 2.4.2.) prikazane su tri korelacije za izmjenu topoline različitih autora (Woschni, Hohenberg, Chang), definirane pomoću različitih eksperimentalnih rezultata. Prve dvije korelacije dobivene su usporedbom s rezultatima konvencionalnih motora, dok je tek treća korelacija (Chang) dobivena analizom toplinskih tokova kod HCCI motora. U osnovi Woschnijeva korelacija predviđa nešto manji koeficijent prijelaza topoline za vrijeme kompresije i ekspanzije, dok za vrijeme izgaranja predviđa veći. Hohenbergova korelacija izračunava veći koeficijent prijelaza topoline za vrijeme kompresije i ekspanzije, u odnosu na Woschnijevu korelaciju, a u području oko GMT, a posebno kod intenzivnog izgaranja, taj koeficijent je dosta manji. Changova korelacija, koja je prilagođena

izgaranju u HCCI motoru, izračunava nešto veći koeficijent u odnosu na Hohenbergovu za cijelo vrijeme proračuna, ali je u području oko GMT i dalje taj koeficijent manji od Woschnijevog. Osim toga kod Changove korelacije postoji efekt povećanja izmjene topline uslijed pojave izgaranja, ali nešto manjeg intenziteta nego što je to kod Woschnija. Više o razlikama između korelacija može se pronaći u točki 2.4.2.

S obzirom na spomenute razlike, a i na činjenicu da je u dosadašnjim proračunima, u kojima je korištena Woschnijeva korelacija, zamijećen nagliji pad temperature tijekom ekspanzije, potrebno je analizirati utjecaj tih korelacija na rezultate tlaka, temperature itd. dobivene prikazanim šestzonskim proračunom HCCI motora. Ova analiza u prvoj fazi će se provesti za radnu točku bez goriva ($\phi=0,00$), a kasnije će se analizirati i utjecaj tih korelacija u radnim točkama s različitim stupnjevima opterećenja.

Za potrebe ove analize napravljeni su šestzonski proračuni uz primjenu druge dvije korelacije izmjene topline, bez promjene ostalih rubnih uvjeta i proračunskih konstanti. Neki rezultati ovih proračuna za radnu točku gonjenog motora prikazani su na slikama 4.3. i 4.4.

Na slici 4.3. prikazane su promjene temperature i neto brzine oslobađanja topline. S obzirom da se radi o radnoj točki bez goriva, oslobađanja topline zbog izgaranja goriva nema. No, već je ranije spomenuto da neto brzina oslobađanja topline u sebi sadrži izmjenu topline i gubitke zbog strujanja u procjep, pa ove krivulje u ovom slučaju mogu poslužiti kao procjena izračunate izmjene topline. Promjena temperature za vrijeme kompresije izračunata s Changovom korelacijom najniža je, a to je posljedica povećane izmjene topline u tom periodu. Isto tako za vrijeme kompresije može se vidjeti da Hohenbergova korelacija daje nižu temperaturu od Woschnijeve, no to se u području oko GMT mijenja kada Woschnijeva korelacija počinje

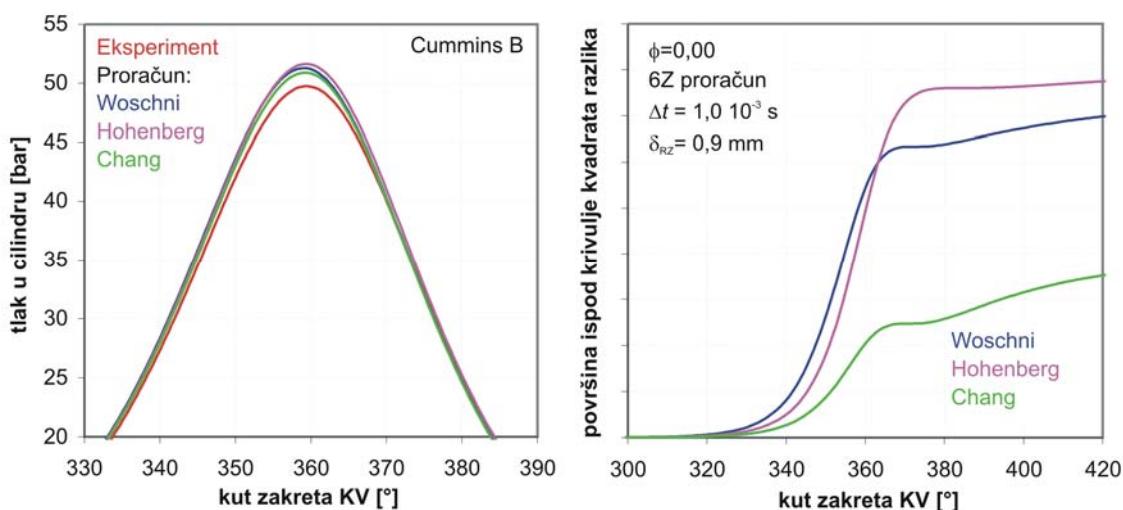


Slika 4.3. Međusobna usporedba promjene temperature i neto brzine oslobađanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije za izmjenu topline u radnoj točki bez goriva.

izračunavati povećanu izmjenu topline. Tada temperatura izračunata s Woschnijevom korelacijom naglje pada i vrlo brzo postaje gotovo jednaka onoj izračunatoj s Changovom korelacijom. Kod sve tri korelacije temperatura u području nakon GMT brže pada u odnosu na eksperimentalnu, no treba napomenuti da je taj pad kod Hohenbergove i Changove korelacije u početnoj fazi nešto manji.

Utjecaj ovih promjena izračunatih temperatura na promjenu izračunatog tlaka može se vidjeti na slici 4.4. Tlaka izračunat Changovom korelacijom za vrijeme kompresije manje odstupa od eksperimentalnog u odnosu na tlak izračunat s Hohenbergovom ili Woschnijevom korelacijom, a to se posebno manifestira u području oko GMT. U tom području Woschnijeva krivulja, zbog intenzivnijeg odvođenja topline, odvaja se od Hohenbergove i približava se Changovoj. Za vrijeme ekspanzije sve tri krivulje vrlo su blizu eksperimentalnoj, pri čemu su krivulje Woschnija i Changa malo niže od krivulje dobivene Hohenbergovom korelacijom.

S obzirom na to da su u različitim trenucima proračuna odstupanja od eksperimentalnog tlaka izračunata različitim korelacijama različita, za ukupnu ocjenu primjenjenih metoda upotrijebljen je matematički proračun kojim su razlike kumulativno kvantificiraju. Proračun se temelji na izračunavanju kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, te određivanja površine ispod krivulje tih kvadrata razlika. Veličina površine u nekom trenutku predstavlja veličinu kumulativnog odstupanja izračunate krivulje od eksperimentalne, od početka visokotlačnog procesa, i može se koristiti za ocjenu različitih proračuna. Prikaz promjena tih površina pri promjeni korelacija za izračunavanje izmjene topline, u radnoj točki bez goriva, prikazana je na slici 4.4. desno. Primjenom Changove korelacije



Slika 4.4. Promjena tlaka i kumulativni iznos veličine površine ispod krivulje kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije izmjene topline i radnu točku bez goriva.

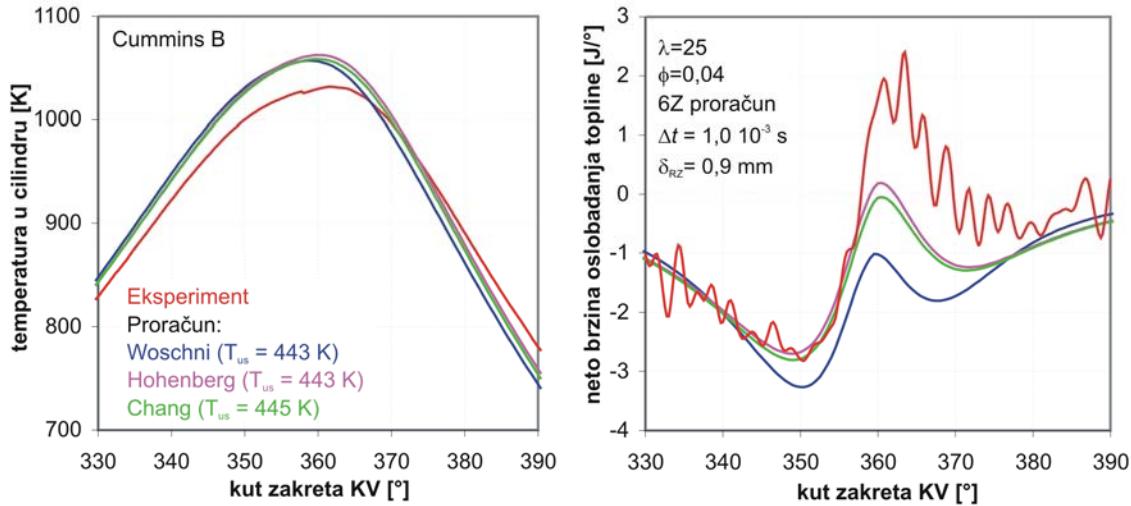
odstupanje izračunatog tlaka od eksperimentalnog, za vrijeme kompresije, dosta je smanjeno što se manifestira mnogo manjom vrijednosti površine u području oko GMT. Iako se površina dobivena iz tlaka izračunatog Changovom korelacijom tijekom ekspanzije malo povećava, ona je na kraju proračuna i dalje najmanja. To znači da je ukupno odstupanje izračunatog tlaka od eksperimentalnog, u radnoj točki bez goriva, najmanje pri upotrebi Changove korelacije.

4.2. Radne točke s gorivom

U točkama 4.1.1. i 4.1.2. pokazano je da podjela na zone i propuhivanje pored klipa imaju određeni utjecaj na rezultate gonjenog motora. Ranije u poglavljiju 3. prikazan je utjecaj podjele na zone na rezultate radnih točaka s većom ili manjom količinom goriva, pa je u ovoj točki analiziran utjecaj primjene različitih korelacija za izračunavanje izmjene topoline na rezultate radnih točaka s većom ili manjom količinom goriva. Pri tom su za analizu odabrane tri radne točke koje predstavljaju pojedine skupine opterećenja. Prva radna točka predstavlja opterećenje manje od praznog hoda i definirana je faktorom pretička zraka $\lambda=25$, tj. faktorom sastava smjese $\phi=0,04$. Kao predstavnik opterećenja praznog hoda odabrana je radna točka s faktorom pretička zraka $\lambda=7,1$, tj. faktorom sastava smjese $\phi=0,14$, a puno opterećenje predstavljeno je s $\lambda=3,8$, tj. $\phi=0,26$.

Za sve tri radne točke napravljeni su proračuni s Woschnijevom, Hohenbergovom i Changovom korelacijom, a rezultati su analizirani na isti način kao i kod radne točke bez goriva. Pri tome su u proračunima s različitim korelacijama malo mijenjani usisni rubni uvjeti kako bi se postigao približno isti trenutak paljenja u svim proračunima s istom količinom goriva, te na taj način pokušao izolirati utjecaj veličine izmjene topoline.

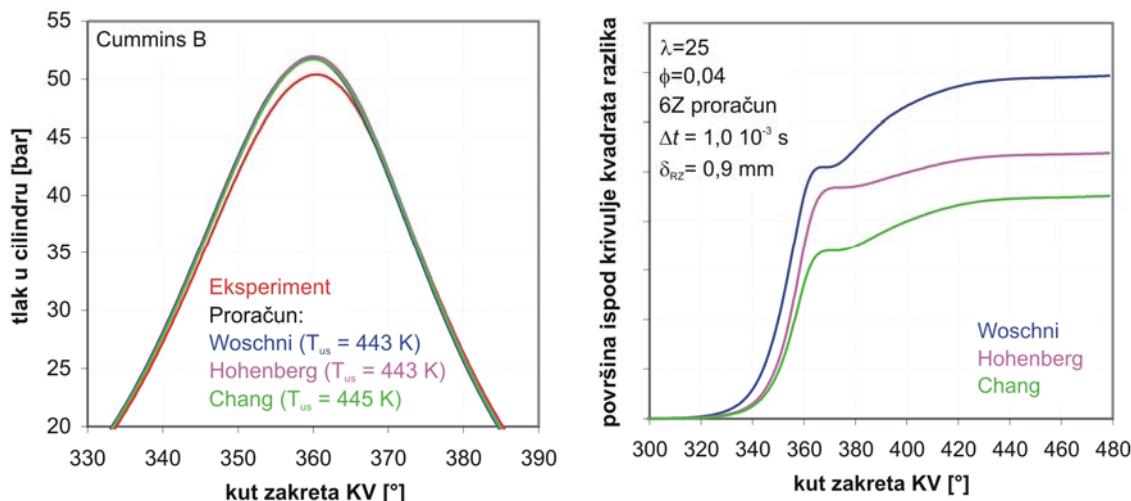
Na slikama 4.5. i 4.6. nalaze se rezultati radne točke s $\lambda=25$. Na slici 4.5. desno vidi se da je početak ovog vrlo slabog izgaranja gotovo isti kod sva tri proračuna. Iz neto brzine oslobođanja topoline može se vidjeti da i u ovom slučaju Woschnijeva korelacija izračunava nešto veću izmjenu topoline u području oko GMT što se manifestira manjom vrijednosti neto brzine oslobođanja topoline. Temperatura izračunata Changovom i Hohenbergovom korelacijom nešto je manja za vrijeme kompresije, no oko GMT sve tri krivulje kreću svojim putem. Hohenbergova krivulja postaje najviša jer se tom korelacijom izračunava najmanja izmjena topiline za vrijeme izgaranja, a Woschnijeva krivulja od najviše postaje najniža s obzirom na svoju karakteristiku povećane izmjene topiline za vrijeme izgaranja. Kao posljedica takvih promjena temperatura mijenjaju se i krivulje tlaka, ali te su promjene mnogo manje vidljive, a prikazane su na slici 4.6. Za ocjenu odstupanja izračunatih krivulja od eksperimentalne ponovno su izračunate vrijednosti površine ispod krivulje kvadrata razlika i prikazane su na slici 4.6.



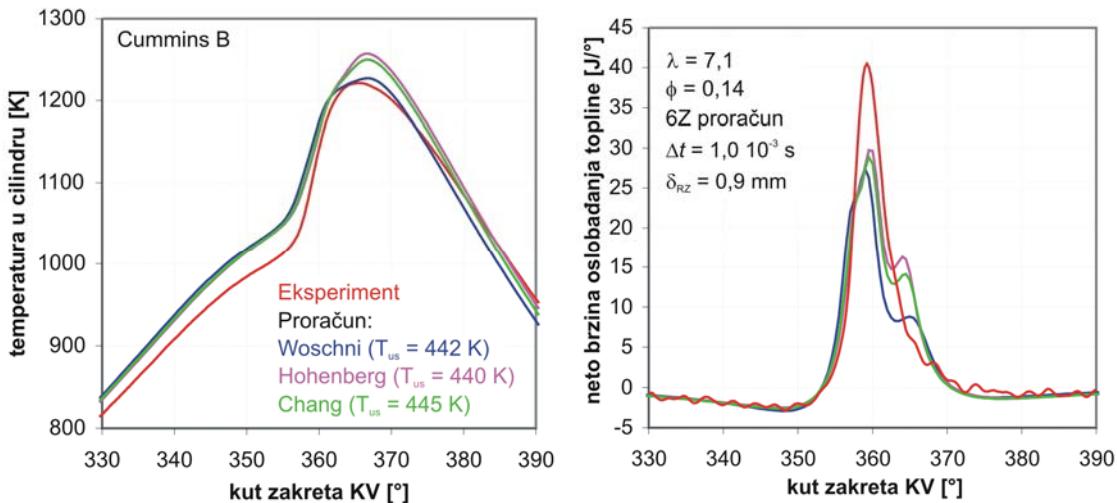
Slika 4.5. Promjene temperature i neto brzine oslobođanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije za izmjenu topline u radnoj točki s $\lambda=25$ ($\phi=0,04$).

desno. Changova korelacija opet daje najmanje odstupanje za vrijeme kompresije, a i za vrijeme ekspanzije odstupanje krivulje tlaka izračunate pomoću Changove korelacije je manje od one izračunate pomoću Woschnijeve. Tijekom ekspanzije najmanje odstupanje daje tlak izračunat Hohenbergovom korelacijom, no na kraju proračuna ukupno odstupanje je najmanje uz primjenu Changove korelacije. U odnosu na Woschnija primjenom Changove korelacije ukupno odstupanje je smanjeno za 35%.

Kod opterećenja s $\lambda=7,1$ izgaranje je već nešto uočljivije, pa je i porast tlaka i temperature izraženiji. Na slici 4.7. koja prikazuje rezultate temperature i neto brzine oslobođanja topline u toj radnoj točki vidi se da



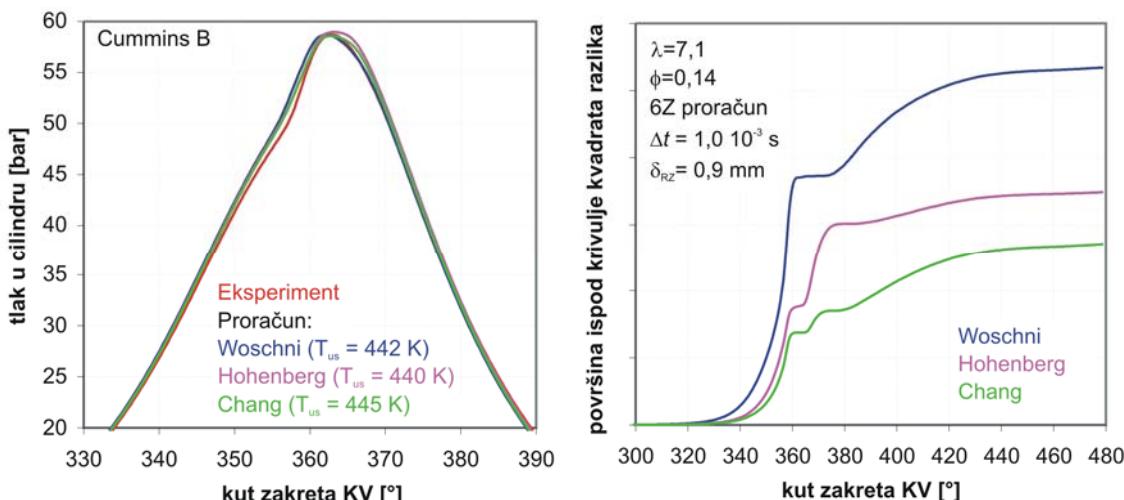
Slika 4.6. Promjene tlaka i kumulativni iznosi veličina površina ispod krivulja kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije za izmjenu topline i radnu točku s $\lambda=25$ ($\phi=0,04$).



Slika 4.7. Promjene temperature i neto brzine oslobađanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije izmjene topline u radnoj točki s $\lambda=7,1$ ($\phi=0,14$).

izgaranje u sva tri proračuna počinje gotovo istovremeno. Iz istih krivulja ponovno se vidi da Woschijeva korelacija daje intenzivnije odvođenje topline za vrijeme izgaranja od Changove, a posebno od Hohenbergove korelacije. Temperatura za vrijeme kompresije ponovno je niža kod Chang i Hohenberga, no povećano odvođenje topline u području oko GMT približava Woschnijevu krivulju skroz do eksperimentalne. Međutim, nakon dostizanja najveće vrijednosti, temperatura se kod Woschnijeve korelacije za vrijeme ekspanzije mnogo dalje odmiče od eksperimentalne, u odnosu na Chang i Hohenberga.

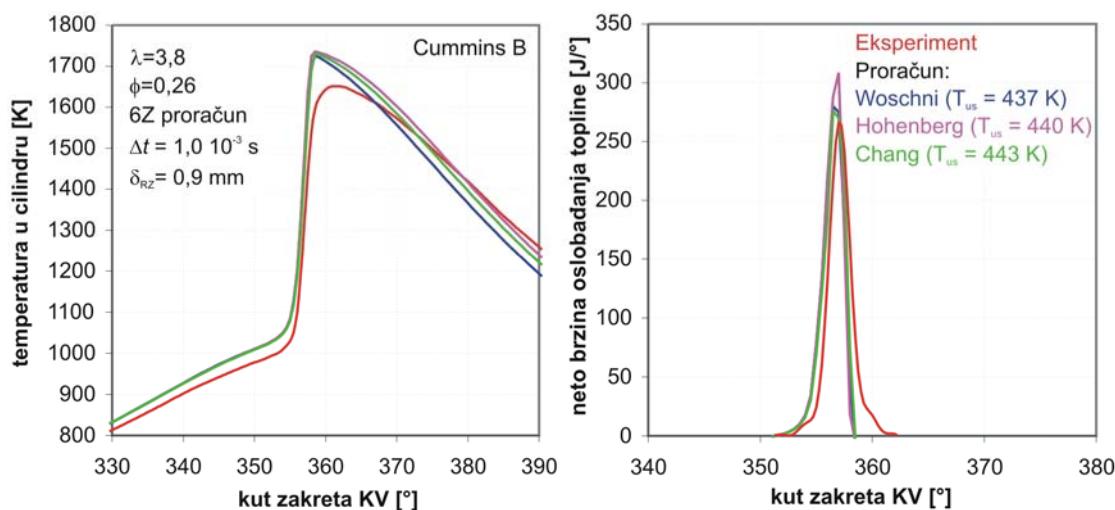
Kod krivulja promjene tlaka prikazanih na slici 4.8. ne zamjećuje se tolika razlika kao kod temperature, no može se vidjeti da je tijekom kompresije, a



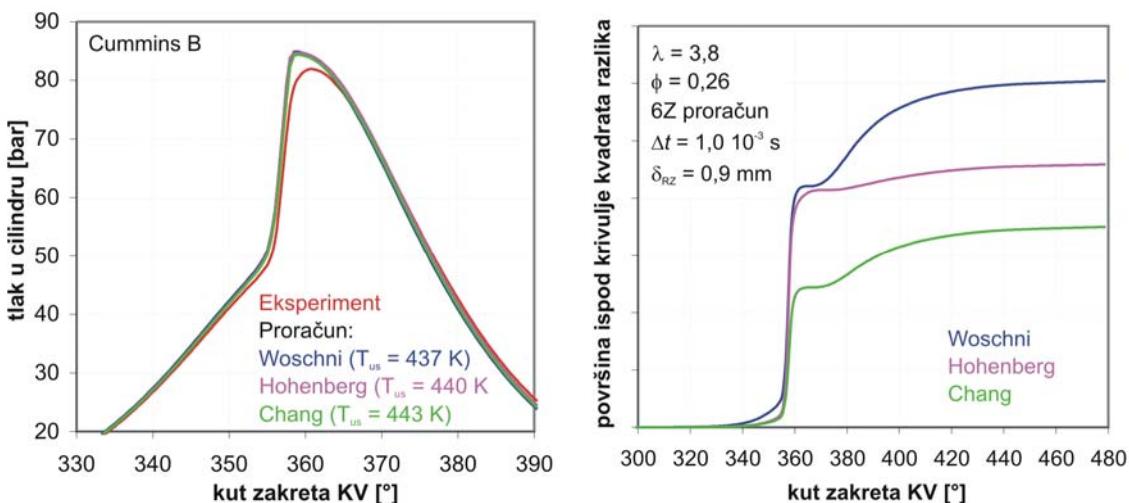
Slika 4.8. Promjene tlaka i kumulativnih iznosa veličina površina ispod krivulja kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije za izmjenu topline i radnu točku s $\lambda=7,1$ ($\phi=0,14$).

i ekspanzije, Changova krivulja bliža eksperimentalnoj od Woschnijeve. To se potvrđuje pogledom na krivulje površina ispod promjene kvadrata razlika, koja između ostalog pokazuje da je za vrijeme kompresije i početnog dijela izgaranja tlak izračunat pomoću Chang-a bliži eksperimentalnom i od onog izračunatog pomoću Hohenberga. Nešto veći odmak od eksperimentalne krivulje Chang u odnosu na Hohenberga ima za vrijeme ekspanzije nakon izgaranja, no ukupno odstupanje i u ovoj radnoj točki najmanje je uz primjenu Changove korelacije. U odnosu na Woschnijevu korelaciju ukupno odstupanje primjenom Changove korelacije u ovoj radnoj točki ($\lambda=7,1$) smanjeno je za 49%.

Proračuni za radnu točku s punim opterećenjem ($\lambda=3,8$) pokazuju iste karakteristike kao i oni za manja opterećenja, što se može vidjeti na slikama



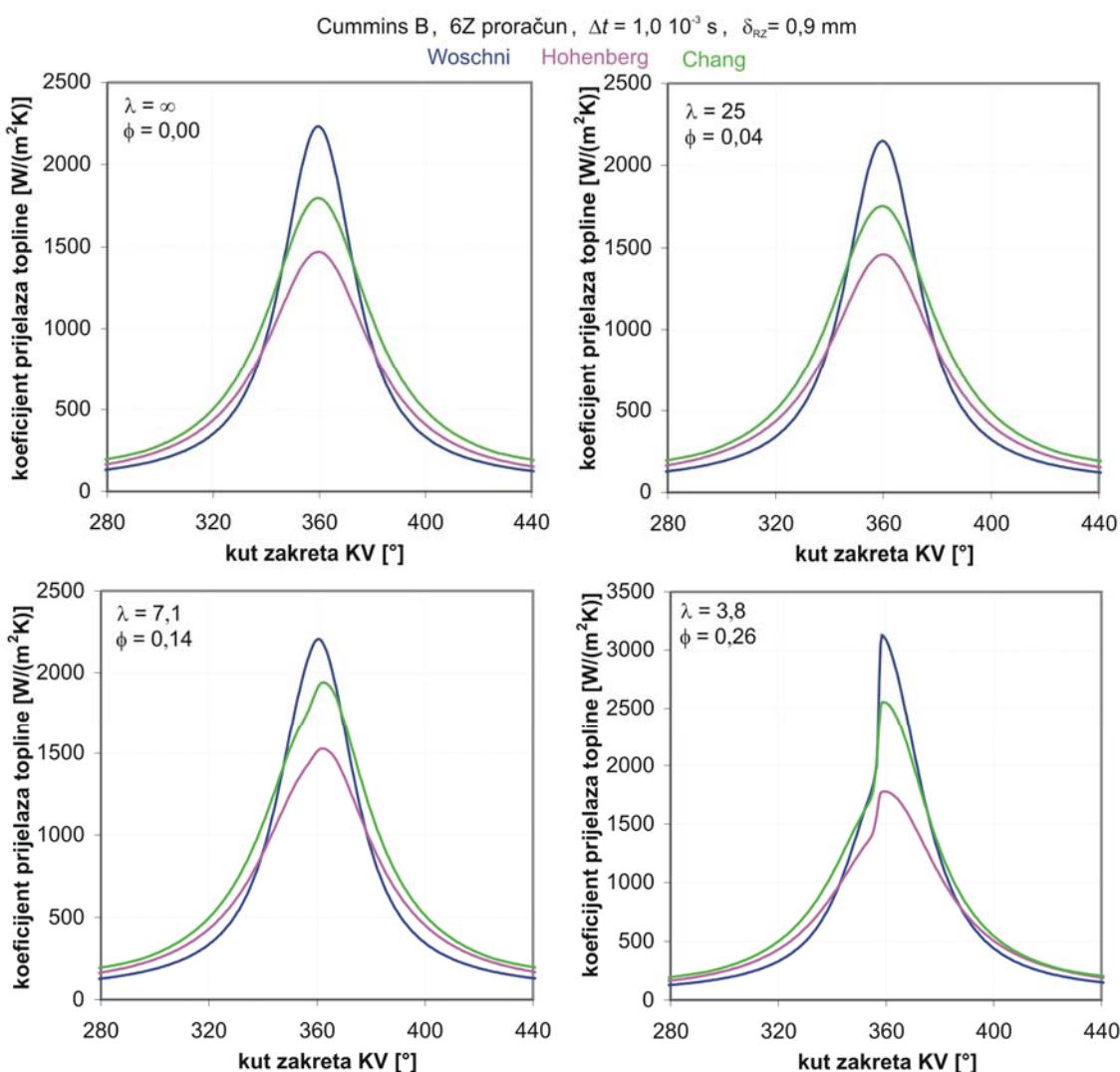
Slika 4.9. Promjene temperature i neto brzine oslobođanja topline izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacije za izmjenu topoline u radnoj točki s $\lambda=3,8$ ($\phi=0,26$).



Slika 4.10. Promjene tlaka i kumulativnih iznosa veličina površina ispod krivulja kvadrata razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka, za tri različite korelacije za izmjenu topoline i radnu točku s $\lambda=3,8$ ($\phi=0,26$).

4.9. i 4.10. I kod najvećeg opterećenja ukupno odstupanje najmanje je kod primjene Changove korelacije, a u usporedbi s Woschnijevom korelacijom ono je smanjeno za 42%.

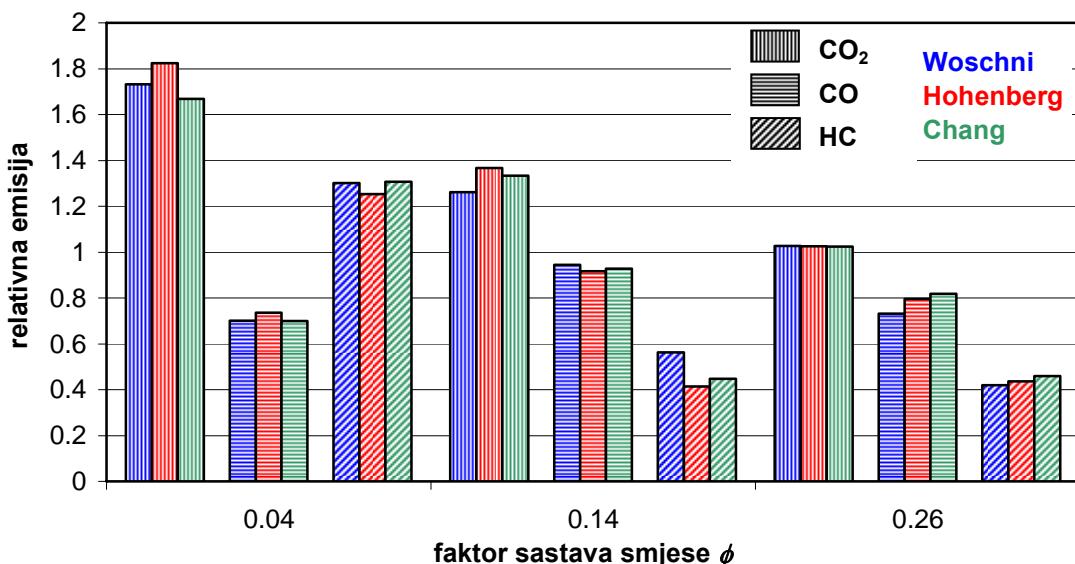
Iako su krivulje neto brzine oslobođanja topline mogle djelomično otkriti razlike između primijenjenih korelacija, posebno u radnim točkama s malim opterećenjem, da bi se jasno vidjele razlike između njih na slici 4.11. prikazane su vrijednosti koeficijenta prijelaza topline u svim razmatranim slučajevima. Vrijednost koeficijenta prijelaza topline izravno mijenja količinu topline koja se prenosi s rubnih zona na stijenke, a samim time i ukupnu toplinu koja se u toku proračuna izmjenjuje s okolinom. Sve četiri slike pokazuju iste karakteristične razlike između korelacija, pri čemu su prve tri slike vrlo slične, što je posljedica sličnosti u krivuljama toka tlaka i temperature zbog vrlo male količine topline dovedene izgaranjem. Woscnijeva korelacija izračunava najmanji koeficijent za vrijeme kompresije



Slika 4.11. Promjene koeficijenta prijelaza topline u ovisnosti o kutu zakreta koljenastog vratila izračunate pomoću tri različite korelacijske funkcije, u četiri različite radne točke.

i ekspanzije, dok je u području oko GMT koeficijent izračunat tom korelacijom najveći. Koeficijenti izračunati Changovom i Hohenbergovom korelacijom ne mijenjaju međusobni odnos, tj. Changov koeficijent cijelo je vrijeme veći od Hohenbergovog, no u području oko GMT porast Changovog koeficijenta je mnogo veći od porasta Hohenbergovog, pa je i njihova međusobna razlika veća nego što je to za vrijeme kompresije i ekspanzije. Posebno su zanimljive promjene koeficijenata prijelaza topline u slučaju s najvećim opterećenjem i to u području izgaranja goriva (~350 do 360 °KV). Na slici se vidi porast vrijednosti koeficijenta uz napredovanje izgaranja u sva tri slučaja, no taj porast je najviše izražen kod Woschnijeve korelacije. To je posljedica povećanja karakteristične brzine strujanja u korelaciji s faktorom kojim se izgaranje uzima u obzir i koji je kod Changove korelacije mnogo manji, a Hohenbergova ga uopće nema. Upravo taj nagli porast koeficijenta prijelaza topline, pri pojavi izgaranja, kod upotrebe Woschnijeve korelacije, dovodi da strmijeg pada tlaka i temperature, a što se ne može zamjetiti u eksperimentalnim rezultatima.

Prije konačne ocjene korelacija za izračunavanje koeficijenta prijelaza topline treba pogledati da li se promjenom ovih korelacija značajno mijenjaju i izračunate emisije. Zbog toga su izračunate relativne emisije svih razmatranih slučajeva, te su prikazane na slici 4.12. Relativna emisija predstavlja omjer emisije izračunate nekim od proračuna i odgovarajuće eksperimentalno određene emisije. Tako npr. krajnji lijevi stupac prikazuje omjer emisije CO₂ u radnoj točki s $\phi=0,04$ ($\lambda=25$) izračunat pomoću Woschnijeve korelacije za izmjenu topline i emisije CO₂ izmjerene u toj radnoj točki. Slika pokazuje da su razlike između emisija izračunatih s različitim korelacijama, a u istim radnim točkama vrlo male. Isto tako može se zamjetiti da je smjer promjene izračunatih emisija raznolik, tj. ne može



Slika 4.12. Relativne emisije CO₂, CO i HC izračunate šestzonskim proračunom s tri različite korelacijske metode za izmjenu topline u tri različite radne točke.

se zamijetiti da neka od korelacija u većini razmatranih slučajeva daje bolja rješenja, a niti da neka od njih daje lošija rješenja. S obzirom da niti jedna od korelacija, s aspekta promjene emisije, ne daje bolja ili lošija rješenja, a i s obzirom da su promjene tih emisija vrlo male, za ocjenu prikladnosti korelacija relevantni su njihovi utjecaji na promjenu tlaka i temperature.

U dosadašnjem razmatranju pokazano je da se u svim razmatranim slučajevima Changovom korelacijom, koja je dobivena analizom rezultata eksperimentalnih ispitivanja izmjene topoline kod HCCI motora, postižu najbolja podudaranja krivulja promjene tlaka i temperature s eksperimentalnim, kako po obliku tako i po vrijednostima, pri čemu je upotrebom ove korelacije ukupno odstupanje izračunatih krivulja promjena tlaka od eksperimentalnih smanjeno za 35 do 49%. Zbog toga se može smatrati se da je Changova korelacija najprikladnija za prikazane šestzonske proračune, a i za eventualne daljnje višezonske proračunske modele.

5. PRIMJER PRIMJENE PRORAČUNSKOG MODELA

5.1. Opis problema

Kao što je već ranije spomenuto, jedan od problema HCCI motora je povećana emisija neizgorjelih ugljikovodika (HC) i ugljikovog monoksida (CO). Iako se taj problem može vrlo efikasno riješiti primjenom oksidacijskog katalizatora, mnogo učinkovitije rješenje je u pronalasku načina da se što veća količina tih spojeva pretvori u CO₂ i H₂O još u cilindru. Na taj način povećati će se učinkovitost izgaranja, a samim time može se ostvariti veći efektivni stupanj djelovanja motora.

S obzirom na način izgaranja HCCI motora, sastav zaostalih produkata izgaranja vrlo je osjetljiv na temperaturnu raspodjelu u cilindru, pa se samim time može očekivati da će veliki izvor CO i HC biti područja s nižom temperaturom, a to su područja uz stijenke cilindra i područje procjepa između klipa i cilindra, što je već djelomično pokazano na slikama 3.22., 3.23., 3.28. i 3.29. Osim toga već je u nekim ranijim radovima pokazano da je najveći izvor HC prostor procjepa [58, 69, 72, 100, 101], a razmatrani su i utjecaji temperature stijenki na emisije CO i HC [69]. Prema tome promjenom veličine prostora procjepa između klipa i cilindra, te promjenom temperature stijenki moglo bi se utjecati na količinu HC i CO koji ostaju u cilindru nakon izgaranja.

U [69] proračunski je analiziran utjecaj veličine prostora procjepa i temperature stijenki na spomenute emisije, no razmatrana su samo dva slučaja za oba parametra. Kod analize volumena prostora procjepa razmatran je slučaj s izvornim volumenom, te slučaj kada je volumen prostora procjepa jednak nuli. Na taj način pokazalo se da utjecaj ove zone postoji, no koliki je on pri nekoj realnoj promjeni volumena, tom analizom to nije pokazano. Kod razmatranja vezanog za temperature stijenki isto su tako analizirana dva krajnja slučaja: jedan s izvornim i realno ostvarivim temperaturama i drugi s pretjerano visokim temperaturama stijenki ($T=600$ K). U [100] i [101] eksperimentalno i numerički su analizirani utjecaji tri različita oblika prostora procjepa, s različitim volumenima, na stvaranje HC i CO. U tim radovima veličina prostora procjepa mijenjana je za dosta veliku vrijednost i to na način da se u odnosu na izvorni volumen ona povećava. Tako je od izvorne veličine koja je iznosila 2,7% kompresijskog volumena ona povećavana do 20,8% kompresijskog volumena. Pri tome je širina procjepa između klipa i cilindra mijenjana od 0,26 mm pa sve do 2,1 mm. Na taj način drastično je promijenjen omjer volumena i površina stijenki koje su u dodiru s plinovima u procjepu, a time se mijenja i raspodjela temperature unutar tog prostora. Zbog toga je u dijelovima tog povećanog prostora procjepa temperatura plinova narasla dovoljno visoko da je nastupilo izgaranje, čime se promijenio osnovni uzrok zbog kojeg je prostor

procjepa izvor neizgorjelih produkata, a to je nemogućnost postizanja dovoljno visoke temperature zbog nepovoljnog omjera površina stijenki i volumena.

Zbog svega toga potrebna je jedna kvantitativna analiza utjecaja volumena prostora procjepa, te temperaturi stijenki prostora izgaranja, na emisije CO i HC, pri čemu će se promjene tih veličina zadržati u realnim okvirima, ne mijenjajući pri tom značajke procesa koji se u tim dijelovima dešavaju.

5.2. Pristup analizi

Analiza opisanih utjecaja veličine zone procjepa, te temperatura stijenki prostora izgaranja na emisije CO i HC provest će se pomoću razvijenog šestzonskog simulacijskog proračuna. Na slikama 3.34. - 3.36. pokazano je da taj proračun u određenoj mjeri ima mogućnost predviđanja spomenutih emisija, pa ako se pri analizi dobivenih rezultata u obzir uzmu veličine i razlozi odstupanja predviđenih emisija od eksperimentalnih, onda se pomoću rezultata tog šestzonskog proračuna mogu donijeti dobri zaključci. S druge strane upotreba šestzonskog proračuna uvelike pojednostavljuje promjenu razmatranih parametara. Promjena veličine zone procjepa zahtjevala bi kod eksperimentalnog ispitivanja izradu potpuno novog klipa, a definiranje promjena temperatura stijenki prostora izgaranja zahtjevalo bi nadzor tih temperatura što nikako nije jednostavno ostvariti.

Prema tome za potrebe analize utjecaja veličine prostora procjepa napravljeni su proračuni prethodno prikazanog Cummins B motora, prerađenog na rad s HCCI izgaranjem, pri čemu je volumen zone 1, koja predstavlja prostora procjepa, u jednom nizu proračuna smanjen, a u drugom je povećan. Taj volumen mijenjan je za 15% od osnovne vrijednosti, pa, je manja vrijednost volumena jednaka $V_{zn1}^m = 0,7 \text{ cm}^3$, a veća $V_{zn1}^v = 0,95 \text{ cm}^3$, s obzirom da je volumen kod osnovnih proračuna bio $V_{zn1}^o = 0,825 \text{ cm}^3$. Promjenom volumena zone procjepa mogao bi se promijeniti i kompresijski volumen, čime bi se promijenio i kompresijski omjer. Sama promjena kompresijskog omjera ima utjecaja na emisiju plinova, pa je stoga kompresijski omjer u sve tri serije proračuna konstantan, što znači da i kompresijski volumen ostaje nepromijenjen. To znači da će promjena volumena zone procjepa dovesti do promjene omjera tog volumena i kompresijskog volumena V_{zn1}/V_K . U osnovnom proračunu taj je omjer bio 1,4%, dok je s promijenjenim veličinama volumena zone procjepa taj omjer iznosio 1,2% i 1,6%.

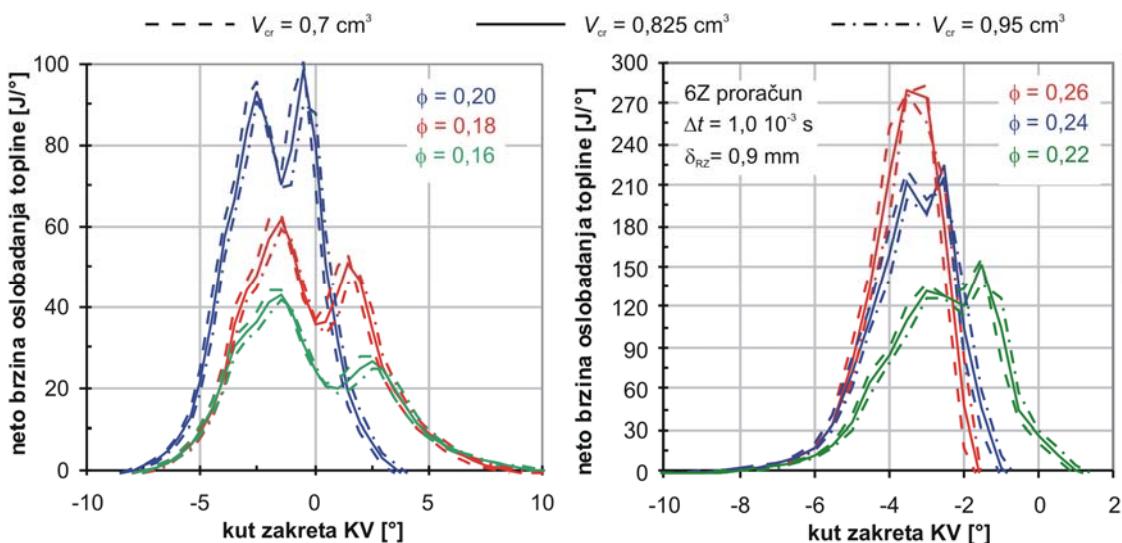
U osnovnom slučaju, čiji rezultati su prikazani na slikama 3.34. – 3.36., napravljeni su proračuni za područje opterećenja $\phi=0,04, \dots, 0,26$ ($\lambda=25, \dots, 3,8$). Pogledom na rezultate emisije može se ustvrditi da pri opterećenjima s manjom količinom goriva emisije CO i HC naglo rastu, dok

emisija CO₂ pada. To se javlja kao posljedica slabijeg izgaranja glavnine radnog medija. U tim radnim točkama male promjene volumena zone procjepa, a i temperatura stijenki, koje dovode do promjene količine neizgorjelih plinova u prostoru procjepa i u rubnim zonama, neće značajno utjecati na ukupnu emisiju. Zbog toga se te radne točke ispuštaju iz ove analize, a u analizu su uključene samo radne točke kod kojih je izgaranje u glavnom prostoru izgaranja gotovo potpuno. Prema tome razmatra se područje opterećenja kod kojeg je $\phi=0,16, \dots, 0,26$ ($\lambda=6,3, \dots, 3,8$). Iako se kod radne točke $\phi = 0,16$ ($\lambda = 6,3$) može zamijetiti značajniji porast emisije CO i značajniji pad emisije CO₂, ona je kao neka vrsta granične točke uključena u razmatranje.

U promatranim radnim točkama osim promjene volumena zone procjepa sve ostale veličine ostavljene su na istim vrijednostima kao i kod osnovnog proračuna. No, s obzirom da početak izgaranja kod HCCI motora ovisi o stanju plina u cilindru, postoji mogućnost da će promjena volumena zone procjepa dovesti do promjene početka izgaranja, što bi onda moglo imati utjecaja na rezultate emisije. Stoga su prije analize rezultata emisija provjereni rezultati neto brzine oslobađanja topline (slika 5.1.) iz kojih se može vidjeti da li je došlo do značajnije promjene u početku izgaranja.

Na slici 5.1. vidi se da su promjene u krivuljama neto brzine oslobađanja topline, pri promjeni volumena zone procjepa, u svim promatranim radnim točkama vrlo male, te se može smatrati da te male promjene neće utjecati na rezultate emisija. Stoga se rezultati emisija izračunati s ovim proračunima mogu koristiti, a njihova analiza prikazana je u točki 5.3.1.

Za potrebe analize utjecaja temperature stijenki prostora izgaranja na emisije CO i HC napravljeni su proračuni u radnim točkama s $\phi=0,16, \dots, 0,26$



Slika 5.1. Promjena neto brzine oslobađanja topline pri promjeni volumena zone procjepa u radnim točkama s $\phi=0,16, \dots, 0,20$ (lijevo) i s $\phi=0,22, \dots, 0,26$ (desno).

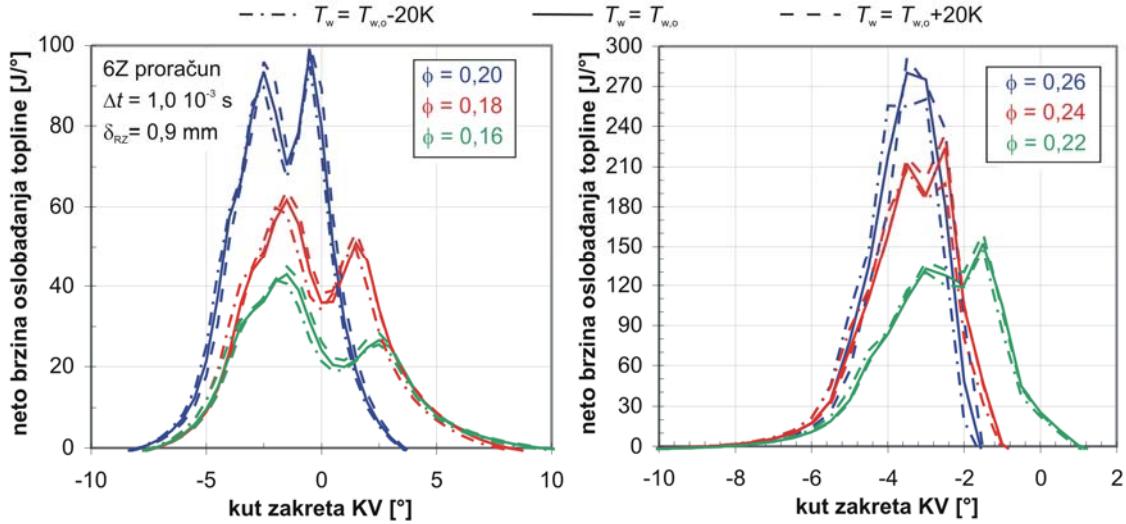
pri čemu se temperature stijenki u jednoj seriji povišene, a u drugoj snižene za 20 K. U tablici 3.5. prikazane su temperature stijenki glave i cilindra, u ovisnosti o faktoru sastava smjese ϕ , osnovnog proračunskog modela, a u točki 3.4.2. opisan je način definiranja temperatura stijenki klipa istog tog modela. Prema tome temperature stijenki proračunskog modela s povišenim temperaturama dobiju se dodavanjem vrijednosti od 20 K na svaku proračunsku vrijednost pojedine temperature stijenke, a kod proračunskog modela sa sniženom temperaturom postupak je isti samo se vrijednost od 20 K oduzima.

S obzirom da će se zbog promjene temperature stijenki promijeniti temperaturni profil plinova u cilindru za vrijeme kompresije, promijeniti će se i trenutak paljenja smjese u cilindru. Kako promjena trenutka paljenja ima veliki utjecaj na sastav smjese u cilindru nakon izgaranja, a svrha ovih proračuna jest razmatrati utjecaj isključivo promjene temperature stijenki na taj sastav, rubni uvjeti temperature usisa u proračunima s povišenim i sniženim temperaturama stijenki mijenjani su tako da se postigne isti trenutak paljenja kao u odgovarajućem osnovnom proračunu. Na taj način iako je profil temperature za vrijeme kompresije različit, temperatura u trenutku paljenja, koje će biti približno na istom mjestu, biti će ista za sva tri razmatrana slučaja. Prema tome dobro će se moći vidjeti kako temperature stijenki utječu na temperature plinova u zonama za vrijeme ekspanzije, a samim time i na kemijske promjene njihovog sastava.

U tablici 5.1. prikazani su usisni rubni uvjeti u svim razmatranim točkama opterećenja, pri osnovnom proračunu i proračunima s povišenim i sniženim temperaturama stijenki, a na slici 5.2. prikazani su rezultati neto brzina oslobođanja topline svih razmatranih slučajeva. Može se zamijetiti da su nakon promjena usinih rubnih uvjeta trenuci početaka izgaranja, pri istim opterećenjima, za sve tri razine temperatura stijenki, približno isti, što znači da se rezultati ovih proračuna mogu koristi u predmetnoj analizi, koja je prikazana u točki 5.3.2.

Tablica 5.1. Temperature usisa proračunskih modela

Faktor sastava smjese ϕ		0,16	0,18	0,20	0,22	0,24	0,26
Temperatura usisa [K]	Snižene temperature stijenki	453	448	449	449	449	448
	Osnovni slučaj	441	436	438	438	438	437
	Povišene temperature stijenki	430	425.5	427	428	428	426

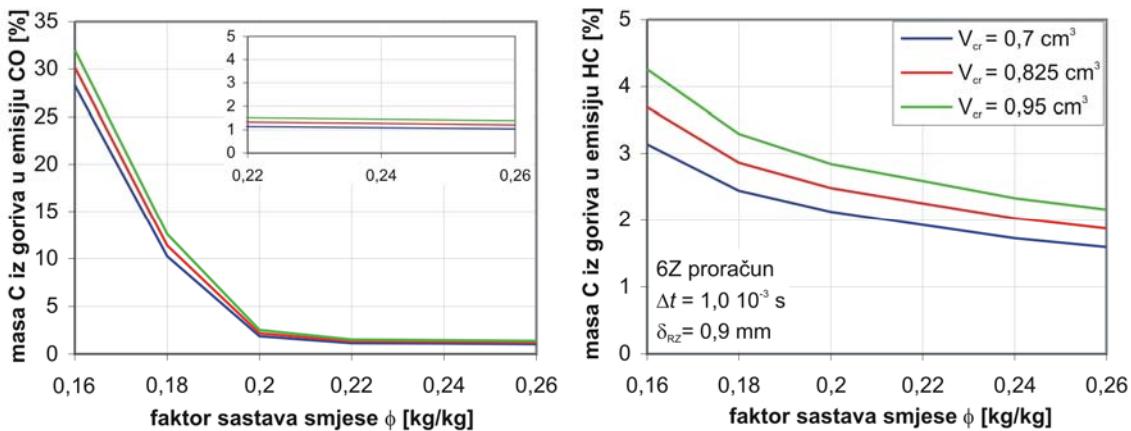


Slika 5.2. Promjena neto brzine oslobađanja topline pri promjeni temperaturi stijenki prostora izgaranja, u radnim točkama s $\phi=0,16, \dots, 0,20$ (lijevo) i s $\phi=0,22, \dots, 0,26$ (desno).

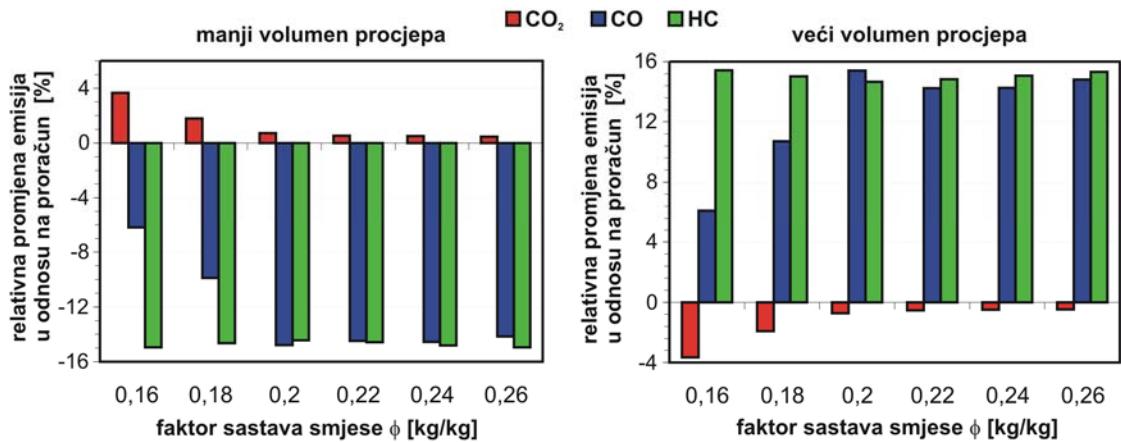
5.3. Rezultati

5.3.1. Promjena volumena zone procjepa

Analiza rezultata počet će pregledom općeg utjecaja promjene volumena zone procjepa na emisije CO i HC, koji je prikazan na slici 5.3. S obzirom da su u prethodnim analizama korišteni rezultati emisija u obliku postotka mase ugljika (C) iz goriva koji se pretvori u određeni oblik emisije, i u ovom dijagramu korišten je isti prikaz. Kao što se moglo i očekivati vidi se da povećanje volumena zone procjepa dovodi do povećanja emisije i CO i HC. Osim toga može se vidjeti da jednaka promjena volumena zone procjepa dovodi do približno jednakog povećanja emisije, što se na slikama očituje time da se krivulja sa srednjom vrijednosti volumena nalazi skoro točno na pola između krivulja s krajnjim vrijednostima volumena. Kako bi



Slika 5.3. Izračunata promjena emisije CO (lijevo) i HC (desno) pri promjeni volumena zone procjepa.



Slika 5.4. Relativna promjena emisija pri smanjenju i povećanju volumena zone procjepa za 15%, pri čemu je osnova izračunata emisija.

se dobio uvid u međusobne odnose promjena emisija, izračunate su relativne promjene emisija pri promjeni volumena zone procjepa, pri čemu su za osnovu relativnih promjena emisija upotrijebljeni izračunati rezultati sa srednjom vrijednosti volumena zone procjepa. Prema tome se npr. relativna promjena emisije CO izračunava pomoću:

$$CO_{\text{rel,pror}} = \frac{CO_{V_{\text{manji}}}^{\text{izr}} - CO_{V_{\text{srednji}}}^{\text{izr}}}{CO_{V_{\text{srednji}}}^{\text{izr}}} \quad (106)$$

gdje su: $CO_{\text{rel,pror}}$, [%] – relativna promjena emisije CO u odnosu na proračun; $CO_{V_{\text{manji}}}^{\text{izr}}$, [%C u CO] izračunata emisija CO uz manji volumen zone procjepa; $CO_{V_{\text{srednji}}}^{\text{izr}}$, [%C u CO] izračunata emisija CO uz srednji volumen zone procjepa.

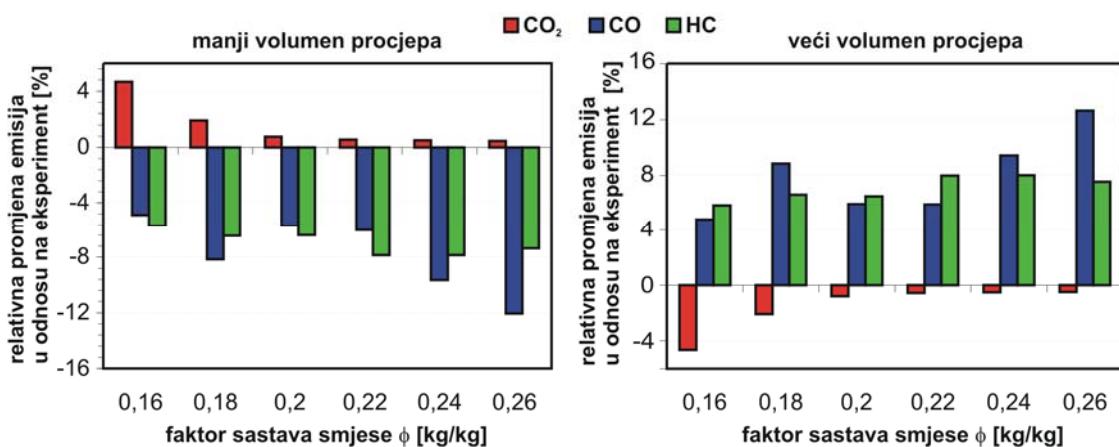
Rezultati za manji volumen (slika 5.4.) pokazuju da je u svim promatranim radnim točkama došlo do smanjenja emisije HC za ~15%, a emisija CO smanjila se za ~15% u radnim točkama s $\phi \geq 0,2$, dok je uz $\phi = 0,18$ emisija manja za 10%, a uz $\phi = 0,16$ ona je manja za 6%. Povećanje volumena daje zrcalno simetrične rezultate, što znači da je povećanjem volumena izračunata emisija HC veća za ~15% u svim radnim točkama, dok je emisija CO povećana za ~15% uz $\phi \geq 0,2$, dok je pri $\phi = 0,18$ i $\phi = 0,16$ ona povećana za 10% i 6%.

Ako se pogleda slika 5.3. lijevo može se zamijetiti da kod smanjenog opterećenja ($\phi < 0,2$) razlika između emisija izračunatih s različitim volumenom raste, a ne pada, no kako je emisija pri tom smanjenom opterećenju općenito porasla, relativna promjena emisije CO se s padom opterećenja smanjuje.

U poglavlju 3. prikazano je da šestzonski proračunski model ima mogućnost predviđanja emisije, no isto tako je pokazano da još uvijek postoji određeno odstupanje od rezultata eksperimentalnih ispitivanja. U području opterećenja promatranog u ovoj analizi, to se odstupanje očituje malo smanjenim predviđanjem emisije HC u cijelom području i malo smanjenim predviđanjem emisije CO pri manjem opterećenju. S obzirom da se smatra da je emisija koja dolazi iz prostora procjepa dobro predviđena ovim modelom, a da se pretpostavlja da razlika između izračunate i izmjerene emisije dolazi iz graničnih slojeva na krajnjim rubovima prostora izgaranja, kao što je ugao između plohe glave i cilindra, ili ugao između plohe čela klipa i cilindra, pretpostavlja se da je ukupna promjena emisije kao posljedice promjene volumena zone procjepa dobro izračunata, a u tom slučaju je relativna promjena emisija prikazana na slici 5.4. precijenjena. Zbog toga je izračunata malo drugačija relativna promjena emisija, referencirana na eksperimentalne podatke, pri čemu je razlika emisija i dalje dobivena kao razlika vrijednosti izračunate s manjim ili većim volumenom i vrijednosti izračunate sa srednjim volumenom, ali je sada ta razlika dijeljena s eksperimentalno određenom emisijom. Primjer izračunavanja relativne promjene emisije CO u odnosu na eksperiment ($CO_{\text{rel,eksp}}$) prikazan je izrazom (107):

$$CO_{\text{rel,eksp}} = \frac{CO_{V_{\text{manji}}}^{\text{izr}} - CO_{V_{\text{srednji}}}^{\text{izr}}}{CO_{V_{\text{srednji}}}^{\text{eksp}}} \quad (107)$$

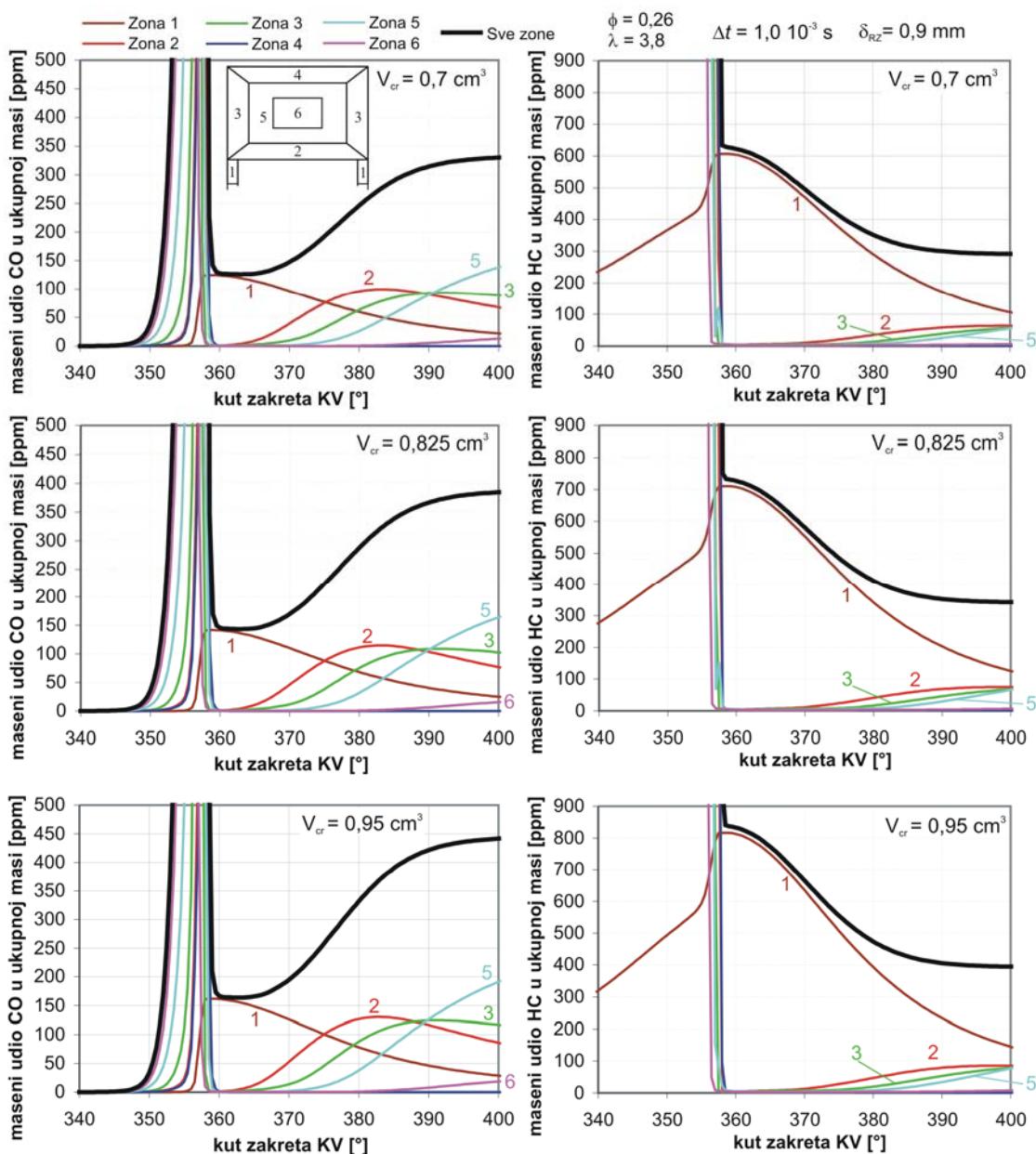
Rezultati ovako izračunatih relativnih promjena emisija prikazani su na slici 5.5. Može se zamjetiti da su ove relativne promjene malo smanjene, pa je tako relativna promjena emisije HC uz $\phi \geq 0,22$ smanjena na $\sim 8\%$, zatim uz $\phi = 0,18, \dots, 0,20$ ta promjena iznosi $\sim 6,5\%$, a kod najmanjeg



Slika 5.5. Relativna promjena emisija pri smanjenju i povećanju volumena zone procjepa za 15%, pri čemu je osnova eksperimentalno određena emisija.

opterećenja $\phi = 0,16$ ona je $\sim 5,8\%$. Relativna promjena emisije CO u odnosu na eksperimentalne rezultate smanjuje se pri smanjivanju opterećenja od $\sim 12\%$ uz $\phi = 0,26$ na 5% uz $\phi = 0,16$. Izuzetak u ovoj padajućoj karakteristici predstavlja radna točka s $\phi = 0,18$ u kojoj relativna promjena emisije CO u odnosu na eksperimentalne rezultate iznosi 8%.

Da bi se objasnili uzroci ovih promjena potrebno je pogledati kako se mijenja promjena udjela CO i HC u pojedinim zonama s promjenom veličine zone procjepa, u različitim radnim točkama. Na slici 5.6. mogu se vidjeti dijagrami ovih promjena za opterećenje kod kojeg je $\phi=0,26$, na kojima se može zamijetiti da izgaranje u svim zonama, kod ovog opterećenja,



Slika 5.6. Promjena udjela CO i HC svih zona, za vrijeme dijela ciklusa, izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,26$.

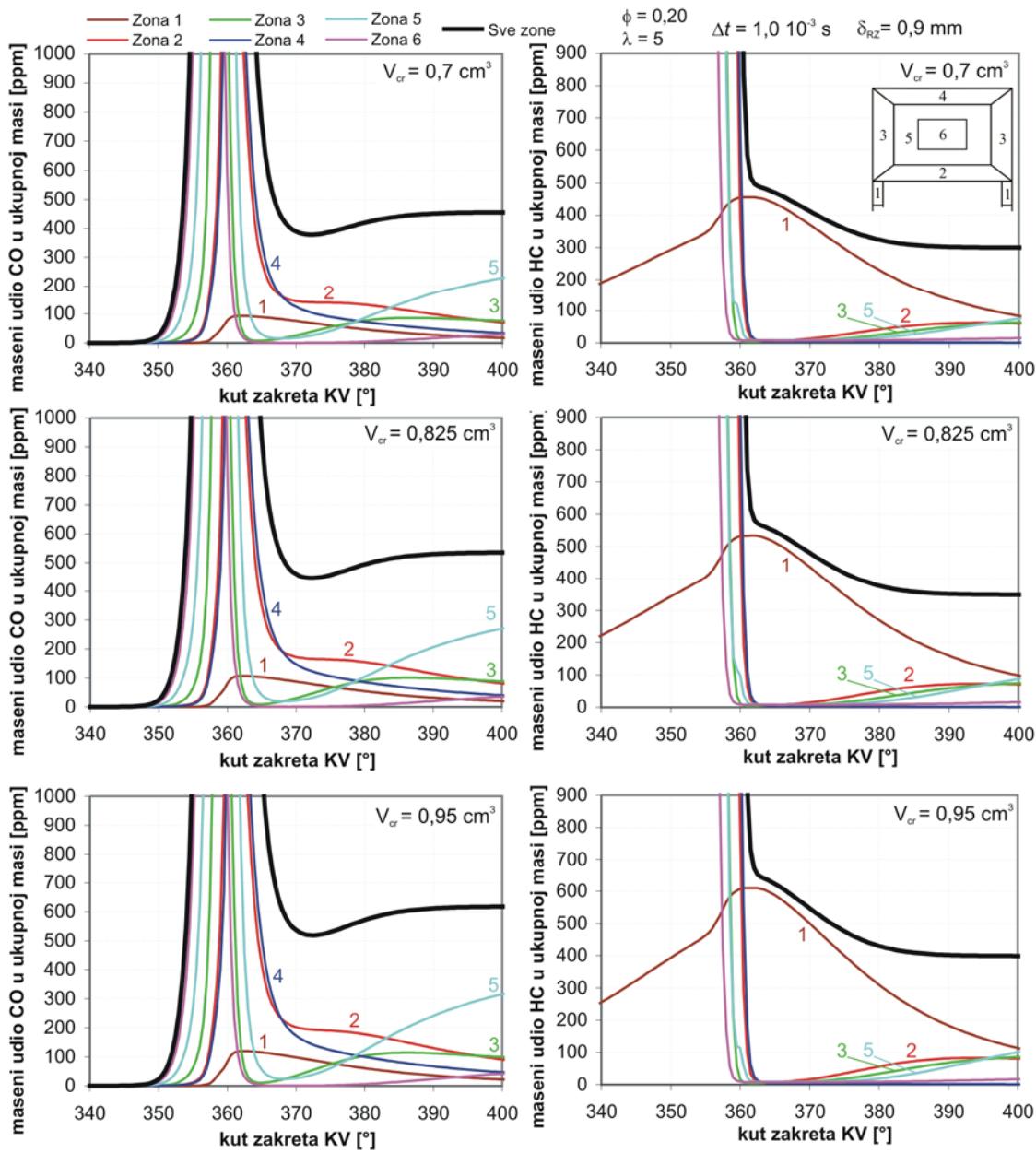
započinje prije GMT, a da udio HC za vrijeme izgaranja u svim zonama, osim u zoni 1, pada gotovo na nulu. U tim trenucima (od $\sim 358^\circ$ do 360° KV) skoro sav HC cilindra smješten je u zoni 1. Ista pojava može se zamijetiti i na dijagramima za CO, s time da kod njega, u GMT, još veći udio ukupnog CO cilindra otpada na zonu 1. Prema tome u području oko GMT veća količina CO i HC nalazi se kod modela s većim volumenom zone 1, kod kojih je ukupna masa radnog medija u toj zoni u području oko GMT veća. Tijekom ekspanzije zbog promjene odnosa volumena među zonama, masa iz zone 1 izlazi u cilindar. S obzirom da je temperatura u cilindru još dovoljno visoka, neizgorjeli plinovi koji izlaze iz zone 1 izgaraju. Na slici 5.6. vidi se da do približno 370° KV sav HC koji izađe iz zone 1 biva pretvoren u CO ili CO_2 , a što se manifestira time da krivulja ukupnog HC i dalje prati krivulju promjene HC u zoni 1. Dalnjim pomakom klipa temperatura u cilindru pada i reakcije pretvorbe HC se usporavaju, a što se očituje laganim odmakom krivulje HC svih zona od krivulje HC zone 1, te povećanjem udjela HC prvo u zoni 2, a zatim u zonama 3 i 5. S obzirom da su u tom periodu razlike između temperature zona dobivene uz različite veličine zone 1 vrlo male, kod sva tri dijagrama to usporavanje pretvorbe HC dešava se u gotovo istom trenutku. Kako se klip odmiče sve dalje temperatura je sve niža, a pretvorba HC je sve sporija, sve dok u jednom tenu ona ne stane. Zaustavljanje pretvorbe HC dešava se oko 400° KV, a daljnja promjena udjela HC u zonama posljedica je prebacivanja mase između zona. I ovaj završetak pretvorbe HC javlja se kod sve tri veličine zone 1 u približno istom trenutku, pa s obzirom da je početna veličina kod modela s najvećom zonom 1 bila najveća, tako je i krajnja veličina na kraju ovog procesa najveća kod modela s najvećim volumenom zone 1. Iako je razlika između udjela HC kod proračuna s najvećim volumenom zone 1 i kod proračuna s najmanjim volumenom te zone u GMT bila oko 200 ppm, treba primjetiti da se nakon pretvaranja HC tijekom ekspanzije ta razlika smanjila na približno 100 ppm. To znači da je u proračunu s većim volumenom, tijekom ekspanzije, nešto veća količina HC pretvorena u ostale spojeve.

Dijagrami za CO isto tako pokazuju da se oko GMT sav CO nalazi u zoni 1. Tijekom ekspanzije, kako masa iz zone 1 izlazi u cilindar, CO iz te zone pretvara se u CO_2 , ali se istovremeno CO stvara pretvorbom HC koji izlazi iz iste te zone. Zbog toga se u početku (360° do 365°) ukupni maseni udio CO uopće ne mijenja. S obzirom da je temperatura pretvorbe CO u CO_2 viša od temperature stvaranja CO iz HC, usporavanje pretvorbe CO u CO_2 počinje ranije, što se manifestira porastom ukupnog CO u cilindru. U početnoj fazi brzina tog porasta raste, da bi se negdje oko 378° KV to promjenilo i brzina porasta se počela smanjivati. Oko 400° KV sa zaustavljanjem pretvorbe HC zaustavlja se i stvaranje CO. U GMT modeli s većim volumenom zone 1 imaju i veću količinu CO u njoj, pa samim time i u cijelom cilindru. Opisani porast udjela CO tijekom ekspanzije veći je kod modela s većim volumenom

zone 1, a što je posljedica veće količine HC koja je u istom periodu pretvorena u CO. Zbog toga je razlika između udjela CO izračunata s najvećim i najmanjim volumenom zone 1 tijekom ekspanzije povećana s vrijednosti od ~ 40 ppm, koliko je iznosila u GMT, na ~ 110 ppm u trenutku kada je koljenasto vratilo na 400° , a kada su krivulje promjene ukupnog CO dostigle svoje maksimume.

Ovakvu karakteristiku izračunatog izgaranja nalazimo i u radnim točkama kod kojih je $\phi=0,24$ i $\phi=0,22$, pa su stoga dijagrami za ta opterećenja izostavljeni. U tim radnim točkama malo se skraćuje period stagnacije CO i period praćenja krivulje ukupnog udjela HC u svim zonama i udjela HC u zoni 1., te se malo povećava udio HC i CO ostalih zona u GMT, no značajnijih promjena u karakteristici izračunatog izgaranja nema. Zbog toga u tim proračunima imamo vrlo malu promjenu emisije CO izraženu u % C iz goriva pretvorenog u CO, dok je ta promjena kod eksperimentalnih rezultata nešto izraženija (slika 3.35.). S obzirom da u ovim radnim točkama u proračunima nema značajnih promjena u karakteristici izgaranja, te da je glavni izvor izračunate emisije CO i HC masa neizgorjelih plinova u prostoru procjepa, promjene relativnih promjena emisijama u odnosu na proračun su vrlo male. No, kako kod eksperimentalnih rezultata za CO, uz smanjenje opterećenja, postoji i određena promjena u emisiji, relativna promjena emisija CO u odnosu na eksperiment, prikazana na slici 5.5., pri smanjenju opterećenja od $\phi=0,26$ do $\phi=0,22$ se isto tako smanjuje. Razlika između izračunate i izmjerene emisije CO u ovim radnim točkama povećava se zbog toga što se kontinuiranim smanjivanjem količine goriva kontinuirano mijenja raspodjela temperature u cilindru, dok se u diskretiziranom proračunskom prostoru ta raspodjela mijenja skokovito. Prema tome, uz smanjenje količine goriva sve se veća količina CO stvara u rubnim područjima, kao posljedica sve nižih temperature u njima, dok je u proračunskom modelu u tim radnim točkama, u području oko GMT i dalje većina CO sadržana u zoni 1. Iako se mala promjena te karakteristike može vidjeti u slučaju s $\phi=0,22$, prava promjena izračunate karakteristike izgaranja zamjećuje se tek kod $\phi=0,20$.

Smanjenjem opterećenja u proračunima zamjećuje se nepotpuno izgaranje i u ostalim zonama, pri čemu se to prvo javlja u rubnim zonama s nižom temperaturom, a manifestira se kao nepotpuna pretvorba CO u CO_2 . Na slici 5.7. vidi se da je oko GMT pretvorba HC i dalje potpuna u svim zonama, osim u zoni 1, no izgaranje CO u zonama 2 i 4 koje predstavljaju rubne zone uz klip i glavu ne dolazi do kraja, pa njihove koncentracije u tim zonama nikada ne padaju na nulu. To znači da je karakteristika pretvorbe HC ostala ista, ali da se karakteristika pretvorbe CO počinje mijenjati. I dalje udio CO tijekom ekspanzije raste, kao posljedica pretvorbe HC, ali je početna vrijednost dosta visoka jer je udio u zonama 2 i 4 dosta visok.



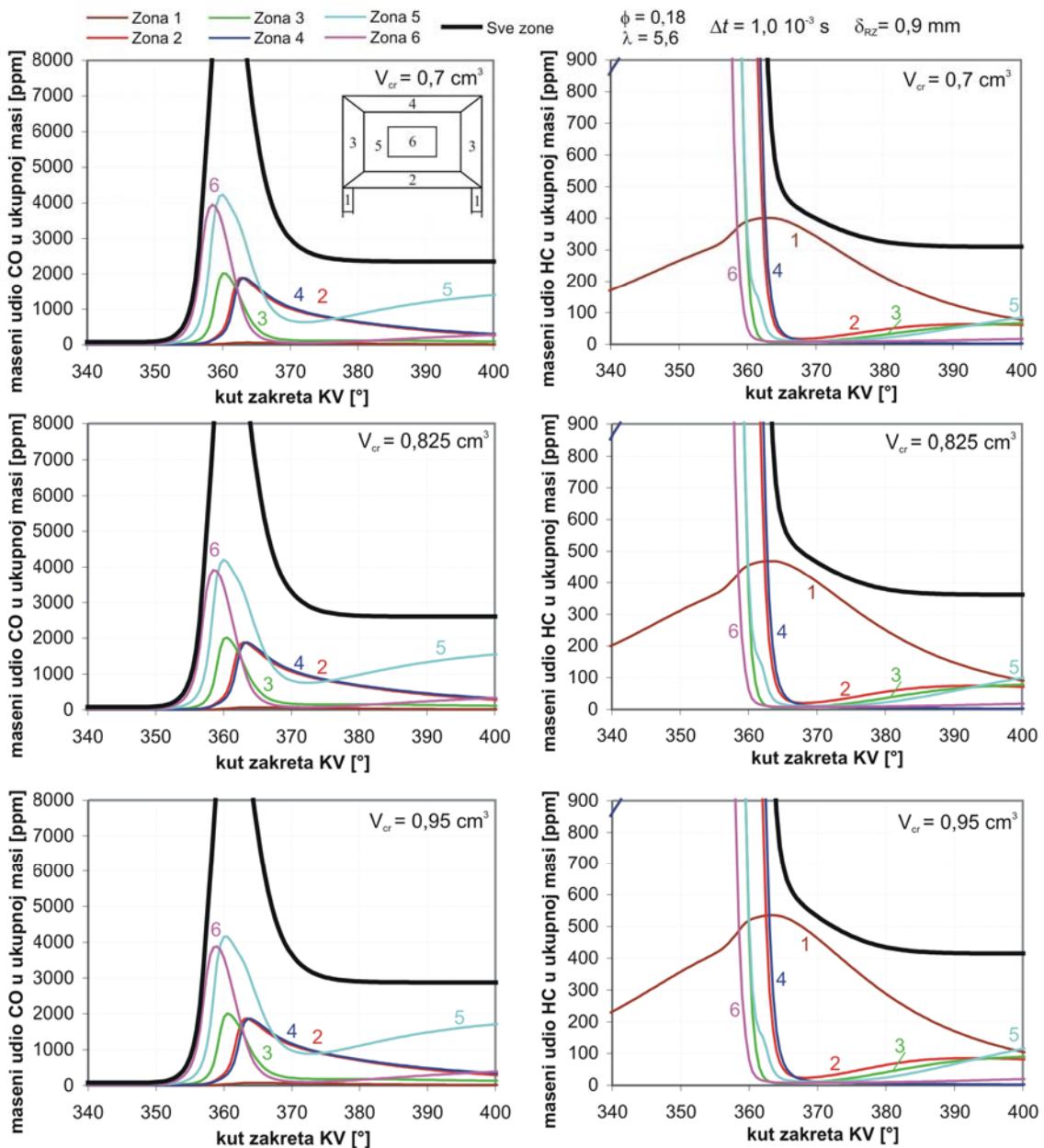
Slika 5.7. Promjena udjela CO i HC svih zona, za vrijeme dijela ciklusa, izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,20$.

Prema tome kod proračuna opterećenja s $\phi=0,20$ i dalje je glavni izvor emisije HC masa plinova u zoni 1, ali se izvor emisije CO mijenja i sve više masa u samom cilindru nepotpuno izgara i postaje njezin izvor. Stoga je kod radne točke s $\phi=0,20$ izvor emisije CO s jedne strane masa neizgorjelih plinova u zoni 1, a s druge strane nepotpuno izgorjela masa u rubnim zonama, pri čemu je omjer njihovog utjecaj približno 1:1. Ako se pogledaju rezultati emisija prikazani na slikama 3.35. i 3.36. vidi se da se promjena karakteristike izvora emisije CO može zamijetiti kao mali lom do tada relativno ravne krivulje izračunate emisije. No taj lom je kod eksperimentalnih rezultata još izraženiji, a lom se može vidjeti i kod

eksperimentalnih rezultata emisije HC, dok kod rezultata proračuna za HC tog loma još nema. Kao i u prethodnim radnim točkama razlog za to je skokovita promjena temperatura zona ovako, relativno grubo, diskretiziranog proračunskog prostora. To se dobro vidi kod daljnje smanjenja količine goriva, gdje se kod opterećenja s $\phi=0,18$ postiže naglji porast emisije CO, a kod još manjeg opterećenja i naglji porast izračunate emisije HC.

Promjena volumena zone procjepa, osim što utječe na masu plinova koja u nju stane za vrijeme kompresije, utječe i na izračunate temperature u zonama. Razlika u temperaturama vrlo je mala, pa u radnim točkama kod kojih je izgaranje u cilindru potpuno ne utječe na stvaranje neizgorjelih plinova, dok kod radnih točaka kod kojih se u cilindru počinje javljati nepotpuno izgaranje ta promjena temperature ima značajniji utjecaj. Kod proračuna s većim volumenom zone procjepa, temperatura u zonama je malo niža, pa je i nešto veći udio neizgorjelih plinova, a samim time i CO. Dakle s jedne strane zbog utjecaja mase u zoni 1 veći volumen dat će veću emisiju, a isto tako i zbog utjecaja različite temperature takav veći volumen dat će veću emisiju. Kako je opterećenje s $\phi=0,20$ na neki način na granici utjecaja različitih faktora na emisiju CO, izračunata promjena emisije CO s promjenom volumena zone 1 dešava se i zbog različitih temperatura u zonama i zbog različite količine neizgorjelih plinova u zoni 1. S obzirom na to, relativna promjena emisije CO u odnosu na proračun čak je malo povećana. S druge strane s obzirom da je razlika između proračunate i eksperimentalne emisije malo povećana, relativna promjena emisije CO u odnosu na eksperiment u ovoj radnoj točki je smanjena. Kako je pak kod HC izvor emisije i kod ovog opterećenja ostao isti, relativna promjena emisije HC u odnosu na proračun ostala je nepromijenjena, dok je relativna promjena emisije HC u odnosu na eksperiment malo smanjena zbog malog povećanja razlike između eksperimentalne i izračunate emisije.

Kod opterećenja s $\phi=0,18$, izgaranje u cilindru je postalo toliko nepotpuno (slika 5.8.) da je udio CO zone 1 gotovo potpuno zanemariv u odnosu na udjele CO ostalih zona. Što se tiče HC i dalje je glavnina HC oko GMT sadržana u zoni 1, no pretvaranje HC koji izlazi iz zone 1 tijekom ekspanzije je vrlo kratko i slabog je intenziteta, a što se manifestira i potpuno nezamjetnim porastom udjela CO za vrijeme ekspanzije. U ovoj radnoj točki zbog promjena opisanih ranije izračunata emisija CO bliža je eksperimentalnoj, u odnosu na radnu točku s $\phi=0,20$, dok je kod emisije HC ta razlika ostala ista. Prema tome s obzirom da se izvor emisije HC i dalje nije promijenio, relativna promjena emisije u odnosu na proračun ostala je na istoj razini, a budući da je i razlika između izračunate i eksperimentalne emisije ostala, relativna promjena emisije u odnosu na eksperiment isto je tako ostala nepromijenjena. Kod emisije CO s promjenom izvora emisije mijenja se i utjecaj volumena zone 1, pa se relativna promjena emisije u

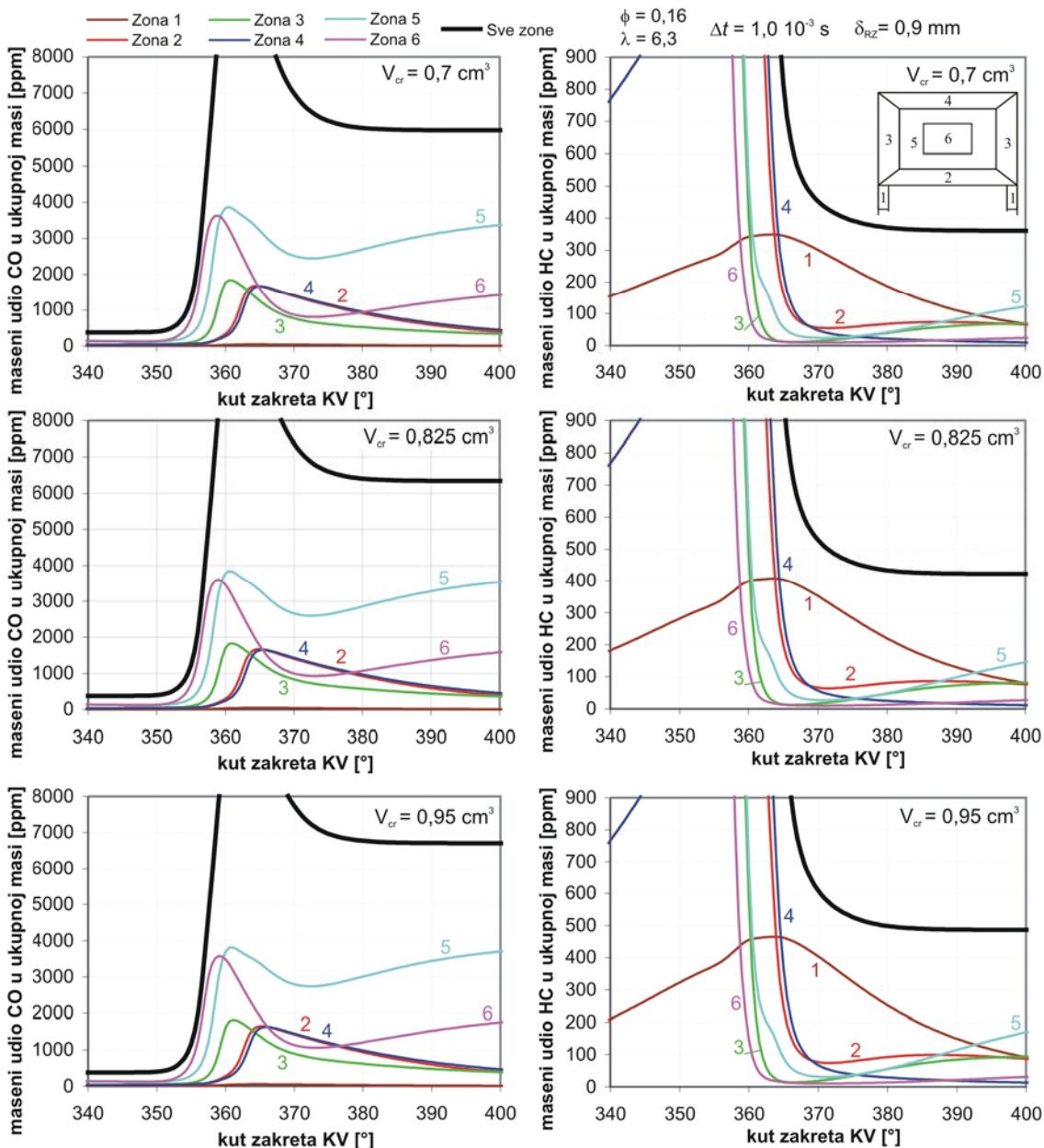


Slika 5.8. Promjena udjela CO i HC svih zona, za vrijeme dijela ciklusa, izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,18$.

odnosu na proračun smanjuje na $\sim 10\%$, no zbog smanjenja razlike između eksperimentalne i izračunate emisije, relativna promjena emisije s obzirom na eksperiment je povećana. Kako je ova promjena nastala zbog promjene u veličini odstupanja izračunate emisije CO od eksperimentalne, pitanje je da li se u ovom prijelaznom području može očekivati porast relativne promjene emisije, a ako i da u svakom slučaju ne toliki.

Daljnijim smanjivanjem količine ubrizganog goriva ($\phi=0,16$) započeti trend sve veće količine neizgorjelog goriva u središtu cilindra još se više povećava (slika 5.9.). Udio CO obje središnje zone sada je već jako izražen, pri čemu zona 5 daleko nadmašuje sve ostale zone. Ukupna emisija CO se pri tom

povećala gotovo tri puta u odnosu na emisiju kod opterećenja s $\phi=0,18$. Kod dijagrama za HC može se zamijetiti početak promjene izvora emisije HC. Iako je i dalje najveći udio HC neposredno nakon izgaranja u zoni 1, može se vidjeti da se i u ostalim zonama počinje javljati zamjetna količina ovih plinova nakon izgaranja. Prema tome u položaju koljenastog vratila od 370° dvije trećine HC i dalje je u zoni 1, ali je sada jedna trećina tih plinova u ostalim zonama, a najviše u zonama s najnižom temperaturom (zone 2 i 4). To pokazuje da se kod ovog opterećenja polagano počinje mijenjati izvor emisije HC, kao što se kod opterećenja s $\phi=0,22$ počeo mijenjati izvor emisije CO. Upravo iz tog razloga od ove radne točke, uz daljnje smanjenje opterećenja, počinje naglji porast izračunate emisije HC, što se vidi na slici 3.36.



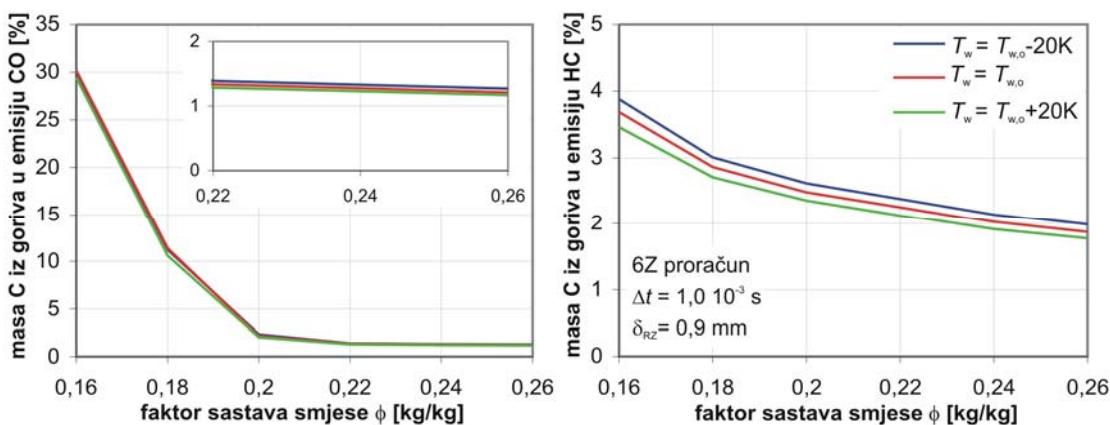
Slika 5.9. Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite veličine zone procjepa, pri opterećenju s $\phi=0,16$.

S obzirom da je u ovoj radnoj točki ($\phi=0,16$) glavni izvor emisije HC i dalje zona 1, relativna promjena te emisije s promjenom volumena zone 1 u odnosu na proračun (slika 5.4.) i dalje je na razini od 15%, ali s obzirom da se izračunata emisija malo odmakla od eksperimentalne, relativna promjena emisije u odnosu na eksperiment malo je smanjena (slika 5.5.). Kako emisija CO više uopće ne ovisi o količini neizgorjelih plinova zarobljenih u prostoru procjepa, već o promjeni temperature, a i s obzirom da je iznos te emisije narastao na poprilične vrijednosti, relativna promjena emisije CO pri promjeni volumena zone 1. se smanjuje.

5.3.2. Promjena temperatura stijenki prostora izgaranja

Promjena temperatura stijenki prostora izgaranja trebala bi utjecati na emisiju razmatranih produkata izgaranja putem sasvim drugačijeg mehanizma. Dok je s promjenom volumena zone procjepa mijenjana masa plinova koja je u području oko GMT zarobljena u toj zoni, te je na taj način mijenjana količina neizgorjelih produkata izgaranja, promjenom temperature stijenki prostora izgaranja mijenjati će se temperature u rubnim, a i u središnjim zonama, pa će neizgorjeli plinovi koji tijekom ekspanzije izlaze iz zone procjepa na različite načine sudjelovati u njihovoј daljnjoj pretvorbi. Isto će tako u radnim točkama s nižim opterećenjem, kod kojih se nepotpuno izgaranje dešava u rubnim i središnjim zonama, promjena temperatura stijenki utjecati na konačnu vrijednost tih neizgorjelih plinova putem promjene temperature zona.

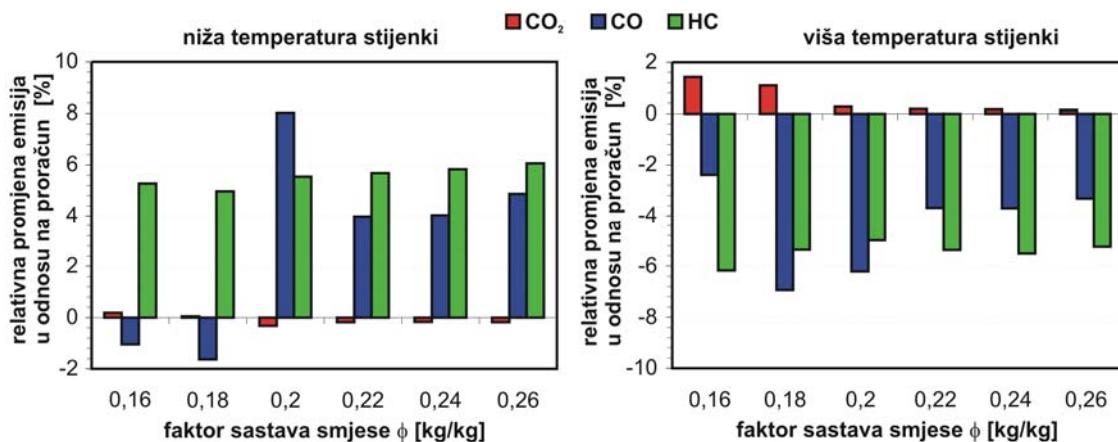
Općenita promjena emisije CO i HC pri promjeni temperatura stijenki, izračunata ranije opisanim proračunskim modelima, prikazana je na slici 5.10. Kao što se može vidjeti, povećanje prosječnih temperatura stijenki prostora izgaranja dovodi do smanjenja emisija CO i HC, dok s druge strane smanjenje tih temperatura dovodi do povećanja tih istih emisija. Usporedbom slike 5.10. sa slikom 5.3. vidi se da je promjena ovih emisija pri promjeni temperatura stijenki manja nego što je to kod promjene



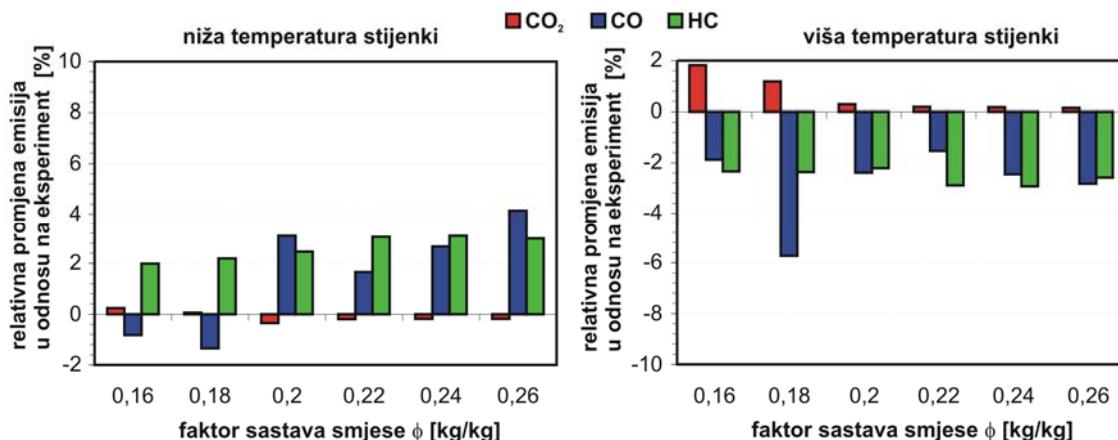
Slika 5.10. Izračunata promjena emisija CO (lijevo) i HC (desno) pri promjeni temperaturi stijenki prostora izgaranja.

volumena zone procjepa. Kako bi se bolje ocijenila veličina tih promjena i kod ove analize izračunate su ranije opisane relativne promjene emisija i to s obzirom na proračun (izraz (106)), te s obzirom na eksperiment (izraz (107)). Rezultati ovih relativnih promjena prikazani su na slikama 5.11. i 5.12.

Relativna promjena emisije HC u odnosu na proračun pokazuje da se ta promjena u cijelom promatranom području opterećenja kreće u rasponu od 5 - 6%. S druge strane relativna promjena emisije CO nema konstantan karakter. U području većeg opterećenja, kod kojeg je $\phi \geq 0,22$, a za koje je ranije pokazano da je glavni izvor emisije CO masa zarobljena u prostoru procjepa, relativna promjena emisije stabilno se kreće oko 4 %, dok je kod nižih opterećenja ta relativna promjena nestalna. Tako je kod opterećenja s $\phi = 0,20$ povećanje temperature dovelo do smanjenja relativne emisije CO za 6%, a snižavanje temperatura stijenki do povećanja od 8%. Kod sljedećeg opterećenja s $\phi = 0,18$ povećanje temperatura stijenki dovelo je do



Slika 5.11. Relativna promjena emisija pri sniženju i povišenju temperature stijenki prostora izgaranja za 20K, pri čemu je osnova izračunata emisija.



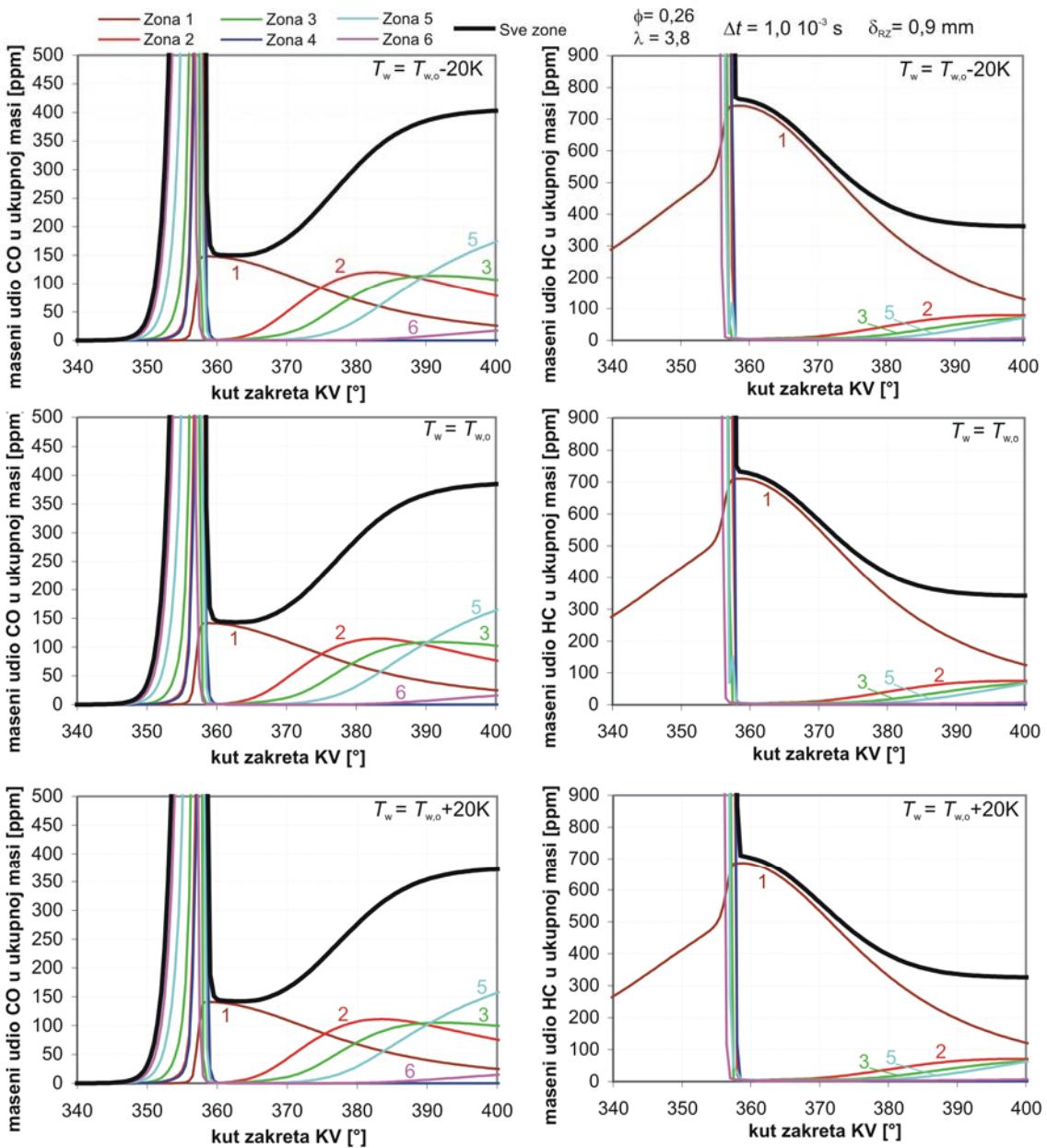
Slika 5.12. Relativna promjena emisija pri sniženju i povišenju temperature stijenki prostora izgaranja za 20K, pri čemu je osnova eksperimentalno određena emisija.

smanjenja emisije od 7%, ali je i sniženje temperature dovelo do smanjenja emisije od čak približno 2%. Kod opterećenja s $\phi=0,16$ povećanje temperatura stijenki dovelo je do smanjenja emisije od 2%, a snižavanje temperaturi stijenki dovelo je ponovno do smanjenja emisije CO od 1%. Kod relativne promjene emisije s obzirom na eksperiment (slika 5.12), slično kao i kod analize promjene volumena zone procjepa, relativne promjene su malo smanjene, pa se za emisiju HC i CO one kreću u rasponu od 2 - 3% uz dvije iznimke, kod opterećenja s $\phi=0,26$ relativna promjena emisije CO pri sniženim temperaturama stijenki je 4%, a kod opterećenja s $\phi=0,18$ relativna promjena emisije CO pri povišenim temperaturama stijenki je 6%.

Analiza dijagrama promjene udjela CO i HC po zonama za vrijeme trajanja visokotlačnog procesa pokazuje zašto pri promjeni temperatura stijenki dolazi do promjene emisija. Na slici 5.13. prikazan je slučaj s najvećim opterećenjem gdje se vidi da je zbog malih promjena u strukturi temperatura zona i male promjene tlaka u cilindru, koja se javlja zbog različitih početnih temperatura i različitih temperatura stijenki, najveća masa plinova u zoni 1, a samim time i najveća količina HC, dobivena kod najnižih temperatura stijenki. Iako se tijekom ekspanzije HC koji izlazi iz zone 1 pretvara u ostale spojeve, na kraju ekspanzije razlika, iako je smanjena, ostaje. Razlika u masi plinova u zoni 1 kod različitih temperatura stijenki manja je nego što je to kod različitih volumena zone 1 pa je utjecaj na konačnu promjenu emisije HC manji. Kao što je ranije objašnjeno glavni izvor emisije HC ostaje masa HC u zoni 1 i to se ne mijenja kroz sve razmatrane slučajeve opterećenja, iako je kod najmanjeg promatranog opterećenja ($\phi=0,16$) zamijećen porast udjela emisije koja dolazi iz rubnih zona uz klip i glavu. S obzirom na to, relativne promjene emisije HC vrlo se malo mijenjaju pri promjeni opterećenja.

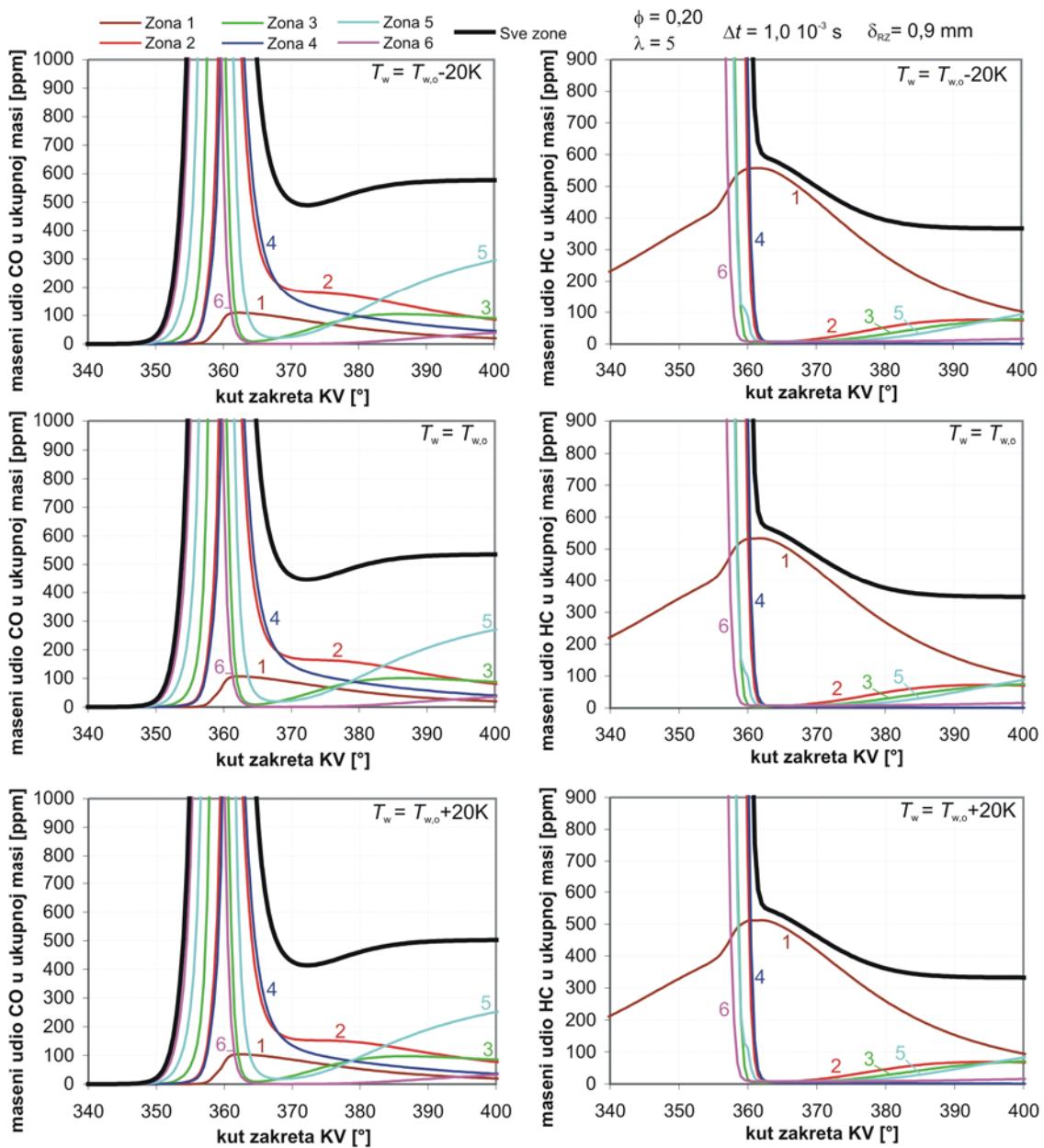
S druge strane slika 5.13. otkriva da je razlika u masi CO u zoni 1 u području oko GMT pri različitim temperaturama stijenki zanemariva. No smanjenjem temperatura stijenki period stagnacije ukupnog CO svih zona, koji se javlja kao posljedica ravnoteže između stvaranja CO iz neizgorjelih produkata i njegove apsorpcije putem pretvaranja u CO_2 , je skraćen. S druge strane porast udjela CO tijekom ekspanzije zbog pretvaranja dijela HC iz zone 1 u CO je povećan. To povećanje javlja se kao posljedica nižih temperatura u rubnim zonama i ranijeg zaustavljanja pretvorbe CO u CO_2 . Takva karakteristika promjene emisije CO pri promjeni temperatura stijenki pronalazi se i pri manjim opterećenjima sve do $\phi=0,20$, kada dolazi do promjene izvora emisije CO.

Kod tog opterećenja (slika 5.14.) za vrijeme izgaranja ne dolazi do potpune pretvorbe CO u CO_2 u zonama 2 i 4 koje predstavljaju rubne zone uz klip i glavu. Iako je dakle došlo do pojave nepotpunog izgaranja u glavnom



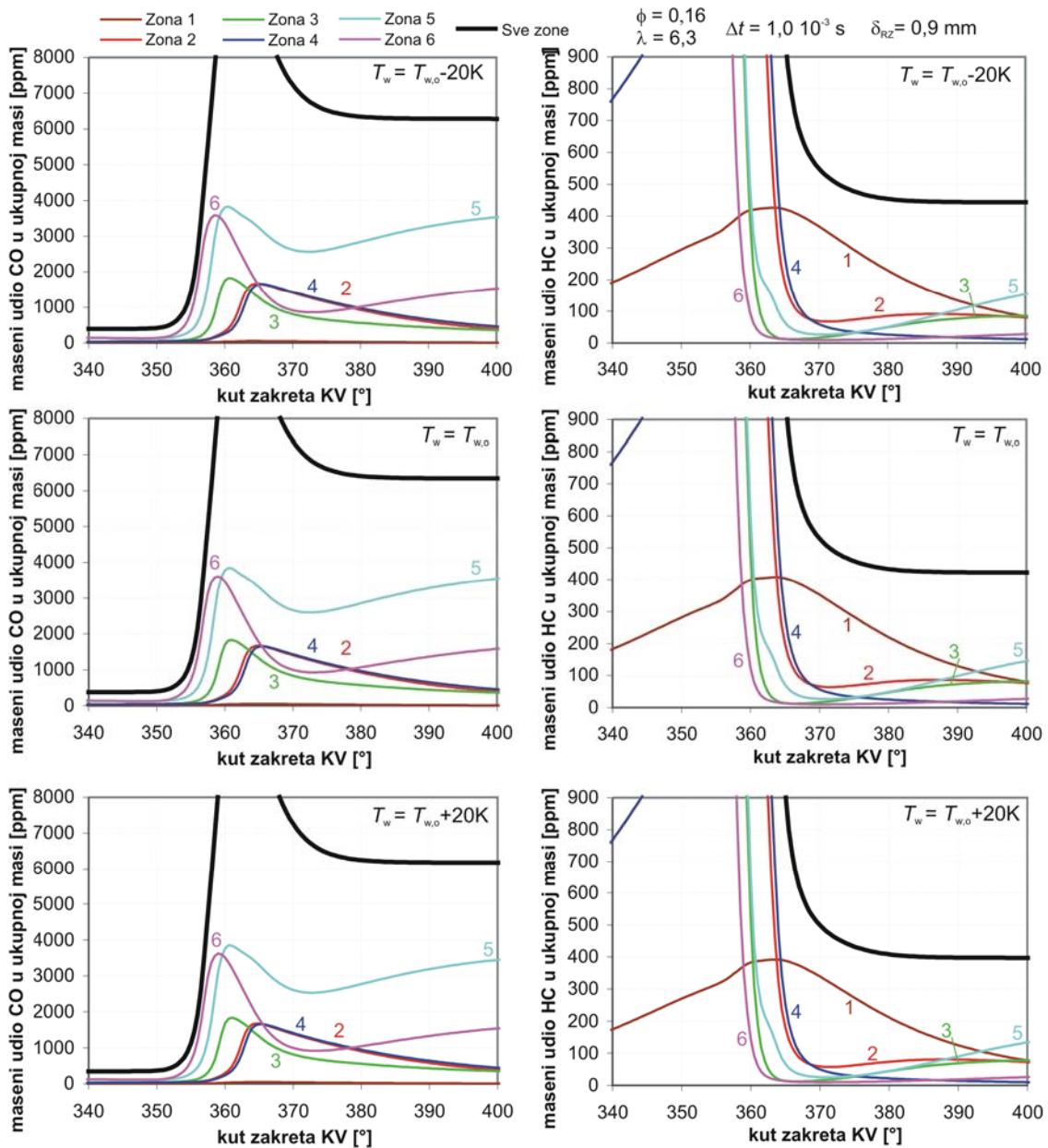
Slika 5.13. Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite razine temperatura stijenki prostora izgaranja, pri opterećenju s $\phi=0,26$.

prostoru cilindra, ono je ograničeno na rubne zone, pa je porast emisije CO još uvjek relativno mali. No promjena temperature stijenki prostora izgaranja, koja utječe na temperaturu rubnih zona, značajnije utječe na različitost stupnja pretvorbe CO u CO_2 u tim zonama, pa je relativna promjena emisije CO u odnosu na proračun, u ovoj radnoj točki ($\phi=0,20$) povećana. Ista ta relativna promjena emisije, ali u odnosu na eksperiment, ne doživljava značajniju promjenu zbog povećanja odstupanja rezultata proračuna od eksperimentalnog.



Slika 5.14. Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite razine temperatura stijenki prostora izgaranja, pri opterećenju s $\phi=0,20$.

Dalnjim smanjenjem opterećenja ($\phi=0,18$ i $\phi=0,16$) nepotpuna pretvorba CO pomiče se i na središnje zone, prvo na vanjsku središnju zonu 5, a zatim i na unutrašnju središnju zonu 6. S obzirom na veličine ovih zona one počinju dominirati emisijom CO, pa promjene temperturnih profila ovih zona počinju dominirati promjenama u emisiji. Osim tog na slici 5.15. koja pokazuje promjene udjela CO i HC po zonama za opterećenje s $\phi=0,16$ može se vidjeti da je porast udjela CO u zonama s višom temperaturom i zonama s nižom temperaturom dosta razmaknut. Tako u zonama 5 i 6 nagli porast nastaje prije GMT, a u zonama 2 i 4 nakon GMT. Stoga se može zaključiti da će u ovim radnim točkama proračunski model u pogledu



Slika 5.15. Promjena udjela CO i HC svih zona izračunata šestzonskim proračunom s tri različite razine temperatura stijenki prostora izgaranja, pri opterećenju s $\phi=0,16$.

emisije CO biti jako osjetljiv na početak izgaranja. Na slici 5.2. može se vidjeti da je sam početak izgaranja kod radnih točaka s $\phi=0,18$ i $\phi=0,16$, koji se javlja kao posljedica početka izgaranja u zoni 6, kod proračuna s najnižim temperaturama stijenki, malo raniji nego što je to kod ostala dva proračuna. Zbog toga se javlja raniji porast udjela CO, a dolazi i do promjena temperatura u zonama koje na kraju ekspanzije dovode do smanjenja ukupne količine CO u odnosu na proračune s višim temperaturama stijenki. To se ne slaže s rezultatima svih ostalih proračuna kod kojih snižavanje temperatura stijenki dovodi do povećanja emisije CO. No, iz prikazanog se jasno vidi da je u ovim radnim točkama, kod kojih je

udio CO koji nastaje u središtu cilindra sve veći, trenutak početka izgaranja vrlo bitan za emisiju CO, pa je vjerojatni razlog za ovo neslaganje s ostalim rezultatima upravo malo raniji početak izgaranja u ova dva slučaja.

5.3.3. Zaključak

S obzirom da je ova analiza temeljena na rezultatima simulacijskih proračuna, a da u literaturi nisu pronađeni eksperimentalni rezultati sličnih analiza kojima bi se neki od prikazanih trendova mogli potvrditi, konačni zaključci bit će malo šireg opsega. Prema prikazanim rezultatima može se očekivati da će promjena volumena prostora procjepa od 15% u području opterećenja HCCI motora od praznog hoda ($\phi=0,16$, $\lambda=6,3$), pa sve do maksimalnog opterećenja ($\phi=0,26$, $\lambda=3,8$), dovesti do promjene emisije HC u rasponu od 6 do 15 %. Pri tome će se s većim volumenom dobiti i veća emisija, dok će se s manjim volumenom emisija smanjiti. Smanjenjem opterećenja relativna promjena emisije HC će se smanjivati, pa se u praznom hodu može očekivati najmanja relativna promjena, a pri najvećem opterećenju najveća relativna promjena. Kod emisije CO razmatrano područje opterećenja podijeljeno je na dva dijela. Pri većem opterećenju, kod kojeg je ukupna emisija CO dosta niska, promjena volumena prostora procjepa može dovesti do promjene emisije CO od 6 – 14%. Pri tome se isto tako može očekivati snižavanje relativne promjene sa smanjenjem opterećenja. U području nižeg opterećenja kod kojeg je povećana ukupna emisija CO, može se očekivati promjena emisije CO od 4 - 10%. Pri tome se na prijelazu s opterećenja kod kojeg je izvor emisije CO prostor procjepa prema opterećenju kod kojeg je izvor te emisije središte cilindra, može očekivati lagani porast relativne promjene emisije, a onda ponovni pad.

Promjena temperatura stijenki cilindra od 20 K ima nešto slabiji, ali ipak evidentan, utjecaj na promjenu emisija. U cijelom razmatranom području opterećenja promjena temperatura stijenki od 20 K dovest će do promjene emisije HC u rasponu od 2 – 5%. Pri tome će se uz više temperature stijenki dobiti manja emisija, a uz niže temperature emisija će biti veća. Emisija CO isto kao i u ranijoj analizi ima dva karakteristična područja. Prvo u kojem glavnina emisije CO dolazi iz neizgorjelih ugljikovodika iz prostora procjepa, a javlja se kod većih opterećenja, te drugo kod nižih opterećenja gdje sve veća količina CO nastaje nepotpunim izgaranjem u rubnim i središnjim zonama. U prvom području opterećenja uslijed promjene temperatuta stijenki može se očekivati promjena emisije od 1 – 4%, dok se u drugom području na prijelazu može desiti lagani porast relativne promjene emisije uz kasniji pad na prethodno spomenutu razinu. Pri tome se isto kao i kod HC uz veću temperaturu dobije manja emisija i obrnuto. Osim toga, treba napomenuti da je u ovom drugom području opterećenja emisija CO izrazito osjetljiva na trenutak početka izgaranja, pa ju je za dobru analizu potrebno vrlo precizno držati konstantnom.

6. ZAKLJUČAK

Ovaj se rad bavi razvojem višezonskih proračunskih modela za izračunavanje promjena stanja u cilindru HCCI motora, analizom njihove učinkovitosti u predviđanju promjena tlaka, temperature, emisija i ostalih značajnih faktora, te analizom mogućnosti daljnog unaprjeđenja. S obzirom na fizikalna svojstva izgaranja u HCCI motoru, u proračunskim modelima koristi se kemijska kinetika, te se pomoću nje računaju promjene sastava mješavine plinova u cilindru, a kao posljedica tih promjena sastava i energija koja se izgaranjem oslobađa. S obzirom na velike proračunske zahtjeve koji se javljaju kod korištenja kemijske kinetike modeli su reducirani na relativno mali broj zona. Kao temelj istraživanja prvo je napravljen jednozonski proračunski model, a nakon njega prvi višezonski model s četiri zone i bez izmjene mase. Proračun četverozonskog modela izведен je na takav način da se sve diferencijalne jednadžbe svih zona izračunavaju istovremeno. Time je vrijeme računanja produljeno, ali je izbačen jedan od mogućih izvora pogrešaka, a to je pogrešna pretpostavka udjela promjene volumena zona u odnosu na ukupnu promjenu volumena cilindra. U model je ugrađena izmjena topline između zona i izmjena topline sa stijenkama prostora izgaranja. Nakon toga je razvijen šestzonski model kod kojeg je osim promjene broja zona uvedena i izmjena mase između njih. Izmjenom mase kompenziraju se problemi koji se javljaju zbog relativno grube diskretizacije prostora, tj. podjele na samo šest zona. Novi model geometrijski definira promjene volumena pojedinih zona i na taj način održava određene parametre proračuna konstantnim, što je potrebno za postizanje dobrih rezultata. Tu se npr. misli na debljine rubnih zona koje je potrebno održavati na određenoj vrijednosti kako bi se osjetio utjecaj stijenki na temperaturu tih zona, a samim time i na karakteristiku izgaranja u njima. I kod šestzonskog modela koristi se isti način rješavanja sustava diferencijalnih jednadžbi, tj. sve jednadžbe svih zona rješavaju se istovremeno, a izmjena mase izračunava se posebno razvijenim modelom u bezvremenskom području. Za potrebe inicijalizacije proračuna razvijen je model predviđanja temperatura rubnih zona, koji se temelji na predviđanju temperaturnog profila uz rub stijenke. Temeljem tih temperatura, razvijenim modelom distribucije mase po zonama izračunavaju se početni uvjeti u zonama. No, da bi se dobili početni uvjeti u cilindru, iz kojih se i izračunavaju početni uvjeti u zonama, svi razvijeni modeli povezani su s programom AVL Boost koji se inače koristi za izračunavanje promjena stanja u cijelom motoru, za cijelo vrijeme trajanja ciklusa. Proračunski model pretvoren je u programske kod na takav način da se u proračunima može koristi bilo koji mehanizam reakcija, pa je na taj način potpuno

fleksibilan u pogledu korištenog goriva. Osim toga na taj način jednostavno se može koristiti za usporedbu različitih mehanizama izgaranja istog goriva.

Razvijeni proračunski modeli verificirani su usporedbom rezultata četverozonskog proračuna s rezultatima jednozonskog, pri čemu je u oba proračuna izmjena topline isključena. Potom su oni validirani usporedbom niza proračuna s dostupnim rezultatima eksperimentalnih ispitivanja. Pritom su analizirani utjecaji raznih proračunskih konstanti, kao i rubnih uvjeta, na promjenu rezultata. Proračuni su provedeni s dva različita mehanizma izgaranja izoktana, pri čemu je izoktan korišten zbog toga što su dostupni eksperimentalni rezultati dobiveni upotrebom upravo tog goriva. U sklopu validacije provedena je analiza utjecaja vremenske konstante izmjene topline, debljine rubnih zona, te temperature rubnog uvjeta na usisu na rezultate. U rezultatima je promatrana promjena tlaka u cilindru, promjena brzine oslobođanja topline, promjena srednje temperature cilindra i temperatura po zonama, te promjena emisija CO, HC i CO₂. Potom je promatrana utjecaj primjene različitih korelacija za izmjenu topline na rezultate, pri čemu je osim radnih točaka s različitim stupnjem opterećenja promatrana i tzv. *gonjena* radna točka kod koje u cilindru uopće nema goriva. Razmatrane su korelacije Woschnija i Hohenberga, koje su razvijane za konvencionalne motore, a primijenjena je i nova Changova korelacija, koje je razvijana upravo za HCCI motore. Analiziran je mogući utjecaj korištenja proračuna propuhivanja pored klipa, kojeg za sada šestzonski proračunski model nema, a na kraju je ovaj proračun upotrijebljen za provedbu parametarske analize utjecaja volumena zone procjepa i temperatura stijenki prostora izgaranja na emisiju CO i HC.

Usporedba dva različita mehanizma oksidacije izoktana pokazala je vrlo različite promjene kemijskih spojeva pri sličnim uvjetima, koja dovodi do različitih vanjskih značajki, tj. do različitih vrijednosti veličina kao što su tlak i temperatura. Kod Golovitchevog mehanizma zamijećeno je vrlo izraženo tzv. predizgaranje, karakterizirano naglim padom udjela goriva i naglim porastom udjela ostalih ugljikovodika, te vrlo slabim porastom udjela CO. Glavno izgaranje odvija se s određenim zakašnjnjem u odnosu na ovo predizgaranje. Kod Chenovog mehanizma ne može se zamijetiti neko izraženo predizgaranje, a promjene kemijskih spojeva odvijaju se kontinuiranom brzinom. S obzirom da u eksperimentalnim rezultatima nije zamijećeno predizgaranje, u ostalim proračunima korišten je Chenov mehanizam, iako je on s obzirom na dosta veći broj kemijskih spojeva proračunski zahtjevniji.

Analiza utjecaja vremenske konstante izmjene topline pokazala je da je red veličine te konstante 1 ms. Povećanjem njene vrijednosti, u promatranom području, temperaturni raspon između pojedinih zona se širi, pa se samim time izračunato vrijeme izgaranja produljuje, a vršna vrijednost brzine oslobođanja topline se smanjuje. Ta značajka javlja se u cijelom području

opterećenja, a pokazano je i da povećanje te konstante uslijed proširenja temperaturnog raspona, uz iste početne i rubne uvjete, pomiče izgaranje prema naprijed. Kako se s promjenom vremenske konstante mijenjaju temperature unutar cilindra i trenutak izgaranja, tako se mijenjaju i izračunate emisije. Pri tome je i kod većeg i kod manjeg opterećenja s povećanjem vrijednosti vremenske konstante izračunata emisija CO smanjena, a emisija HC povećana.

Debljina rubnih zona, što je u ovom proračunskom modelu druga proračunska konstanta, isto tako utječe na promjenu tlaka, temperature te promjenu emisije. Početne vrijednosti debljine rubnih zona određene su iz radova [63, 65] kod kojih je ta debljina izračunavana posebnim proračunom rubnih slojeva. Promjena debljine rubnih zona prvenstveno utječe na temperaturu rubnih zona, a s obzirom da su rubne zone u međusobnoj interakciji s ostalim zonama, promjena temperatura rubnih zona utječe i na središnje zone. Taj utjecaj na središnje zone nešto je slabiji u odnosu na utjecaj promjene vremenske konstante. Povećanjem debljine rubnih zona temperaturni raspon između pojedinih zona se sužava, čime se izgaranje pomiče prema naprijed. Vršne vrijednosti brzine oslobađanja topline imaju različite značajke pri većem i pri manjem opterećenju. U području najvećeg opterećenja, kod kojeg je izgaranje gotovo potpuno, povećanje debljine rubnih zona povećava i vršnu vrijednost brzine oslobađanja topline, dok kod opterećenja praznog hoda, kod kojeg je izgaranje nepotpuno, povećanje debljine rubnih zona dovodi do smanjivanja tih vršnih vrijednosti. Kao i kod promjene veličine vremenske konstante, promjena debljine rubnih zona mijenja i izračunatu emisiju. I ovdje se drugačija karakteristika dobije pri različitim opterećenjima, pa su kod potpunog izgaranja s povećanjem debljine rubnih zona emisije CO i HC smanjene, dok su kod djelomičnog izgaranja, kojeg nalazimo kod praznog hoda, pri povećanju debljine rubnih zona izračunate emisije CO i HC povećane.

Analiza utjecaja proračunskih konstanti pokazala je da se promjenama vrijednosti tih konstanti mogu postići rezultati vrlo bliski eksperimentalnim. Podešavanjem proračuna prema dostupnim eksperimentalnim rezultatima, koji su kod motora s unutarnjim izgaranjem obično dosta šturi, otvara se mogućnost puno detaljnijeg pregleda zbivanja u cilindru motora za vrijeme njegova rada. Kao što je na više mjesta tijekom rada pokazano, analiza promjene pojedinih kemijskih spojeva ili njihovih grupa po zonama, te analiza promjena temperatura zona, pružaju mogućnost dubljeg pogleda na zbivanja u cilindru HCCI motora. S druge strane, s obzirom da su granice unutar kojih se kreću vrijednosti ovih konstanti relativno uske, a i s obzirom da je moguće fizikalno odrediti faktore koji mogu na njih utjecati, otvara se mogućnost da se u nastavku istraživanja ove konstante isto tako modeliraju. Pregledom rezultata za cijelo područje rada HCCI motora, dobivenih s istim vrijednostima proračunskih konstanti u svim radnim točkama, pokazalo se

da proračunski model i bez posebnog podešavanja tih konstanti daje vrlo dobra predviđanja toka tlaka i brzine oslobađanja topline, kao i dosta poboljšana predviđanja emisija CO i HC. Kako je emisije motora s unutarnjim izgaranjem, a posebno emisiju CO, izrazito teško modelirati, svaki je napredak vrijedan. U području opterećenja motora kod kojeg je izgaranje gotovo potpuno, u kojem jednozonski model uopće nema mogućnost predviđanja spomenutih emisija, šestzonski proračunski model radi to dosta dobro. Kod njega je u tim radnim točkama predviđena emisija ipak nešto niža od eksperimentalne, a razlog za to leži u još uvijek relativno gruboj diskretizaciji prostora zbog koje se ne obuhvaćaju efekti koji se javljaju u područjima kao što su uglovi prostora izgaranja, u kojima stijenke okružuju plinove sa više strana. Pored toga, tu su i ostali uzroci odstupanja proračunskih rezultata od eksperimentalnih kao npr. pretpostavka idealnog plina, pretpostavka savršenog miješanja usisane smjese i zaostalih produkata izgaranja, nepostojanje gubitaka propuhivanja pored klipa, pojednostavljeni mehanizam izgaranja izoktana, konstantne temperature pojedinih stijenki prostora izgaranja kao i pretpostavke njihovih vrijednosti, način izračunavanja izmjene topline itd. No, bez obzira na to trend promjene emisija s promjenom opterećenja je uhvaćen i porast emisije CO i HC sa smanjivanjem opterećenja dosta je dobro predviđen. Kod vrlo niskog opterećenja, ispod razine praznog hoda, odstupanja emisije su nešto veća, no to se s promjenom proračunskih konstanti sigurno može popraviti.

Analiza utjecaja propuhivanja pored klipa pokazala je da propuhivanje ima vrlo mali utjecaj na promjene tlaka u cilindru, te da nema gotovo nikakav utjecaj na promjenu temperature. No, iako je utjecaj na promjenu tlaka mali, njime se može objasniti 10% odstupanja izračunatog tlaka od eksperimentalnog. Utjecaj broja zona na promjene tlaka i temperature, bez utjecaja na izgaranje, mnogo je veći, pa se kod gonjenog motora upotrebom šestzonskog modela razlika između izračunatog i eksperimentalnog tlaka i temperature smanjuje za 43 % i 46% u odnosu na jednozonski proračun. Dakle, podjela prostora cilindra na zone pored toga što utječe na proces izgaranja u cilindru, utječe i na izračunate promjene tlaka i temperature prije i poslije izgaranja. Isto tako pokazano je da različite korelacije za izračunavanje izmjene topline mogu značajno promijeniti vrijednosti i trendove promjena temperature cilindra, a samim time i tlaka i sastava. Woschnijeva i Hohenbergova korelacija, obje razvijane za konvencionalne motore, u različitim radnim točkama pokazuju različite stupnjeve točnosti predviđanja promjene temperature i tlaka. Kod Woschnijeve korelacije izmjena topline za vrijeme kompresije nešto je niža, dok je kod izgaranja malo previsoka. Woschnijeva korelacija naime izračunava povećani koeficijent prijelaza topline nakon pojave izgaranja kao posljedicu utjecaja fronte plamena na izmjenu topline. S druge strane, Hohenbergova korelacija izračunava nešto veću izmjenu topline za vrijeme

kompresije, no kako ona potpuno zanemaruje utjecaj plamena na promjenu izmjene topline, za vrijeme izgaranja izmjena topline je malo preniska. Najbolje podudaranje rezultata proračuna s rezultatima eksperimentalnih ispitivanja dobiveno je upotrebom Changove korelacije koja i je prilagođena za izgaranje u HCCI motoru. Kod nje je izmjena topline za vrijeme kompresije još malo povećana, ali je ona za vrijeme izgaranja negdje između Woschnijeve i Hohenbergove. Chang uzima u obzir utjecaj plamena na povećanje izmjene topline, ali mu zbog nepostojanja jasne fronte plamena pridaje manji značaj nego što je to kod konvencionalnih motora.

Primjenom šestzonskog proračuna na parametarsku analizu utjecaja veličine zone procjepa i temperatura stijenki prostora izgaranja pokazano je da ova dva parametra imaju značajan utjecaj na emisiju HC i CO. Nadalje je pokazano da se uz promjenu volumena zone procjepa od 15 % mogu očekivati promjene emisije HC od 6 – 15 %, te promjene emisije CO od 4 – 14%, zavisno o kojem se području opterećenja radi. Pored toga promjena temperatura stijenki od 20 K može dovesti do promjene emisije HC u rasponu od 2 – 5 %, te promjene emisije CO u rasponu od 1 – 4%. Posebno je važan utjecaj ovih parametara na emisije razmatranih plinova u gornjem području opterećenja HCCI motora. To područje opterećenja predstavlja srednje područje opterećenja nekog od konvencionalnih motora (Ottov i Dieselov), u kojem oni provedu veliki dio svog životnog vijeka. U slučaju kombiniranog rada (HCCI - Otto, ili HCCI - Diesel) upravo u tim dijelovima konvencionalni način izgaranja zamijenit će se HCCI-om, pa je to područje posebno važno.

Na kraju je još potrebno definirati moguće smjerove daljnog razvoja ovog proračunskog modela. Iako su neki od njih već ranije spomenuti ovdje će se svi sakupiti na jednom mjestu. U dalnjem istraživanju mogu se na temelju opsežnih rezultata simulacijskih proračuna motora s različitim konfiguracijama prostora izgaranja i njihove usporedbе s eksperimentalnim rezultatima, modelirati proračunske konstante: vremenska konstanta izmjene topline i debljina rubnih zona. S obzirom na ranije pokazani napredak pri prelasku s jedne na šest zona, a i s obzirom na nekoliko analiza koje pokazuju potrebu za gušćom razdiobom prostora, kao mogući napredak nameće se povećanje broja zona. Pritom bi se uz povećanje broja zona iznad deset trebalo prebaciti na tzv. razdvojeni rješavač kod kojeg bi se diferencijalne jednadžbe pojedinih zona rješavale odvojeno. Kod takvog rješavanja potrebno je na temelju ukupne promjene volumena cilindra definirati promjenu volumena svake zone, pa se ovaj model može koristiti za ocjenjivanje različitih strategija određivanja tih promjena volumena zona. Osim toga model se može unaprijediti uvođenjem proračuna propuhivanja pored klipa, kao i razvijanjem modela za izračunavanje izmjene topline.

7. LITERATURA

- [1] S. Onishi, et. al.: *Active Thermo-Atmosphere Combustion – A New Combustion Process for Internal Combustion Engines*, SAE Paper 790501, 1979.
- [2] M. Noguchi, et. al.: *A Study on Gasoline Engine Combustion by Observation of Intermediate Reactive Products During Combustion*, SAE Paper 790840, 1979.
- [3] P. M. Najt, D. E. Foster: *Compression – Ignited Homogeneous Charge Combustion*, SAE Paper 830264, 1983.
- [4] R. H. Thring: *Homogeneous Charge Compression – Ignition (HCCI) Engines*, SAE Paper 892068, 1989.
- [5] A. Fürhapter, W. F. Piock, G. K. Fraidl: *Homogene Selbstzündung- Die praktische Umsetzung am transienten Vollmotor*, MTZ 02/2004, str. 94. – 101.
- [6] N. Iida: Combustion Analysis of Methanol-Fueled Active Thermo-Atmosphere Combustion (Atac) Engine Using a Spectroscopic Observation, SAE Paper 940684, 1994.
- [7] B. Johansson, et. al.: Optical Diagnostics Applied to a Naturally Aspirated Homogeneous Charge Compression Ignition Engine, SEA Paper 1999-01-3649, 1999.
- [8] B. Johansson, et. al.: A Study of the Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion Process By Chemiluminescence Imaging, SAE Paper 1999-01-3680, 1999.
- [9] Y. Ishibashi, M. Asai: Improving the Exhaust Emissions of Two-Stroke Engines By Applying the Activated Radical Combustion, SAE Paper 960742, 1996.
- [10] Y. Ishibashi, M. Asai: A Low-Pressure Pneumatic Direct-Injection, Two-Stroke Engine By Activated Radical Combustion Concept, SAE Paper 980757, 1998.
- [11] Honda Readies Activated Radical Combustion Two –Stroke Engine for Production, Automotive Engineering, December 1997, str. 101-102.
- [12] R. Gentili: Experimental Study on Atac (Active Thermo-Atmosphere Combustion) in a Two-Stroke Gasoline Engine, SAE Paper 970363.
- [13] R. Gentili: ATAC and GDI in a Small Two-Stroke Engine, SAE Paper, 1999-01-3273, 1999.
- [14] N. Lida: A Study of Autoignition and Combustion in Two-Stroke Atac Engine-Compression Ignition Characteristics of Low Carbon Alternative Fuels, SAE Paper 1999-01-3274, 1999.

- [15] M. Christensen, P. Einewall, B. Johansson: Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Using Isooctane, Ethanol and Natural Gas--A Comparison With Spark-Ignition Operation, SAE Paper 972874, 1997.
- [16] M. Christensen, B. Johansson: Influence of Mixture Quality on Homogeneous Charge Compression Ignition, SAE Paper 982454, 1998.
- [17] M. Christensen, B. Johansson, P. J. H. Amneus, F. Mauss: Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition, SAE Paper 980787, 1998.
- [18] M. Christensen, B. Johansson: Homogeneous Charge Compression Ignition With Water Injection, SAE Paper 1999-01-0182, 1999.
- [19] M. Christensen, A. Hultqvist, B. Johansson: Demonstrating the Multi-Fuel Capability of a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine With Variable Compression Ratio, SAE Paper 1999-01-3679, 1999.
- [20] P. Amneus, et. al.: Homogeneous Charge Compression Ignition Engine: Experiments and Detailed Chemical Kinetic Calculations, Proceedings of the Fourth International Symposium COMODIA 98, 20. - 23. Srpanj, Kyoto, Japan, 1998.
- [21] Y. Takeda, N. Keiichi: Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion With Extremely Early Staged Fuel Injection, SAE Paper 961163, 1996.
- [22] K. Nakagome, K. Niimura: Combustion and Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion Engine, SAE Paper 970898.
- [23] N. Shimazaki, H. Akagawa, A. Harada, S. Sasaki, T. Miyamoto, K. Tsujimura: The Effects of Mixture Formation on Premixed Lean Diesel Combustion, SAE Paper 980533, 1998.
- [24] H. Akagawa, T. Hashizume, T. Miyamoto, K. Tsujimura: Combustion and Emission Characteristics of Multiple-Stage Diesel Combustion, SAE Paper 980505, 1998.
- [25] N. Shimazaki, H. Akagawa, K. Tsujimura: An Experimental Study of Premixed Lean Diesel Combustion Process, SAE Paper 1999-01-0181, 1999.
- [26] N. Shimazaki, H. Akagawa, T. Hashizume, A. Harada, S. Sasaki, T. Miyamoto: Approaches to Solve Problems of the Premixed Lean Diesel Combustion, SAE Paper 1999-01-0183, 1999.

- [27] H. Ogawa L. Chenyu, S. Tosaka, Y. Fujivara, N. Miyamoto: Combustion Mechanism Analysis with In-Chamber Gas Composition Measurements in a Premixed Lean Compression Ignition Engine, Proceedings of the Fourth International Symposium COMODIA 98, 20. – 23. srpanj, Kyoto, Japan, 1998.
 - [28] Y. Iwabuchi, K. Kawai, T. Shoji, Y. Takeda: Trial of New Concept Diesel Combustion System - Premixed Compression-Ignition Combustion, SAE Paper 1999-01-0185, 1999.
 - [29] H. Suzuki: Exhaust Purification of Diesel Engines By Homogeneous Charge With Compression Ignition--Part 1: Experimental Investigation of Combustion and Exhaust Emission Behavior Under Pre-Mixed Homogeneous Charge Compression Ignition Method SAE Paper 970313, 1997.
 - [30] M. Odaka, N. Koike, H. Suzuki: Combustion Control Method of Homogeneous Charge Diesel Engines, SAE Paper 980509, 1998.
 - [31] M. Odaka, N. Koike, H. Ishii, H. Suzuki: Search for Optimizing Control Method of Homogeneous Charge Diesel Combustion, SAE Paper 1999-01-0184, 1999.
 - [32] T. W. Ryan, T. J. Callahan : Homogeneous Charge Compression Ignition of Diesel Fuel, SAE Paper 961160, 1996.
 - [33] T. W Ryan, A. W Gray: Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) of Diesel Fuel, SAE Paper 971676, 1997.
 - [34] J. Lavy, et. al. : Innovative Ultra-Low NOx Controlled Auto-Ignition Combustion Process for Gasoline Engines: the 4-Space Project, SAE Paper 2000-01-1837, 2000.
 - [35] D. Law, et. al.: 4-Stroke Active Combustion (Controlled Auto Ignition) Investigation Using a Single Cylinder Engine with Lotus Active Valve Train (AVT), Internation Conference on 21st century emissions technology C588/006/2000, 2000.
 - [36] B. Johansson: Homogeneous Charge Compression Ignition engines?, International Journal of Vehicle Design, Volume 44, Numbers 1-2, 12 April 2007 , str. 1-19, 2007.
 - [37] TIAx, Global Insight: The Future of Heavy-Duty Powertrains: 2007 to 2020, studija o predviđanjima promjena na pogonima kamiona, autobusa i ostalih teških vozila do 2020 g., ožujak, 2005.
 - [38] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, C. K. Westbrook: A comprehensive modeling study of n-heptan oxidation, Combustion and Flame, vol. 114, br. 1-2 , str. 149-177, 1998.
 - [39] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz,C. K. Westbrook: Comprehensive Modeling Study of Iso-Octane Oxidation, Combustion and Flame, vol. 129, br. 3, str. 253-280, 2002.
-

- [40] Y.-H. Chen, J. Y. Chen: Development of Isooctane Skeletal Mechanisms for Fast and Accurate Predictions of SOC and Emissions of HCCI Engines based on LLNL Detailed Mechanism, 2005 Fall Meeting Western States Combustion Institute, Stanford, CA, October 17-18., Paper 05F-44, 2005.
 - [41] Shigeyuki Tanaka, Ferran Ayala, James C. Keck: A Reduced Chemical Kinetic Model for HCCI Combustion of Primary Reference Fuels in a Rapid Compression Machine, Combustion and Flame, vol. 133, br. 4, str. 467-481, 2003.
 - [42] A. Patel, S. C. Kong, R. D. Reitz: Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations, SAE Paper 2004-01-0558, 2004.
 - [43] V. Golovichev, R. Ogink: Numerical Evaluation of Main Features of Chemical Models for Motor Fuel Surrogates, Joint meeting of the Scandinavian-Nordic and Italian Sections of the Combustion Institute Ishia (Napoli), 18. - 21. rujan, 2003.
 - [44] R. Ogink, V. Golovitchev: Reaction Mechanisms for Natural Gas and Gasoline in Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engine Modeling, 6th Int. Conf. on Engines for Automobile, SAE Naples, ICE2003, Italy, rujan 2003.
 - [45] R. Dibble et. al.: Current Research in HCCI Combustion at UC Berkeley and LLNL, SAE Paper 2001-01-2511, 2001.
 - [46] J. R. Smith, S. M. Aceves, C. Westbrook, W. Pitz: Modeling of Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) of Methane, Proceedings of the 1997 ASME International Combustion Engine Fall Technical Conference, ICE-Vol. 29-3, Paper 97-ICE-68, str. 85-90, 1997.
 - [47] S M. Aceves, J. R. Smith, C. Westbrook, W. Pitz: Compression Ratio Effect on Methane HCCI Combustion, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol 121, No. 3., str. 569-574, 1999.
 - [48] D. Flowers et. al.: HCCI in a CFR Engine: Experiments and Detailed Kinetic Modeling, SAE Paper 2000-01-0328, 2000.
 - [49] J. Martinez-Frias et. al.: HCCI Engine Control by Thermal Management, SAE Paper 2000-01-2869, 2000.
 - [50] S. B. Fiveland, D. N. Assanis: A Four-Stroke Homogeneous Charge Compression Ignition Engine Simulation for Combustion and Performance Studies, SAE Paper 2000-01-0332, 2000.
 - [51] R. Ogink, V. Golovitchev: Gasoline HCCI Modeling: Computer Program Combining Detailed Chemistry and Gas Exchange Processes, SAE Paper 2001-01-3614, 2001.
-

- [52] C. M. Lund: A General Computer Program for Calculating Time-Dependent Phenomena Involving One-Dimensional Hydrodynamics, Transport, and Detailed Chemical Kinetics, Lawrence Livermore National Laboratory report UCRL-52504, 1995.
- [53] G. Woschni: A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine, SAE Paper 670931, 1967.
- [54] R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Miller: Chemkin-III: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics, Sandia National Labs report SAND96-8216, 1996.
- [55] D. N. Assanis, J. B. Heywood: Development and Use of Computer Simulation of the Turbocompounded Diesel System for Engine Performance and Component Heat Transfer Studies, SAE Paper 860329, 1986.
- [56] AVL Boost user's guide, version 4.03, AVL Graz.
- [57] A. E. Lutz, R. J. Kee, J. A. Miller: SENKIN: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics With Sensitivity Analysis, Sandia National Labs report SAND87-8248, 1988.
- [58] S. M. Aceves et. al.: A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions, SAE Paper, 2000-01-0327, 2000.
- [59] S. C. Kong, C. D. Marriott, R. D. Reitz, M. Christensen: Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD, SAE Paper 2001-01-1026, 2001.
- [60] J. Kusaka, Y. Daisho: Multi-Dimensional Modeling Combined with a Detailed Kinetics (Application for HCCI of Natural Gas), the Fifth International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA 2001), 1. – 4. srpnja 2001., Nagoya, 2001.
- [61] A. Bourdon, G. Rymer, R. Wanker: Optimisation of a 5-Step kinetic Scheme for HCCI Applications, SAE Paper 2004 - 01- 0559, 2004.
- [62] O. Colin, A. P. Cruz, S. Jay: Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations, Proceedings of the Combustion Institute, vol. 30, br. 2. str. 2649–2656, siječanj 2005.
- [63] S. B. Fiveland D. N. Assanis: Development of a Two-Zone HCCI Combustion Model Accounting for Boundary Layer Effects, SAE 2001-01-1028, 2001.

- [64] S. B. Fiveland, D.N. Assanis, R. Agama, M. Christensen, B. Johansson, J. Hiltner, F. Mauss: Experimental and Simulated Results Detailing the Sensitivity of Natural Gas HCCI Engines to Fuel Composition, SAE Paper 2001-01-3609, 2001.
 - [65] S. B. Fiveland, D. N. Assanis: Development and Validation of a Quasi-Dimensional Model for HCCI Engine Performance and Emissions Studies under Turbocharged Conditions, SAE Paper 2002-01-1757.
 - [66] W. L. Easley, A. Agarwal, G. A. Lavoie: Modeling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry, SAE Paper 2001-01-1029, 2001.
 - [67] T. Noda, D. E. Foster: A Numerical Study to Control Combustion Duration of Hydrogen-Fueled HCCI by Using Multi-Zone Chemical Kinetics Simulation, SAE Paper 2001-01-0250, 2001.
 - [69] S. M. Aceves et. al.: A Sequential Fluid-Mechanic Chemical-Kinetic Model of Propane HCCI Combustion, SAE Paper 2001-01-1027, 2001.
 - [70] S. M. Aceves et. al.: A Decoupled Model of Detailed Fluid Mechanics Followed by Detailed Chemical Kinetics for Prediction of Iso-Octane HCCI Combustion, SAE Paper 2001-01-3612, 2001.
 - [71] S. M. Aceves et. al.: HCCI Combustion: Analysis and Experiments, SAE Paper 2001-01-2077, 2001.
 - [72] S. M. Aceves et. al.: Spatial Analysis of Emissions Sources for HCCI Combustion at Low Loads Using a Multi-Zone Model, SAE Paper 2004-01-1910, 2004.
 - [73] S. M. Aceves et. al.: Analysis of the Effect of Geometry Generated Turbulence on HCCI Combustion by Multi-Zone Modeling, SAE Brazil Fuels & Lubricants Meeting & Exhibition, Rio de Janeiro, Brazil, 11. - 13. svibanj 2005.
 - [74] S. M. Aceves et. al.: Analysis of Premixed Charge Compression Ignition Combustion with a Sequential Fluid Mechanics-Multizone Chemical Kinetics Model, 2005-01-0115, 2005.
 - [75] R. Ogink, V. Golovitchev: Gasoline HCCI Modeling: An Engine Cycle Simulation Code with a Multi-Zone Combustion Model, SAE Paper 2002-01-1745, 2002.
 - [76] R. Ogink: Applications and Results of a User-Defined, Detailed-Chemistry HCCI Combustion Model in the AVL BOOST Cycle Simulation Code, International User Meeting 2003, AVL, Graz, Austria 14. – 15. Listopad 2003.
 - [77] A. Babajimopoulos, D. N. Assanis, S. B. Fiveland: An Approach for Modeling the Effects of Gas Exchange Processes on HCCI Combustion and Its Application in Evaluating Variable Valve Timing Control Strategies, SAE Paper 2002-01-2829, 2002.
-

- [78] A. Babajimopoulos, G. A. Lavoie, D. N. Assanis: Modeling HCCI Combustion with High Levels of Residual Gas Fraction – A Comparison of Two VVA Strategies, SAE Paper 2003-01-3220, 2003.
 - [79] N. P. Komninos, D. T. Hountalas, D. A. Kouremenos: Development of a New Multi-Zone Model for the Description of Physical Processes in HCCI Engines, SAE Paper 2004-01-0562, 2004.
 - [80] N. P. Komninos, D. T. Hountalas, D. A. Kouremenos: Description of in Cylinder Combustion Processes in HCCI Engines Using a Multi-Zone Model, SAE Paper 2005-01-0171, 2005.
 - [81] P. Kongseperep, M. D. Checkel, B. Kashani: A Stand-Alone Multi-Zone Model for Combustion in HCCI Engines, Proceedings of ICEF2005, ASME Internal Combustion Engine Division 2005 Fall Technical Conference, September 11-14, Ottawa, Canada, 2005.
 - [82] P. Kongseperep, M. D. Checkel: Novel Method of Setting Initial Conditions for Multi-Zone HCCI Combustion Modeling, SAE Paper 2007-01-0674, 2007.
 - [83] T. Amano, S. Morimoto, Y. Kawabata: Modeling of the Effect of Air/Fuel Ratio and Temperature Distribution on HCCI Engines, SAE Paper 2001-01-1024, 2001.
 - [84] J. A. Eng, W. R. Leppard, T. M. Sloane: The Effect of Di-Tertiary Butyl Peroxide (DTBP) Addition to Gasoline on HCCI Combustion, SAE Paper 2003-01-3170, 2003.
 - [85] P. E. Yelvington, W. H. Green: Prediction of the Knock Limit and Viable Operating Range for a Homogeneous-Charge Compression Ignition (HCCI) Engine, SAE Paper 2003-01-1092, 2003.
 - [86] H. Xu, M. Liu, S. Gharahbaghi, S. Richardson: Modelling of HCCI Engines: Comparison of Single-zone, Multi-zone and Test Data, SAE Paper 2005-01-2123, 2005.
 - [87] W. Zeng, M. Xie, M. Jia: Numerical investigation on the application of catalytic combustion to HCCI engines, Chemical Engineering Journal, Volume 127, Br. 1-3, str. 81-93, 1. ožujak 2007.
 - [88] I. Glassman: Combustion, 2nd edition, ISBN: 0-12-285851-4 Academic press INC., London, 1987.
 - [89] R. G. Gilbert, K. Luther, J. Troe: Theory of Thermal Unimolecular Reactions in the Fall Off Range II. Weak Collision Rate Constants, Ber Bunsenges Phys. Chem., 87, str. 169-177, 1983.
 - [90] J. B. Heywood: Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill, ISBN: 0-07-100499-8, Singapore, 1988.
 - [91] A. Galović: Termodinamika I, FSB, ISBN: 953-6313-44-8, Zagreb, 2002.
-

- [92] W. J. D. Annand: Heat Transfer in the Cylinders of Reciprocating Internal Combustion Engines, Proc. Instn Mech. Engrs., vol. 177., br. 36., str. 973-990, 1963.
- [93] G. F. Hohenberg: Advanced Approaches for Heat Transfer Calculations, SAE Paper 790825, 1979.
- [94] G. Woschni: Einfluß von Rußablagerungen auf den Wärmeübergang zwischen Arbeitsgas und Wand im Dieselmotor, zbornik radova „Der Arbeitsprozeß des Verbrennungsmotors“, Graz, 1991.
- [95] J. Chang, O. Güralf, Z. Filipi, D. Assanis, T. W. Kuo, P. Najt, R. Rask: New Heat Transfer Correlation for an HCCI Engine Derived from Measurements of Instantaneous Surface Heat Flux, SAE paper 2004-01-2996, 2004.
- [96] P. N. Brown, G. D. Byrne, A. C. Hindmarsh: VODE: A Variable-Coefficient ODE Solver, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, volume 10., br. 5., str. 1038-1051, 1989.
- [97] A. Galović: Nauka o toplini II, FSB, ISBN: 953-6313-10-3, Zagreb, 1997.
- [98] R. Ogink, V. Golovitchev: Generalised Skeletal Reaction Mechanism For Aliphatic Hydrocarbons (From Methane To Iso-octane) For CFD Engine Modelling, First Biennial Meeting of the Scandinavian-Nordic Section of the Combustion Institute, Göteborg, 2001.
- [99] <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html>
- [100] J. E. Dec, M. Sjöberg: A Parametric Study of HCCI Combustion – the Sources of Emissions at Low Loads and the Effects of GDI Fuel Injection, SAE Paper 2003-01-0752, 2003.
- [101] M. Christensen, A. Hultqvist, B. Johansson: The Effect of Piston Topland Geometry on Emissions of Unburned Hydrocarbons From a Homogeneous Charge Compression Ignition (Hcci) Engine, SAE Paper 2001-01-1893, 2001.
- [102] S. M. Aceves et. al.: Piston-Liner Crevice Geometry Effect on HCCI Combustion by Multi-Zone Analysis, SAE Paper 2002-01-2869, 2002.
- [103] F. A. Williams: Combustion theory, The Benjamin/Cummings Publishing Company INC., ISBN: 0-8053-981-5, Menolo Park, California, 1985.

PRILOZI

Prilog 1. Preračunavanje masenih udjela

U poglavlju 2.3.4. opisan je način prikaza mješavine plinova u programu AVL Boost te u proračunu s kemijskom kinetikom. Osim toga prikazan je nacrt modela pretvorbe iz jednog načina prikaza u drugi, a u ovom prilogu taj nacrt je pretvoren u matematičke jednadžbe.

Izračunavanje masenih udjela u Boostu iz kemijskih masenih udjela

Maseni udio goriva jednak je:

$$x_G^b = x_{C_xH_yO_z}^k \quad (108)$$

Maseni udio produkata izgaranja jednak je:

$$x_{PI}^b = 1 - \frac{x_{O_2}^k}{x_{O_2/Z}} - x_{C_xH_yO_z}^k \quad (109)$$

gdje je: $x_{O_2/Z}$ - maseni udio kisika u zraku (0.231561067).

Maseni udio zraka jednak je:

$$x_Z^b = \frac{x_{O_2}^k}{x_{O_2/Z}} = 1 - x_G^b - x_{PI}^b \quad (110)$$

Maseni udio izgorjelog goriva u trenutku 2 izračunava se iz podataka o masenim udjelima u trenutku 1:

$$x_{IG}^b = x_G^1 + x_{C_xH_yO_z}^1 - x_{C_xH_yO_z}^2 \quad (111)$$

Izračunavanje kemijskih masenih udjela iz masenih u Boostu

Maseni udio kemijskog spoja koji predstavlja gorivo jednak je:

$$x_{C_xH_yO_z}^k = x_G^b \quad (112)$$

Maseni udio kisika je:

$$x_{O_2}^k = x_Z^b \cdot x_{O_2/Z}^b \quad (113)$$

Maseni udio dušika je:

$$x_{N_2}^k = x_Z^b \cdot \left(1 - x_{O_2/Z}^b\right) + x_{PI}^b \cdot \frac{x_{N_2}^{KVP} - \frac{1 - x_{O_2/Z}}{x_{O_2/Z}} \cdot x_{O_2}^{KVP}}{1 - \frac{x_{O_2}^{KVP}}{x_{O_2/Z}} - x_{C_xH_yO_z}^{KVP}} \quad (114)$$

gdje su: $x_{C_xH_yO_z}^{KVP}$, $x_{N_2}^{KVP}$ i $x_{O_2}^{KVP}$ maseni udjeli goriva, dušika i kisika na kraju visokotlačnog procesa prethodnog ciklusa.

Maseni udjeli ostalih kemijskih spojeva jednaki su:

$$x_i^k = x_{PI}^b \cdot \frac{x_i^{KVP}}{1 - \frac{x_{O_2}^{KVP}}{x_{O_2/Z}} - x_{C_xH_yO_z}^{KVP}} \quad (115)$$

gdje je: x_i^{KVP} maseni udio razmatranog kemijskog spoja na kraju visokotlačnog procesa prethodnog ciklusa.

Prilog 2. Izračunavanje promjene sastava produkata izgaranja za vrijeme izmjene radnog medija.

Stanje mješavine plinova u trenutku otvaranja ispušnog ventila (IVO) zadano je tlakom (p_1), temperaturom (T_1) i masenim udjelima kemijskih spojeva x_i^{KVP} . U trenutku zatvaranja usisnih ventila poznat je tlak i temperatura mješavine (p_2 i T_2). Izmjena radnog medija odvija se u vremenu Δt . Proračunom promjene sastava izračunava se kako bi se mijenjao sastav ako bi se tlak i temperatura u vremenu Δt prema zakonu za politropske promjene stanja promijenili sa (p_1 i T_1) na (p_2 i T_2). Za to će se iskoristiti sustav diferencijalnih jednadžbi postavljenih izrazom (30):

$$\frac{dx_i}{dt} = M_i \cdot v \cdot \dot{\omega}_i \quad i=1, \dots, N_{sp} \quad (116)$$

Brzina stvaranja kemijskih spojeva $\dot{\omega}_i$ može se izračunati uz poznati sastav x_i , te poznatu temperaturu i tlak mješavine. Pomoću jednadžbe stanja plina uz poznati sastav, tlak i temperaturu isto se tako može izračunati i specifični volumen v .

S obzirom na pretpostavku da je promjena stanja od $(p_1 \text{ i } T_1)$ na $(p_2 \text{ i } T_2)$ politropska slijedi da je u nekom trenutku t za koji vrijedi $0 \leq t \leq \Delta t$ tlak jednak:

$$p(t) = p_1 \cdot \left[\frac{1}{\left[\left(\frac{p_1}{p_2} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right] \cdot \left(\frac{t}{\Delta t} \right) + 1} \right]^n, \quad (117)$$

a temperatura je:

$$T(t) = T_1 \cdot \left[\frac{1}{\left[\left(\frac{p_1}{p_2} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right] \cdot \left(\frac{t}{\Delta t} \right) + 1} \right]^{\frac{n-1}{n}}, \quad (118)$$

gdje je n eksponent politropske promjene stanja koji se računa pomoću:

$$n = \frac{\ln \frac{p_1}{p_2}}{\ln \frac{p_1}{p_2} - \ln \frac{T_1}{T_2}}. \quad (119)$$

Uz ovako zadane tlak i temperaturu sustav jednadžbi (116) postaju funkcije masenih udjela x_i i vremena t :

$$\frac{dx_i}{dt} = f(x_i, t), \quad (120)$$

što onda čini sustav s N_{sp} diferencijalnih jednadžbi prvoga reda koji se onda može riješiti nekom od metoda za njihovo rješavanje.

Prilog 3. Izvod diferencijalnih jednadžbi višeozonskog modela

U točki 2.3.1. prikazan je izvod diferencijalnih jednadžbi jednozonskog modela koje se sastoje od jednadžbe za temperaturu (29) i jednadžbi za promjenu sastava (30). S obzirom na pretpostavke višeozonskog modela opisane u točki 2.4.1. ranije spomenute jednadžbe (29) i (30) mogu se postaviti za svaku zonu posebno. Na taj se način iz jednadžbe (29) dobije:

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_{v,j}} \cdot \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{dQ_j}{dt} - \frac{p_c}{m_j} \frac{dV_j}{dt} - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_{ij} \cdot \dot{\omega}_{ij} \cdot M_i) \right], \quad (121)$$

gdje je indeks $i=1, \dots, N_{sp}$ i predstavlja oznaku kemijskog spoja, a indeks $j=1, \dots, N_{zn}$ i predstavlja oznaku zone. Za svaki volumen zone pri tom vrijedi jednadžba stanja plina pa se može zapisati:

$$V_j = \frac{m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c} \quad (122)$$

$$\frac{dV_j}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\frac{m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c} \right] \quad (123)$$

S obzirom da je pretpostavljeno da za vrijeme rješavanja jednadžbi nema izmjene mase između zona, što znači da je masa unutar zona konstantna, desna strana jednadžbe (123) može se nadalje transformirati pa vrijedi:

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c} \right] = m_j \frac{d}{dt} \left[\frac{R_j \cdot T_j}{p_c} \right] = m_j \frac{\frac{d}{dt} (R_j \cdot T_j) p_c - R_j \cdot T_j \frac{dp_c}{dt}}{p_c^2} \quad (124)$$

$$= m_j \frac{\frac{d}{dt} \left(T_j \frac{dR_j}{dt} + R_j \frac{dT_j}{dt} \right) p_c - R_j \cdot T_j \frac{dp_c}{dt}}{p_c^2} = \frac{dV_j}{dt} \quad (125)$$

Ako se sada izraz (125) uvrsti u (121) onda se dobije:

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_{v,j}} \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{dQ_j}{dt} - \frac{p_c}{m_j} \left[m_j \frac{\left(T_j \frac{dR_j}{dt} + R_j \frac{dT_j}{dt} \right) p_c - R_j \cdot T_j \frac{dp_c}{dt}}{p_c^2} \right] - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_{ij} \cdot \dot{\omega}_{ij} \cdot M_i) \right] \quad (126)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_{v,j}} \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{dQ_j}{dt} - T_j \frac{dR_j}{dt} - R_j \frac{dT_j}{dt} + \frac{R_j \cdot T_j}{p_c} \frac{dp_c}{dt} - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_{ij} \cdot \dot{\omega}_{ij} \cdot M_i) \right]. \quad (127)$$

Ako se sada iz desnog dijela jednadžbe (127) izdvoji član koji sadrži brzinu promjene temperature $\frac{dT_j}{dt}$ zone i prebaci na lijevu stranu tada se dobije:

$$\frac{dT_j}{dt} + \frac{R_j}{\bar{c}_{v,j}} \frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_{v,j}} \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{dQ_j}{dt} - T_j \frac{dR_j}{dt} + \frac{R_j \cdot T_j}{p_c} \frac{dp_c}{dt} - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_{ij} \cdot \dot{\omega}_{ij} \cdot M_i) \right] \quad (128)$$

Ljeva strana jednadžbe (128) može se nadalje pretvoriti pa se dobije:

$$\frac{dT_j}{dt} + \frac{R_j}{\bar{c}_{v,j}} \frac{dT_j}{dt} = \frac{dT_j}{dt} \left(1 + \frac{R_j}{\bar{c}_{v,j}} \right) = \frac{dT_j}{dt} \left(\frac{\bar{c}_{v,j} + R_j}{\bar{c}_{v,j}} \right) \quad (129)$$

Prema [97] vrijedi:

$$\bar{c}_{v,j} + R_j = \bar{c}_{p,j}, \quad (130)$$

pa se uvrštenjem (130) u (129) i (128) dobije:

$$\frac{dT_j}{dt} \left(\frac{\bar{c}_{p,j}}{\bar{c}_{v,j}} \right) = \frac{1}{\bar{c}_{v,j}} \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{dQ_j}{dt} - T_j \frac{dR_j}{dt} + \frac{R_j \cdot T_j}{p_c} \frac{dp_c}{dt} - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_{ij} \cdot \dot{\omega}_{ij} \cdot M_i) \right]. \quad (131)$$

Prebacivanjem omjera specifičnih toplinskih kapaciteta s lijeve strane na desnu dobije se konačan izraz za promjenu temperature pojedine zone, prikazan u točki 2.4.1.(jednadžba (45)):

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_{p,j}} \left[\frac{1}{m_j} \cdot \frac{dQ_j}{dt} - T_j \frac{dR_j}{dt} + \frac{R_j \cdot T_j}{p_c} \frac{dp_c}{dt} - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} (u_{ij} \cdot \dot{\omega}_{ij} \cdot M_i) \right]. \quad (132)$$

S obzirom da se u jednadžbi (132) nalazi faktor promjene tlaka u cilindru, koji je nepoznat, tako se sustavu jednadžbi koji se sastoji od jednadžbi promjena temperatura zona (132) i jednadžbi promjena masenih udjela pojednih vrsta u svakoj zoni (u točki 2.4.1. prikazane jednadžbom (48)) mora dodati još jedna jednadžba. Ta jednadžba dobije se iz zbroja volumena svih zona koji mora biti jednak volumenu cilindra:

$$V_c = \sum_{j=1}^{N_{zn}} V_j = \sum_{j=1}^{N_{zn}} \frac{m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c} = \frac{\sum_{j=1}^{N_{zn}} m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c}. \quad (133)$$

Deriviranjem lijeve i desne strane jednadžbe (133) dobije se:

$$\frac{dV_c}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\sum_{j=1}^{N_{zn}} m_j \cdot R_j \cdot T_j}{p_c} \right) = \frac{\frac{d}{dt} \left(\sum_{j=1}^{N_{zn}} m_j \cdot R_j \cdot T_j \right)}{p_c} - \frac{dp_c}{dt} \frac{\sum_{j=1}^{N_{zn}} (m_j \cdot R_j \cdot T_j)}{p_c^2} \quad (134)$$

S obzirom na pretpostavku konstantnih masa u zonama derivacija prvog pribrojnika u brojniku na desnoj strani može se provesti na sljedeći način:

$$\frac{dV_c}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{N_{zn}} \left[m_j \cdot p_c \cdot \left(\frac{dR_j}{dt} \cdot T_j + \frac{dT_j}{dt} \cdot R_j \right) \right] - \frac{dp_c}{dt} \sum_{j=1}^{N_{zn}} (m_j \cdot R_j \cdot T_j)}{p_c^2}. \quad (135)$$

Daljnjom matematičkom pretvorbom dobije se:

$$\frac{\sum_{j=1}^{N_{zn}} (m_j \cdot R_j \cdot T_j)}{p_c} \frac{dp_c}{dt} - \sum_{j=1}^{N_{zn}} \left[m_j \cdot R_j \cdot \frac{dT_j}{dt} \right] = \sum_{j=1}^{N_{zn}} \left[m_j \cdot T_j \cdot \frac{dR_j}{dt} \right] - p_c \cdot \frac{dV_c}{dt}, \quad (136)$$

a s obzirom da prvi razlomak na lijevoj strani odgovara vrijednosti volumena cilindra (vidi jednadžbu (133)), tada vrijedi:

$$V_c \cdot \frac{dp_c}{dt} - \sum_{j=1}^{N_{zn}} \left[m_j \cdot R_j \cdot \frac{dT_j}{dt} \right] = \sum_{j=1}^{N_{zn}} \left[m_j \cdot T_j \cdot \frac{dR_j}{dt} \right] - p_c \cdot \frac{dV_c}{dt}. \quad (137)$$

Jednadžbom (137) upotpunjuje se ranije spomenuti sustav diferencijalnih jednadžbi, a ista ta jednadžba u točki 2.4.1. prikazana je jednadžbom (47).

Prilog 4. Izračunavanje masenih udjela zona četverozonskog modela

U točki 2.4.3. prikazano je kako se kod četverozonskog modela na temelju prepostavljenog udjela volumena u rubnim zonama x_{Vzn} izračunava debljina rubnih zona δ_{RZ} (jednadžba (58)). Pomoću te debljine i općih geometrijskih značajki motora nadalje se izračunavaju maseni udjeli mješavine plinova u pojedinim zonama. Kako je kod četverozonskog modela prepostavljeno da je stanje u svim zonama na početku visokotlačnog procesa međusobno jednak, tako su maseni udjeli jednak volumnim udjelima. Volumeni pojedinih zona na početku visokotlačnog procesa izračunavaju se pomoću:

$$V_{klip} = \max \left[\left(A_{klip} \cdot \delta_{RZ} \right), \left(\frac{D_c^2 \cdot \pi}{4} \delta_{RZ} \right) \right] \quad (138)$$

$$V_{glava} = \max \left[\left(A_{glava} \cdot \delta_{RZ} \right), \left(\frac{D_c^2 \cdot \pi}{4} \delta_{RZ} \right) \right] \quad (139)$$

$$V_{st.cil} = \max \left[\left(\frac{A_{st.cil.GMT} + A_{st.cil.DMT}}{2} \cdot \delta_{RZ} \right), \left(\frac{H}{2} \cdot D_c \cdot \pi \cdot \delta_{RZ} \right) \right]. \quad (140)$$

S obzirom na ranije spomenutu prepostavku jednakosti volumnih i masenih udjela, maseni udjeli plinova u rubnim zonama jednak su:

$$x_{Z, \text{klip}} = \frac{V_{\text{klip}}}{V_H + V_K} \quad (141)$$

$$x_{Z, \text{glava}} = \frac{V_{\text{glava}}}{V_H + V_K} \quad (142)$$

$$x_{Z, \text{st.cil}} = \frac{V_{\text{st.cil}}}{V_H + V_K} \quad (143)$$

Na temelju izračunatih masenih udjela rubnih zona izračunava se maseni udio središnje zone pomoću:

$$x_{Z, \text{sred}} = 1 - x_{Z, \text{klip}} - x_{Z, \text{glava}} - x_{Z, \text{st.cil}} \quad (144)$$

Prilog 5. Izračunavanje volumena zona šestzonskog modela

U skladu sa slikom 2.16. svakom položaju klipa h odgovara jedinstvena raspodjela volumena cilindra na zone. Volumen zone 1 (V_1) konstantan je za cijelo vrijeme trajanja ciklusa i zadaje se kao ulazni podatak zajedno s geometrijom klipnog mehanizma.

Volumen zone 2 dobije se pomoću jednadžbi za izračunavanje volumena krnjeg stožca, pri čemu je baza tog stožca ima tzv. računski promjer klipa ($D_{\text{kl}, r}$) koji može, ali i ne mora, biti jednak stvarnom promjeru klipa i izračunava se iz:

$$D_{\text{kl}, r} = \sqrt{\frac{4 \cdot A_{\text{klip}}}{\pi}} . \quad (145)$$

Prema tome volumen zone 2 jednak je:

$$V_2 = \frac{\pi \cdot \delta_{\text{RZ}}}{3} \left(\frac{3}{4} \cdot D_{\text{kl}, r}^2 - \frac{3}{2} \cdot D_{\text{kl}, r} \cdot \delta_{\text{RZ}} + \delta_{\text{RZ}}^2 \right) \quad (146)$$

Volumen zone 3 dosta ovisi o trenutnom položaju klipa, a prema slici 2.16. ima oblik cijevi debljine δ_{RZ} sa skošenim rubovima. Duljina vanjskog ruba te cijevi jednaka je tzv. proračunskoj visini stijenke cilindra ($h_{\text{st.cil}, r}$) koja se dobije iz:

$$h_{\text{st.cil}, r} = h + h_0 \quad (147)$$

gdje je: h_0 , [m] – proračunska visina stijenke cilindra kada je klip u GMT.

Prema tome volumen zone 3 jednak je:

$$V_3 = \frac{D_c^2 \cdot \pi}{4} \cdot h_{st.cil,r} - \frac{\pi \cdot \delta_{RZ}}{3} \left(\frac{3}{4} \cdot D_c^2 - \frac{3}{2} \cdot D_c \cdot \delta_{RZ} + \delta_{RZ}^2 \right) - \frac{(D_c - 2 \cdot \delta_{RZ})^2 \cdot \pi}{4} (h_{st.cil,r} - 2 \cdot \delta_{RZ}) \quad (148)$$

Zona 4 ima isti oblik kao i zona 2 pa se na istovjetan način i računa. Prema tome prvo se izračunava računski promjer glave ($D_{gl,r}$):

$$D_{gl,r} = \sqrt{\frac{4 \cdot A_{glava}}{\pi}}, \quad (149)$$

a potom i volumen zone 4:

$$V_4 = \frac{\pi \cdot \delta_{RZ}}{3} \left(\frac{3}{4} \cdot D_{gl,r}^2 - \frac{3}{2} \cdot D_{gl,r} \cdot \delta_{RZ} + \delta_{RZ}^2 \right) \quad (150)$$

Volumen zone 5 i zone 6 jednaki su i predstavljaju preostali prostor u cilindru pa se izračunavaju pomoću:

$$V_5 = V_6 = \frac{\frac{D_c^2 \cdot \pi}{4} \cdot h - V_1 - V_2 - V_3 - V_4}{2} \quad (151)$$

Prilog 6. Izračunavanje temperature nakon miješanja dviju masa pri konstantnom volumenu.

Ako se pretpostavi da se dvije mase različitog sastava, različitih temperatura i tlakova miješaju bez promjene ukupnog volumena tada prema [91] vrijedi:

$$U_I = U_{II} \quad (152)$$

gdje su: U_I [J] – unutarnja energija mase prije miješanja; U_{II} [J] – unutarnja energija mase nakon miješanja.

Unutarnja energija mase prije miješanja može se prikazati pomoću:

$$U_I = m_1 \cdot \bar{u}_1 + m_2 \cdot \bar{u}_2 \quad (153)$$

gdje su: m_i , [kg] – masa pojedinog dijela prije miješanja; \bar{u}_j , [J/kg] – specifična unutarnja energija mješavine plinova svake pojedine mase prije miješanja.

S obzirom na način definiranja smjese plinova i njihovih termodinamičkih značajki (točka 2.3.2.) specifična unutarnja energija mješavine plinova može se izračunati pomoću:

$$\bar{u}_j = \sum_{i=1}^{N_{sp}} (x_i \cdot u_i) \quad (154)$$

gdje su: x_i , [kg/kg] – maseni udio i -tog kemijskog spoja; u_i , [J/kg] – specifična unutarnja energija i -tog kemijskog spoja.

Kako specifična unutarnja energija i -tog kemijskog spoja ovisi o trenutnoj temperaturi plina, specifična unutarnja energija mješavne plinova ovisi o temperaturi plina i o masenim udjelima kemijskih spojeva u mješavini $\bar{u}_j = f(x_{ij}, T_j)$.

Prema tome jednadžba (153) može se prikazati kao:

$$U_I = m_1 \cdot \bar{u}_1(x_{i1}, T_1) + m_2 \cdot \bar{u}_2(x_{i2}, T_2) \quad (155)$$

S druge strane unutarnja energija plinova nakon miješanja može se prikazati kao:

$$U_{II} = (m_1 + m_2) \cdot \bar{u}_m(x_{im}, T_m) \quad (156)$$

gdje su: x_{im} , [kg/kg] – maseni udio i -tog kemijskog spoja nakon miješanja dviju masa; T_m , [K] – temperatura mješavine.

Ako se specifična unutarnja energija mješavine plinova pri temperaturi T_m prikaže kao:

$$\bar{u}_m(x_{im}, T_m) = [\bar{c}_v]_{T_0}^{T_m} (T_m - T_0) + \bar{u}_{m,0}(x_{im}, T_0) \quad (157)$$

gdje su: $[\bar{c}_v]_{T_0}^{T_m}$, [J/(kgK)] – srednji specifični toplinski kapacitet mješavine u rasponu od T_0 do T_m ; $\bar{u}_{m,0}$, [J/kg] – specifična unutarnja energija mješavine sastava x_{im} pri temperaturi T_0 ;

tada se srednji specifični toplinski kapacitet mješavine u rasponu od T_0 do T_m može izračunati iz:

$$[\bar{c}_v]_{T_0}^{T_m} = \frac{\bar{u}_m(x_{im}, T_m) - \bar{u}_{m,0}(x_{im}, T_0)}{(T_m - T_0)}. \quad (158)$$

Pri tome se maseni udjeli svakog kemijskog spoja nakon miješanja dobije iz:

$$x_{im} = \frac{m_1 \cdot x_{i1} + m_2 \cdot x_{i2}}{m_1 + m_2}. \quad (159)$$

Uvrštenjem jednadžbe (157) u jednadžbu koja se dobije uvrštavanjem jednadžbi (155) i (156) u jednadžbu (152), te njenom matematičkom pretvorbom dobije se:

$$T_m = \frac{m_1 \cdot \bar{u}_1(x_{i,1}, T_1) + m_2 \cdot \bar{u}_2(x_{i,2}, T_2) - (m_1 + m_2) \bar{u}_{m,0}(x_{i,m}, T_0)}{(m_1 + m_2) \cdot [\bar{c}_v]_{T_0}^{T_m}} + T_0. \quad (160)$$

Iz jednadžbe (160) može se vidjeti da je za njeno rješavanje potrebno odrediti srednji specifični toplinski kapacitet mješavine u rasponu od T_0 do T_m $([\bar{c}_v]_{T_0}^{T_m})$, a za njegovo izračunavanje potrebno je znati vrijednost temperature mješavine T_m . Zbog toga će se vrijednost temperature mješavine (T_m) izračunati iteracijskim postupkom. U prvom koraku vrijednost temperature mješavine prepostaviti će se iz:

$$T_{m,p} = \frac{m_1 \cdot T_1 + m_2 \cdot T_2}{(m_1 + m_2)} \quad (161)$$

S tom temperaturom pomoću jednadžbe (158) izračunat će se srednji specifični toplinski kapacitet mješavine koji će se zatim uvrstiti u jednadžbu (160) iz koje će se izračunati temperatura mješavine T_m . U slučaju da je apsolutna vrijednost razlike između izračunate i prepostavljene temperature mješavine veća od granične vrijednosti tolerancije $(|T_m - T_{m,p}| > tol)$, tada se postupak ponavlja pri čemu je nova prepostavljena vrijednost temperature mješavine jednaka izračunatoj. Kada apsolutna vrijednost ranije spomenute razlike postane manja od granične vrijednosti tolerancije, iteracija se prekida i posljednja izračunata vrijednost temperature mješavine uzima se kao konačno rješenje.

ŽIVOTOPIS

Darko Kozarac rođen je 18. rujna 1975. godine u Zagrebu. Osnovnu školu pohađao je u Zagrebu, a maturirao je 1994. g. na V gimnaziji u Zagrebu.

Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu upisuje 1995. g., te na istom fakultetu 2001 g. na konstrukcijskom smjeru, usmjerenje motori i vozila, brani diplomski rad s naslovom „*Utjecaj konfiguracije usisnog i ispušnog sustava na radne parametre automobilskog Ottovog motora*“.

Od veljače 2002. g. zaposlen je na Fakultetu strojarstva i brodogradnje, na Katedri za motore i vozila, gdje radi kao znanstveni novak na projektu *Modeliranje radnih stanja u motoru s unutarnjim izgaranjem*, a zatim na projektu *Biogoriva – nužnost održive mobilnosti u Republici Hrvatskoj*.

Tijekom 2006. g. pohađao je seminar Proaktivni pristup hrvatskih laboratorija korištenju EU fondova, a tijekom 2007 g. pohađao je tečaj s naslovom Upravljanje projektima.

Tijekom 2007. godine radio je kao recenzent za časopis Energy & Fuels kojeg izdaje Američko udruženje kemičara (engl. American Chemical Society).

Pored rada na projektu sudjeluje u izvođenju nastave pri čemu drži vježbe iz kolegija: Motori s unutarnjim izgaranjem A i B, Volumetrički strojevi, Konstrukcije motora, Računalne simulacije u razvoju motora i vozila, te auditornu i laboratorijsku vježbu Ispitivanje motora na kočnici, kolegija Brodskih strojeva-laboratorij.

Kao autor i koautor objavio je 12 znanstvenih i 3 stručna rada u Hrvatskoj i inozemstvu.

Služi se engleski jezikom. Oženjen je.

BIOGRAPHY

Darko Kozarac was born in Zagreb on 18th September, 1975. He attended primary school in Zagreb and he obtained his high school diploma from the 5th gimnazija (a grammar school) in Zagreb in 1994.

In 1995 he started his studies at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture of the University of Zagreb. He graduated from the same faculty after having defended his graduation thesis entitled "Influence of the Intake and Exhaust Manifold Configuration on Operating Parameters of an Automotive Otto Engine" in 2001.

Since 2002 he has been working at the Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, the Chair of IC Engines and Motor Vehicles, as a junior researcher. He has worked on two projects, i.e. "Operating Conditions Modelling of Internal Combustion Engine", and "Biofuels – the necessity for sustainable mobility in the Republic of Croatia".

In 2006 he attended a seminar entitled "Proactive approach of Croatian Laboratories in using EU funds", and in 2007 he attended a course on project management.

In 2007 he also worked as a reviewer for the journal Energy & Fuels which is published by the American Chemical Society.

In addition to being involved with the project work, he has taken an active part in teaching by being in charge of exercises of several courses: Internal Combustion Engines A & B, Volumetric Machines, Engine Design, Computer Simulations in Engine and Vehicle Development and Testing of Engines.

As an author and co-author he has published 12 scientific and 3 professional papers in Croatia and abroad.

He can speak and write English. He is married.