

Vladimír Hlavňa - Daniela Zvarková \*

# MATEMATICKÉ MODELOVANIE TVORBY OXIDOV DUSÍKA V ZÁŽIHOVOM MOTORE NA CNG

## A MATHEMATICAL MODELLING OF NITROGEN OXIDE FORMATION IN A CNG SPARK IGNITION ENGINE

*Medzi plynnými škodlivinami emitovanými výfukovými plynni spaľovacích motorov majú oxidy dusíka zvláštne postavenie, ktoré sa navonok prejavuje ako súvislosť medzi energetickými a ekologickými vlastnosťami motora. Príspevok hovorí o 3D modelovaní tvorby oxidov dusíka v zážihovom motore na CNG s využitím programu FLUENT.*

### Úvod

Spaľovacie motory svojou prevádzkou zaťažujú životné prostredie. Niektoré emisie sú legislatívou limitované, iné nie. Požiadavka znižovania emisií CO<sub>2</sub> pri súčasnom znižovaní produkcie ostatných toxických emisií vedie v konečnom dôsledku k eliminácii spaľovania palív na báze uhlíka. Táto skutočnosť v súčasnosti smeruje k používaniu palív alternatívnych, napr. rekonštrukciou spaľovacích motorov na stlačený zemný plyn (Compressed Natural Gas) - zníženie produkcie CO<sub>2</sub> až o 25 %. Kritériom ekologického spaľovania prestáva byť len kvantita emisií, ale stáva sa aj kvalita spaľovania. Vo všeobecnosti je v povedomí menšie zaťaženie životného prostredia prevádzkou spaľovacích motorov na plynné palivá. Pri spaľovaní CNG sa javí ako problematická produkcia uhľovodíkov, ktoré spolu s oxidmi dusíka - NO<sub>x</sub> (pojem oxidy dusíka zahŕňa skupinu emisií obsahujúcich predovšetkým oxid dusnatý NO a oxid dusičitý NO<sub>2</sub>) sa okrem iného podieľajú na tvorbe smogu. Doterajšie skúsenosti s používaním plynných palív možno zhrnúť do nasledovných bodov:

- zníženie produkcie oxidu uhličitého,
- podstatné zníženie emisie pevných častíc a dymivosti motora,
- zníženie hluku vyžarovaného motorom,
- čiastočne zvyšovanie produkcie nespálených uhľovodíkov v suchých spalinách so zvyšovaním súčiniteľa prebytku vzduchu.

*Nitrogen oxides occupy a specific position among gaseous harmful emissions produced by combustion engines. This position may externally appear as a coherence between energetic and ecological properties of the engine. The paper deals with a 3-D modelling of nitrogen oxides formation in a CNG ignition engine when the FLUENT programme is applied.*

### Introduction

Operation of combustion engines impairs the environment. Some emissions are limited by law, others are not. The requirement of lower CO<sub>2</sub> emission limits while simultaneously lowering production of other toxic emissions has finally led to the elimination of combustibles based on carbon. This fact has at present aimed at the use of alternative fuels, e.g. by a reconstruction of combustion engines to engines using compressed natural gas (CNG). Such a reconstruction can bring about a decrease in CO<sub>2</sub> production by as much as 25%. The criterion of ecologic combustion is no longer the emission quantity but at present also the quality of emission. Generally, it is believed that operation of gas combustion engines impairs the environment less. When CNG is used as a combustible, some problems arise due to the production of hydrocarbons which together with nitrogen oxides - NO<sub>x</sub> (the term nitrogen oxides includes a group of emissions containing mainly nitrogen oxide NO and nitrogen dioxide NO<sub>2</sub>) forms among other things, smog. The experience with gaseous fuels used up to this time can be summarised to the following points:

- decrease in production of carbon dioxide,
- substantial reduction of solid particle emission and engine smoking,
- reduction of engine-emitted noise,
- and a partial rise in production of unburnt hydrocarbons in dry combustion gases together with an increase in the excess coefficient.

\* Prof. Ing. Vladimír Hlavňa, PhD., Ing. Daniela Zvarková, PhD.

Department of Railway Vehicles, Engines and Lifting Equipment, University of Žilina, Veľký diel, 010 26 Žilina, Slovak Republic,  
Phone: +421-89-530 16, e-mail: hlavna@fstroj.utc.sk,

Department of Heat and Hydraulic machines, University of Žilina, Veľký diel, 010 26 Žilina, Slovak Republic,  
Phone: +421-89-513 2879

## Oxidy dusíka ako súčasť plynných emisií a vplyv vybraných parametrov na ich tvorbu

Medzi plynnými škodlivinami emitovanými výfukovými plynmi spaľovacích motorov majú oxidy dusíka zvláštne postavenie, ktoré sa navonok prejavuje ako súvislosť medzi energetickými a ekologickými vlastnosťami motora. Spaľovací motor s vysokým merným výkonom a vysokou účinnosťou obyčajne vykazuje nízky obsah produktov nedokonalnej oxidácie v spalinách, zatiaľ čo produkcia oxidov dusíka zlepšovaním energetických parametrov motora rastie. Vnútrošnou príčinou tejto skutočnosti je fakt, že vplyvy zlepšujúce akosť premeny chemickej energie paliva na mechanickú prácu motora, t. j. dostatok prípadne prebytok kyslíčovadla (pre dobrú chemickú účinnosť) a vysoká maximálna teplota pracovného obehu (pre dobrú termickú účinnosť) súčasne podporujú oxidáciu dusíka.

Zníženie kompresného pomeru znižuje maximálne teploty spaľovania vo valci motora, a preto má pozitívny vplyv na redukciu oxidov dusíka. Toto zníženie kompresného pomeru, podobne ako zníženie uhla predstihu zážihu, má za následok ale pokles termickej účinnosti, zníženie výkonu, vzrast mernej spotreby paliva a merných emisií ostatných škodlivín. Tieto nedostatky je možné čiastočne kompenzovať u motorov na CNG preplňovaním, vzhľadom na dobré antidetončné vlastnosti metánu, ktorý je obsiahnutý v palive. U preplňovaných motorov je obmedzenie dané parametrami použitého turbodúchadla, prípadne teplotou výfukových plynov. Ak je potrebné znížiť koncentráciu oxidov dusíka pod určitú hranicu, najjednoduchšou a najúčinnnejšou úpravou je zníženie uhla predstihu zážihu, i keď za cenu čiastočného poklesu výkonu a vzrastu mernej spotreby paliva. Efekt zníženia koncentrácie oxidov dusíka a mernej spotreby paliva zvyšovaním kompresného pomeru pri súčasnom znížení uhla predstihu zážihu (konštantná hladina maximálneho tlaku) je výraznejší pri nižších kompresných pomeroch. Pokles mernej spotreby paliva zvýšením kompresného pomeru a znížením uhla predstihu zážihu je výraznejší u bohatších zmesí (max. o 5 %), zatiaľ čo pokles oxidov dusíka je výraznejší u chudobnejších zmesí (cca 3,6-krát). Motory so zvýšeným kompresným pomerom a zníženým uhlom predstihu zážihu si vyžadujú kvalitnú a výkonnú elektrickú zapalovaciu sústavu, aby sa zaručilo spoľahlivé zapálenie zmesi a tým aj rovnomerný chod motora.

Ochudobňovaním zmesi za inak rovnakých podmienok sa dosiahne nižšia koncentrácia oxidov dusíka a vyššia merná spotreba. Tento jav je spôsobený poklesom maximálnych teplôt náplne valca v dôsledku nižšej energetickej hustoty obsahu náplne valca. Zvýšenie mernej spotreby paliva nie je podstatné, ale pokles produkcie oxidov dusíka ochudobňovaním zmesi je výrazný. Problémom použitia chudobnej zmesi je pokles výkonu a nerovnomernosť chodu motora. Pokles výkonu je možné kompenzovať preplňovaním.

Vplyv teploty stien valca je možné posúdiť na základe vplyvu veľkosti tepelného odporu vloženého valca. Pri nízkych hodnotách tepelného odporu vložky dochádza k väčšiemu odvodu tepla z pracovného priestoru do chladiaceho média. Tento odvod tepla

## Nitrogen oxides as part of gaseous emissions and the influence of chosen parameters on their formation

Nitrogen oxides occupy a specific position among gaseous harmful emissions produced by combustion engines. This position may externally appear as a coherence between energetic and ecological properties of the engine. The combustion engine featuring a high specific output and high efficiency usually shows a poor content of products of insufficient oxidation in combustion gases, while the production of nitrogen oxides increases due to the improvement of energetic parameters of the engine. The internal cause leading to the mentioned reality is the fact that the influences that improve the quality of change of fuel chemical energy to mechanical work of the engine, i. e. sufficiency or excess of oxidizer (for a good chemical efficiency) and high maximum temperature of the working cycle (for a good thermal efficiency) simultaneously support oxidation of nitrogen.

A decrease in the compression ratio lowers maximum temperatures of combustion in the engine cylinder and has, therefore, a positive influence on the reduction of nitrogen oxides. This lowering of the compression ratio similarly as a decrease in an advanced ignition angle lead, however, to a fall of thermal efficiency, lower output, increase of the specific fuel consumption and specific emissions of other harmful substances. These shortcomings may be partly compensated in CNG engines by supercharging owing to good antidetonant properties of methane contained in fuel. In supercharged engines the limitation is given by parameters of the used turbocharger or by temperature of exhaust gases. If the concentration of nitrogen oxides is to be lowered under a certain limit, the easiest and most efficient arrangement is to lower the advanced ignition angle, even though the output partially decreases and specific fuel consumption increases. The effect of decrease of a nitrogen oxide concentration and specific fuel consumption by increasing the compression ratio at a simultaneous lowering of the advanced ignition angle is more marked with richer mixtures (max. by 5%), while the decrease in nitrogen oxides is more remarkable with leaner mixtures (approx. 3.6-times). Engines with a higher compression ratio and lower advanced ignition angle need an efficient electric ignition system of high quality in order to provide reliable ignition of mixture and, consequently, a regular engine running.

Making the mixture leaner, under otherwise similar conditions, leads to a lower concentration of nitrogen oxides and to a higher specific fuel consumption. This phenomenon is caused by a fall of maximum temperatures of the cylinder charge due to a lower energetic density of the cylinder charge content. An increase in the specific fuel consumption is not substantial but a decrease in production of nitrogen oxides due to making the mixture leaner is marked. A disadvantage of the use of lean mixture is a decrease in the output and irregularities in the engine run. The decrease in the output can be compensated by supercharging.

The influence of the cylinder wall temperature can be judged on the basis of the influence of a thermal resistance magnitude of the cylinder liner. Low values of the liner thermal resistance bring about higher heat abstraction from the working area to the cooling medium. This heat abstraction causes a decrease in temperatures

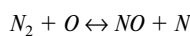
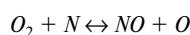
má za následok pokles teplôt pracovného obehu motora samozrejme s dôsledkom na tvorbu oxidov dusíka.

V zážihových motoroch na CNG sa predpokladá kinetické spaľovanie homogénnej chudobnej zmesi. Pri kinetickom spaľovaní je zóna pred plamenným frontom vyplnená rovnomernou zmesou paliva so vzduchom. V okamihu prechodu plameňa dochádza ku takmer skokovej zmene koncentrácií. Základná predstava pre porovnanie kinetického a difúzneho spaľovania z hľadiska produkcie  $\text{NO}_x$  je skutočnosť, že pri kinetickom spaľovaní chudobnej zmesi je aj vzduch, ktorý sa nezúčastňuje chemickej reakcie prítomný priamo v oblasti plameňa a svojou tepelnou kapacitou prispieva k zníženiu teploty horiacej vrstvy. Pri kinetickom spaľovaní stechiometrickej zmesi je priamo v plameni prítomné len práve potrebné množstvo vzduchu k uskutočneniu chemickej reakcie. Spaľovanie prebieha v tomto prípade pri vysokej teplote, čo je nevýhodné vzhľadom na tvorbu oxidov dusíka. Ochudobňovaním zmesi sa teda znižuje úroveň teplôt pracovnej látky vplyvom poklesu výhrevnosti zmesi ako aj vplyvom posunu výrazného podielu fázy prívodu tepla do pokročilého štádia expanzného pohybu piesta pri pomalom horení chudobnej zmesi [2].

### Tvorba oxidov dusíka

Z pohľadu škodlivosti oxidov dusíka je rozhodujúcou zložkou  $\text{NO}_2$ . Hlavnou emitovanou zložkou spaľovacím motorom je však NO. Legislatíva limitov emisií vychádza z predpokladu, že celé emitované množstvo oxidov dusíka v atmosfére oxiduje na  $\text{NO}_2$ . V niektorých prípadoch sa z praktických dôvodov používa prepočet emisií oxidov dusíka vo výfukových plynách na množstvo oxidu dusnatého.

Oxid dusnatý vzniká z väčšej časti pomalou reťazovou reakciou - Zeldovičov mechanizmus [3]:



Nosným procesom z hľadiska prítomnosti oxidov dusíka vo výfukových plynách je výskyt pomerne vysokej rovnovážnej koncentrácie NO vo fáze s vysokou teplotou nasledovaný dramatickým znížením reakčnej rýchlosti dekompozície NO po poklese teploty náplne valca v priebehu expanzného zdvihu piesta. Spomalenie reakcie rozpadu oxidu dusnatého je tak náhle, že sa pre jeho popis používa termín zmrázanie koncentrácie NO [4]. Pri znížení spaľovacích teplôt klesá hodnota maxima rovnovážnej koncentrácie NO, znižuje sa rýchlosť tvorby NO, čím sa znižuje aj celková koncentrácia NO v spalinách. Veľkosť maximálnych spaľovacích tlakov neovplyvňuje priamo na chemické reakcie, ale ovplyvňuje teploty reakcií. Najvyššie teploty sa dosahujú pri mierne bohatých zmesiach. Ako je zrejme z vyššie uvedených reakcií, nedostatok kyslíka brzdí produkciu  $\text{NO}_x$ . Maximum produkcie je posunuté do oblasti mierne chudobných zmesí so súčiniteľom prebytku vzduchu okolo 1,15. Poloha maxima rovnovážnej koncentrácie emisií NO sa teoreticky zhoduje s polohou maxima

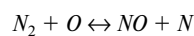
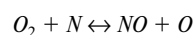
of the engine working cycle and, of course, has an impact on the formation of nitrogen oxides.

In CNG spark ignition engines kinetic combustion of homogenous lean mixture is suggested. At kinetic combustion the area in front of the flame front is filled in with a homogenous air-fuel mixture. In the moment of flame transition almost a jump change in the concentration occurs. A basic idea for comparison of kinetic and diffusion combustion from the point of view of  $\text{NO}_x$  production is the fact that at kinetic combustion of lean mixture there also is air that does not take part in a chemical reaction present directly in the area of flame and contributes with its thermal capacity to a decrease in temperature of a burning layer. In the case of kinetic combustion of stoichiometric mixture there is exactly such an amount of air present directly in the flame that is needed to carry out a chemical reaction. The combustion in this case takes place at a high temperature which is disadvantageous from the point of view of formation of nitrogen oxides. Thus, making the mixture leaner decreases a temperature level of the working medium due to a decrease in a calorific value of the mixture as well as due to a marked part of a phase of heat induction in an advanced stage of an expansion piston movement at a low combustion of lean mixture [2].

### Formation of nitrogen oxides

From the point of view of nitrogen oxides harmful effect, a decisive component is  $\text{NO}_2$ , although the main component emitted by the combustion engine is NO. Legislation of emission limits is based on a suggestion that the whole emitted amount of nitrogen oxides in the atmosphere oxides to  $\text{NO}_2$ . In some cases, from practical reasons a conversion of emissions of nitrogen oxides in exhaust gases to the amount of nitrogen oxide NO is used.

Nitrogen oxide is formed, from a greater part, during a slow chain reaction - Zeldovic mechanism [3]:

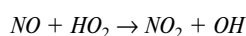


From the point of view of presence of nitrogen oxides in exhaust gases, the main process is an occurrence of a relatively high equilibrium NO concentration in a phase with a high temperature followed by a dramatic fall of a reaction velocity of NO decomposition after a decrease in temperature of the cylinder charge during the expansion piston movement. Deceleration of a reaction of nitrogen oxide NO decomposition is so sudden that to describe it the term NO concentration freezing [4] is used. At a decrease in combustion temperatures the value of maximum of NO equilibrium concentration decreases, the velocity of NO formation decreases and, consequently, the overall NO concentration in combustion gases also decreases. A magnitude of maximum combustion pressures does not directly influence chemical reactions, but it influences temperatures of the reactions. The highest temperatures are reached with slightly rich mixtures. As it can be seen from the above mentioned reactions, lack of oxygen slows down  $\text{NO}_x$  production. The production maximum is shifted to an area of slightly

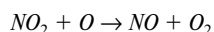
teploty v spaľovacom priestore. V skutočnosti je však maximum tvorby posunuté ďalej. Čím vyššie sú teploty, tým viac sa blíži skutočná koncentrácia NO ku koncentrácii stanovenej podľa rovnovážnych stavov [3].

Z vytvoreného oxidu dusnatého sa sekundárne tvorí oxid dusičitý. Podľa [3] možno približný mechanizmus vzniku NO<sub>2</sub> popísať nasledujúcim postupom:

- oxid dusnatý nachádzajúci sa v zóne plameňa môže byť rýchlo premenený na NO<sub>2</sub> reakciou:



- ďalej nastupuje premena NO<sub>2</sub> na NO

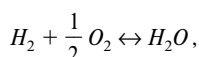
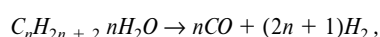
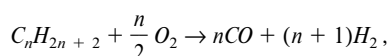


Reakcia prebieha dovtedy, kým NO<sub>2</sub> vytvorený v zóne plameňa sa neochladí zmiešaním sa s relatívne studenými plynmi.

### Matematický model

Pre výpočet spaľovania bol využitý program FLUENT. Je ním možné riešiť problémy z oblasti prúdenia buď plošne alebo priestorovo. Po zostavení geometrického modelu je potrebné zvoliť model fyzikálny. Po zadani všetkých okrajových a začiatkových podmienok i správnej voľbe podrelaxačných a disipačných faktorov možno uskutočniť výpočet. Model popisujúci chemickú kinetiku v podmienkach kinetického alebo difúzneho plameňa je vytvorený pomocou programu pre výpočet chemickej kinetiky a termodynamiky. Plameň možno modelovať buď ako kinetický s voľbou kinetických rovníc, alebo ako difúzny s výpočtom rovnovážnych koncentrácií zložiek v laminárnom alebo turbulentnom režime. Je výhodné použitie malých reakčných schém na presný popis rozhodujúcich vlastností plameňa. Tieto schémy majú význam najmä z praktického hľadiska pre problémy v oblasti spaľovania, pretože obsahujú všetky aplikácie zahrňujúce akékoľvek palivo. Jedna z najdôležitejších aplikácií je aplikácia turbulentného spaľovania, kde fluktujúci charakter prúdenia a s tým spojené chemické deje popisujúce turbulenciu spôsobujú niektoré ťažkosti pri modelovaní.

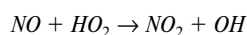
Schémy globálnych reakcií pre spaľovanie alkánových uhľovodíkov (až po bután) v zmesiach so vzduchom v kinetických a difúznych plameňoch obsahujú dve vedľajšie reakcie rozkladu paliva. Reakčný mechanizmus je popísaný nasledovnými rovnicami [5]:



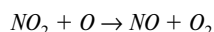
lean mixtures with an excess coefficient around 1.15. The position of maximum of NO emissions equilibrium concentration is theoretically identical with the position of the temperature maximum in the combustion chamber. Though in reality, the formation maximum is shifted further. The higher the temperatures, the more a real NO concentration approaches the one determined in compliance with equilibrium states [3].

From the formed nitrogen oxide secondary nitrogen dioxide is formed. According to [3] the approximate mechanism of NO<sub>2</sub> formation can be described with the following procedure:

- nitrogen oxide present in the flame area can be quickly changed to NO<sub>2</sub> by the reaction:



- then a change of NO<sub>2</sub> to NO takes place

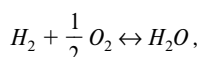
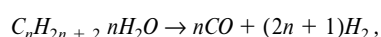
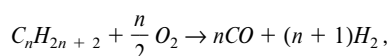


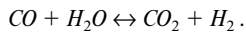
The reaction takes place until NO<sub>2</sub> formed in the flame area is cooled down mixing with relative cold gases.

### Mathematical model

The program FLUENT was applied for calculation of combustion. It enables the solving of problems from a field of flow either in an areal or spatial way. After a geometric model is constructed, a physical model is to be chosen. After all boundary and initial conditions are set and subrelaxation and dissipation factors are correctly selected, the calculation can be carried out. The model describing chemical kinetics under conditions of a kinetic or diffusion flame is created with the help of a program for calculation of chemical kinetics and thermodynamics. The flame can be modelled either as kinetic with a choice of kinetic equations or as diffusive with a calculation of equilibrium concentration of components in a laminar or turbulent regime. It is good to use small reaction schemes for a precise description of the flame decisive properties. These schemes are especially significant for problems from a practical point of view in the field of combustion as they contain all applications covering any fuel. One of the most important applications is the one of turbulent combustion where a fluctuating character of flow and related chemical processes describing turbulence cause some difficulties during modelling.

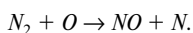
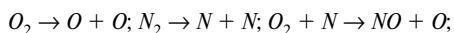
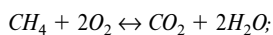
The schemes of global reactions for combustion of alkane hydrocarbons (up to butane) in mixtures with air in kinetic and diffusion flame contain two subsidiary reactions of fuel decomposition. The reaction mechanism is described with the following equations [5]:





Priestorový model spaľovacieho priestoru (zložený zo 16 tisíc elementov tvaru šesťstena) je vytvorený na základe súradnic bodov popisujúcich tvar spaľovacieho priestoru. Tak bola vytvorená povrchová a fyzikálna sieť. Zážih palivovej zmesi v uzatvorenom spaľovacom priestore bol simulovaný zadáním plošky so zápalnou teplotou. Okrem toho na začiatku bola zadaná veľkosť tangenciálnej rýchlosti pre turbulentné prúdenie.

Výpočet bol realizovaný v dvoch častiach. V prvej časti bolo zvolených päť reakčných zložiek: CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O a rovnica popisujúca oxidáciu metánu. Štyri zložky sa priamo zúčastňujú chemickej reakcie (CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> a H<sub>2</sub>O) a piata zložka, dusík, bola volená z dôvodu jej najväčšieho podielu v atmosférickom vzduchu. Priebeh koncentrácie tejto zložky je výhradne numerickou záležitosťou (dopočet do čísla 1, ktoré predstavuje súčet mólových zlomkov zadávaných zložiek, t. j. metánu, dusíka a kyslíka). V druhej časti bolo zvolených deväť reakčných zložiek: CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NO, N, O, Ar a okrem rovnice popisujúcej oxidáciu metánu aj chemické rovnice popisujúce tvorbu NO, rozklad kyslíka a rozklad dusíka. Tak napr. reakcie v prvej časti výpočtu prebehnú takto:



Pohyb reakčnej zmesi je popísaný rovnicami [6]:

- kontinuity

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u}{\partial z} = 0,$$

- Navier - Stokesovými

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v^2 r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho_{rr} r}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} - \frac{\partial \sigma_{\phi\phi}}{\partial r},$$

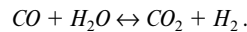
$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho u v r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{rz} r}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}$$

- energetickej bilancie toku

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho E v r}{\partial r} + \frac{\partial \rho E u}{\partial z} = & -\frac{1}{r} \frac{\partial \rho v r}{\partial r} - \frac{\partial \rho u}{\partial z} + \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial (\sigma_{rr} v r + \sigma_{rz} u r)}{\partial r} + \frac{\partial (\sigma_{rz} v + \sigma_{zz} u)}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial q_r}{\partial r} - \\ & - \frac{\partial q_z}{\partial z} + q_c \end{aligned}$$

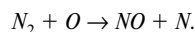
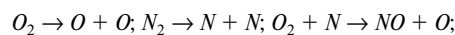
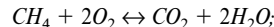
V uvedených rovnicach je:

$\rho$  hustota,  
 $u, v$  zložky vektoru rýchlosti v smere  $r$  a  $z$ ,



The spatial model of the combustion chamber (composed of 16 thousand elements of a six-wall shape) is created on the basis of co-ordinates of points describing a shape of the combustion chamber. Thus, the surface and physical network was created. The ignition of air-fuel mixture in a closed combustion chamber was simulated by setting a small surface with an ignition temperature. Apart from this, the magnitude of tangential velocity for turbulent flow was given in the beginning.

The calculation was done in two stages. In the first stage five reaction components: CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and the equation describing oxidation of methane were selected. Four components take part in the chemical reaction directly (CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O) and the fifth component, nitrogen, was selected because of its largest portion in the atmospheric air. The course of concentration of this component is an exclusively numerical matter (additional calculation up to number 1 representing the sum of molecular fractions of the given components, i. e. methane, nitrogen and oxygen). In the second stage, nine reaction components: CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NO, N, O, Ar were selected apart from the equation describing oxidation of methane also chemical equations describing NO formation, oxygen and nitrogen decomposition. So, e.g. the reactions in the first stage of calculation have the following course:



The motion of reaction mixture is described with the equations [6]:

- of continuity

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u}{\partial z} = 0,$$

- Navier-Stoke

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v^2 r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho_{rr} r}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} - \frac{\partial \sigma_{\phi\phi}}{\partial r},$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho u v r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{rz} r}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}$$

- of energetic balance of flow

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho E v r}{\partial r} + \frac{\partial \rho E u}{\partial z} = & -\frac{1}{r} \frac{\partial \rho v r}{\partial r} - \frac{\partial \rho u}{\partial z} + \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial (\sigma_{rr} v r + \sigma_{rz} u r)}{\partial r} + \frac{\partial (\sigma_{rz} v + \sigma_{zz} u)}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial q_r}{\partial r} - \\ & - \frac{\partial q_z}{\partial z} + q_c \end{aligned}$$

The symbols in the above equations are as follows:

$\rho$  density,  
 $u, v$  components of velocity vector in the directions  $r$  and  $z$ ,

$p$	tlak,
$\rho_{rr}, \rho_{rz}, \rho_{\phi\phi}, \rho_{zz}$	zložky tenzoru viskózneho napätia,
$E$	celková energia pre ktorú platí $E = [2(u + v) + I]^{-1}$ , $I$ je merná vnútorná energia,
$q_r, q_z$	tok energie v smere $r$ a $z$ , spôsobený tepelnou vodivosťou a difúziou,
$q_c$	rýchlosť uvoľňovania tepla vplyvom chemických reakcií.

Výpočet bol umelou difúziou stabilizovaný. Rovnice hybnosti pre zmes boli stabilizované prostredníctvom viskozitného koeficienta. Rovnica celkovej energie je stabilizovaná pridaním difúznej časti cez pomer koeficientu tepelnej vodivosti a merného tepla pri konštantnom objeme. Stabilita riešenia rovníc transportu zložiek je kontrolovaná rovnicou zákona zachovania hmoty. Výpočet bol realizovaný pre tieto parametre:

• otáčky motora	2000	$\text{min}^{-1}$ ,
• točivý moment	726	Nm,
• predstih zážihu	24,1	$^\circ$ pred HÚ,
• súčiniteľ prebytku vzduchu	1,41,	
• veľkosť časového kroku	$1,6 \cdot 10^{-3}$	s,
• teplota steny	500	K,
• referenčná teplota	707	K,
• referenčný tlak	1,872	MPa,
• tangenciálna rýchlosť	5	$\text{ms}^{-1}$ ,
• model turbulencie		$k - \epsilon$

## Výsledky výpočtu

Proces oxidácie metánu je zobrazený na obrázku 1. Miesta zobrazené tmavšími odtieňmi predstavujú zóny s menšou koncentráciou metánu, t. j. tie, kde proces spaľovania už prebehol. Spaľovanie začína od stredu spaľovacieho priestoru, teda od miesta polohy zapalovacej sviečky a postupuje do rozšírenej časti spaľovacieho priestoru. No v niektorých úsekoch cyklu proces spaľovania samovoľne začína aj v okrajových miestach spaľovacieho priestoru. Tento jav je možné vysvetliť lokálne zvýšenou teplotou v zúženej časti spaľovacieho priestoru počas spaľovania, obrázok 2. Na obrázku 3 vidieť vplyv nestacionárneho prúdenia v systéme, pretože rozloženie koncentrácie metánu nie je rovnaké na symetrických rezoch spaľovacieho priestoru. Z výpočtu vyplýva, že proces dohorievania prebieha v rozšírenej časti spaľovacieho priestoru a končí v jeho dolnej časti, kde zostávajú aj zvyšky metánu po skončení procesu spaľovania, obrázok 4. Ich koncentrácia je však pomerne nízka 0,0313. Rozloženie koncentrácie všetkých zložiek je ovplyvnené teplotou. Vypočítané priebehy koncentrácií oxidov dusíka v určitých časových krokoch sú zobrazené na obrázkoch 5, 6, 7 a 8.

Výpočet umožňuje sledovať aj šírenie sa tlakových vln v spaľovacom priestore počas horenia palivovej zmesi, obrázok 9. Tlak nie je kritériom konvergencie tohto výpočtu. Zmena tlaku nemá podstatný vplyv na priebeh koncentrácií jednotlivých zložiek.

Z priebehov rýchlostí počas spaľovania vyplýva, že počas procesu spaľovania dochádza k nestacionárnemu šíreniu sa tlako-

$p$	pressure,
$\rho_{rr}, \rho_{rz}, \rho_{\phi\phi}, \rho_{zz}$	components of viscose stress of tensor,
$E$	total energy for which holds $E = [2(u + v) + I]^{-1}$ , $I$ is specific internal energy,
$q_r, q_z$	flow of energy in the directions $r$ and $z$ caused by thermal conductivity and diffusion,
$q_c$	velocity of heat release due to chemical reactions.

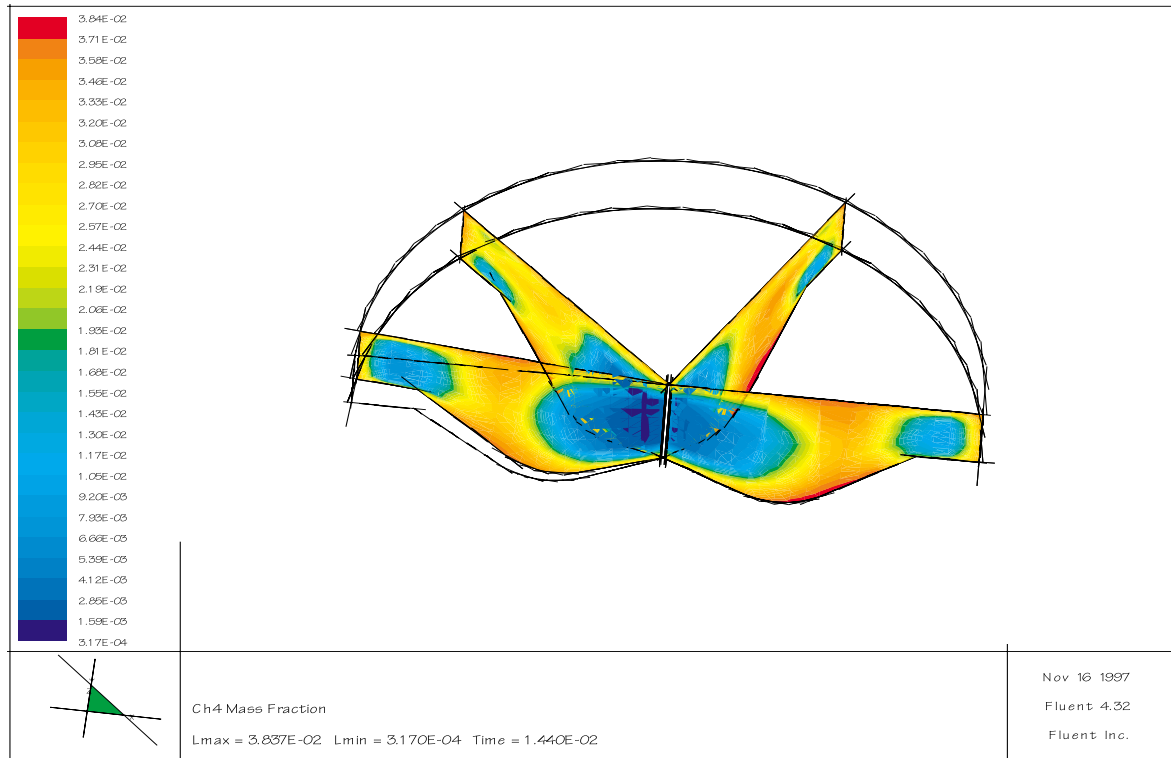
The calculation was stabilised by an artificial diffusion. The equations of motion for mixture were stabilised via the viscosity coefficient. The equation of total energy is stabilised by adding the diffusion part via a ratio of the coefficient of thermal conductivity and specific heat at a constant volume. The stability of solution of equation of the component transport is controlled by the equation of the law of mass conservation. The calculation was done for the following parameters:

• engine revolutions	2000	$\text{min}^{-1}$ ,
• torque	726	Nm,
• advanced ignition	24,1	$^\circ$ in front of TDC,
• excess coefficient	1,41,	
• magnitude of time interval	$1,6 \cdot 10^{-3}$	s,
• temperature of wall	500	K,
• reference temperature	707	K,
• reference pressure	1,872	MPa,
• tangential velocity	5	$\text{ms}^{-1}$ ,
• turbulence model		$k - \epsilon$

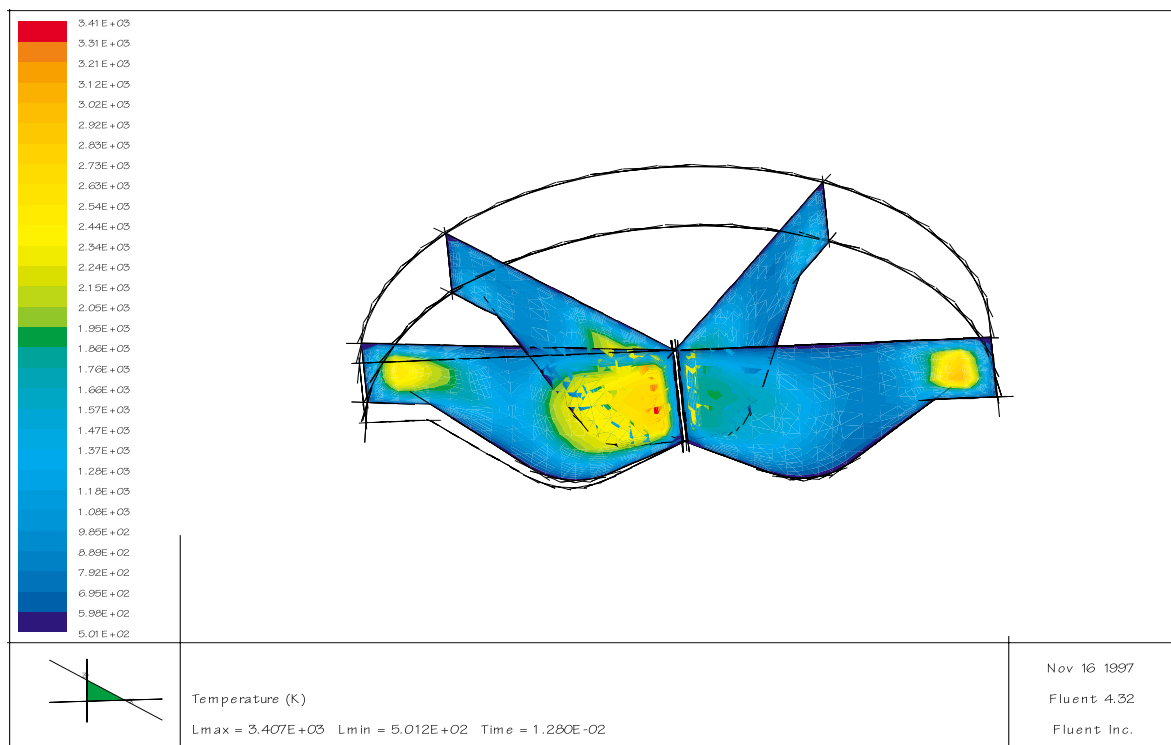
## Results of the calculation

The process of methane oxidation is shown in Fig. 1. The darker places represent the areas of a lower methane concentration, i. e. those where the combustion process is already over. The combustion starts from the centre of the combustion chamber, that is, from the place where an ignition plug is located, and proceeds to an extended part of the combustion chamber. But in some intervals of the cycle, the process of burning starts automatically also in boundary places of the combustion chamber. This phenomenon can be explained by a locally increased temperature in a tapered part of the combustion chamber during burning, Fig. 2. Fig. 3 shows the influence of non-stationary flow in the system as the distribution of methane concentration is not the same on symmetric cuts of the combustion chamber. From the calculation it follows that the process of burning low takes place in an extended part of the combustion chamber and ends in its bottom part where methane residues also remain after the combustion process is over, Fig. 4. But their concentration is relatively low - 0.0313. The distribution of concentration of all components is influenced by temperature. The calculated courses of nitrogen oxides concentration in certain time intervals are shown in Figs 5, 6, 7, and 8.

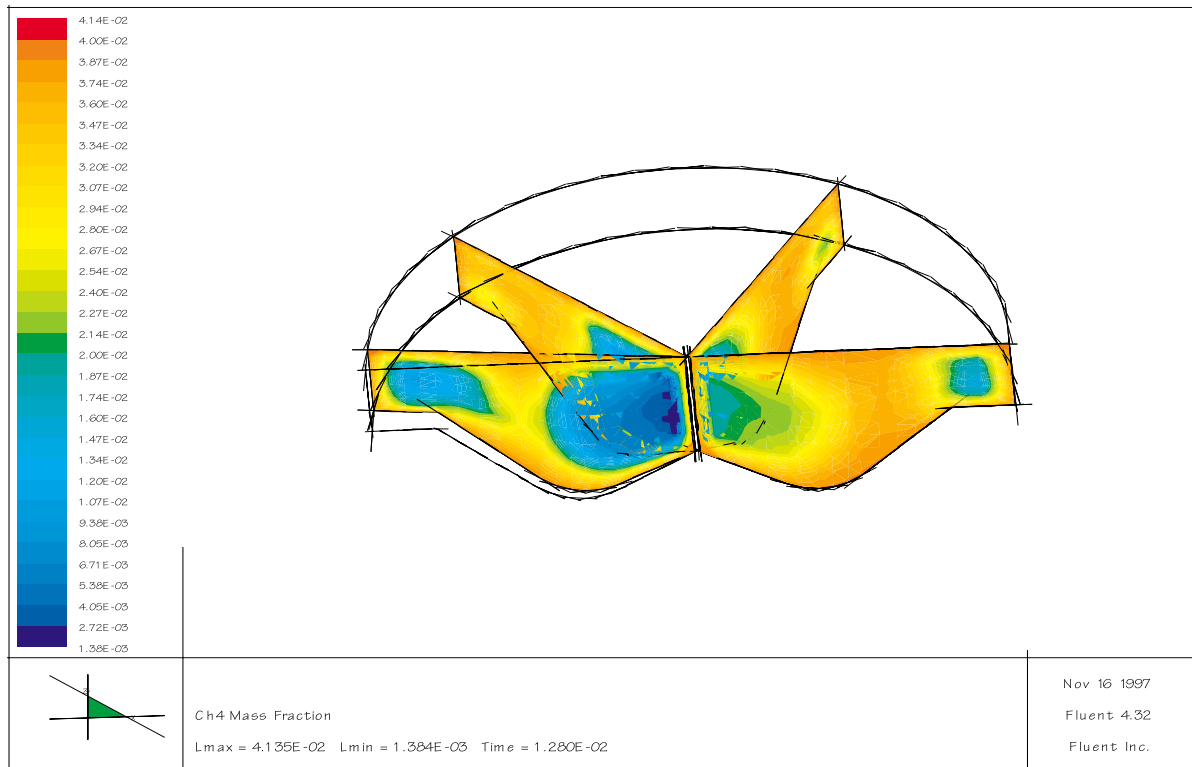
The calculation also allows to follow propagation of pressure waves in the combustion chamber during burning of air-fuel mixture - Fig. 9. Pressure is not a convergence criterion of this calculation. A change in pressure does not have any substantial influence on the concentration of individual components.



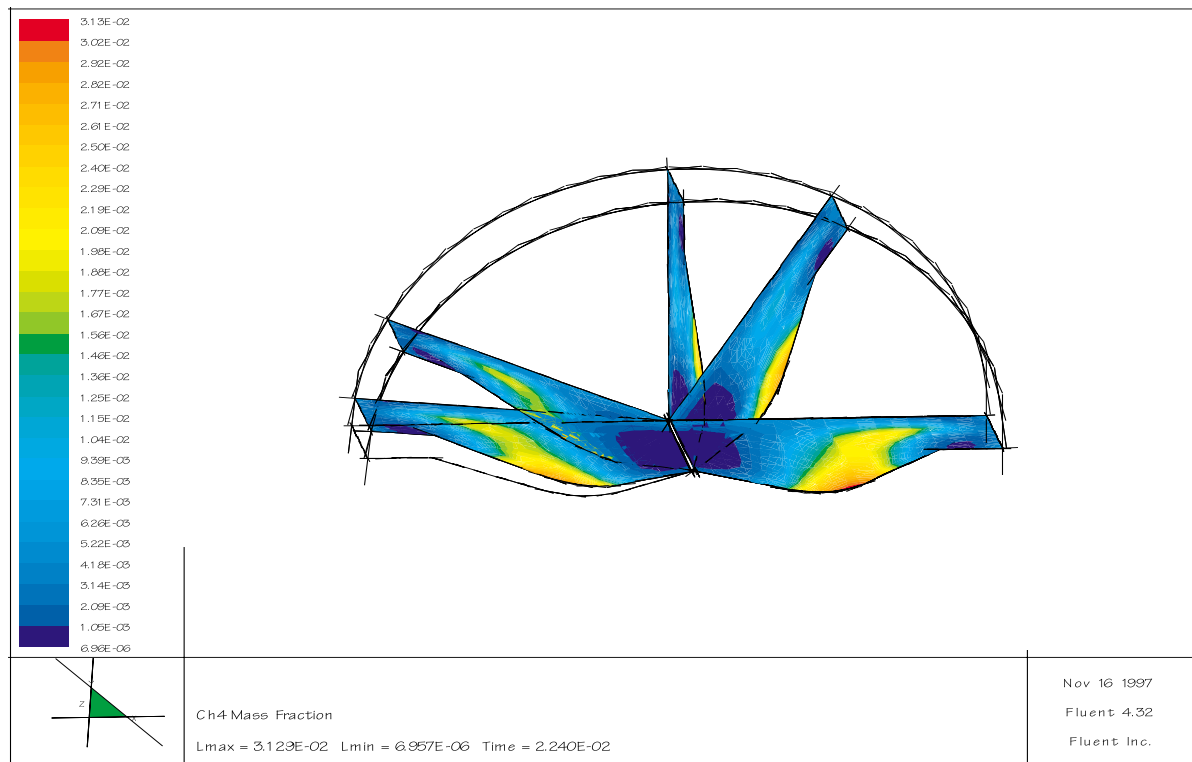
Obr. 1 Oxidácia metánu  
 Fig. 1 Oxidation of methane



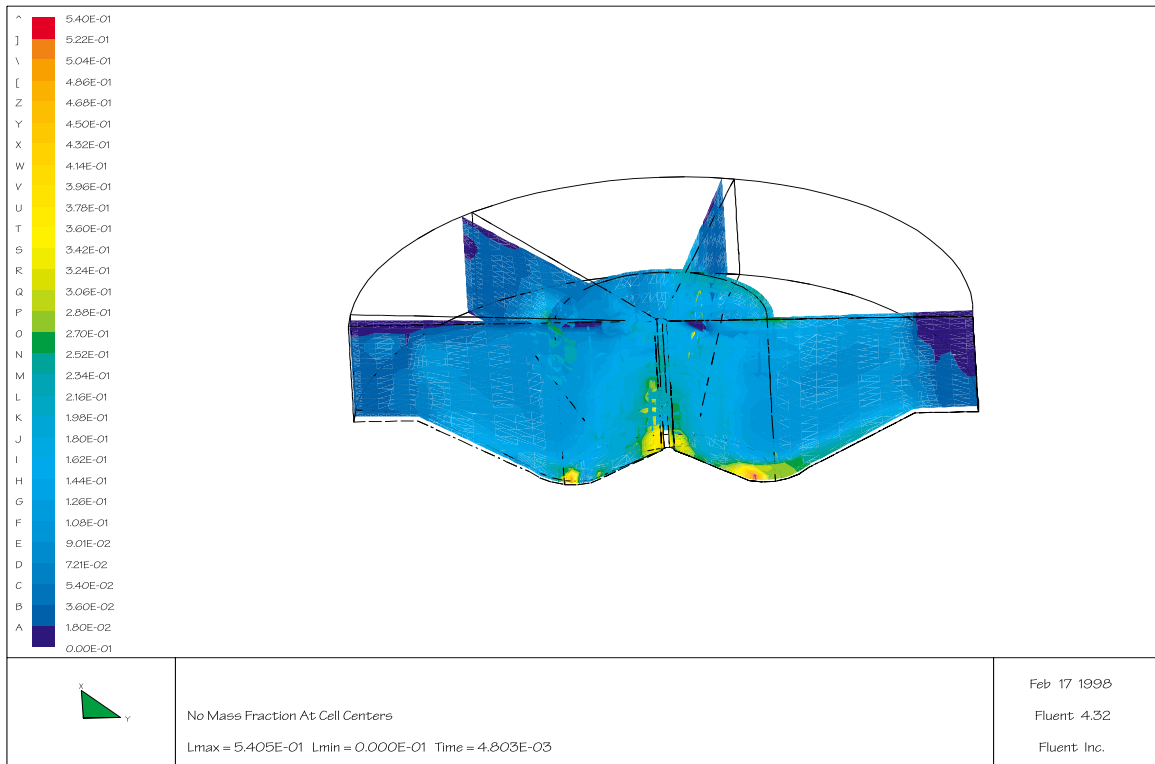
Obr. 2 Rozloženie teploty  
 Fig. 2 Distribution of temperature



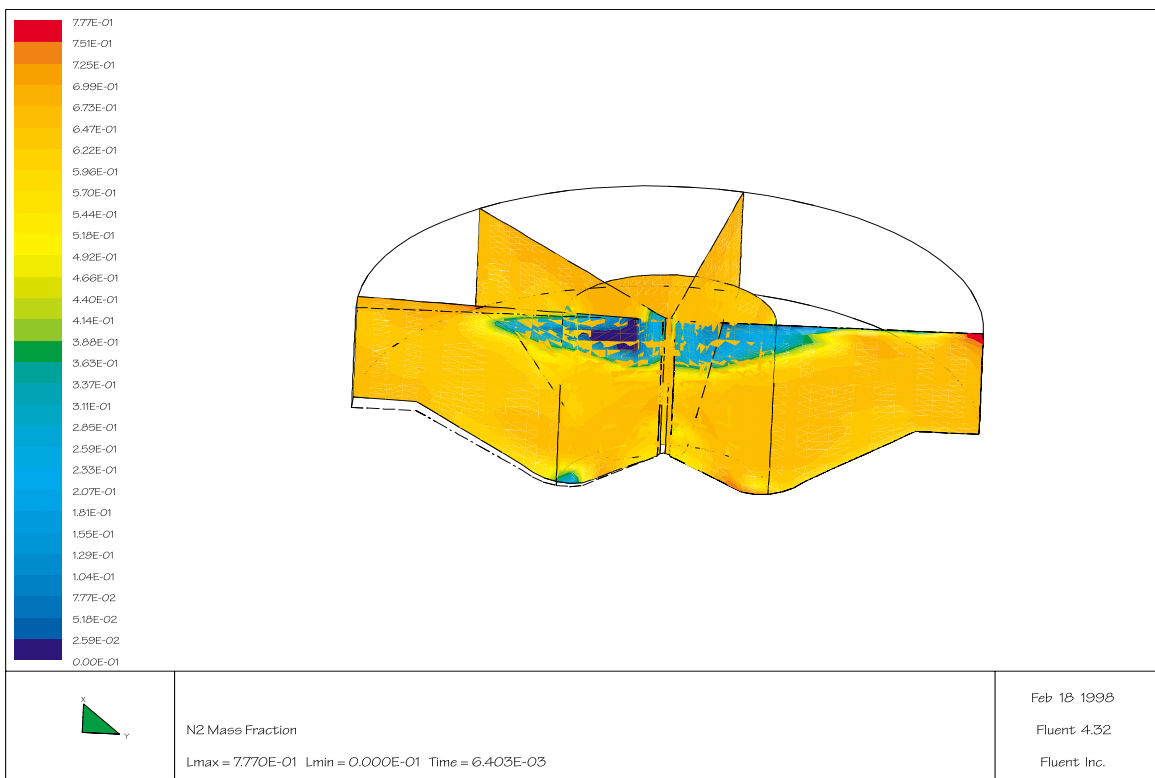
Obr. 3 Vplyv nestacionárneho prúdenia na koncentráciu metánu  
Fig. 3 Influence of nonstationary flow on concentration of methane



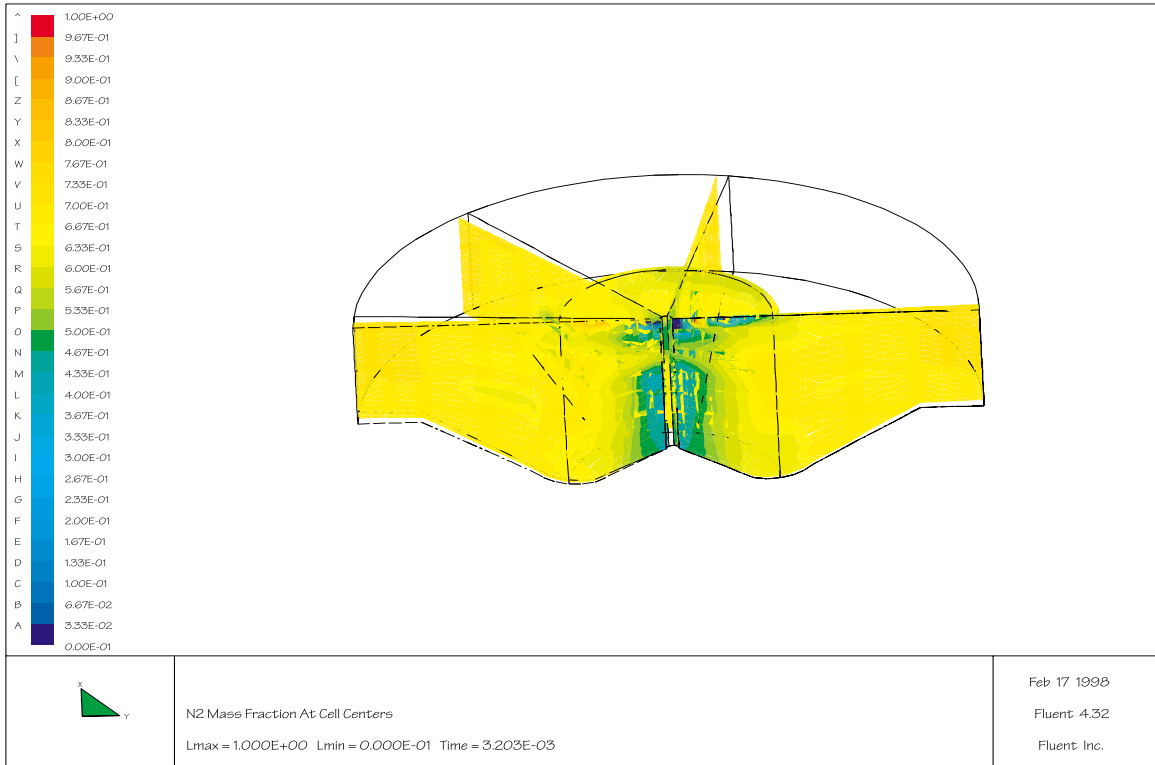
Obr. 4 Zvyšky metánu po skončení spaľovania  
Fig. 4 Residues of methane after combustion is over



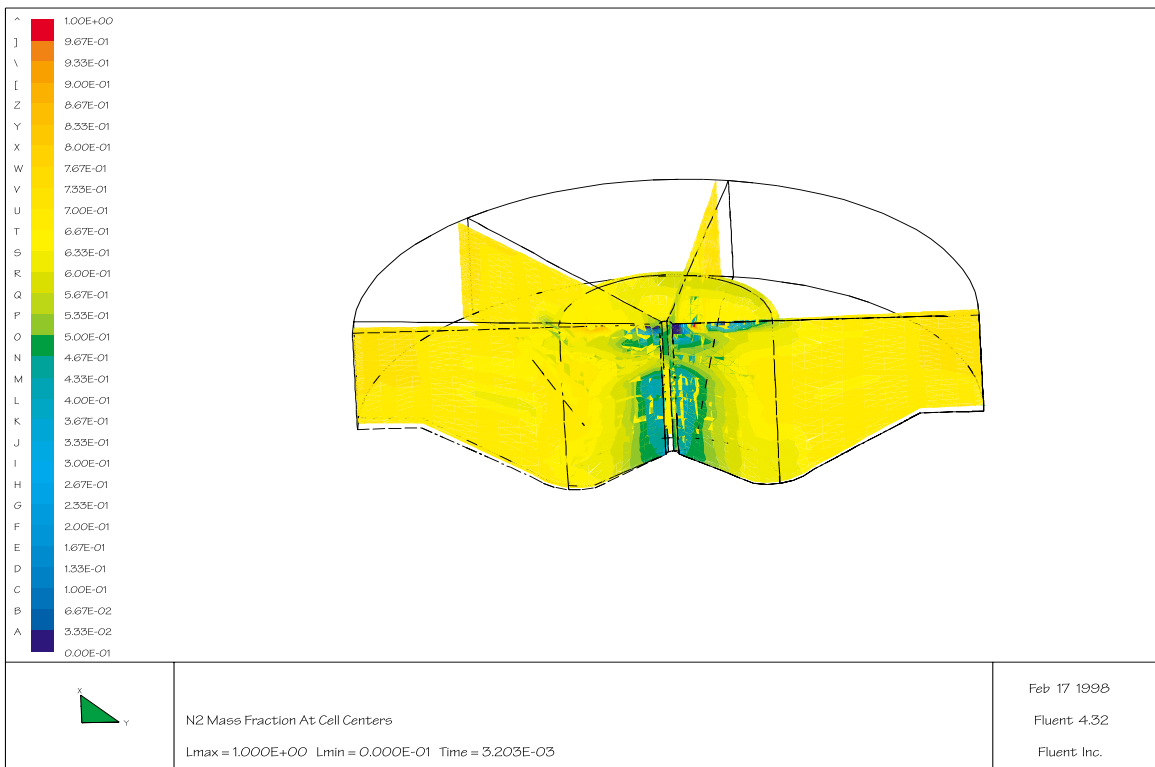
Obr. 5 Koncentrácie NO  
Fig. 5 NO concentrations



Obr. 6 Koncentrácie NO  
Fig. 6 NO concentrations



Obr. 7 Koncentrácie  $N_2$   
Fig. 7  $NO_2$  concentrations



Obr. 8 Koncentrácie  $N_2$   
Fig. 8  $NO_2$  concentrations



Obr. 9 Rozloženie tlakov  
Fig. 9 Distribution of pressures

vých vlín v priestore. Pribeh rýchlostí je časovo nespojitý, premenlivý, striedajú sa zóny s najnižšou a najvyššou rýchlosťou. Zmena rýchlostí nenastáva len vzhľadom na osovú symetriu, ale sa aj po obvode. Vplyv počiatocnej tangenciálnej rýchlosti sa prejavuje aj počas horenia zmesi a horením generovaná rýchlosť častíc sa superponuje na stacionárne počiatocné rýchlostné pole za de finovanej počiatocnej podmienky rýchlosti. S horením sa prejavuje vplyv trecích síl o stenu valca, čo spôsobuje postupné znižovanie rýchlosti s časom.

## Záver

Ako z výpočtu vyplýva, skutočný okamžitý obsah každej zložky reagujúcej zmesi v priebehu reakcie leží medzi východiskovým obsahom tejto zložky vo vstupných produktoch reakcie a jej rovnovážnym obsahom pre okamžité stavové a koncentračné podmienky. Proces tvorby a zániku príslušnej zložky je možné chápať ako posun hodnoty okamžitej koncentrácie medzi týmito krajnými hodnotami v smere k ustanoveniu rovnováhy, ktorý je určený integrálom reakčnej rýchlosti za dobu trvania reakcie. Vo valci spaľovacieho motora sa však navyše mení s časom tlak a teplota, pričom teplota má v rôznych miestach spaľovacieho priestoru rôzny časový priebeh, najmä je do veľkej miery ovplyvnená prechodom plamenného frontu daným miestom.

From the courses of velocities during combustion it follows that during the combustion process nonstationary propagation of pressure waves occurs. The course of velocities is time-discontinuous, variable, areas with the lowest and highest velocity interchange. The change in velocities does not occur only due to an axial symmetry, but it is also on the periphery. The influence of initial tangential velocity is felt also during burning of the mixture and the speed of particles generated by burning is superposed to a stationary initial velocity field at a defined initial condition of velocity. The influence of friction forces against the cylinder wall is observed with burning. It causes a gradual decrease in velocity with time.

## Conclusions

As it results from the calculation, the real instantaneous content of each component of the reaction mixture during the course of reaction lies between the initial content of this element in the input products of the reaction and its equilibrium content for instantaneous state and concentration conditions. The process of formation and extinction of a particular component can be understood as a shift of a value of the instantaneous concentration between these boundary values in the direction to the equilibrium stabilization that is determined by the integral of reaction velocity during the reaction duration. Pressure and temperature change most with time in the cylinder of a combustion engine. Temperature

Na priebeh koncentrácie reakčných zložiek má významný vplyv chemická reakcia s najväčšou rýchlosťou. V porovnaní s prvou časťou výpočtu boli v druhej časti problémy s numerickou stabilitou systému, pretože program počíta s veľmi malými hodnotami koncentrácií jednotlivých zložiek. Použitá metóda konečných diferencii je optimálna vtedy, keď pomer diferencii počítaných veličín (rýchlosť, tlak, teplota, koncentrácie jednotlivých reakčných zložiek) je hodnota blízka číslu 1. V prípade počítania s veľmi malými hodnotami koncentrácií (řádovo stotiny až tisíciny) dochádza k chybám výpočtu. Pre dosiahnutie korektniejšieho výpočtu by bolo preto vhodnejšie pracovať s časovo premenlivou sieťou, t. j. každý výpočtový krok počítať s novou sieťou. Takúto možnosť má napríklad výpočtový program RAMPANT, ktorý je určený len pre výpočty v oblasti prúdenia. Pre zabezpečenie konvergencie výpočtu by bolo vhodnejšie použiť rozdielnu veľkosť časového kroku pre prúdenie a pre chemické reakcie, ktorú umožňuje verzia programu FLUENT UNS.

Recenzenti: M. Steiner, Š. Liščák

has a different time course in different places of the combustion chamber and it is influenced, to a great extent, by a transition of the flame front across the given place.

The course of reaction component concentration is greatly influenced by the chemical reaction of the highest velocity. When compared with the first stage of the calculation, in the second stage there were problems with a numerical stability of the system as the program considers very small values of concentrations of individual components. The applied method of finite differences is optimal when a difference ratio of the calculated magnitudes (velocity, pressure, temperature, concentration of individual reaction components) is a value near number 1. When the calculation is done with very small values of concentrations (hundredths or thousandths) some errors in calculation occur. In order to achieve a more correct calculation it would be suitable to work with a time-variable network, i. e. to calculate each calculation step with a new network. This possibility is provided e. g. by the program RAMPANT which is designed for calculation from the field of flow only. To provide a convergence of calculation it would be better to use a different option of a time interval for flow and for chemical reactions which is enabled by a version of the program FLUENT UNS.

Reviewed by: M. Steiner, Š. Liščák

## Literatúra - References

- [1] HLAVŇA, V. a kol.: Dopravný prostriedok a životné prostredie, ES VŠDS Žilina, 1996, str. 7-24.
- [2] ŠTUDLAR, Z., TAKÁTS, M.: Vliv homogenity směsi ve válci spalovacího motoru na produkci oxidu dusíku, Zborník prednášok MOTOR SYMPO 1995
- [3] ZELDOVYCH, Y., B.: The Oxidation of Nitrogen in Combustions, Acta Physicochemica USSR, Vol. 21, 1987
- [4] TAKÁTS, M.: Měření emisí spalovacích motorů, ČVUT FSj Praha 1994
- [5] JONES, W., LINDSTERDT, R.: Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion, DCHECHT Imperial College, London 1988
- [6] LÁBAJ, J. a kol.: Výpočtové metódy v dopravnej a manipulačnej technike, ES ŽU 1997
- [7] ZVARKOVÁ, D.: Znižovanie produkcie emisií plynového zážihového motora prevádzkovaného na zemný plyn po jeho prestavbe z pôvodného vznetrového motora ML 636, dizertačná práca, Sjf ŽU Žilina 1998