



DİZEL MOTORDA SCR SİSTEMİNDE CFD ANALİZİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Şükrü Bedirhan GENİŞLER

Danışman:

Dr. Öğr. Üyesi Şükrü Ayhan BAYDIR

OTOMOTİV MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

Şubat 2024

AFYON KOCATEPE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DİZEL MOTORDA SCR SİSTEMİNDE CFD ANALİZİ

Şükrü Bedirhan GENİŞLER

Danışman

Dr. Öğr. Üyesi Şükrü Ayhan BAYDIR

OTOMOTİV MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

Şubat 2024

TEZ ONAY SAYFASI

Şükrü Bedirhan GENİŞLER tarafından hazırlanan “Dizel Motorda SCR Sisteminde CFD Analizi” adlı tez çalışması lisansüstü eğitim ve öğretim yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca 23/02/2024 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından **oy birliği** ile Afyon Kocatepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Otomotiv Mühendisliği Anabilim Dalı’nda YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Danışman : Dr. Öğr. Üyesi Şükrü Ayhan BAYDIR

Başkan : Prof. Dr. İbrahim MUTLU
Afyon Kocatepe Üniversitesi, Teknoloji Fakültesi

Üye : Doç. Dr. Ahmet KESKİN
Bolu Abant İzzet Baysal Üniversitesi, Teknik Bilimler MYO

Üye : Dr. Öğr. Üyesi Şükrü Ayhan BAYDIR
Afyon Kocatepe Üniversitesi, Teknoloji Fakültesi

Afyon Kocatepe Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu’nun
..... /..... /..... tarih ve
..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

.....
Prof. Dr. Bekir YALÇIN
Enstitü Müdürü

BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI

Afyon Kocatepe Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içindeki bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda ilgili eserlere bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu,
- Atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapmadığımı,
- Ve bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversite veya başka bir üniversitede başka bir tez çalışması olarak sunmadığımı

beyan ederim.

23 / 02 / 2024

Şükrü Bedirhan GENİŞLER

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

DİZEL MOTORDA SCR SİSTEMİNDE CFD ANALİZİ

Şükrü Bedirhan GENİŞLER

Afyon Kocatepe Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Otomotiv Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Şükrü Ayhan BAYDIR

Bu araştırmada üre SCR (Seçici Katalitik İndirgeme) yoluyla dizel motorlardan kaynaklanan NO_x emisyonlarının azaltılması simülasyon analizinde incelenmiştir. Avrupa standardı emisyon seviyeleri sürekli olarak sıkılaştırılıyor ve bu da atık arıtma sistemine yüksek talepler getirmiştir. Bu tezde, SCR sisteminin çalışmasında yanma sonrası gazlarının üre-su-hava karışımı ile tepkimesinden kaynaklı gaz dağılımı, katalizör öncesi ve sonrası basınç, sıcaklık ve gaz akış hızı analiz edilmiştir. Amaç, CFD simülasyonları aracılığıyla üre spreyi ile egzoz gazının karıştırma borusundaki karışımını incelemektir. Sprey ve türbülanslı akış alanı arasındaki etkileşim incelenmiştir.

2024, x + 41 sayfa

Anahtar Kelimeler: SCR, CFD, Emisyon,

ABSTRACT

M.Sc. Thesis

CFD ANALYSIS IN SCR SYSTEM IN DIESEL ENGINE

Şükrü Bedirhan GENİŞLER

Afyon Kocatepe University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Automotive Engineering

Supervisor: Asst. Prof. Şükrü Ayhan BAYDIR

In this research, the reduction of NOX emissions from diesel engines through urea SCR (Selective Catalytic Reduction) was examined in simulation analysis. European standard emission levels are constantly being tightened, which has placed high demands on the waste treatment system. In this thesis, the gas distribution resulting from the reaction of post-combustion gases with the urea-water-air mixture, pressure, temperature and gas flow rate before and after the catalyst were analyzed in the operation of the SCR system. The aim was to study the mixing of urea spray and exhaust gas in the mixing pipe through CFD simulations. The interaction between the spray and the turbulent flow field was studied.

2024, x + 41 pages

Keywords: SCR, CFD, Emission

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasında ve yüksek lisans programının tüm aşamalarında bilgi, birikim ve desteklerini tüm mütavaziliyle aktarmaktan hiç çekinmeyen saygı değer hocam Dr. Öğr. Üyesi Şükrü AYHAN BAYDIR' a en içten teşekkürlerimi sunarım. Bu yola başlamamda ve devam etmemde emeklerini esirgemeyen sevgili babam olmak üzere aileme tüm içtenlikle teşekkür ederim.

Şükrü Bedirhan GENİŞLER

Afyonkarahisar, 2024

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

Sayfa

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	vi
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
RESİMLER DİZİNİ	ix
1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR BİLGİLERİ	3
2.1 Dizel Yanması ve Yönetmelikler.....	3
2.1.1 Yanma ve Emisyonlar.....	3
2.1.2 NO _x Son İşlem Teknikleri	3
2.1.3 SCR.....	4
2.1.4 SCR Türleri.....	5
2.1.5 Üre Ayrışması.....	5
2.1.6 SCR Yüzey Kimyası	6
2.1.7 SCR Katalizörü	7
2.2 Modelleme	8
2.2.1 SCR CFD Modelleme	8
2.2.2 Model Bağlantısı.....	9
2.2.3 Katalizör Modelleme	10
3. MATERYAL VE METOT	12
3.1 Analizdeki SCR'nin Modellemesi	12
3.2 Analiz Adımları	12
4. BULGULAR.....	30
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	38
6. KAYNAKLAR	39
ÖZGEÇMİŞ	41

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler

C	Karbon
CO	Karbon Monoksit
CO ₂	Karbon Dioksit
CO(NH ₂) ₂	Üre
°C	Santigrat Derece
H	Hidrojen
H ₂ O	Su
H ₂ SO ₄	Sülfürik Asit
HNCO	İzosiyanik Asit
K	Kelvin
O ₂	Oksijen
NH ₃	Amonyak
NO	Azot Oksit
SO ₂	Kükürt Dioksit
SO ₃	Kükürt Trioksit
SO _x	Kükürt Oksit

Kısaltmalar

CFD	Computational Fluid Dynamics
DPM	Discrete Phase Model
RANS	The Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RNG	Re-Normalisation Group
SCR	Selective Catalytic Reduction
TAB	Taylor Analogy Breakup

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 2.1 Monolit katalizörün şematik bir şekli. Substrat, reaksiyonun katalizör yüzeyin de gerçekleştiği birkaç kanala bölünür.....	7
Şekil 2.2 Katalizör girişindeki giriş sınır koşullarının hesaplanması.....	10
Şekil 3.1 Sistemdeki enjektör.	12
Şekil 3.2 Model ağ yapısı ve gaz giriş bölgesi.....	13
Şekil 3.3 Türbülans model ayarları.....	13
Şekil 3.4 Species ayarları.	14
Şekil 3.5 Physical Models ayarları.	14
Şekil 3.6 Enjektör modeli oluşturma.....	15
Şekil 3.7 Enjektör konum ve doğrultu ayarları.....	15
Şekil 3.8 Türbülans dağılım değerleri.....	16
Şekil 3.9 Islak yanma modeli ayarı.....	16
Şekil 3.10 Enjeksiyonlar.....	17
Şekil 3.11 Karışım türleri ayarları.	18
Şekil 3.12 Karışım türündeki elementler.	18
Şekil 3.13 Droplet-particle ayarları.....	19
Şekil 3.14 Combusting-particle ayarları.....	19
Şekil 3.15 Pre-Exponential Factor ve Activation Energy değerleri.....	20
Şekil 3.16 Hücre bölgesi koşulu ayarı.....	20
Şekil 3.17 Katalizör ayarları.....	21
Şekil 3.18 Wall inlet thermal ayarları.	21
Şekil 3.19 Wall inlet türler ayarı.	22
Şekil 3.20 DPM ayarı.	22
Şekil 3.21 Wall outlet thermal ayarları.	23
Şekil 3.22 Wall katalizör türler ayarı.....	23
Şekil 3.23 Boundary condition açılır listesi.	24
Şekil 3.24 Momentum ayarları.	24
Şekil 3.25 Thermal ayarlar.	25
Şekil 3.26 Species ayarları.	25
Şekil 3.27 DPM ayarı.....	26
Şekil 3.28 Outlet momentum ayarları.....	26
Şekil 3.29 Outlet thermal ayarı.....	27

	Sayfa
Şekil 3.30 Outlet species ayarı.....	27
Şekil 3.31 Outlet DPM ayarı.	28
Şekil 3.32 Surface report 1.	28
Şekil 3.33 Surface report 2.	29
Şekil 4.1 Kalıntı değerleri grafiği.....	30
Şekil 4.2 NH ₃ ağırlıklı alan grafiği.	31
Şekil 4.3 Gaz akış grafiği	31
Şekil 4.4 Katalizör girişi NH ₃ dağılımı.	32
Şekil 4.5 Giriş, katalizör girişi, katalizör çıkışı ve çıkış sıcaklık dağılımları.....	33
Şekil 4.6 Giriş, katalizör girişi, katalizör çıkışı ve çıkış yüzeylerindeki dinamik basınç dağılımları.....	33
Şekil 4.7 SCR sisteminde orta kesitteki hız dağılımı.....	34
Şekil 4.8 SCR sisteminde tepkime sonrası oluşan amonyak, izosiyanik asit ve su dağılımı.....	36
Şekil 4.9 SCR sisteminde nitrojen ve oksijen dağılımı.....	37

ÇİZELGELER DİZİNİ

Sayfa

Çizelge 3.1 Enjeksiyonların konum ve püskürtme yönü değerleri.....	17
Çizelge 3.2 Wall inlet thermal ayar değerleri.....	22



RESİMLER DİZİNİ

Sayfa

Resim 3.1 Deney düzeneğindeki SCR sistemi.....	12
---	----



1. GİRİŞ

Azot oksitler veya NO_x , dizel motorun yanma sürecinde ideal olmayan koşullar nedeniyle üretilen egzoz gazlarında istenmeyen bir kirleticidir (İnt. Kyn. 1). Avrupa emisyon standartları, dizel motorlardan izin verilen NO_x emisyon seviyesini düzenlemektedir ve bu seviyenin son on yılda önemli ölçüde azalmış olduğu ve yakın gelecekte daha da azalması beklenmektedir. Volvo Penta'da üretilen yol dışı dizel motorlar, egzoz gazlarındaki NO_x miktarını azaltmak için bir SCR sistemi içeriyor. Böyle bir sistemde NO_x 'i nitrojen gazına (N_2) ve suya (H_2O) dönüştürmek için indirgeyici madde olarak amonyak (NH_3) kullanılır. (İnt. Kyn. 2). NH_3 düşük konsantrasyonlarda bile sağlıksız bir kimyasal olduğundan NH_3 kaynağı olarak üre kullanılır (Salib vd. 2003). Üre bazlı bir SCR sisteminde, üre (ağırlıkça %32,5) ve AdBlue adı verilen sudan oluşan bir çözelti, atomizasyon yoluyla sıcak egzoz gazlarına enjekte edilir. Ürenin NH_3 'e ayrışması için suyun buharlaşması gerekir (Bosch vd. 2006). Doğal olarak, katalizör üzerinde yüksek bir NO_x dönüşümü elde etmek için, yüksek bir üre dönüşümü ve NO_x ile NH_3 arasında düzgün bir karışım elde etmek önemlidir. Bunu başarmak amacıyla, türbülansı arttırmak ve spreyi daha küçük damlacıklara bölmek için statik karıştırıcılar kurulabilir (Samuelsson ve Holmberg 2013).

Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (CFD), otomotiv endüstrisinde egzoz gazı son işlem sistemlerinin tasarlanması ve geliştirilmesi için önemli bir araç olmuştur. SCR katalizörünün girişindeki NH_3 konsantrasyonunu ölçerek SCR performansını deneysel olarak değerlendirme süreci hem pahalı hem de zaman alıcı olan zor bir iştir. Bununla birlikte, CFD simülasyonlarının bir SCR sisteminde meydana gelen atomizasyonu ve kimyasal reaksiyonları akış karışımıyla birlikte tahmin etmesini sağlayan sayısal yöntemler ve hesaplama teknolojileri hızla geliştirilmektedir. Dolayısıyla, CFD simülasyonları aracılığıyla akış tekdüzeliğinin tahmin edilmesiyle geliştirme ilerlemesi için gereken süre önemli ölçüde azaldı (Zhang vd. 2006).

Bu tezin amacı, SCR katalizörünün yukarı akışında yer alan karıştırma borusundaki üre ve egzoz gazlarının karışma olayını incelemektir. Sprey, türbülanslı akış alanı ve karıştırıcı elemanlar arasındaki etkileşim incelenmiştir. Sistemin nasıl çalıştığına ve üre dönüşümü ve karıştırma performansı açısından sonuçları iyileştirecek hangi

modifikasyonların yapıldığına dair daha iyi bilgi edinmek amacıyla sonuçlar trend olarak değerlendirilir. NO_x dönüşümünün daha iyi tahmin edilebilmesi için sistem performansını değerlendirme yöntemleri analiz edilmekte ve geliştirilmektedir.



2. LİTERATÜR BİLGİLERİ

2.1 Dizel Yanması ve Yönetmelikler

2.1.1 Yanma ve Emisyonlar

Dizel motorlar hidrokarbonları yakar ve ideal koşullardaki ürünler karbondioksit (CO_2) ve sudur (H_2O). Sonuç olarak, motordan çıkan egzoz gazı esas olarak CO_2 , H_2O ve yanmadan kaynaklanan kullanılmamış havadan oluşacaktır. Koşullar ideal değilse CO_2 ve H_2O 'ya ek olarak kirleticiler de üretilir. Bu kirleticilerden bazıları çevre ve/veya sağlık üzerinde istenmeyen etkilere sahiptir. Yaygın kirleticiler yanmamış hidrokarbonlar (HC), karbon monoksit (CO), nitrojen oksitler (NO_x) ve partikül maddedir (PM) (İnt. Kyn. 1).

Yol dışı dizel motorlar için, izin verilen emisyon sınırını düzenleyen ve Aşama 1-4 olarak bilinen Avrupa emisyon standartları bulunmaktadır. Avrupa'da karayolu dışı dizel motorlardan kaynaklanan emisyonlara ilişkin ilk mevzuat iki adımda uygulanmıştır; Motorun güç çıkışına bağlı olarak Aşama 1 1999'da ve Aşama 2 ise 2001'den 2004'e kadar tanıtıldı. Bu iki aşamada belirtilen emisyon limitleri, herhangi bir egzoz son işlem cihazından önceki emisyonlar anlamına gelen motor çıkış limitleri olarak adlandırılmıştır. Aşama 3A ve Aşama 3B olarak ikiye ayrılan Aşama 3, sırasıyla 2006-2008 ve 2011-2013 yıllarında uygulamaya konmuş olup, Aşama 4'teki standartlar 2014 yılında uygulamaya konulacaktır. Bu standartlar ayrıca amonyak emisyon limitini de içermektedir. Aşama 3B'de partikül madde için 0,025 g/kWh'lik bir limit getirildi ve bu limite ulaşmak için motordan sonra partikül filtresinin kullanılması öngörülüyordu. Yaklaşan Aşama 4'te önemli ölçüde daha düşük bir NO_x sınırı vardır ve bunun da aynı şekilde bir NO_x son işlem cihazının geliştirilmesini gerektirmesi beklenmektedir (İnt. Kyn. 3).

2.1.2 NO_x Son İşlem Teknikleri

NO_x deşarjına ilişkin gelecek standart seviyelerin karşılanması için bazı son arıtma cihazlarına ihtiyaç duyulmaktadır. NO_x 'in son arıtımına yönelik farklı teknolojiler mevcuttur ve günümüzde mevcut en yaygın tekniklerden bazıları şunlardır:

Egzoz gazlarına hidrokarbonların eklendiği yalın NO_x katalizörleri NO_x 'i azaltır ve nitrojen, karbondioksit ve su oluşturur. Bu tür katalizörlerin ana dezavantajı nispeten

düşük NO_x dönüşümünün (%10-20) olmasıdır. Dolayısıyla bu teknoloji geleceğin standartlarını karşılayabilecek bir teknoloji olarak görülmüyor (İnt. Kyn. 2).

Fakir NO_x katalizörleri ile birlikte kullanılabilen ve zayıf NO_x katalizörünün zayıf performansa sahip olduğu düşük sıcaklıklarda NO_x'i adsorbe eden NO_x adsorberleri. Adsorplanan NO_x daha sonra hidrokarbonlarla reaksiyonu teşvik eden sıcaklıklarda salınır (İnt. Kyn. 2). Bununla birlikte, NO_x adsorbe edicileri kükürt zehirlenmesine karşı duyarlıdır, bu da kükürtün adsorpsiyonunun geri dönüşü olmayan katalizör deaktivasyonuna neden olduğu anlamına gelir. Bu tip katalizörlerin dizel motorlarda kullanılmamasının ana nedeni budur (Salib vd. 2003).

NO moleküllerini azaltabilen veya oksitleyebilen radikalleri üretmek için termal olmayan plazmanın kullanıldığı plazma destekli katalizör kullanılır (Yu vd. 2005). Egzoz gazlarında oksijen mevcut olduğundan oksidasyon reaksiyonu ana reaksiyon olacak ve NO, NO₂'ye oksitlenebilecek ve dolayısıyla NO_x'in indirgenmesi düşük olacaktır. Teknoloji nispeten yeni olduğundan, dizel motorlara yönelik son işlem uygulamalarında gelecekteki kullanımın değerlendirilmesi için daha fazla araştırma yapılması gerekmektedir ve şu anda ticari olarak kullanılmamaktadır (İnt. Kyn. 4).

Günümüz uygulamalarında seçici katalitik indirgeme (SCR) kullanılır.

2.1.3 SCR

Bir SCR sisteminde, NO_x'i nitrojen gazına (N₂) ve suya (H₂O) dönüştürmek için indirgeyici madde olarak amonyak (NH₃) kullanılır. Bu sistemin ana avantajı yüksek NO_x dönüşümleridir (%90 veya daha yüksek). Dezavantajları arasında katalizör için gerekli alan, yüksek sermaye ve işletme maliyetleri, diğer emisyonların oluşumu (NH₃ kayması) ve katalizörün maskelenmesine ve devre dışı bırakılmasına yol açabilecek istenmeyen bileşiklerin oluşumu yer alır. NH₃ kayması, SCR sisteminden sonra bir oksidasyon katalizörü kurularak kontrol edilebilir. SCR sisteminin bazı dezavantajları olmasına rağmen, Avrupa standartlarını karşılayacak daha iyi seçeneklerin bulunmaması nedeniyle bu teknoloji dizel motor üreticilerinin çoğunluğu tarafından tercih edilmektedir (İnt. Kyn. 2).

2.1.4 SCR Türleri

NH₃'ü sisteme tanıtmanın üç olası yolu vardır; susuz NH₃, sulu NH₃ veya NH₃'e ayrıışan sulu bir üre çözeltilisi. Amonyak düşük konsantrasyonlarda bile cildi, gözleri ve mukoza zarlarını tahriş eder. Gaz halindeki NH₃'ün depolanması ve taşınmasıyla ilgili potansiyel risk önemlidir ve dolayısıyla yaygın olarak kullanılmaz. Sulu NH₃, susuzdan daha düşük bir buhar basıncına sahiptir ve bu da kaza durumunda sonuçların azalmasına neden olur. Hem susuz hem de sulu NH₃'ün doğrudan işlenmesini önlemek için, genellikle bir NH₃ kaynağı olarak üre kullanılır (Salib vd. 2003).

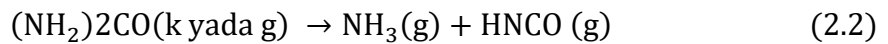
2.1.5 Üre Ayrışması

Bir üre SCR sisteminde, genellikle AdBlue olarak adlandırılan bir üre-su çözeltilisi, sıcak egzoz gazlarına püskürtülür. AdBlue çözeltilisi ağırlıkça %32,5 üre ve ağırlıkça %67,5 su içerir. SCR sisteminde NH₃ üretimi, reaksiyonlar (2.1)-(2.3)'te anlatıldığı gibi üç aşamada gerçekleşir. İlk reaksiyonda AdBlue damlacıklarından su buharlaştırılır ve ikinci reaksiyonda termohidroliz yoluyla üre NH₃ ve izosiyanik asit (HNCO)'ye ayrıştırılır. Birkhold ve arkadaşlarına göre ürenin su buharlaştıktan sonraki durumu tam olarak anlaşılamamıştır çünkü bazı yazarlar ürenin gaz fazında olduğunu, diğerleri ise ürenin katı halde olduğunu bildirmektedir (Bosch vd. 2006).

Damlacıklardan suyun buharlaşması (Bosch vd. 2006):

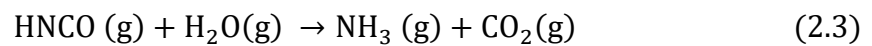


Ürenin NH₃ ve izo-siyanik asite termolizi (Bosch vd. 2006):



Gaz fazındaki HNCO oldukça kararlıdır ancak sıcaklık yeterince yüksekse (400° C veya daha yüksek) veya daha düşük sıcaklıklarda metal oksitlerin yüzeyinde hidroliz reaksiyonu yoluyla kolaylıkla NH₃ ve karbondioksite dönüştürülebilir (Yim vd. 2004).

İzo-siyanik asidin hidrolizi (Bosch vd. 2006):



Uygun koşullarda, bir mol üre sonuç olarak iki mol NH₃ verecektir. Üre SCR'deki tek NH₃ kaynağı olduğundan ayrıştırma genel performans açısından önemli bir adımdır. Hem NH₃ hem de HNCO, katalizör yüzeyinde NO_x ile reaksiyona girecek (HNCO (3)'te anlatıldığı gibi reaksiyona girecek ve daha sonra NO_x ile reaksiyona girecek) ve bu iki türe burada aktif madde adı verilecektir. Yim ve arkadaşları tarafından kanıtlanmıştır. Ürenin tamamen ayrışması için gereken süre sıcaklık arttıkça azalır ve bunun tersi de geçerlidir (Yim vd. 2004).

Üre termolizi ve HNCO hidrolizi, gaz fazında reaksiyona giren türler varsayılarak modellenmiştir ve kinetik, Yim ve arkadaşlarının bir çalışmasına göre belirtilmiştir. Ürenin termal bozunmasının kinetiği, reaksiyonu araştırılmıştır; bu, ürenin aktif maddeye termolizinin bir katalizörün varlığından bağımsız olduğunu ortaya koymaktadır. Bunun tersine, hidrolizin reaksiyon hızı sabiti, bir katalizör varlığında, hidrolizin bir katalizör tarafından hızlandırılabilirliği belirtilmeyen duruma göre daha büyüktür (Yim vd. 2004).

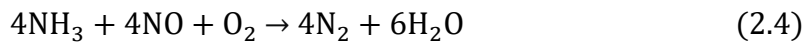
$$k_1 = 4,9 \times 10^3 e^{\frac{-2,3 \times 10^7}{RT}}$$

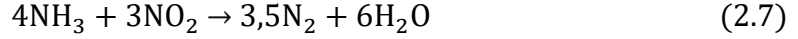
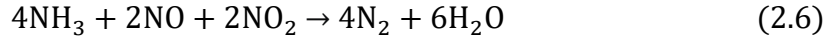
$$k'_2 = 2,5 \times 10^3 e^{\frac{-6,22 \times 10^7}{RT}}$$

Üre k₁'in termolizi ve izo-siyanik asit k₂'nin katalizör olmadan hidrolizi için reaksiyon hızı sabitleri Yim ve diğerleri tarafından sunulmuştur. Aktivasyon enerjileri J mol⁻¹ K⁻¹ cinsinden ve ön üstel faktörler s⁻¹ cinsinden verilmiştir. k'₂ sabiti, reaksiyon hızı sabiti ile su buharı konsantrasyonunun bir ürünüdür. Egzoz gazı akışındaki su konsantrasyonu yüksektir ve bu nedenle değişmeyecektir. Ayrıca k'₂ büyük ölçüde sıcaklığa bağlıdır, bu da yüksek aktivasyon enerjisiyle sonuçlanır ve reaksiyonu başlatmak için yüksek sıcaklığa ihtiyaç vardır. Ancak düşük sıcaklıklarda metal oksitlerin yüzeyinde yani katalizör yüzeyinde hidrolizin reaksiyon hızı artar (Samuelsson ve Holmberg 2013).

2.1.6 SCR Yüzey Kimyası

SCR'de gerçekleşen dört temel reaksiyon vardır (Koebel vd. 2000):

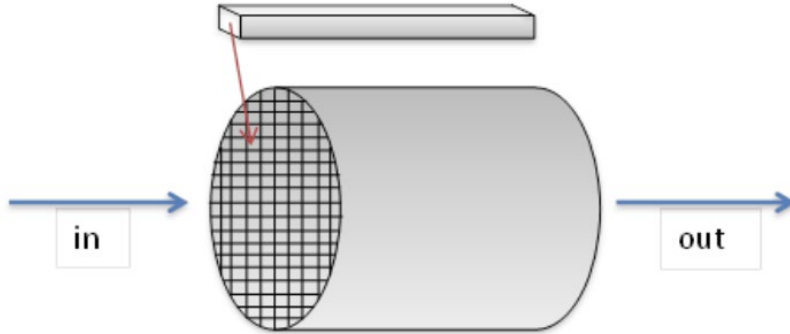




Dizel egzoz gazındaki NO_x 'in genellikle %90'ının NO olması nedeniyle reaksiyon (2.4), SCR'nin ana reaksiyonudur. Reaksiyon (2.5) ve (2.7) ana reaksiyondan daha yavaştır. Diğer yandan reaksiyon (2.6) ana reaksiyondan daha hızlıdır, bu da NO_x 'in yüksek dönüşümü için eş molar miktarda NO ve NO_2 'nin uygun olduğu anlamına gelir. Hem teknik hem de pratik sınırlamalardan dolayı yüzey kimyası modellenmemiştir. Ancak denklem (2.4)'ün en önemli reaksiyon olduğu ve oluşan tüm aktif maddenin NO_x ile reaksiyona gireceği ve NO_x 'in sadece NO'dan oluştuğu varsayılmaktadır (Koebel vd. 2000).

2.1.7 SCR Katalizörü

Bölüm 2.1.6'da açıklanan reaksiyonlar, katalizör yüzeyinde, yüzey üzerinde nispeten eşit bir dağılıma sahip aktif bölgelerde gerçekleşir. Bir SCR sisteminde kullanılan katalizör monolitik bir katalizördür. Bir monolit, Şekil 2.1'de şematik olarak gösterildiği gibi, tüm katalizör substratı boyunca uzanan kare kanallardan oluşur (Roberts 2008).



Şekil 1.1 Monolit katalizörün şematik bir şekli. Substrat, reaksiyonun katalizör yüzeyinde gerçekleştiği birkaç kanala bölünür (Roberts 2008).

Monolitler, tamamen spesifik katalizör malzemesinden hazırlanabilir veya bir miktar inert malzeme örneğin; Kanalların duvarlarına katalitik bir katman uygulanan, destek malzemesi görevi gören metalik veya seramik. Katalizör kanallara bölünmüş olduğundan, gaz akışı katalizöre girdikten sonra önemli bir karışım olmayacaktır. Bu nedenle aktif

maddenin SCR katalizör girişi üzerinde eşit şekilde dağıtılması ve böylece tüm kanallarda kullanılabilir hale getirilmesi önemlidir. Bu, katalizör girişinden önce üniform bir karışıma ulaşmanın önemini vurgulamaktadır (Roberts 2008).

2.2 Modelleme

2.2.1 SCR CFD Modelleme

Akış simülasyonu, türbülansın kapatılması için gerçekleştirilebilir k-ε modelinin benimsendiği "RANS" formülasyonu kullanılarak gerçekleştirilir. Duvara yakın bölgede akış, iki katmanlı yaklaşımı gelişmiş duvar işlevleriyle birleştiren Gelişmiş Duvar İşleme Modeli tarafından belirlenir.

Spesifik bir konfigürasyon nedeniyle, sürekli akışlı katalizör bloğu gözenekli bir ortam olarak tanımlanır. Viskoz ve atalet kayıplarından kaynaklanan kanal içi basınç düşüşü aşağıdaki şekilde hesaplanır.

$$\Delta p = C_{visc}\mu \cdot u \cdot 2 + \frac{\rho}{2} C_{inert} u^2 \Delta z \quad (2.8)$$

C_{visc} , C_{inert} – sırasıyla viskoz ve eylemsizlik direnç katsayıları (Blinov vd. 2020).

Üre-su-çözeltili spreyi Lagrangian yaklaşımıyla simüle edilmiştir. Yörüngeleri daha da takip edilen bir dizi ayrı damlacık olarak temsil edildi. Dahili bir Ayırık Faz Modeli uygulandı. Başlangıçtaki damlacık boyutları ve hızlarının yanı sıra püskürtme deseni de doğrudan belirtilir. İlki Rosin-Rammler dağılım fonksiyonu şeklinde ifade edilir:

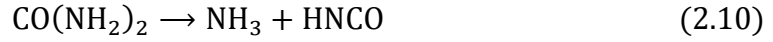
$$Q_{(d)} = 1 - \exp\left[-\left(d/\bar{d}\right)^n\right] \quad (2.9)$$

d – damlacık çapı, $\bar{d}$ – ortalama damlacık çapı; n - dağılımın şekil parametresi (Blinov vd. 2020).

İkincil damlacık kırılması, salınım damlacığı ile yaylı kütle sistemi arasındaki analojiye dayanan TAB modeliyle simüle edilir. Damlacık ekvatorunun yer değiştirmesi kritik değerini ($y > 1$) aştığında damlacık kırılması meydana gelir. Sönümlü, zorlanmış bir osilatörü yöneten denklemden hesaplanır (O'Rourke ve Amsden 1987). Sıcaklık ve bileşen konsantrasyonunun damlacık içinde mekansal olarak tekdüze olduğu ancak

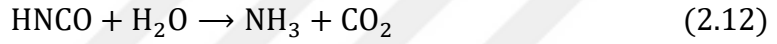
zamansal olarak deđiřtiđi varsayılmıřtır (Blinov vd. 2020). Üre ayrıřma süreci, reaksiyon hızlarının kuvvet yasası kinetik denklemlerine uygun olarak hesaplandıđı hacimsel reaksiyonlarla tanımlandı (Saha vd. 2012):

Üre termolizi:



$$R_{\text{termoliz}} = A_{\text{termoliz}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{a,\text{termoliz}}}{RT}\right) \cdot [\text{CO}(\text{NH}_2)_2] \quad (2.11)$$

İzosiyanik asit hidrolizi:



$$R_{\text{hidroliz}} = A_{\text{hidroliz}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{a,\text{hidroliz}}}{RT}\right) \cdot [\text{HNCO}] \quad (2.13)$$

R_i – reaksiyon hızı; A_i – üstel öncesi sabit; $E_{a,i}$ – aktivasyon enerjisi; R – evrensel gaz sabiti; T – gaz sıcaklıđı (Blinov vd. 2020).

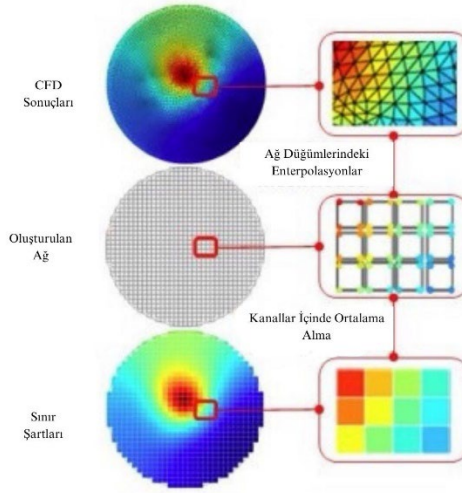
2.2.2 Model Bađlantısı

CFD simölasyonları ile elde edilen katalizör giriřindeki akıř parametrelerinin dađılımları (sıcaklık, hız, kimyasal bileřim vb.) MATLAB'da uygulanan geliřtirilen matematiksel modele aktarılmaktadır. Her bir katalizör kanalının giriř sınır kořullarını tanımlamak için kullanılırlar. Bu amaçla ařađıdaki prosedür uygulanır:

Alt tabakanın kesitini temsil eden ađın oluřturulması;

Örgü düđümlerinde CFD verilerinin enterpolasyonu;

Kanal giriřleri içindeki enterpolasyonlu deđerlerin aritmetik ortalaması (Blinov vd. 2020).



Şekil 2.2 Katalizör girişindeki giriş sınır koşullarının hesaplanması (Blinov vd. 2020).

2.2.3 Katalizör Modelleme

Geliştirilen çok kanallı katalizör modeli, hem kanallar arasındaki ısı transferini hem de katalizör girişindeki gaz akış parametrelerinin dağılımlarını hesaba katacak şekilde genişletilmiş, iyi bilinen 1 boyutlu tek kanallı yaklaşımı kullanır (Depcik ve Assanis 2005).

Bir kanal içindeki gaz özellikleri eksenel mesafenin fonksiyonu olarak hesaplanır:

$$\frac{\partial T_g}{\partial z} = -\frac{hP}{\rho_g A_g C_{p,g} u} (T_g - \bar{T}_w) \quad (2.14)$$

$$A_g u \frac{\partial C_i}{\partial z} = s \sum_j R_{j,i} \quad (2.15)$$

T_g , ρ_g , $C_{p,g}$ – sırasıyla gaz sıcaklığı, yoğunluk ve özgül ısı kapasitesi; u – gaz hızı; T_w – ortalama kanal duvarı sıcaklığı; P – kesit çevresi, A – kesit alanı; C_i i-inci bileşenin konsantrasyonu; R_j – j'inci reaksiyonun reaksiyon hızı; s – kanalın uzunluğu başına reaksiyon sitelerinin sayısı; z – eksenel koordinat (Blinov vd. 2020).

Katalitik reaksiyonları tanımlamak için Eley-Rideal mekanizması kullanıldı. Bu çalışmada yalnızca dört baskın reaksiyon yolu dikkate alındı:

Amonyak adsorpsiyonu:



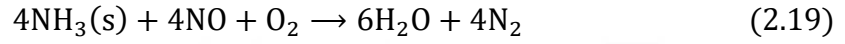
Amonyak desorpsiyonu:



Amonyak oksidasyonu:



Nitrik oksit azaltımı:



Reaksiyon oranları şu şekilde hesaplandı:

$$R_{ads} = k_{ads} C_{\text{NH}_3} (1 - \theta) \quad (2.20)$$

$$R_{des} = k_{des} \exp\left(-\frac{E_{a,des}(1 - a\theta)}{RT_w}\right) \theta \quad (2.21)$$

$$R_{oxid} = k_{oxid} \exp\left(-\frac{E_{a,oxid}}{RT_w}\right) \theta \quad (2.22)$$

$$R_{red} = k_{red} \exp\left(-\frac{E_{a,red}}{RT_w}\right) C_{\text{NO}} \theta \quad (2.23)$$

Amonyak fraksiyonel yükünün katalizör yüzeyine değişimi aşağıdaki denklemle hesaplandı:

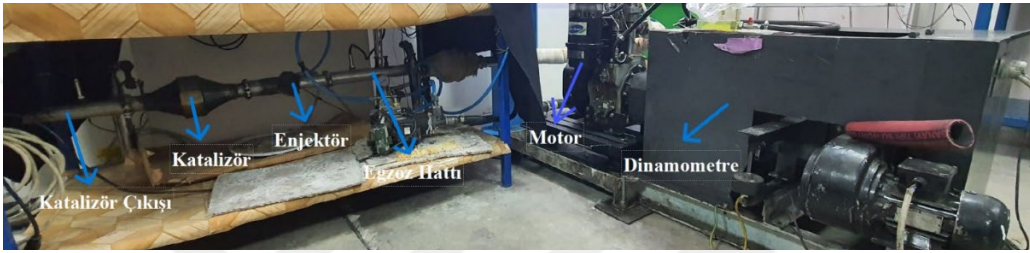
$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial C_{\text{NH}_3}(\text{s})}{\partial t} = (R_{ads} - R_{des} - R_{red} - R_{oxid}) \quad (2.24)$$

Ω – yıkama katının hacmi başına reaksiyon bölgelerinin sayısı.

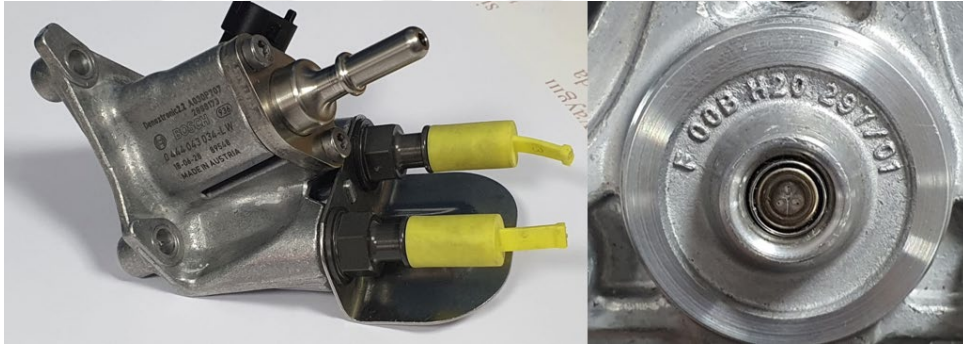
3. MATERYAL ve METOT

3.1 Analizdeki SCR'nin Modellemesi

Analizde kullanılan SCR modellemesinde atölyemizde kullanılan deney düzeneğindeki Resim 3.1'de gösterilen SCR sistemi baz alındı. Birebir ölçüleri ile simülasyon ortamına çizildi. Sistem giriş, enjeksiyon, katalizör ve çıkış olarak 4 kısımdan oluşturuldu. Enjektör püskürtme özellikleri Şekil 3.1'de gösterilen, mevcut sistemde kullanılan enjeksiyondan alındı.



Resim 3.1 Deney düzeneğindeki SCR sistemi.



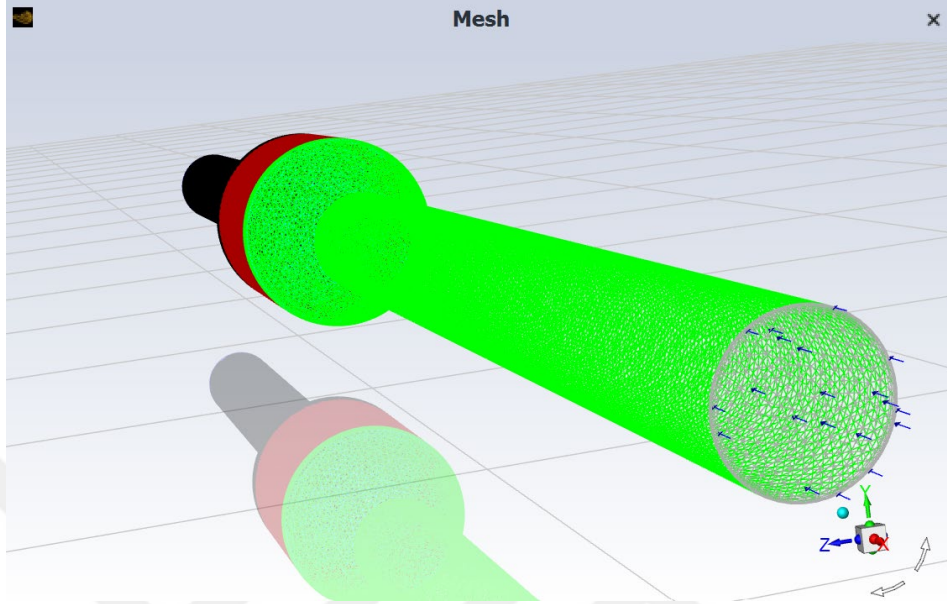
Şekil 3.1 Sistemdeki enjektör.

Analizde kullanılan değerlerden sıcaklık ve enjektör değerlerini deney düzeneğindeki sistem ile birebir alındı. Diğer değerlerde net bir saptama yapılamadığı için deneye ve simülasyon analizine benzer olan çalışmalardan alındı.

3.2 Analiz Adımları

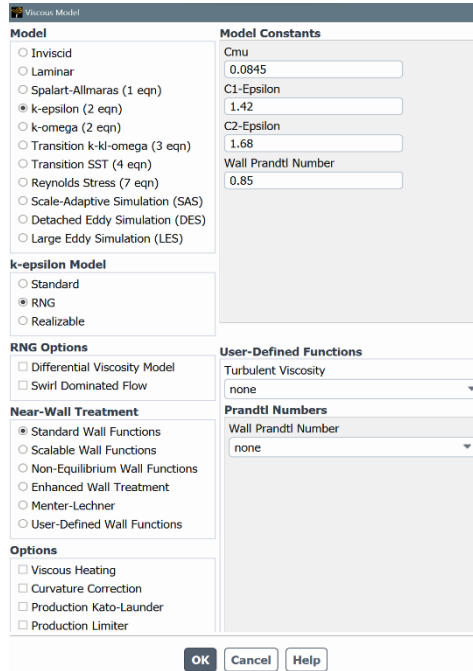
Deney kullanılacak sıcaklık birimini C (celsius), ölçü birimini ise m (metre) olarak ayarlandı.

Ağ görüntüleme işlemi yapıldı. Ağ görüntüleme işlemi sonrasında Şekil 3.2’te gösterilen sistem ağ yapısı ve gaz giriş çıkış noktaları belli olmaktadır.



Şekil 3.2 Model ağ yapısı ve gaz giriş bölgesi.

Model kısmında Şekil 3.3’te gösterilen viscous (viskoz) ayarlarına girilerek RNG (Re-Normalisation Group) k-ε (epsilon) türbülans modeli etkinleştirildi.



Şekil 3.3 Türbülans model ayarları

Model kısmında Şekil 3.4'te gösterilen species (bileşikler) ayarlarına girilerek transport modeli etkinleştirildi.

Species Model

Model

- ☐ Off
- ☒ Species Transport
- ☐ Non-Premixed Combustion
- ☐ Premixed Combustion
- ☐ Partially Premixed Combustion
- ☐ Composition PDF Transport

Reactions

- ☒ Volumetric
- ☐ Wall Surface
- ☐ Particle Surface
- ☐ Electrochemical

Chemistry Solver

None - Direct Source

Options

- ☒ Diffusion Energy Source
- ☐ Full Multicomponent Diffusion
- ☐ Thermal Diffusion

Mixture Properties

Mixture Material: urea-water-air **Edit...**

Import CHEMKIN Mechanism...

Number of Volumetric Species: 7

Turbulence-Chemistry Interaction

- ☒ Finite-Rate/No TCI
- ☐ Finite-Rate/Eddy-Dissipation
- ☐ Eddy-Dissipation
- ☐ Eddy-Dissipation Concept

Coal Calculator... **Water Corrosion Pre...**

Select Boundary Species

Select Reported Residuals

Thermodynamic Database File Name

~1\ANSYSI~1\v232\fluent\fluent23.2.0\isat\data\thermo.db **Browse...**

OK **Apply** **Cancel** **Help**

Şekil 3.4 Species ayarları.

Model kısmında Şekil 3.5'deki Physical Models (Fiziksel Modeller) sekmesi ayarlamaları yapıldı.

Discrete Phase Model

Interaction

- ☒ Interaction with Continuous Phase
- ☒ Update DPM Sources Every Flow Iteration
- DPM Iteration Interval: 5

Particle Treatment

- ☐ Unsteady Particle Tracking

Contour Plots for DPM Variables

- ☐ Mean Values

Tracking **Physical Models** **UDF** **Numerics** **Parallel**

Options

- ☐ Thermophoretic Force
- ☐ Saffman Lift Force
- ☒ Virtual Mass Force
- ☒ Pressure Gradient Force
- ☐ Erosion/Accretion
- ☐ Pressure Dependent Boiling
- ☒ Temperature Dependent Latent Heat
- ☐ Two-Way Turbulence Coupling
- ☐ DEM Collision
- ☐ Stochastic Collision
- ☐ Breakup
- ☐ Volume Displacement

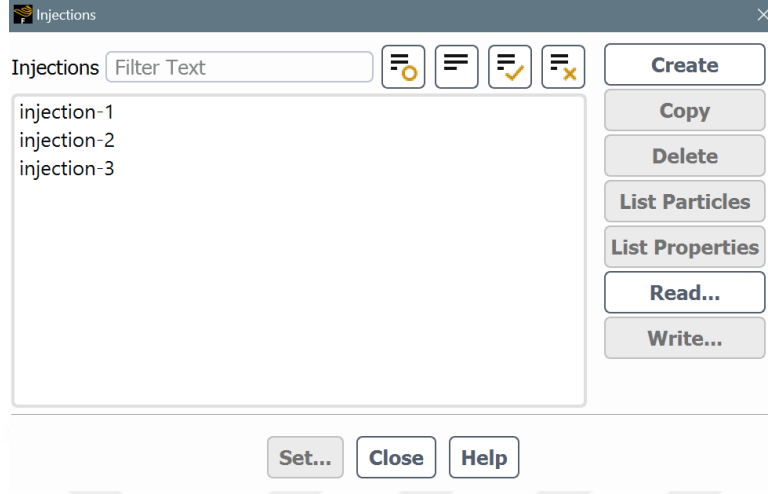
Virtual Mass Force

Virtual Mass Factor: 0.5

OK **Injections...** **DEM Collisions...** **Cancel** **Help**

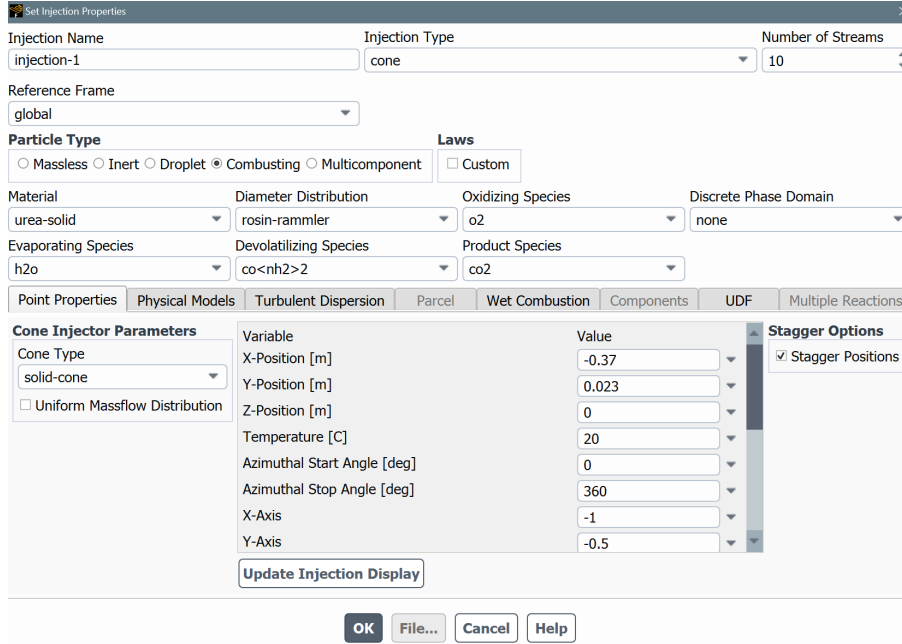
Şekil 3.5 Physical Models ayarları.

Injection kısmında Şekil 3.6’da gösterilen create(oluşturma) bölümünden Şekil 3.7, 3.8 ve 3.9’daki gibi enjeksiyon modellemesi yapıldı.



Şekil 3.6 Enjektör modeli oluşturma

Şekil 3.7’de gösterildiği gibi point properties (nokta özellikleri) sekmesinde enjeksiyon noktalarının koordinat düzlemindeki X, Y ve Z konumları ve püskürtme yönü değerleri girildi. Bu sekmede sadece bu değerler değiştirildi, diğer değerler programın kendi atadığı optimum değerlerdir.



Şekil 3.7 Enjektör konum ve doğrultu ayarları.

Sonrasında aynı sayfada şekil 3.8’de gösterilen turbulent dispersion (türbülans dağılım) sekmesindeki programın kendi atadığı değerler değiştirilmedi.

The screenshot shows the 'Set Injection Properties' dialog box with the 'Turbulent Dispersion' tab selected. The 'Injection Name' is 'injection-1', 'Injection Type' is 'cone', and 'Number of Streams' is '10'. The 'Reference Frame' is 'global'. Under 'Particle Type', 'Combusting' is selected. The 'Material' is 'urea-solid', 'Diameter Distribution' is 'rosin-rammler', 'Oxidizing Species' is 'o2', and 'Discrete Phase Domain' is 'none'. 'Evaporating Species' is 'h2o', 'Devolatilizing Species' is 'co<nh2>2', and 'Product Species' is 'co2'. The 'Stochastic Tracking' section is expanded, showing 'Discrete Random Walk Model' checked, 'Random Eddy Lifetime' unchecked, 'Number of Tries' set to 4, and 'Time Scale Constant' set to 0.15. The 'OK', 'File...', 'Cancel', and 'Help' buttons are at the bottom.

Şekil 3.8 Türbülans dağılım değerleri.

The screenshot shows the 'Set Injection Properties' dialog box with the 'Wet Combustion' tab selected. The 'Injection Name' is 'injection-1', 'Injection Type' is 'cone', and 'Number of Streams' is '10'. The 'Reference Frame' is 'global'. Under 'Particle Type', 'Combusting' is selected. The 'Material' is 'urea-solid', 'Diameter Distribution' is 'rosin-rammler', 'Oxidizing Species' is 'o2', and 'Discrete Phase Domain' is 'none'. 'Evaporating Species' is 'h2o', 'Devolatilizing Species' is 'co<nh2>2', and 'Product Species' is 'co2'. The 'Wet Combustion' section is expanded, showing 'Wet Combustion Model' checked, 'Liquid Material' set to 'water-liquid', and 'Liquid Fraction' set to 0.675. The 'OK', 'File...', 'Cancel', and 'Help' buttons are at the bottom.

Şekil 3.9 Islak yanma modeli ayarı

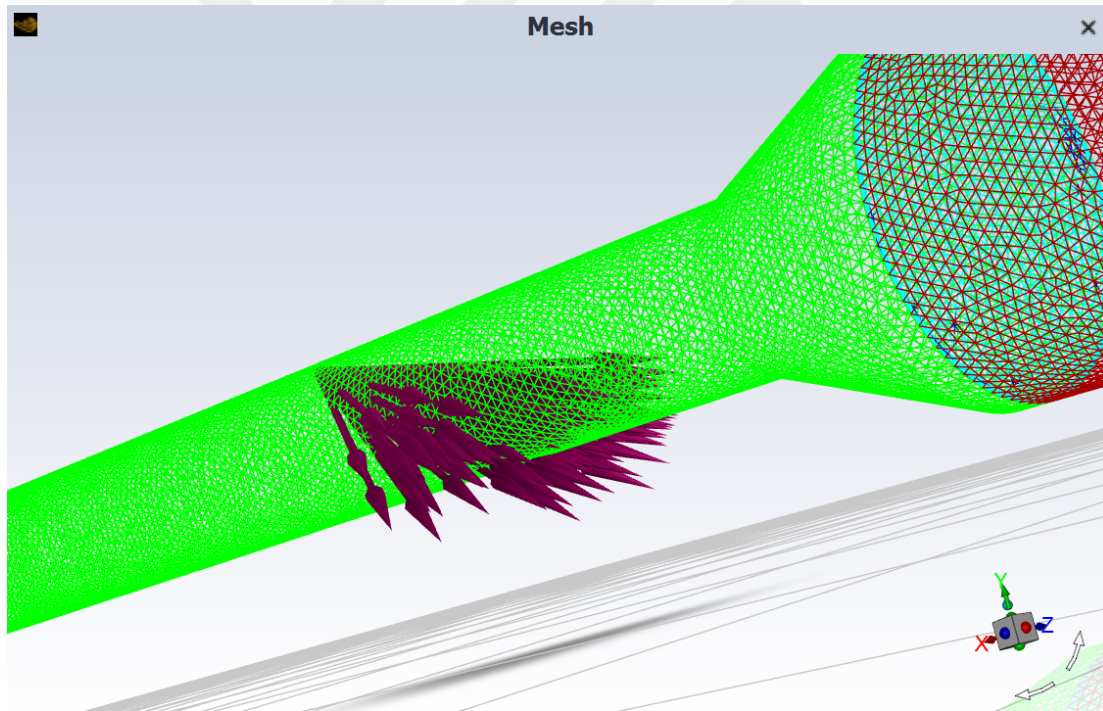
Mevcut deney düzeneğindeki enjektör 3 noktadan püskürtme yaptığı için simülasyonda 3 adet enjektör oluşturuldu. Enjektörler oluşturulurken sadece vektörel konumları ve

vektörel püskürtme yönü değerlerinde farklılık yapıldı. Bu değerler Çizelge 3.1’ de gösterilmiştir.

Çizelge 3.1 Enjektörlerin konum ve püskürtme yönü değerleri

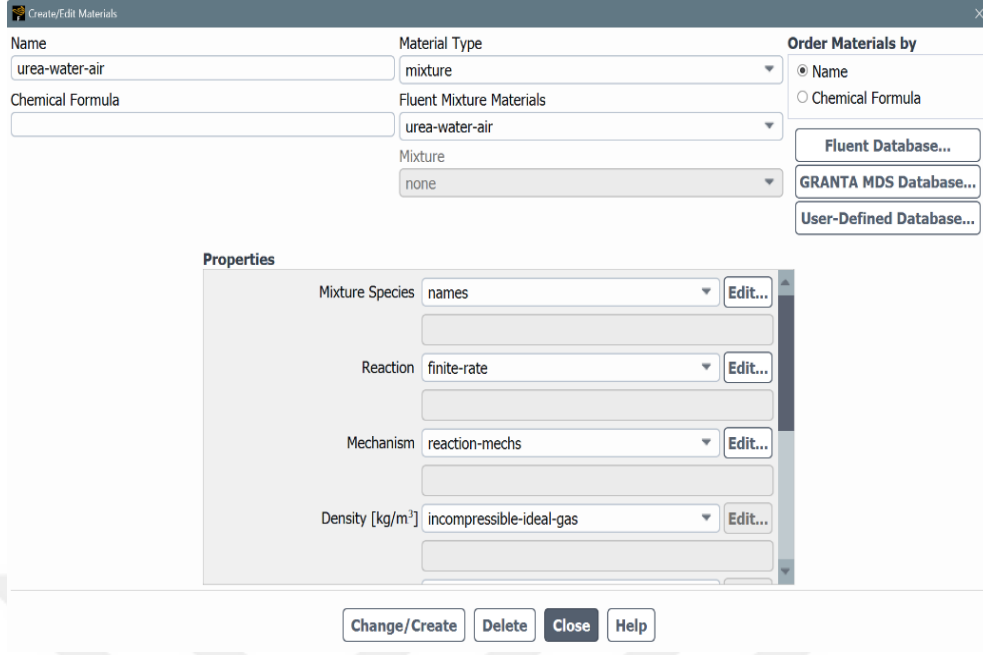
Eksenler	1. Enjeksiyon	2. Enjeksiyon	3. Enjeksiyon
X Eksen (m)	-0,37	0,368	-0,368
Y Eksen (m)	0,023	0,023	0,023
Z Eksen (m)	0	0	0
X Eksen	-1	-1	-1
Y Eksen	-0,5	-0,5	-0,5
Z Eksen	0	-0,5	0,5

Enjektör modelleri oluşturulduktan sonra enjeksiyonlar Şekil 3.10’daki gibi göründü.

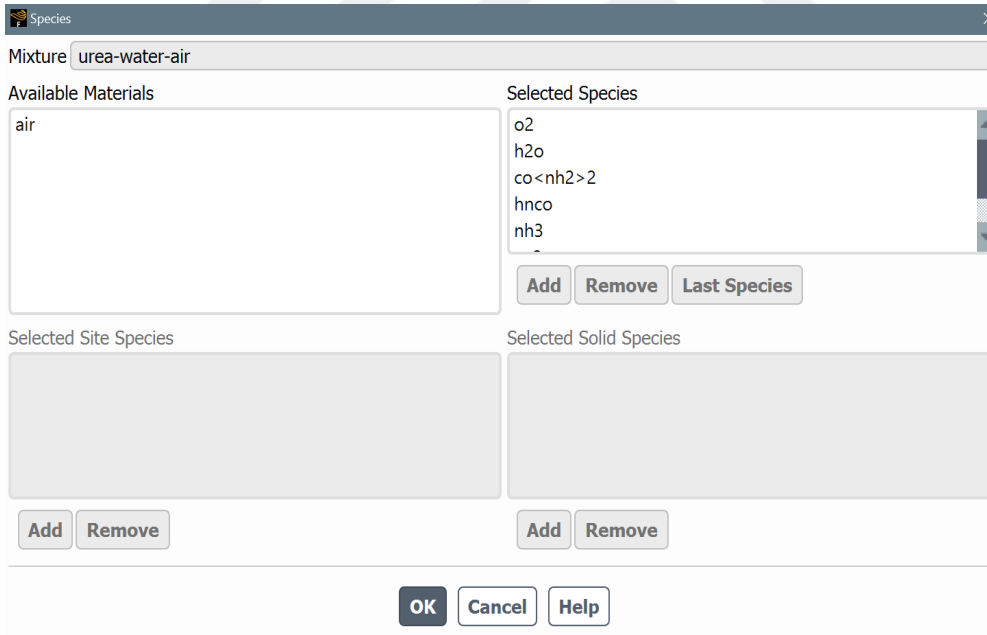


Şekil 3.10 Enjeksiyonlar.

Material (materyal) kısmında Şekil 3.11 ve 3.12’de gösterilen mixtures(karışımlar) bölümünden karışım türlerinin düzenlemesi yapıldı. Material type (materyal tip) mixture, fluent mixture materials (akıcı karışım materyalleri) urea-water-air (üre-su-hava) seçildi.



Şekil 3.11 Karışım türleri ayarları.



Şekil 3.12 Karışım türündeki elementler.

Şekil 3.13’ de gösterilen malzeme türü açılır listesinden droplet-particle (damlacık parçacık) seçeneğini seçerek particle mixture (parçacık karışımı) tanımlandı. Vaporization (buharlaşma) Modeli açılır listesinden convection/diffusion controlled (konveksiyon/difüzyon kontrolü) seçeneği seçildi.

Create/Edit Materials

Name: water-liquid

Material Type: droplet-particle

Chemical Formula: h2o<l>

Fluent Droplet Particle Materials

Mixture: none

Order Materials by: Name

Fluent Database...
GRANTA MDS Database...
User-Defined Database...

Properties

Temperature Averaging Coefficient: none

Composition Averaging Coefficient: none

Vaporization/Boiling Model: convection/diffusion-controlled

Thermolysis Model: none

Change/Create Delete Close Help

Şekil 3.13 Droplet-particle ayarları.

Şekil 3.14’ de gösterilen malzeme türü açılır listesinden **combusting-particle** (yanan parçacık) seçeneğini seçerek parçacık karışımını tanımlayın. Devolatilization (buharsızlaştırma) Modeli açılır listesinden **single-rate** (tek oran) seçin.

Create/Edit Materials

Name: urea-solid

Material Type: combusting-particle

Chemical Formula: co<nh2>2<s>

Fluent Combusting Particle Materials

Mixture: none

Order Materials by: Name

Fluent Database...
User-Defined Database...

Properties

Binary Diffusivity (m2/s): constant

2.33e-05

Diffusivity Reference Pressure (pascal): none

Swelling Coefficient: constant

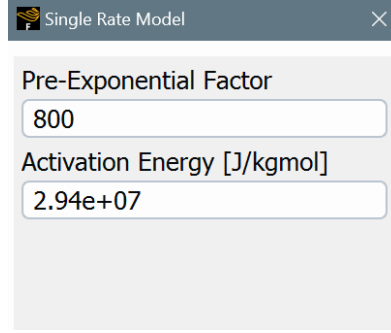
1

Devolatilization Model (1/s): single-rate

Change/Create Delete Close Help

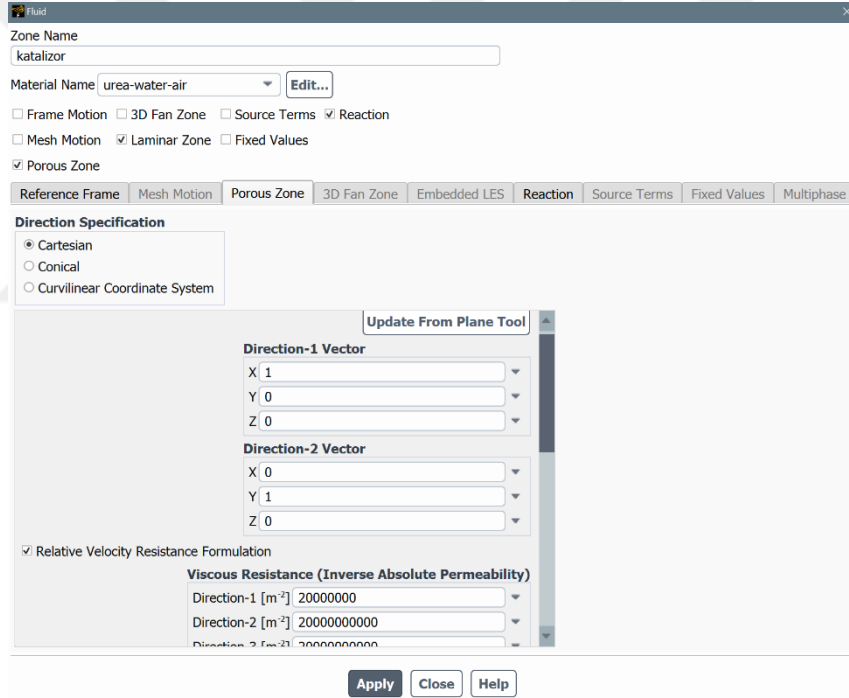
Şekil 3.14 Combusting-particle ayarları.

Pre-Exponential Factor (ön üstel faktör) için 800, Activation Energy (aktivasyon enerjisi) için 2,94e+07 değeri Şekil 3.15’deki gibi girildi. (Anonim 2013)



Şekil 3.15 Pre-Exponential Factor ve Activation Energy değerleri.

Cell zone condition (hücre bölgesi koşulu) kısmında Şekil 3.16’da gösterilen katalizör için hücre bölgesi koşulu ayarı yapıldı. Buradaki ayarları, katalizör iç yapısının gözenekli olmasını istediğimiz için porous zone (gözenekli bölge) sekmesinden yapıldı.



Şekil 3.16 Hücre bölgesi koşulu ayarı.

Direction-1 Vector (yön-1 vektör) grup kutusuna X, Y, Z için sırasıyla 0, 0, 1 ve Direction-2 Vector grup kutusunda X, Y, Z'nin sırasıyla 0, 1, 0 olarak Resim 3.16’ da gösterildiği gibi ayarlandı.

Relative Velocity Resistance Formulation (Bağıl Hız Direnci Formülasyonu) etkinleştirildi.

Viscous resistance (viskoz direnç) grubu kutucuğuna Yön-1 için $2e+7 \text{ m}^{-2}$, Yön-2 ve Yön-3 için $2e+10 \text{ m}^{-2}$, Atalet Direnci grup kutusuna Yön-1 için 10 m^{-1} , Yön-2 ve Yön-3 için Şekil 3.17’ de gösterildiği gibi 9500 m^{-1} girildi.

Şekil 3.17 Katalizör ayarları.

Wall Inlet (giriş cidarı) için sınır koşulu Şekil 3.18, 3.19 ve 3.20’deki gibi ayarlandı. Şekillerde gösterilen seçimler ve değerler ile ilgili deney düzeneğinden net veriler alınamadığından değiştirilmedi, bütün değerler ve seçimler program tarafından atanan değerler ve seçimlerdir.

Şekil 3.18 Wall inlet thermal ayarları.

Çizelge 3.2 Wall inlet thermal ayar değerleri

Ayarlar	Değerler
Thermal Conditions (Termal Koşullar)	Convection
Heat Transfer Coefficient (Isı Transfer Katsayısı) W/m^2K	10
Free Stream Temperature (Serbest Akış Sıcaklığı) C	-30
Wall Thickness (Duvar Kalınlığı) m	$2,46e-5$
Heat Generation Rate (Isı Üretim Oranı) W/m^3	0

Wall

Zone Name

wall_inlet

Adjacent Cell Zone

body_inlet

Momentum

Thermal

Radiation

Species

DPM

Multiphase

UDS

Potential

Structure

Ablation

Species Boundary Condition

o2

Specified Flux (Mass)

h2o

Specified Flux (Mass)

co<nh2>2

Specified Flux (Mass)

hnco

Specified Flux (Mass)

nh3

Specified Flux (Mass)

co2

Specified Flux (Mass)

Species Mass Fraction/ Mass Flux

o2 $[kg/(m^2 s)]$

0

h2o $[kg/(m^2 s)]$

0

co<nh2>2 $[kg/(m^2 s)]$

0

hnco $[kg/(m^2 s)]$

0

nh3 $[kg/(m^2 s)]$

0

co2 $[kg/(m^2 s)]$

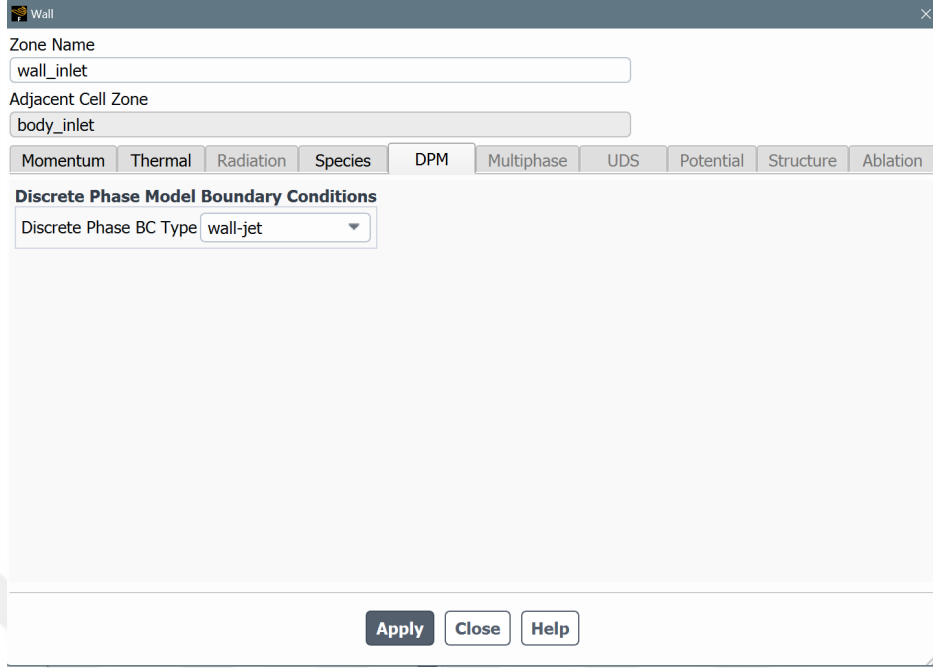
0

Apply

Close

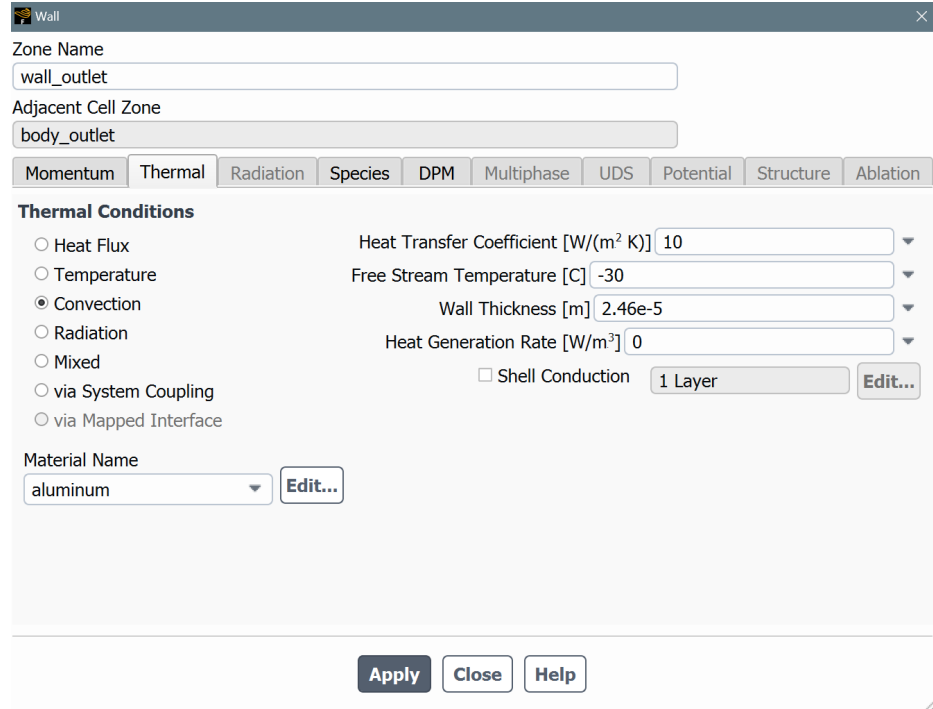
Help

Şekil 3.19 Wall inlet türler ayarı.

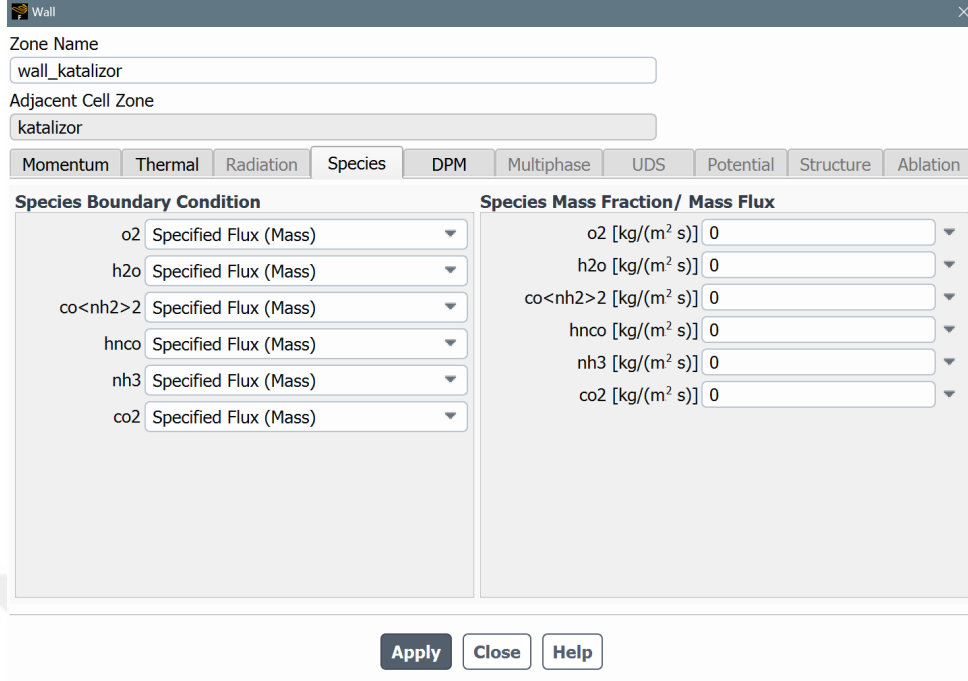


Şekil 3.20 DPM ayarı.

Wall inlet için girilen değerler ve yapılan seçimler Şekil 3.21 ve 3.22'deki gibi Wall Outlet (çıkış duvarı) ve wall katalizör (katalizör duvarı) içinde aynı şekilde programın belirlemesine bırakıldı.

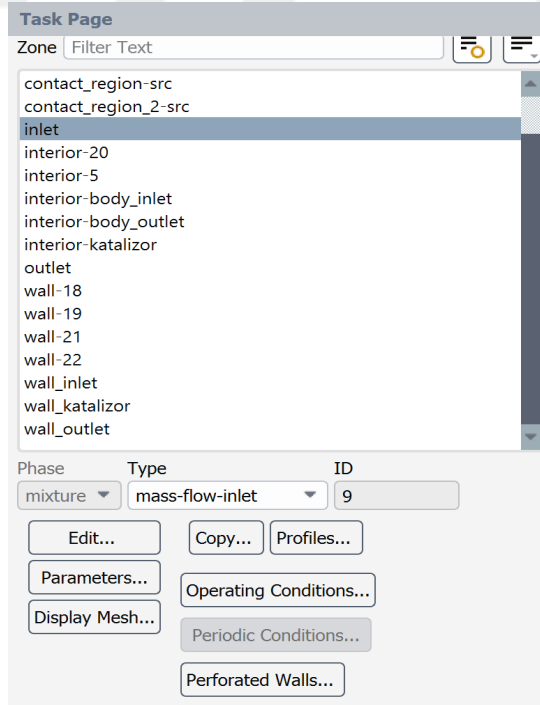


Şekil 3.21 Wall outlet thermal ayarları.



Şekil 3.22 Wall katalizör türler ayarı

Boundary condition (sınır koşulu) için tip açılır listesinden Şekil 3.23’ deki gibi mass-flow-inlet (kütle akış girişi) seçildi.



Şekil 3.23 Boundary condition açılır listesi.

Edit (düzenleme) sekmesinden açılan sayfada Şekil 3.24, 3.25, 3.26 ve 3.27'deki gibi ayarlandı. Bu ayarlarda thermal sekmesindeki total temperature (toplam sıcaklık) değeri deney düzeneğindeki sıcaklığa göre 330°C olarak girildi.

The screenshot shows the 'Mass-Flow Inlet' dialog box with the 'Momentum' tab selected. The 'Zone Name' is 'inlet'. The 'Reference Frame' is 'Absolute'. The 'Mass Flow Specification Method' is 'Mass Flow Rate' with a value of 0.0347754 kg/s. The 'Supersonic/Initial Gauge Pressure [Pa]' is 0. The 'Direction Specification Method' is 'Normal to Boundary'. The 'Turbulence' section is expanded, showing 'Specification Method' as 'Intensity and Viscosity Ratio', 'Turbulent Intensity [%]' as 5, and 'Turbulent Viscosity Ratio' as 5. At the bottom are 'Apply', 'Close', and 'Help' buttons.

Şekil 3.24 Momentum ayarları.

The screenshot shows the 'Mass-Flow Inlet' dialog box with the 'Thermal' tab selected. The 'Zone Name' is 'inlet'. The 'Total Temperature [C]' is 330. At the bottom are 'Apply', 'Close', and 'Help' buttons.

Şekil 3.25 Thermal ayarlar.

Mass-Flow Inlet

Zone Name
inlet

Momentum Thermal Radiation **Species** DPM Multiphase Potential Structure UDS

☐ Specify Species in Mole Fractions

Species Mass Fractions

o2	0.001
h2o	0.08
co<nh2>2	0
hnco	0
nh3	0
co2	0.02

Apply Close Help

Şekil 3.26 Species ayarları.

Şekil 3.26’ da gösterilen species sekmesindeki moleküllerin oranları mass fractions (kütle kesirleri) olarak belirlendi. Girilen değerler deney düzeneğindeki verilen havaya göre belirlendi.

Mass-Flow Inlet

Zone Name
inlet

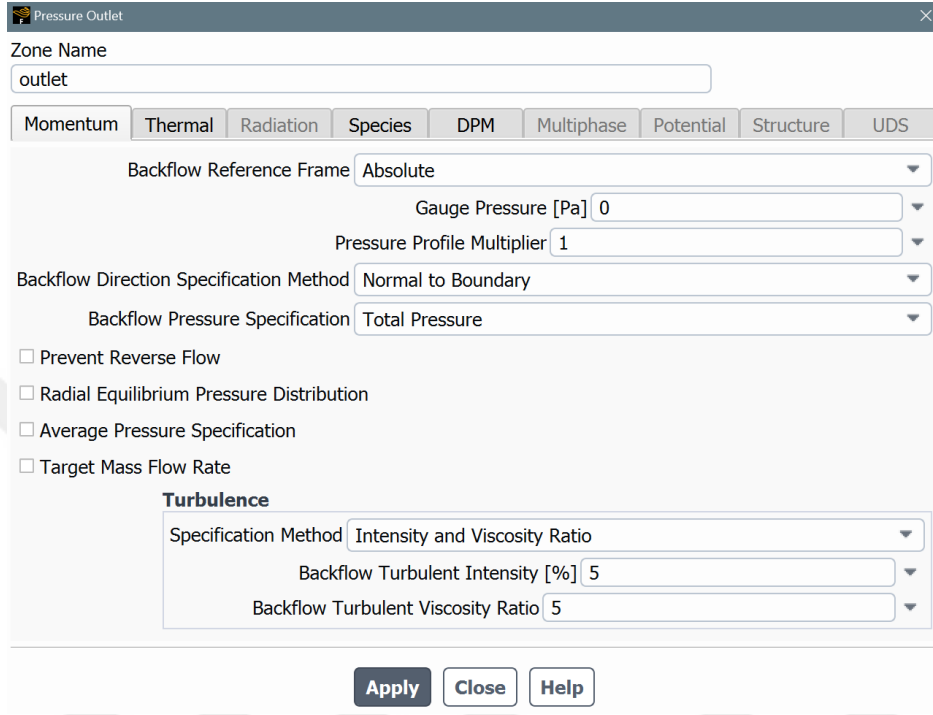
Momentum Thermal Radiation Species **DPM** Multiphase Potential Structure UDS

Discrete Phase BC Type escape

Apply Close Help

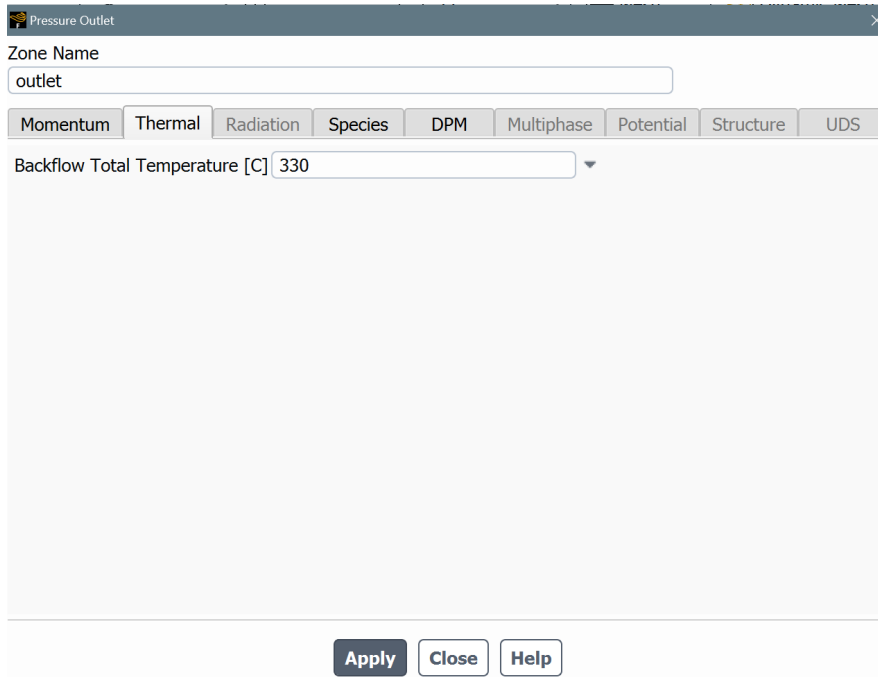
Şekil 3.27 DPM ayarı.

Türbülans grup kutusundaki Spesifikasyon Yöntemi açılır listesinden Intensity(yoğunluk) and Viscosity Ratio (viskozite oranı) seçildi. Sonrasında tekrar Şekil 3.28, 3.29, 3.30 ve 3.31'deki gibi ayarlandı.



The screenshot shows the 'Pressure Outlet' dialog box with the 'Momentum' tab selected. The 'Zone Name' is 'outlet'. The 'Backflow Reference Frame' is set to 'Absolute'. The 'Gauge Pressure [Pa]' is '0'. The 'Pressure Profile Multiplier' is '1'. The 'Backflow Direction Specification Method' is 'Normal to Boundary'. The 'Backflow Pressure Specification' is 'Total Pressure'. There are four unchecked checkboxes: 'Prevent Reverse Flow', 'Radial Equilibrium Pressure Distribution', 'Average Pressure Specification', and 'Target Mass Flow Rate'. The 'Turbulence' section is expanded, showing 'Specification Method' as 'Intensity and Viscosity Ratio', 'Backflow Turbulent Intensity [%]' as '5', and 'Backflow Turbulent Viscosity Ratio' as '5'. At the bottom are 'Apply', 'Close', and 'Help' buttons.

Şekil 3.28 Outlet momentum ayarları.



The screenshot shows the 'Pressure Outlet' dialog box with the 'Thermal' tab selected. The 'Zone Name' is 'outlet'. The 'Backflow Total Temperature [C]' is '330'. At the bottom are 'Apply', 'Close', and 'Help' buttons.

Şekil 3.29 Outlet thermal ayarı.

The screenshot shows the 'Pressure Outlet' dialog box with the 'Species' tab selected. The 'Zone Name' is 'outlet'. The 'Specify Species in Mole Fractions' checkbox is unchecked. Under 'Backflow Species Mass Fractions', there are seven input fields for species: o2, h2o, co<nh2>2, hnco, nh3, and co2, all with a value of 0. At the bottom are 'Apply', 'Close', and 'Help' buttons.

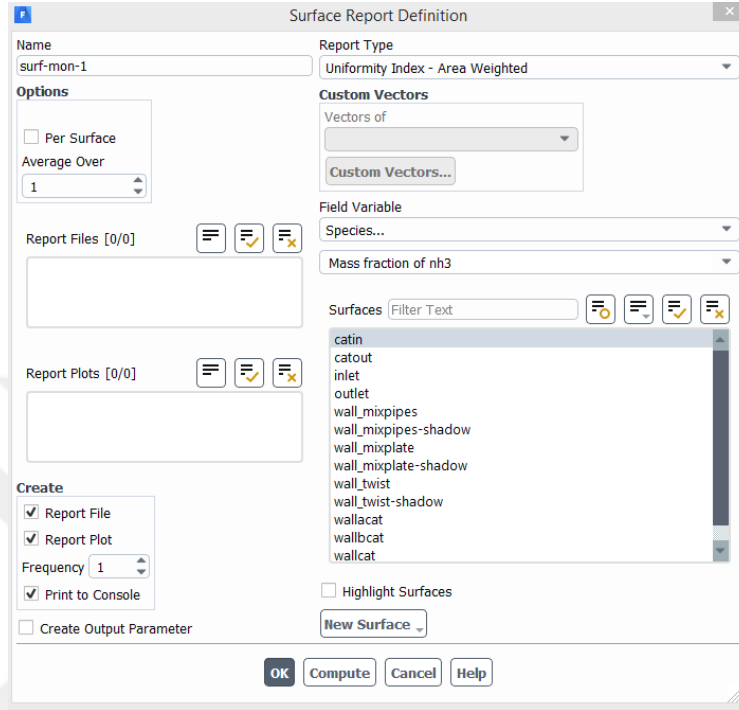
Şekil 3.30 Outlet species ayarı.

Şekil 3.30’ da gösterilen outlet (çıkış) species ayarında değer girilmemesinin sebebi katalizörden sonra sisteme harici bir hava girişinin olmamasıdır.

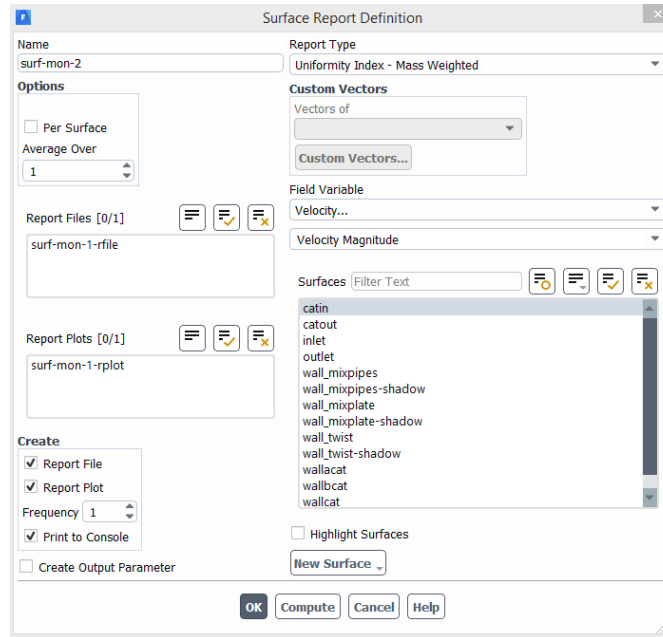
The screenshot shows the 'Pressure Outlet' dialog box with the 'DPM' tab selected. The 'Zone Name' is 'outlet'. The 'Discrete Phase BC Type' is set to 'escape'. At the bottom are 'Apply', 'Close', and 'Help' buttons.

Şekil 3.31 Outlet DPM ayarı.

Solution (çözüm) kısmında Şekil 3.32 ve 3.33’ de gösterdiği gibi analizin gaz akış sonuçlarını görüntüleyebilmek için monitör bölümünde surface report (yüzey raporu) oluşturuldu.



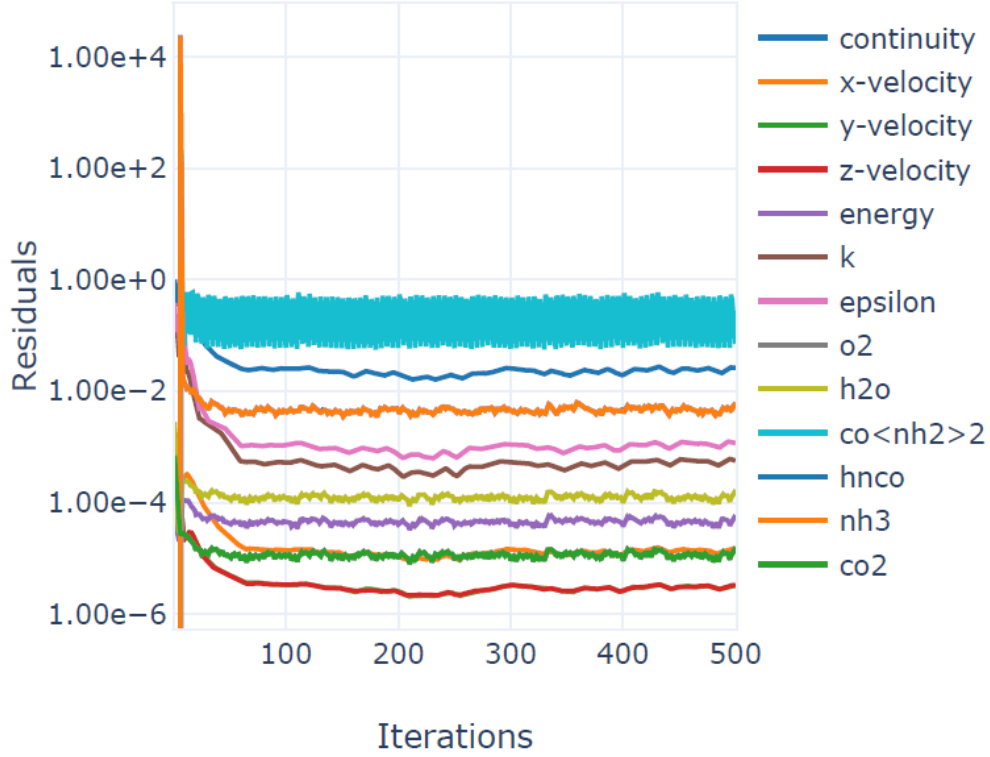
Şekil 3.32 Surface report 1.



Şekil 3.33 Surface report 2.

4. BULGULAR

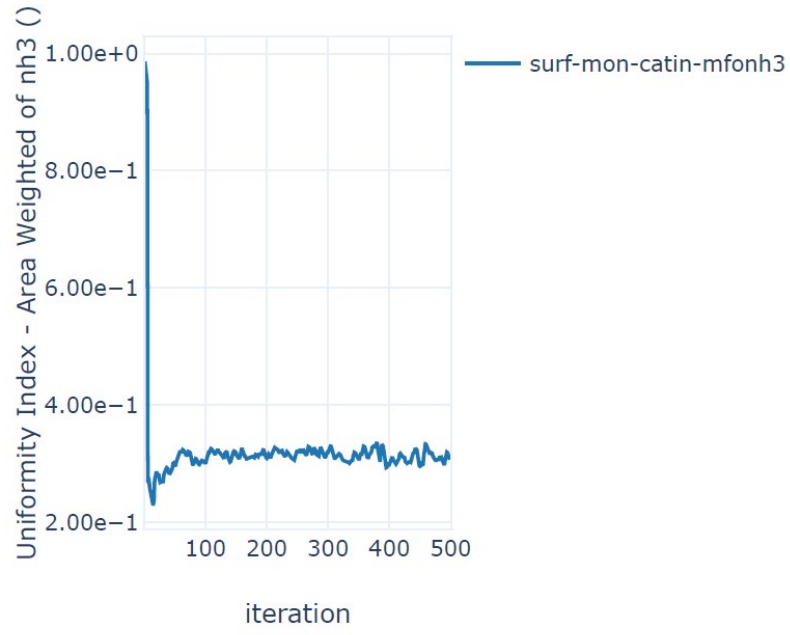
Programa girilen deęerler ve řartlar kapsamında analizimiz tamamlanmıřtır. Katalizör öncesi ve sonrasındaki tepkimelerde oluřan elementlerin residual (kalıntı) deęerlerine řekil 4.1' deki grafikte bakılmıřtır.



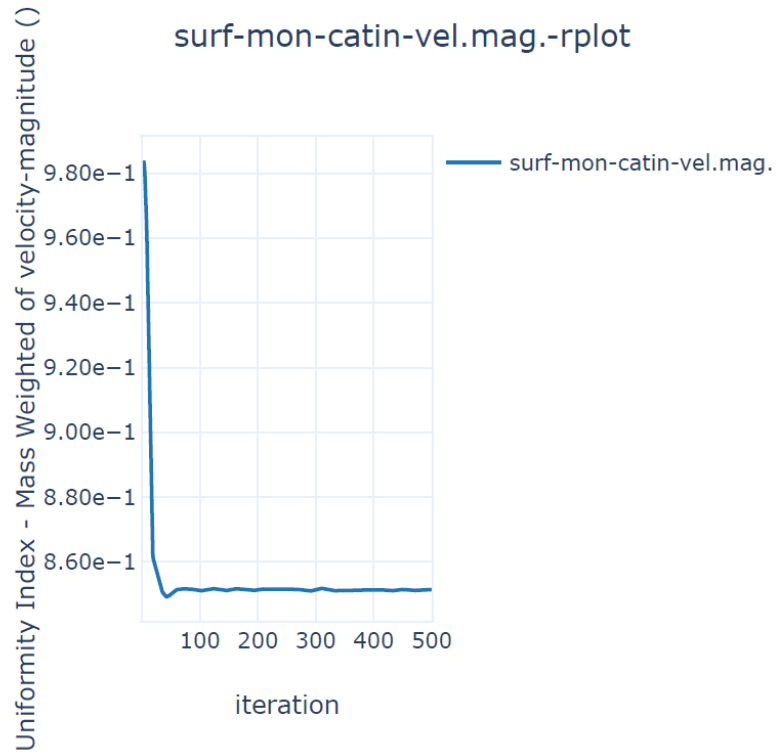
Şekil 4.1 Kalıntı deęerleri grafięi

Residuals deęerlerine bakıldıęında tepkimelerin kararlılıkla devam ettięi görölmüřtür. CO(NH₂)₂ giren hava akıřında verilen miktara göre en yüksek kalıntı deęerine sahip olduęu ortaya çıkmıřtır.

NH₃ için řekil 4.2' deki katalizör giriřinde aęırlıklı alan grafięine baktıęımızda NH₃'ün kullandıęımız SCR sisteminde motor egzoz gazları ile tepkimeye girdięi görölmüřtür. Aynı řekilde katalizör giriřinde řekil 4.3' teki grafięe bakıldıęında egzoz gazının enjeksiyonlardan püskürtölen üre su karıřımı ile tepkimesinden dolayı akıřta hız düřmesi görölmüřtür.



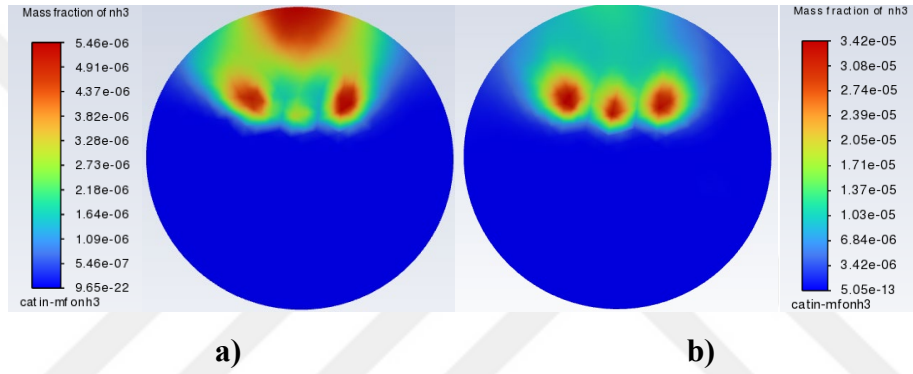
Şekil 4.2 NH_3 ağırlıklı alan grafiği.



Şekil 4.3 Gaz akış grafiği.

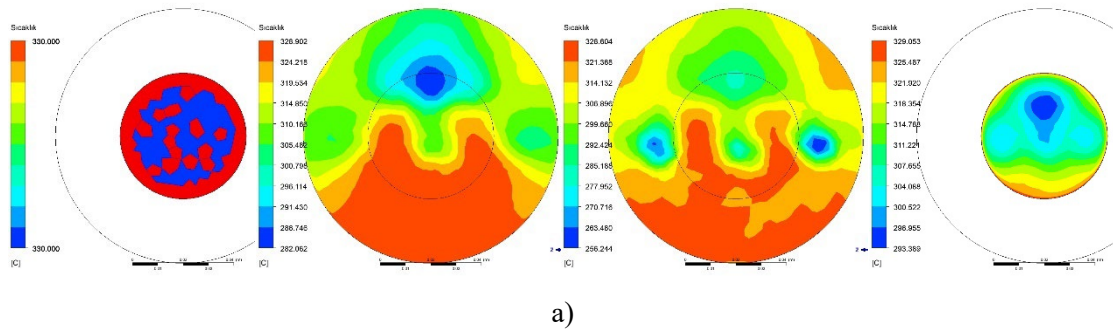
Ağırlık olarak %32,5 üre, % 67,5 su içeren standart dizel egzoz sıvısı (DEF32,5), giriş oksijen kütle oranının 0,001, toplam sıcaklık 330°C olan A durumu ve ağırlık olarak %50 üre, % 50 su içeren dizel egzoz sıvısı (DEF50), giriş oksijen kütle oranının 0,006, toplam sıcaklık 400°C olan B durumu için CFD simülasyonları gerçekleştirilmiştir.

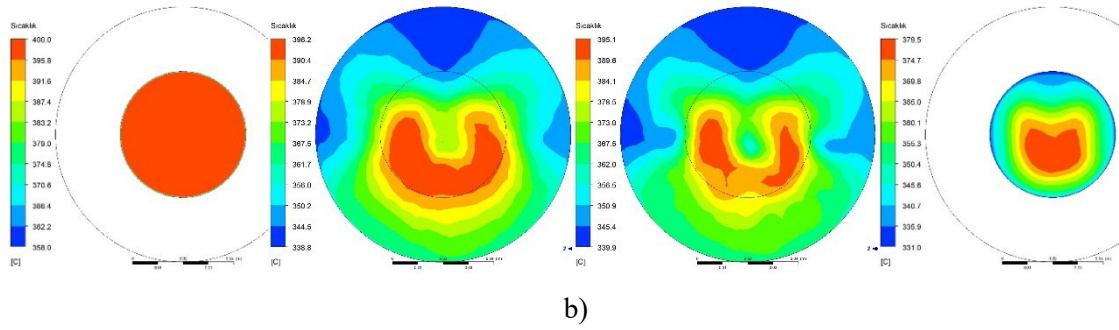
Şekil 4.4-a'da A durumu (DEF32,5-O₂ 0,001-330°C) ve Şekil 4.4-b'de B durumu (DEF50-O₂ 0,006-400°C) için katalizör girişindeki NH₃ dağılımları gösterilmiştir. Dağılıma bakıldığında üre su karışımının yukarıdan enjekte edilmesinden dolayı sistemin üst noktalarında NH₃ daha ağırlıklı görülmüştür. B durumunda görülen NH₃ kütle oranının daha fazla olmasının temel nedeni dize egzoz sıvısındaki üre oranının daha fazla olması saptanmıştır.



Şekil 4.4 Katalizör girişi NH₃ dağılımları.

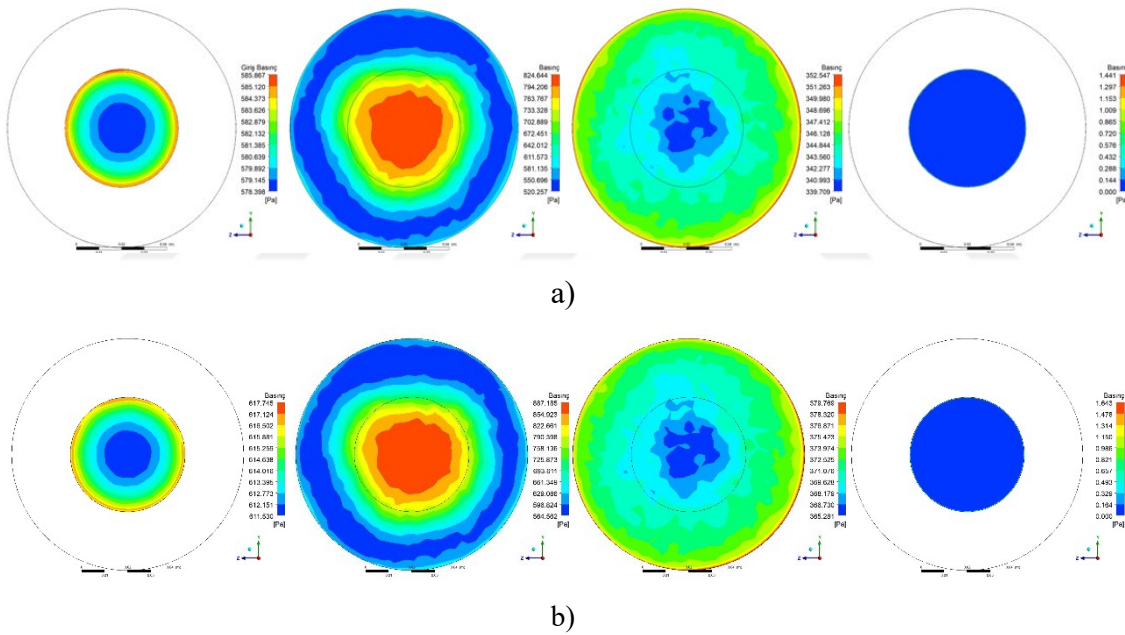
Şekil 4.5-a'da A durumu ve Şekil 4.5-b'de B durumu için gösterilen sıcaklık dağılımına göre SCR girişinden çıkışına doğru egzoz gazı sıcaklığının üre su karışımı ile tepkimesi dolayısı ile azaldığı görülmüştür. Sıcaklık dağılımlarındaki farklılıklarda toplam sıcaklık ve dizel egzoz sıvısı farklılığı etkili olduğu görülmüştür.





Şekil 4.5 Giriş, katalizör girişi, katalizör çıkışı ve çıkış sıcaklık dağılımları.

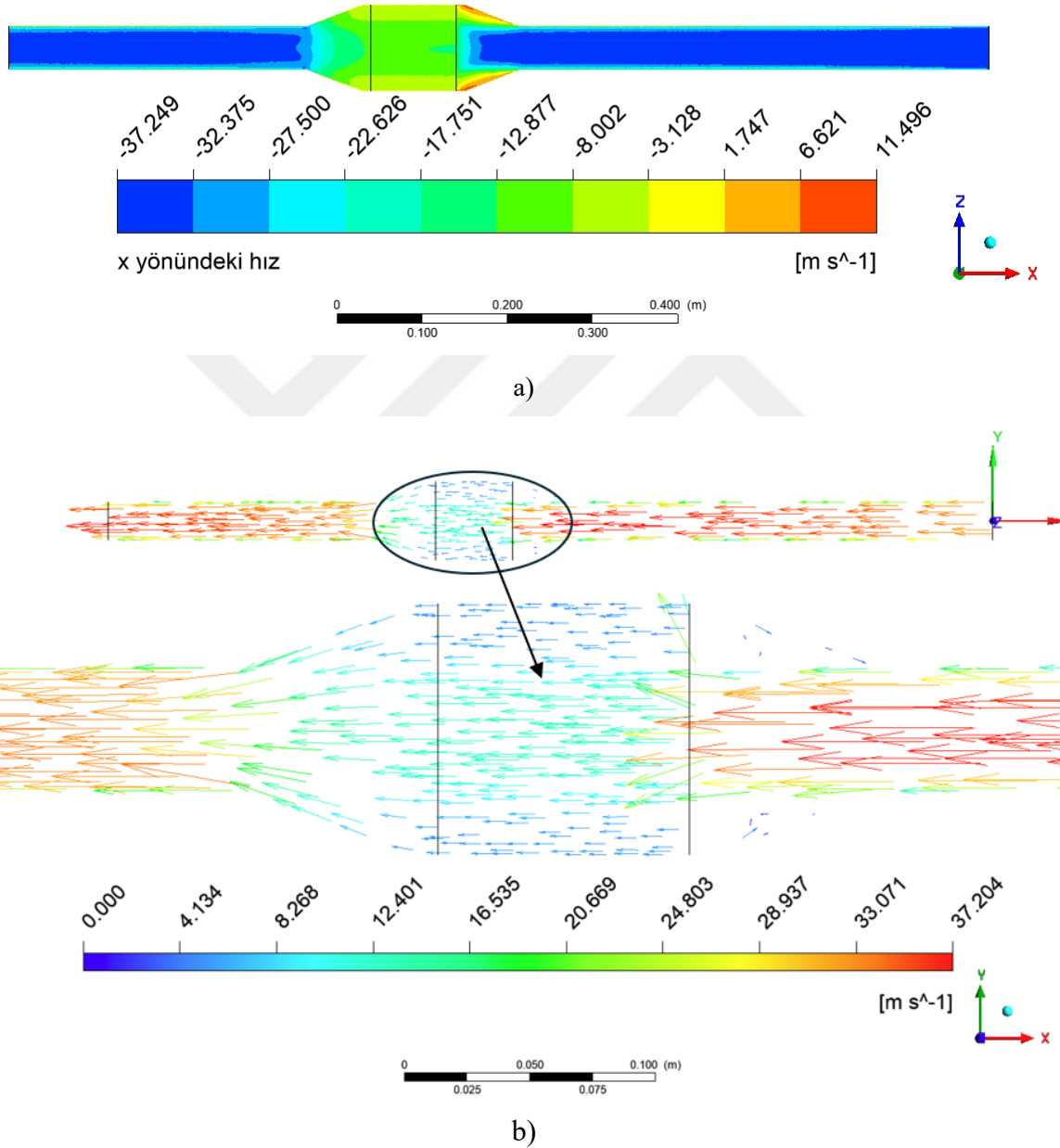
Şekil 4.5-a'da A durumu ve Şekil 4.5-b'de B durumu için gösterilen dinamik basınç dağılımına göre tepkime sonucu ve katalizörde hacmin artması sonucu oluşan ters ventüri etkisi ile katalizör çıkışına kadar basınç değerlerinin arttığı sonrasında tekrar katalizör çıkışında kesitin azalması sonucu ventüri etkisi ile basıncın düştüğü görülmüştür.



Şekil 4.6 Giriş, katalizör girişi, katalizör çıkışı ve çıkış yüzeylerindeki dinamik basınç dağılımları.

Akışkan gazların x eksenı boyunca hız dağılımlarına baktığımızda A ve B durumu arasında değerlendirmeye alacak kadar bir fark görülmemiştir. Ancak hız dağılımına bakıldığında SCR sisteminin basınç dağılımına etkisinin tam tersi bir etki görülmüş olup katalizör bölümünde kesit alanının artması akışkan gazlarda ventüri etkisi yarattığı görülmüştür. Şekil 4.7'ye baktığımızda katalizör girişinde kesit alanı arttığında basıncın artması ile hızın düştüğü (şekil 4.7-a'da gaz akışı -x yönünde olduğundan hız değerleri

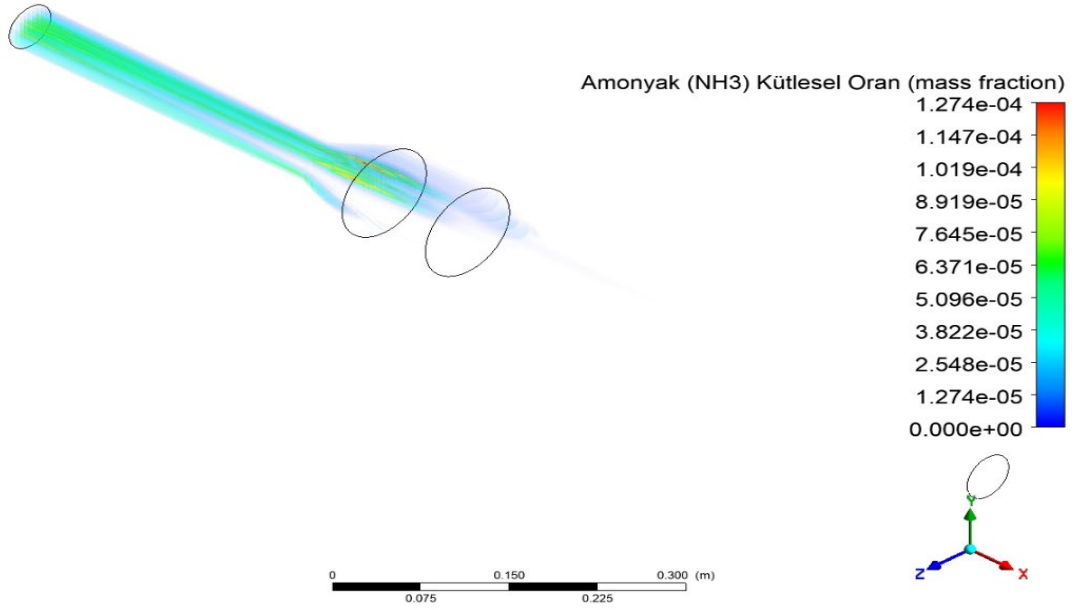
eksi olarak ve dağılım ters renklerle görülmektedir.), katalizör çıkışında kesit alanı tekrar azaldığından akış hızının tekrar arttığı görülmüştür. Şekil 4.7-b’de gösterilen hız vektörel dağılımına bakıldığında katalizör girişinde kesit alanı artması ile akışta negatif yöne yönelimde görülmektedir. Bu durum katalizör girişinde sıkışmaya neden olduğundan, bu bölgede basıncın artmasında neden olduğu ortaya çıkmıştır.



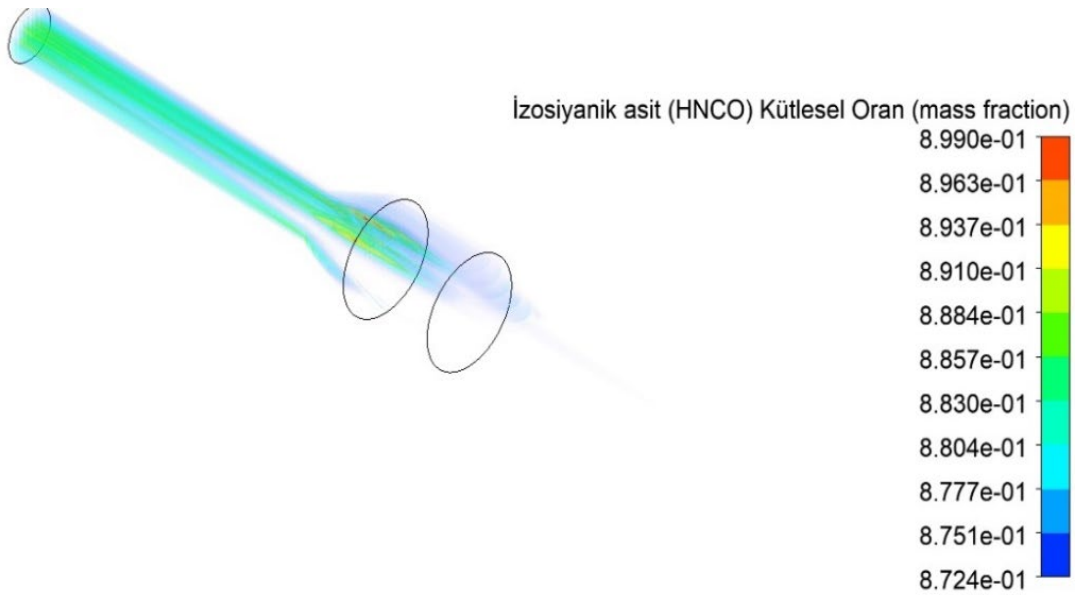
Şekil 4.7 SCR sisteminde orta kesitteki hız dağılımı.

Şekil 4.7-b’de katalizör bölümündeki akış hareketleri yakından gösterilmektedir.

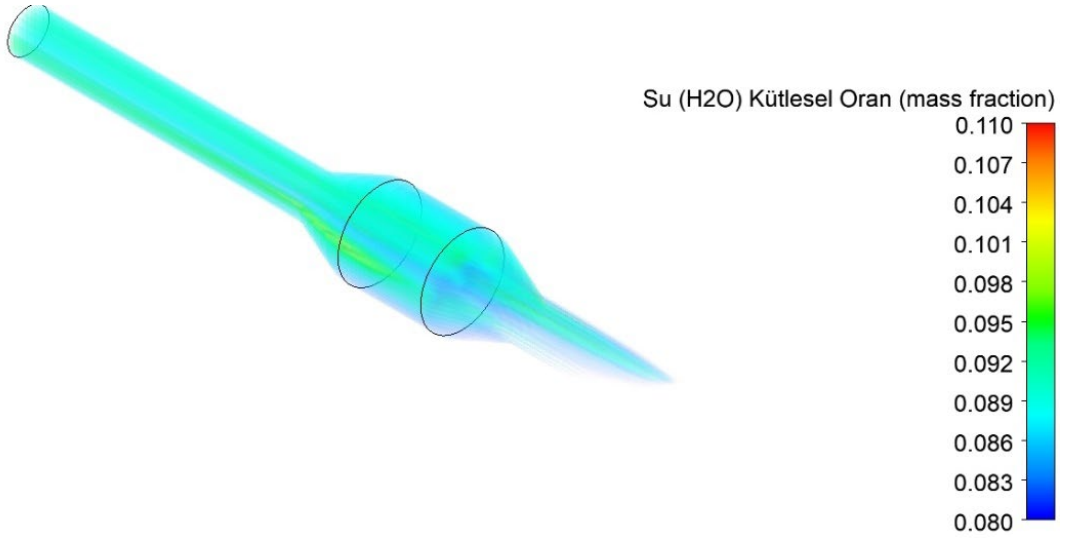
Şekil 4.8’de motordan çıkan egzoz gazı ve dizel egzoz sıvısının tepkimesi sonucu oluşan bileşiklerin dağılımı gösterilmiştir. Bu bileşiklerin dağılımları A ve B durumunda benzer şekilde görülmüş, sadece kütle oranlarında farklılıklar saptanmıştır. Bu nedenle sadece A durumu dağılımı gösterilmiştir. Bileşiklerin katalizör girişinden itibaren görülmesinin sebebi dizel egzoz sıvısının katalizör girişine yakın bir noktada enjekte edilmesiyle birlikte tepkimenin başlaması olduğu görülmüştür.



a)



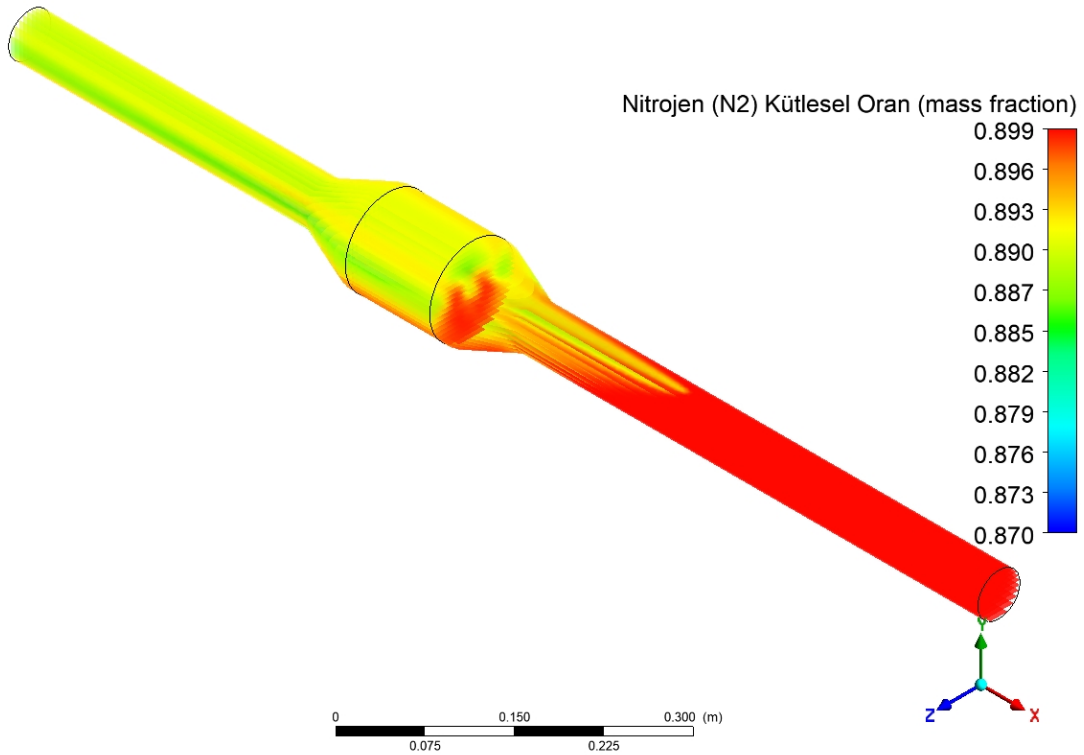
b)



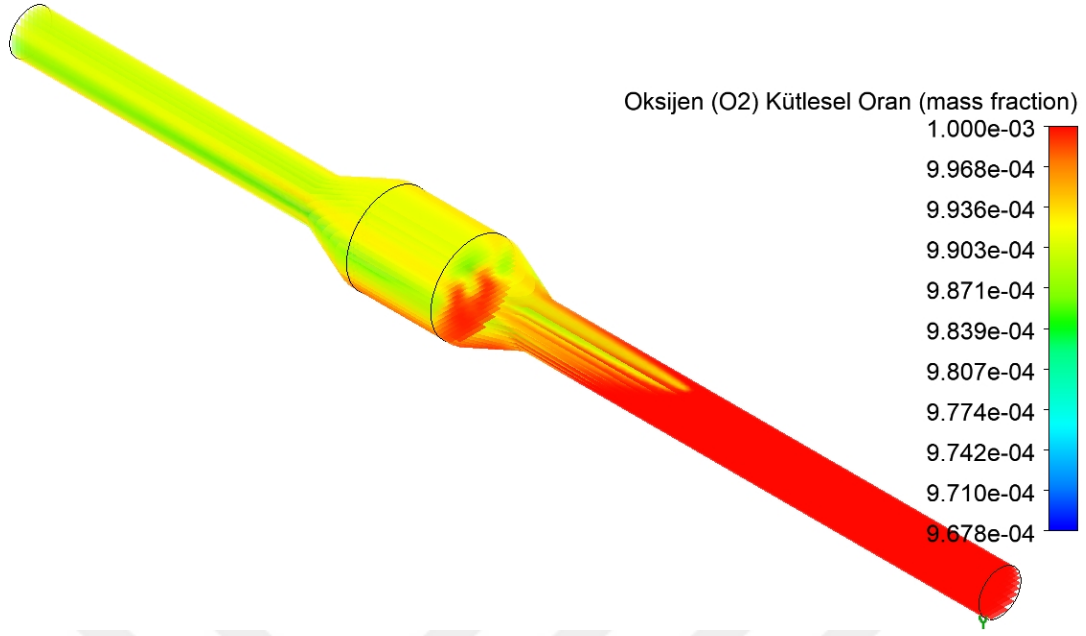
c)

Şekil 4.8 SCR sisteminde tepkime sonrası oluşan amonyak, izosiyanik asit ve su dağılımı.

Nitrojen ve oksijen dağılımlarında şekil 4.9'a bakıldığında tepkimenin başlamasıyla azaldığı görülmüştür. Bu dağılımlar, SCR sisteminin emisyon gazlarının azalmasını sağladığını göstermiştir.



a)



b)

Şekil 4.9 SCR sisteminde nitrojen ve oksijen dağılımı.

5. TARTIŞMA ve SONUÇ

Bu çalışmada bir SCR sisteminin kurulumu, simülasyonu ve son işlemleri gösterilmektedir. Katalizörün yukarı akışındaki karışımın hazırlanması modellenmiştir. Yanma sonucu oluşan gazların üzerindeki SCR sisteminin etkisi, NH_3 kütle oranı, sıcaklık, basınç ve hız dağılımları açısından ölçülmüştür.

İlk simülasyon adımında, SCR sistemi ve boyunca gaz akışı dinamiklerinin CFD modellemesi gerçekleştirilmiştir. Gerçekleştirilen CFD analizinde katalizör öncesindeki üre-su-hava karışımı ve yanma sonrası oluşan gazların tepkimeleri sonucu, katalizör ve katalizör sonrasında gazlarda sıcaklık, hız, basınç ve gazların alan dağılımlarında farklılıklar görülmüştür.

Yapılan analizde her ne kadar üre-su-hava karışımının yanma sonrası gazlar ile tepkimeye girmesi görülsede enjeksiyon sonrası karıştırıcı bir bölüm eklenmesi ve geliştirilmesi, gaz dağılımlarını ve bunun sonucunda oluşacak tepkime kalitesini artıracak belirlenmiştir.

CFD analizinde SCR sistemine enjekte edilen üre-su-hava karışımıyla birlikte geometrik tasarımında gazların akışındaki etkisi saptanmıştır. Bu nedenle adblue gibi katkı maddelerinin yanısıra geometrik olarakta SCR sisteminin geliştirilmesi gerektiği belirlenmiştir.

Atölyede kullanılan deney düzeneğine göre CFD analizinde SCR sistemi içerisindeki gazların akış analizlerini çıkarabilmek mümkün olmuştur. CFD analizinde kullanılan ANSYS programı enjeksiyon konumu, püskürtme eksenini ve püskürtme açısı geliştirme işlemlerine ilişkin de ayrıntılı bilgi verebileceği görülmüş olup daha sonraki çalışmalarda ANSYS programının kullanılabileceği saptanmıştır.

6. KAYNAKLAR

- Anonim, 2013, Tutorial: Selective catalytic reduction (SCR) simulation, ANSYS Inc.
- Blinov A, Malastowski N, Myagkov L, 2020, Methodology for calculating diesel SCR systems, In E3S Web of Conferences Vol. 220, p. 01093, EDP Sciences.
- Birkhold F, Meingast U, Wassermann P, Deutschmann O, 2006, Analysis of the injection of urea-water-solution for automotive SCR DeNOx-systems: modeling of two-phase flow and spray/wall-interaction. SAE Transactions, 252-262.
- Depcik C, Assanis D, 2005, One-dimensional automotive catalyst modeling. Progress in energy and combustion science, 31(4), 308-369.
- Koebel M, Elsener M, Kleemann M, 2000, Urea-SCR: a promising technique to reduce NOx emissions from automotive diesel engines, Catalysis today, 59(3-4), 335-345.
- O'Rourke P J, Amsden A A, 1987, The TAB method for numerical calculation of spray droplet breakup, No. 872089, SAE Technical Paper.
- Roberts G W, 2008, Chemical reactions and chemical reactors, John Wiley & Sons, Inc, River Street, Hoboken.
- Saha K, Abu Ramadan E, Li X, 2012, Multicomponent evaporation model for pure and blended biodiesel droplets in high temperature convective environment, Applied Energy, 93, 71-79.
- Salib R, Keeth R, 2003, Optimization of ammonia source for SCR applications. In Proceedings of the 2003 Mega Symposium.
- Samuelsson E, Holmberg S, 2013, A CFD study of the urea supply, droplet breakup and mixing in a pipe upstream of a SCR catalyst.
- Yim S D, Kim S J, Baik J H, Nam I S, Mok Y S, Lee J H, vd. 2004, Decomposition of Urea into NH₃ for the SCR Process. Industrial engineering chemistry research, 43(16), 4856-4863.
- Yu G, Yu Q, Jiang Y L, Zeng K S, Gu F, 2005, Mechanism of NO reduction with non-thermal plasma. Journal of environmental sciences, 17(3), 445-447.
- Zhang X, Romzek M, Morgan C, 2006, 3-D numerical study of mixing characteristics of NH₃ in front of SCR, No. 2006-01-3444, SAE Technical Paper.

İnternet Kaynakları

- 1- <https://dieselnet.com/tech/emissions.php>, 03.01.2024
- 2- https://dieselnet.com/tech/cat_diesel.php, 11.08.2023
- 3- <https://dieselnet.com/tech/plasma.php>, 05.12.2023
- 4- <https://dieselnet.com/standards/eu/nonroad.php>, 21.07.2023

